极大似然函数、最小二乘、交叉熵比较 [1]

leolinuxer

July 1, 2020

Contents

1 似然函数

1.1 似然函数和概率密度函数的关系

$$L(\theta|x) = f(x|\theta)$$

该公式表示给定联合样本 x 时，关于（未知）参数 θ 的函数。

其中 x 为随机变量 X 可以取到的值，即 $X = x$；$f(x|\theta)$ 表示给定 θ 值时，关于联合样本值 x 的联合密度函数 (注：按照连密度函数的写法，$f(x|\theta)$ 应该写为 $f(x, \theta)$【待验证】)。

在此需要注意的是，似然函数与密度函数本是不同的数学对象：前者是关于 θ 的函数，后者是是关于随机变量 x 的函数。仅仅是在此，两者的值相同。

1.2 与极大似然估计（MLE）的关系

若 x 是离散随机变量，则有：

$$f(x|\theta) = P_\theta(X = x)$$

表示在参数 θ 下，X 取 x 的可能性大小。

并且若有

$$L(\theta_1|x) = P_{\theta_1}(X = x) > L(\theta_2|x) = P_{\theta_2}(X = x)$$

则可以认为 θ_1 比 θ_2 要更接近真实值。

由此引出极大似然估计（MLE）。

2 极大似然估计（MLE）

核心思想：通过最大化似然函数来获取最接近真实值的参数 θ 。

举个典型的例子：已知口袋中有 10 个球，球可能是白色或黑色。每次抽取一个球，记录颜色后放回口袋。如果抽取 10 次，白球出现 7 次，黑球出现 3 次，问口袋里最有可能的白球总数量。

我们会很自然的觉得白球很有可能是 7 个。其中的思考过程即是极大似然估计的思想——认为观测到的情况总是在众多可能中最大概率发生的那一个。

将抽球结果作为离散随机变量 X ，设白球为 $X = 1$，黑球为 $X = 0$ 。假设抽到白球的概率为 θ ，θ 即是未知的需要通过极大似然估计得出的参数。写出似然函数。

$$L(\theta|x) = f(x|\theta) = P(x, \theta) = \theta^x \cdot (1 - \theta)^{1-x}$$

抽到白球，则密度函数为 θ，抽到黑球则是 $1 - \theta$。

对于 10 次有放回抽球可以认为是 10 次独立事件，其**符合二项分布**。

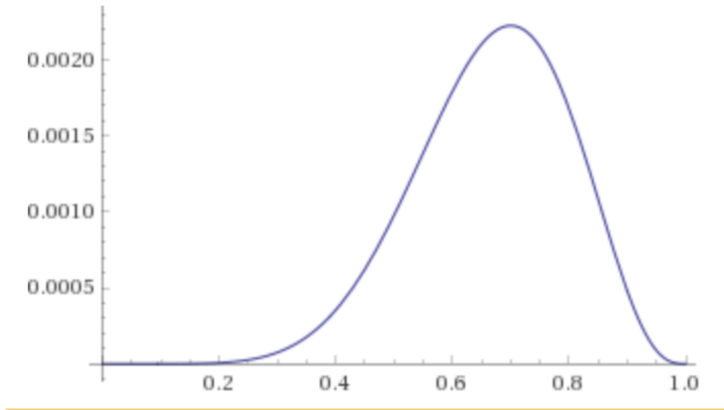
对于二项分布，出现符合观测情况的，白球出现 7 次，黑球出现 3 次的概率密度函数为

$$P(X, \theta) = P(x_1, \theta) \cdot P(x_2, \theta) \cdot \cdots \cdot P(x_{10}, \theta) = \theta^7 \cdot (1 - \theta)^3$$

写成似然函数形式为：

$$L(\theta|x) = P(X, \theta) = \theta^7 \cdot (1 - \theta)^3$$

此时可以清楚看到 θ 是似然函数的自变量。那么当我们假定 θ 为 0.5 时，可得似然函数值为 0.0009765625，若假定 θ 为 0.7 时，似然函数值为 0.1093543。后者要显然大于前者，因此我们认为白球占总数的 70% 是更有可能发生的，因为这样**使得发生我们所观测到的现象的发生概率最大**。



$L(\theta|x)$ 的图像，可以看出 $x=0.7$ 时 $L(\theta|x)$ 取得最大值

我们可以通过对似然函数求导，来求得其极大值：

$$\frac{dL}{d\theta}=7\theta^6\cdot(1-\theta)^3-\theta^7\cdot 3\cdot(1-\theta)^2=0$$

求得，当 $\theta=0.7$ 时，似然函数取到极大值，因此我们认为白球占总数 70% 时，10 次抽球最可能出现 7 次白球。

3 由极大似然估计推导最小二乘公式

给定线性模型：$\hat{y}=wx$，可以认为观测值为 $y=\hat{y}+\epsilon$，其中 ϵ 为误差，其分布符合正态分布 $\epsilon\sim N(0,\sigma^2)$，则观测值也同样符合正态分布，即：

$$y\sim N(wx,\sigma^2)$$

正态分布的密度函数为：

$$f(x|w)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(y_i-wx)^2}{2\sigma^2}}$$

为了方便求极大值，我们对似然函数取对数，即**对数似然**：

$$\ln L(w|X)=\sum_{i=1}^{n}\left[\ln\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}-\frac{(y_i-wx)^2}{2\sigma^2}\right]$$

其中 σ 为常数，**则当 $\frac{(y_i-wx)^2}{2\sigma^2}$ 取得最小时，对数似然取得最大，也即似然函数取得最大。而后者即是最小二乘法所用的均方误差公式，在整个最小二乘过程中，都在试图使其降低，其结果也就是使得似然函数极大。**

4 极大似然估计推导交叉熵

4.1 二分类问题

二分类模型可认为符合二项分布，设 $X=\{0,1\}$，y 为样品的真实类别。则有：

$$P(X=0,w)=1-P(X=1,w)$$

因此有：

$$f(x|w)=[P(X=1,w)]^{y}\cdot[1-P(X=1,w)]^{1-y}$$

对于 m 次观察结果，则有：

$$f(X|w)=\prod_{i=1}^{m}\{[P(X=1,w)]^{y}\cdot[1-P(X=1,w)]^{1-y}\}$$

写出似然函数并取对数形式，则有：

$$\ln L(w|X)=\ln f(X|w)=\sum_{i=1}^{m}\left[y_i\ln(P(X=1,w))+(1-y_i)\ln(1-P(X=1,w))\right]$$

当 $-\left[y_i\ln(P(X=1,w))+(1-y_i)\ln(1-P(X=1,w))\right]$ 取得最大时，则似然函数也取得最大。

通常我们做二分类时，最后通过 sigmoid 激活函数输出，其输出值即是 $\hat{y}=P(X=1|w)$。因此将上式化简，即是 binary cross entropy 形式：

$$-\left[y\ln(\hat{y})+(1-y)\ln(1-\hat{y})\right]$$

4.2 多分类问题

多分类问题将二项分布扩展到多项分布，设有 n 个类别，则有：

$$f(X|w)=\prod_{C=1}^{n}P(X=C,w)^{y_C}$$

同样的，对于 m 个样本，写出其对数似然：

（【原文疑似有误，原文为】）

$$\ln L(w|X)=\sum_{i=1}^{m}[(1-x_i)\sum_{C=1}^{n}y_{iC}\ln P(X=C,w)]$$

（【原文疑似有误，自己推导为】）

$$\ln L(w|X) = \sum_{C=1}^{n} y_{iC} \ln P(X = C, w)$$

其中 $-\sum_{C=1}^{n} y_{iC} \ln P(X = C, w)$ 即是 cross entropy，当其取得最小时，似然函数取得最大。

5 总结

可以看到机器学习中常见的三个损失函数：mean square loss, binary cross entropy loss, categories cross entropy loss，其背后的原理都指向了极大似然估计。可见损失函数的定义并不是简单的“衡量预测值与真实值的距离”，其背后有着严谨的数学在为其可靠性做担保。

References

[1] 极大似然函数、最小二乘、交叉熵之间的联系.