为什么Binary Classification 不用MSE?

当我们优化一个binary classification 的时候,我们的输出实际为 y_i 的概率,当 $y_i=1$ 的时候,output 越大越好。反之, 当 $y_i=0$ 的时候,output 越小越好。 所以理论上来说,用MSE:

$$MSE = yi(1-p)^2 + (1-yi)(0-p)^2$$

也行的通。但是为什么不呢?

我搜索了一下并翻了很多答案,我觉得比较正确和靠谱的解释是,回归模型和分类模型的假设不一样。

在回归模型里面,我们假设 $P(y_i|x_i)\sim N(h(x),\sigma)$, 因此, 回归模型的log maximum likelihood 会是:

$$log L = \sum_{i=1}^n -rac{(y_i-h(x_i))^2}{2\sigma^2} - nlog(\sigma) -rac{n}{2}log 2\pi$$

其余的 $2\sigma^2, nlog\sigma, n/2 \times log2\pi$ 都是常数,而我们模型唯一能优化的就是 $-(y_i - h(x))^2$,正好等于**负的**MSE, 也就是说,当MSE越小,模型的MLE就能越大。

而在分类模型里面,我们假设 $P(y_i|x_i)$ 服从伯努利分布,而非正态分布,即 $P(y_i|x_i) = h(x)^{y_i}(1-h(x))^{1-y_i}$,而分布模型的log MLE会是:

$$logL = \sum_{i=1}^n y_i log(h(x_i)) + (1-y_i) log(1-h(x_i))$$

而公式中间部分正好的负的BCE loss

$$BCEloss = -y_i log(h(x_i)) + (1 - y_i) log(1 - h(x_i))$$

也就是说, 当BCE越小, MLE会越大。

如果用MSE来评估分类问题的loss

$$MSE = yi(1 - h(x_i))^2 + (1 - yi)h(x_i)^2$$

$$MSE' = egin{cases} 2h(x_i) - 2, y_i = 1 \ 2h(x_i), y_i = 0 \end{cases}$$

而实际的MLE是:

$$MLE' = \left\{ egin{array}{l} rac{1}{h(x_i)}, yi = 1 \ rac{1}{h(x_i)-1}, yi = 0 \end{array}
ight.$$

一个是线性函数一个是反比例函数,换句话说,当 $h(x_i)$ 增加的时候,MSE无论何时都会同比例的减少,但是对于MLE, 当 $h(x_i)$ 比较大的时候,再增加对模型的改进是有限的。