机器学习损失函数

原创 by zhuyibo@yuewen.com

通常，监督学习的优化目标函数（或者叫代价函数）形式如下[1]：

$$\theta^* = \arg\min_\theta(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(y_i, f(x_i;\theta)) + \lambda\,\Omega(\theta)) \tag{1}$$

即学习到使得右边式子达到最小值的参数θ的解θ^*。其中，前面部分$L(y_i, f(x_i;\theta))$是第i个样本的预测值$f(x_i;\theta)$和真实值y_i之间的误差，也即损失函数[2]。后面的$\Omega(\theta)$是对参数θ的正则化项或者惩罚项，主要用来降低模型的复杂度，避免过拟合。损失函数 L 也被称为经验风险，加上正则项后就是结构风险[3]。我们令$\hat{y}_i = f(x_i;\theta)$，下面分别看一下分类问题和回归问题中的一些常见损失函数。为了简化表示，略去代表第i个样本的下标i。

分类问题

1. 0-1损失[4]

$$L(y, \hat{y}) = \begin{cases} 1, & y \neq \hat{y} \\ 0, & y = \hat{y} \end{cases}$$

如果是二分类问题，则等价于判断y和$\hat{y}$的符号是否相同：

$$L(y, \hat{y}) = \begin{cases} 1, & y\hat{y} \leq 0 \\ 0, & y\hat{y} > 0 \end{cases}$$

此时亦等价于[5]：

$$L(y, \hat{y}) = \frac{1}{2}(1 - sign(y\hat{y}))$$

该损失函数能够直观地刻画分类的错误率，但是非凸、非光滑的特点，在算法上难以优化，0-1损失的

一个代理损失函数是Hinge损失函数[6]。

2. Hinge loss

Hinge loss和SVM息息相关[7]，具体公式如下：

$$L(y,\hat{y}) = max(0, 1 - y\hat{y}), \quad y = \pm 1$$

可见，当真实值y和预测值$\hat{y}$符号相同时，并且$y\hat{y} \geq 1$时，Hinge loss为0；当y和$\hat{y}$符号相反时，Hinge loss随着$\hat{y}$的增大而线性增大[8]。
另外，Hinge loss在$y\hat{y} = 1$处不可导，因此不能用梯度下降法进行优化，而是用次梯度下降法(Subgradient Descent Method)[9]。

3. 指数损失Exponential loss[10]

指数损失函数也是0-1损失函数的一种代理函数：

$$L(y,\hat{y}) = \exp(-y\hat{y})$$

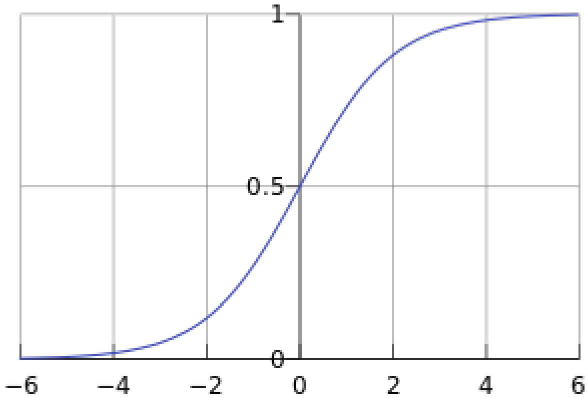
运用指数损失的典型分类器是AdaBoost算法。

4. Logistic损失(log loss)

我们先来看一下Logistic函数。

$$\begin{gathered} \sigma(z) = sigmoid(z) = \frac{1}{1+\exp(-z)} \\ \sigma(-z) = 1 - \sigma(z) \end{gathered} \tag{4.0}$$

其函数图像：



在$y \in \{-1,1\}$时，log loss形式为：[9:1] [11]

$$L(y,\hat{y}) = \log(1+\exp(-y\hat{y})), \quad y=\pm 1 \tag{4.1}$$

注意，其中 $\hat{y} = f(x;\theta) = \theta^{\mathrm{T}} x$

在$y \in \{0,1\}$时，log loss形式为：[12] [13]

$$L(y,\hat{y}) = -(y\log\sigma(\hat{y}) + (1-y)\log(1-\sigma(\hat{y}))), \quad y=0,1 \tag{4.2}$$

如果我们调整一下 $\hat{y}$ 的定义：$\hat{y} = \sigma(f(x;\theta)) = \sigma(\theta^{\mathrm{T}} x)$，此时其形式就变为我们熟悉的二元交叉熵形式[14]：

$$L(y,\hat{y}) = -(y\log\hat{y} + (1-y)\log(1-\hat{y})), \quad y=0,1 \tag{4.3}$$

式(4.1)、式(4.2)和式(4.3)等价，我们来看一下(4.1)和(4.2)式等价的推导过程。
(4.1)式中$y=1$时(4.2)式中也有$y=1$, (4.1)式化简为：

$$\begin{aligned} L(y,\hat{y}) = L(1,\hat{y}) &= \log(1+\exp(-\hat{y})) \\ &= -\log\sigma(\hat{y}) \\ &= -\log\sigma(\theta^{\mathrm{T}} x) \end{aligned}$$

(4.2)式化简为：

$$\begin{aligned} L(y,\hat{y}) = L(1,\hat{y}) &= -\log\sigma(\hat{y}) \\ &= -\log\sigma(\theta^{\mathrm{T}} x) \end{aligned}$$

可见当y取标签1（正例）时，(4.1)和(4.2)式相等。
再看当y取负例时，此时(4.1)式中$y=-1$，(4.2)式中$y=0$。(4.1)式化简为：

$$
\begin{aligned}
L(y,\hat{y}) = L(-1,\hat{y}) &= \log(1+\exp(\hat{y})) \\
&= -\log(\frac{1}{1+\exp(\hat{y})}) \\
&= -\log(\sigma(-\hat{y})) \\
&= -\log(1-\sigma(\hat{y})) \\
&= -\log(1-\sigma(\theta^{\mathrm{T}}x))
\end{aligned}
$$

最后一步是因为(4.0)式$\sigma(-z)=1-\sigma(z)$。(4.2)式化简为：

$$
\begin{aligned}
L(y,\hat{y}) = L(0,\hat{y}) &= -\log(1-\sigma(\hat{y})) \\
&= -\log(1-\sigma(\theta^{\mathrm{T}}x))
\end{aligned}
$$

因此当y取负例时(4.1)和(4.2)式相等，综合起来就是两者等价。
我们现在再来推导一下这个损失函数的由来。
对于n个服从i.i.d.分布（独立同分布）的样本$\{x_i, y_i\}$, x_i是输入特征向量，y_i是真实分类标签并且$y_i \in \{0,1\}$。设随机变量X代表输入x，随机变量Y代表类别标签y，我们试图寻找出具体的联合分布$P(X,Y)$以及条件分布$P(Y|X)$（或者连续值情况下的概率密度函数），但是因为我们无法获得所有的样本，输入的复杂性等等原因，我们很难求解没有给出具体分布函数形式的非参数统计(nonparametric)问题。另一方面，我们可以基于经验、数据生成的方式或中心极限定理来猜测具体的分布形式（比如正态分布、0-1伯努利分布、二项分布、泊松分布等），一旦我们做出分布假定，就可以用一组参数θ来确定该分布，所以问题就转为对这组参数θ的估计，也即“分布已知，参数未知”的参数统计(parametric)问题。最大似然估计(maximum-likelihood estimation,MLE)就是其中一种参数估计方法（还有最小方差无偏估计、贝叶斯估计等方法）[15]。
最大似然的意思就是最为相似，即最大的可能性。对于获得的服从i.i.d.的n个样本$\{x_i, y_i\}$，我们假定样本服从某种分布，
找到使以下概率最大化（使该样本结果出现的可能性最大）的参数θ就是最大似然估计：

$$
\arg\max_{\theta} P(y_1,\cdots,y_n|x_1,\cdots,x_n;\theta)
$$

因为样本服从i.i.d.，所以等价于：

$$
\arg\max_{\theta} \prod_{i=1}^{n} P(y_i|x_i;\theta)
$$

连续相乘比较复杂，为了简化计算，我们对优化目标取对数$\log$（一般取自然对数$\ln$或者$\log_2$），因为$\log$严格单调递增，并不影响结果：

$$
\begin{aligned}
L(\theta) &= \prod_{i=1}^{n} P(y_i|x_i;\theta) \\
l(\theta) = \log L(\theta) &= \sum_{i=1}^{n} \log P(y_i|x_i;\theta)
\end{aligned} \tag{4.4}
$$

最大化$L(\theta)$和最大化$l(\theta)$是等价的，但是$l(\theta)$是求和计算，简单多了。在逻辑回归二元分类任务中，分类标签$y \in \{0,1\}$，因此我们可以认为数据服从0-1伯努利分布：

$$y \sim Bernoulli(1,p)$$

即对于每一个样本的分类标签y，为1（正例）的概率p，为0（反例）的概率则为$1-p$。因此：

$$
\begin{gathered}
P(y=1|x;\theta) = h_\theta(x) \\
P(y=0|x;\theta) = 1 - h_\theta(x)
\end{gathered}
$$

上面两个公式可以合并成一个公式：

$$P(y|x;\theta) = (h_\theta(x))^y * (1-h_\theta(x))^{1-y}$$

代入到(4.4)式中，得：

$$
\begin{aligned}
l(\theta) &= \sum_{i=1}^{n} \log(h_\theta(x_i))^{y_i} * (1-h_\theta(x_i))^{1-y_i} \\
&= \sum_{i=1}^{n} (y_i \log h_\theta(x_i) + (1-y_i)\log(1-h_\theta(x_i)))
\end{aligned} \tag{4.5}
$$

最大化$l(\theta)$相当于最小化$-l(\theta)$，而$h_\theta(x) = \sigma(\theta^{\mathrm{T}}x) = \hat{y}$，因此(4.5)式等价于最小化：

$$-\sum_{i=1}^{n} (y_i \log \hat{y}_i + (1-y_i)\log(1-\hat{y}_i))$$

最后除以样本的数量n，得到平均到每个样本的平均损失使结果更直观：

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i\log\hat{y}_i+(1-y_i)\log(1-\hat{y}_i))$$

对于单个样本（去掉下标）损失函数则是：

$$L(y,\hat{y})=-(y\log\hat{y}+(1-y)\log(1-\hat{y})),\quad y=0,1$$

这正是(4.3)式。至此，log loss的由来推导完毕。

5. 交叉熵损失(Cross Entropy)

交叉熵来自于KL散度（Kullback-Leibler (KL) divergence，KL散度也叫相对熵），主要用来度量两个分布的差异，交叉熵越小，差异越小，分布越相似。其形式如下：

$$L(y,\hat{y})=-\sum_{j=1}^{m}y^j\log\hat{y}^j$$

注意$y^j,\hat{y}^j$分别表示在m类中第j类的真实值和预测值，一个样本只能属于m个类别中的一个，也就是说这是一个多分类情况下的公式。如果在把n个样本考虑进来则损失函数变为：

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}y_i^j\log\hat{y_i}^j$$

可见，包括从上面第4节log loss的介绍中我们也已经发现，log loss其实是交叉熵损失在二分类情况下的一个特例。
因为只能属于m个类别中的1个，也就是真实标签$y_{ij},j\in\{1,\cdots,m\}$只能有一个值为1，其它都是0，因此可以化简为：

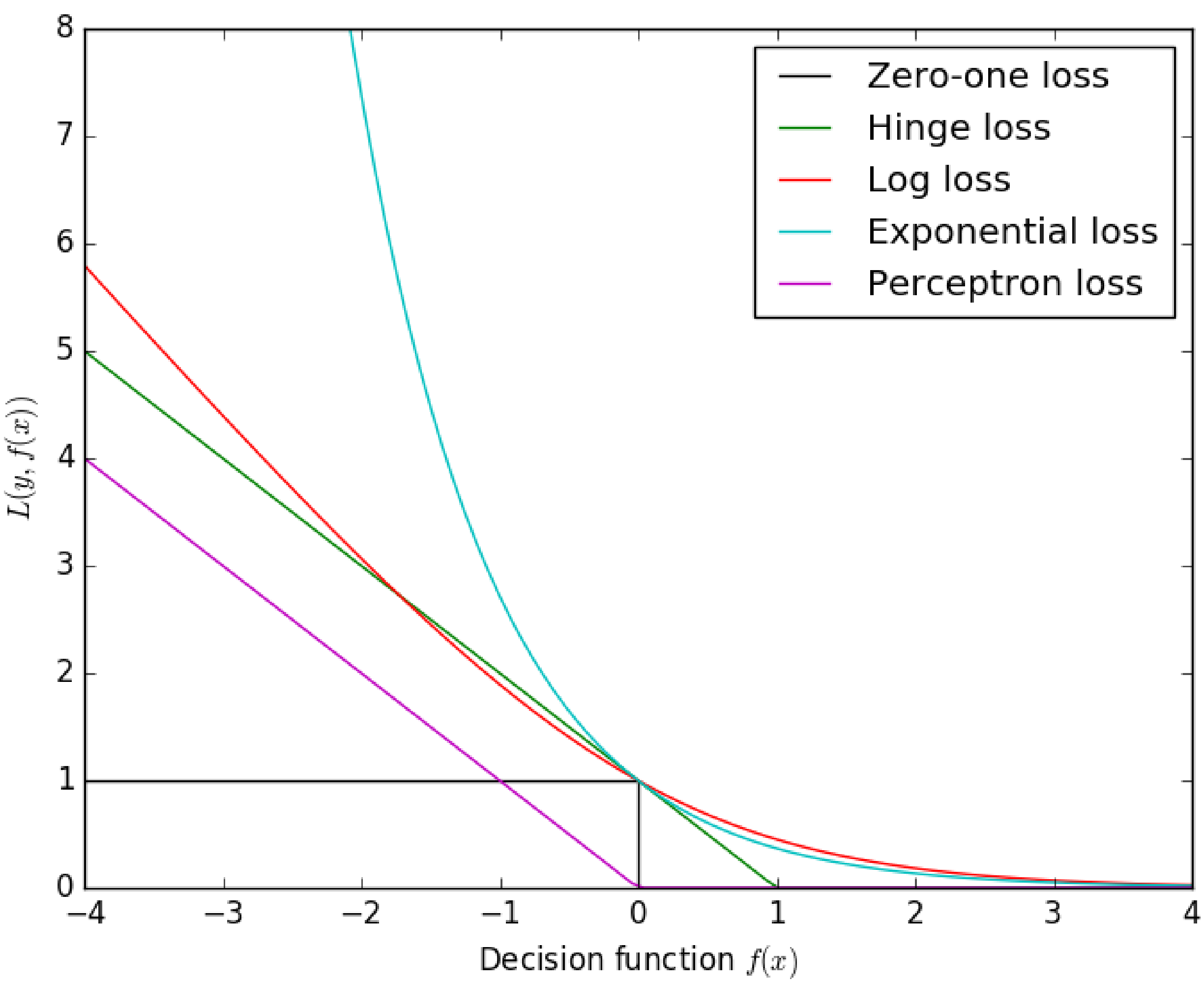
$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log\hat{y_i}^{(j)}$$

其中，$\hat{y_i}^{(j)}$表示第i个样本真实标签值为1的第(j)个分类的预测概率。
对于多分类问题，深度学习神经网络的最后一层通常会加一层softmax层来计算预测概率：

$$z_i = f(x_i;\theta)$$
$$\hat{y}_i = softmax(z_i) = \frac{\exp(z_i)}{\sum_{j=1}^{m}\exp(z_j)}, \quad i = 1, \cdots, m$$

因此多分类交叉熵经常和softmax函数结合使用。

以上一些损失函数曲线对比如下图：



回归问题，大多数参考[16][17][18]

假设：

真实值：$y = \{y_1, y_2, \ldots, y_n\}$

预测值：$\hat{y} = \{\hat{y_1}\ \hat{y_2}, \ldots, \hat{y_n}\}$

1、平方损失（也叫L2损失），或者均方误差MSE(Mean Square Error)

$$L(y,\hat{y})=\frac{1}{2}(y-\hat{y})^2$$

其中乘以$\frac{1}{2}$是为了求导时去掉系数。平方损失主要用于均值回归，其函数光滑处处可导，可以用梯度下降法进行优化。然而，当预测值距离真实值越远，平方损失惩罚力度就越大，对异常点很敏感。在训练时，会赋予异常样本更大的权重，以牺牲其它样本的误差为代价，朝着减小异常点误差的方向更新，这样就会降低模型的整体性能。

当用于预测结果评估指标时，则是大家熟悉的MSE指标：

$$MSE=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2$$

范围$[0,+\infty)$，当预测值与真实值完全吻合时等于0，即完美模型；误差越大，该值越大。

2、均方根误差RMSE(Root Mean Square Error)

对MSE加个根号运算就是RMSE，这样数量级上比较直观，可以和$y,\hat{y}$值在同一根轴上进行比较。

$$RMSE=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}$$

同MSE一样，如果实际问题中，如果存在个别偏离程度非常大的离群点（Outlier）时，即使离群点数量非常少，也会让MSE和RMSE指标变得很差。突发事件通常会带来不少离群点。

3、绝对损失（也叫L1损失），或者平均绝对误差MAE(Mean Absolute Error)

$$L(y,\hat{y})=|y-\hat{y}|$$

绝对损失相当于是在做中值回归，相对于平方损失而言，对异常点更鲁棒一些。但是，绝对损失在0点($y=\hat{y}$)时不可导，此时无法使用梯度下降算法。更严重的是，绝对损失在非0点的梯度始终相同，即使是很小的损失梯度也很大，这样不利于模型的学习（不过也有解决方法，就是在损失接近0时降低学习率，也就是采用变化的学习率）。而平方损失的梯度随着损失的增大而增大，在损失靠近0时则梯度也会随之减小，这样在训练结束时模型就会收敛到更精确的结果。

如果异常点代表在商业中很重要的异常情况，并且需要被检测出来，则应选用平方损失函数。相反，如果只把异常值当作受损数据，则应选用绝对损失函数。

当用于预测结果评估指标时，则是大家熟悉的MAE指标：

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\hat{y}_i - y_i|$$

MAE对于离群点的处理比RMSE要稳定一点，因为平方相对于绝对值会放大差异。

4、平均绝对百分比误差MAPE(Mean Absolute Percentage Error)

$$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\hat{y}_i - y_i}{y_i} \right|$$

MAPE把每个点的误差进行了归一化，降低了离群点带来的绝对误差的影响。但是注意当真实值有数据等于0时，存在分母为0公式不能用的问题。

5、对称平均绝对百分比误差SMAPE(Symmetric Mean Absolute Percentage Error)

$$SMAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{(|\hat{y}_i| + |y_i|)/2}$$

SMAPE也把每个点的误差进行了归一化，也要注意当真实值和预测值都等于0时，存在分母为0公式不能用的问题。

6、Huber损失

$$L(y, \hat{y}) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2, & |y - \hat{y}| \le \delta \\ \delta|y - \hat{y}| - \frac{1}{2}\delta^2, & |y - \hat{y}| > \delta \end{cases}$$

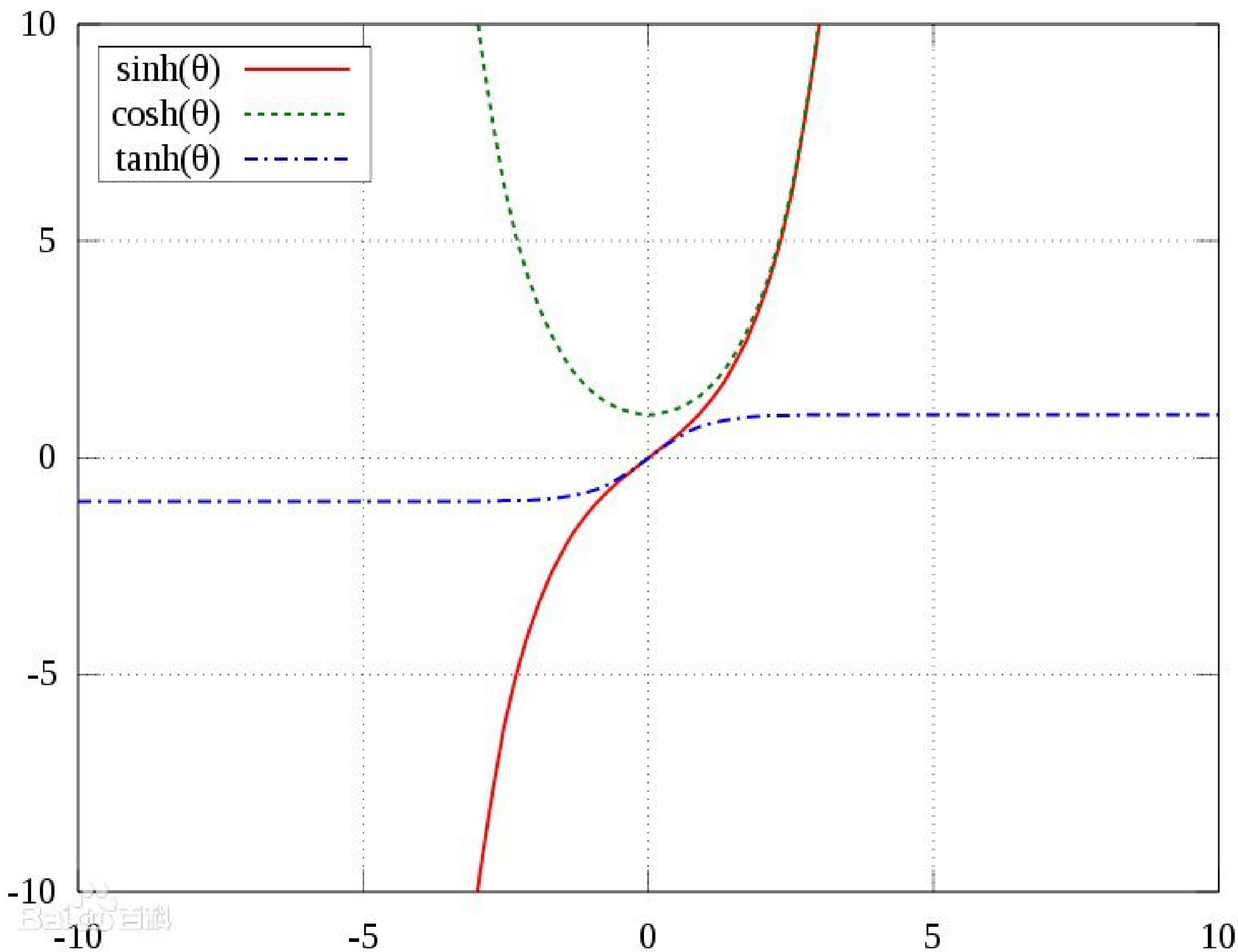
其中δ是大于0的超参数。可见，当绝对误差$|y - \hat{y}|$在$[-\delta, \delta]$之间时，Huber损失等价于平方损失；在$(-\infty, \delta)$或$(\delta, +\infty)$时，等价于绝对损失。因此δ的选择很重要，这决定你如何定义异常点，决定何时

采用绝对损失，何时采用平方损失。
Huber损失结合了平方损失和绝对损失的优点，但是需要不断的实验以确定比较好的超参δ。

7、Log-Cosh损失

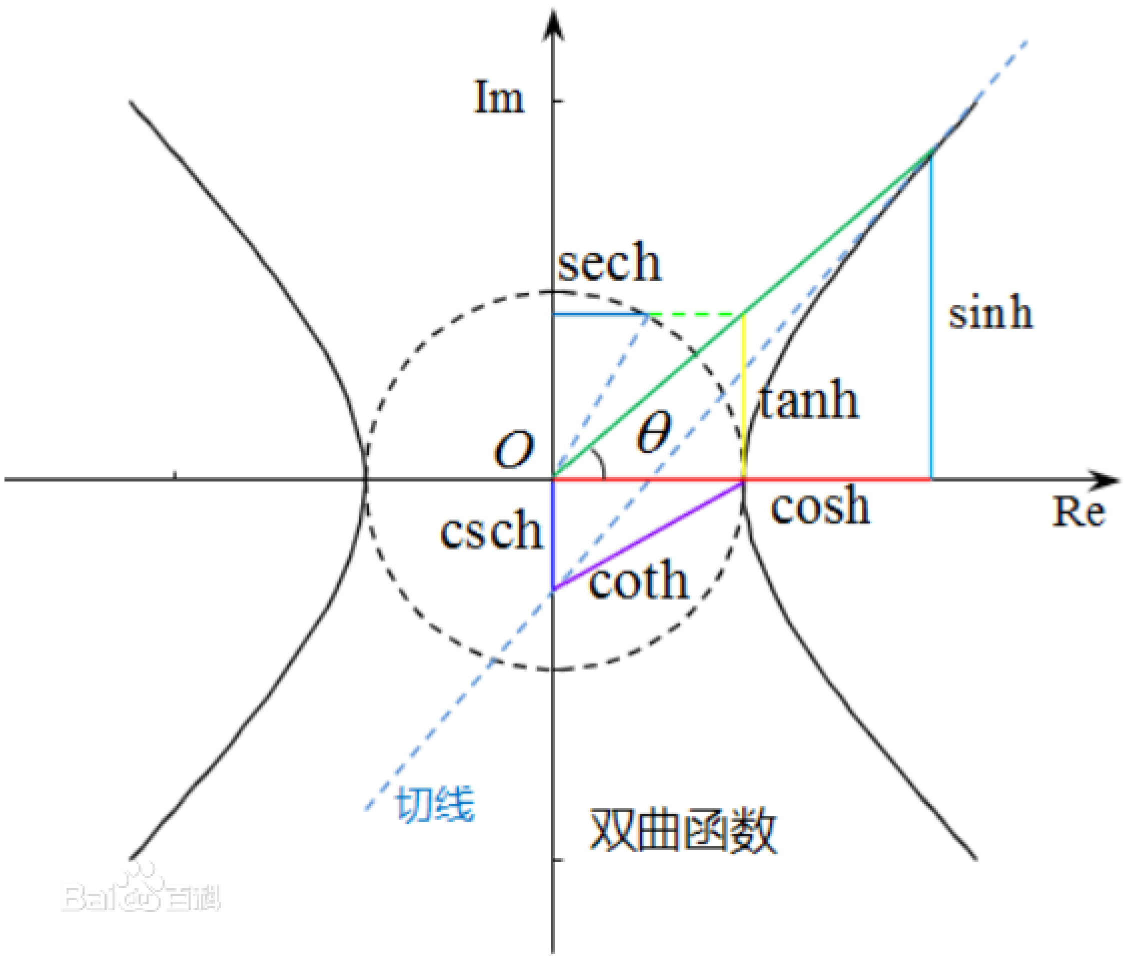
$$L(y, \hat{y}) = \log(\cosh(y - \hat{y}))$$

cosh是双曲余弦函数。该损失函数二阶可导，且比平方损失更光滑，它也具有Huber损失的所有优点。缺点是当误差很大时，一阶导数和Hessian矩阵会变成定值，会导致XGBoost中出现的缺少分裂点类似的问题。



这里再介绍一下双曲函数[19]。
双曲正弦：$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$
双曲余弦：$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$
双曲正切：$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$
双曲余切：$\coth(x) = \frac{1}{\tanh(x)} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}$

双曲正割：$sech(x)=\frac{1}{\cosh(x)}=\frac{2}{e^x+e^{-x}}$
双曲余割：$csch(x)=\frac{1}{\sinh(x)}=\frac{2}{e^x-e^{-x}}$



8、分位数损失[20]

$$L(y,\hat{y})=\sum_{i:y_i<\hat{y}_i}(1-\gamma)|y_i-\hat{y}_i|+\sum_{i:y_i\geq\hat{y}_i}\gamma|y_i-\hat{y}_i|$$

$\gamma\in(0,1)$就是所需的超参分位数。γ等于0.5时就是绝对误差MAE。分位数损失用于预测范围，而不是单值。设置多个γ值，得到多个预测模型，然后绘制成图表，即可知道预测范围及对应概率(两个γ值相减)。

深度学习激活函数 [21]

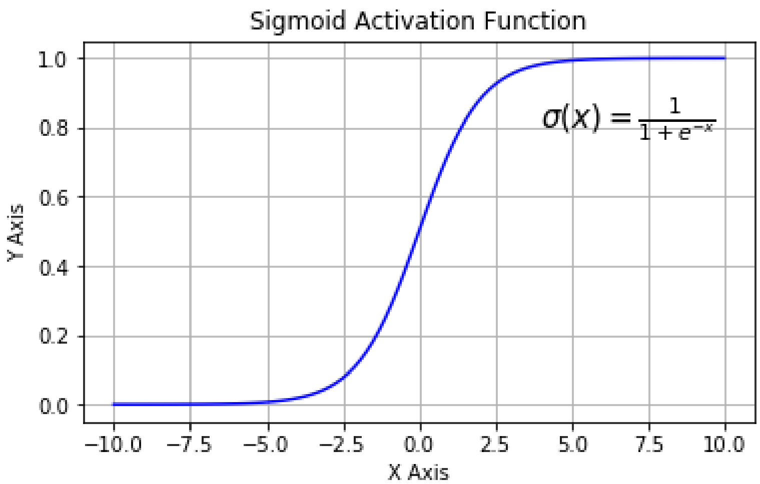
对于深度神经网络，需要在每一层线性变换后叠加一个非线性激活函数，以避免多层神经网络等效于单层线性函数，增加模型的非线性拟合能力，解决真实世界中线性不可分问题。

激活函数也用于将神经网络的输出压缩到特定边界内，对于神经元的输出值$w^{\mathrm{T}}x+b$可能非常大，如果直接传给下一层，又会被放大，从而导致计算复杂消耗算力[22]。

1、对数几率Sigmoid

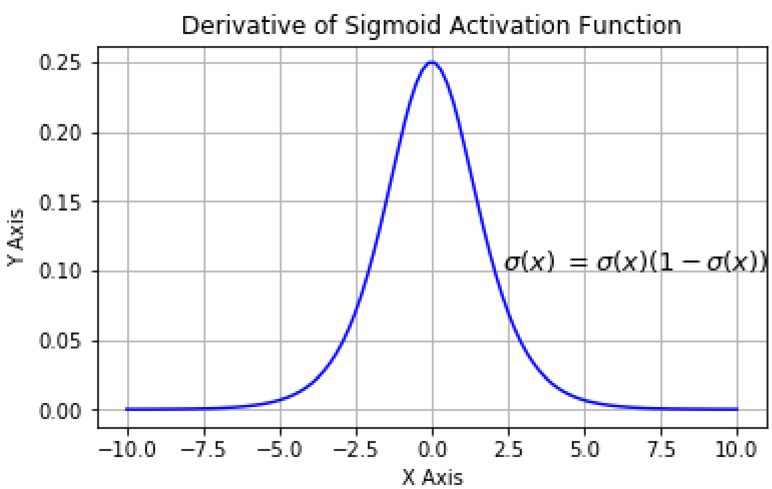
Sigmoid激活函数形式为：

$$f(z)=\frac{1}{1+e^{-z}}$$



其导数为：

$$f'(z)=f(z)(1-f(z))$$



Sigmoid主要有如下几个问题：

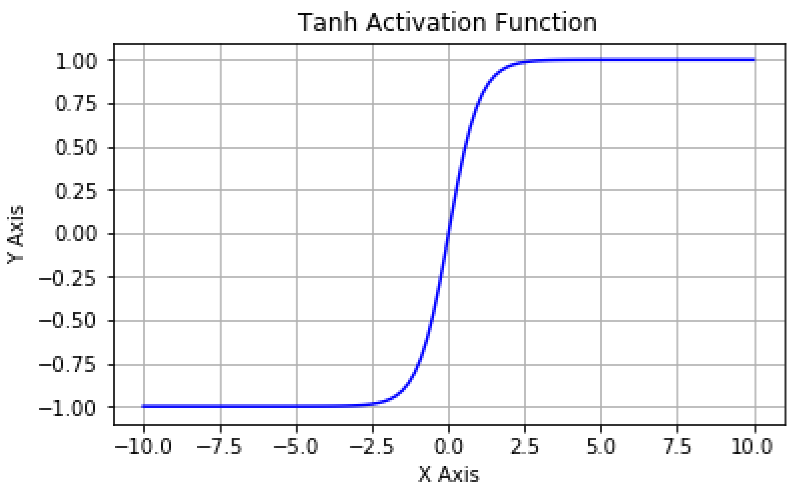
- Sigmoid将输入z映射到区间$(0,1)$，当z很大时，$f(z)$趋近于1，z很小时，$f(z)$趋近于0，而此时其导数都会趋近于0，从而导致梯度消失的现象：神经元饱和，权重不会更新，与之相连的神经元的权重也更新很慢，反向传播几乎无法执行；
- 不以0为中心（zero-centered）；

- 幂运算$exp()$函数计算成本比较高。

2、双曲正切Tanh

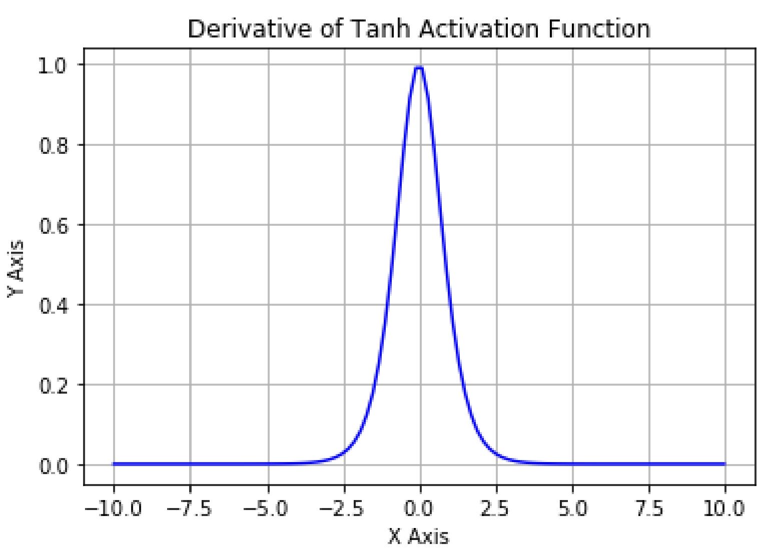
Tanh激活函数形式为：

$$f(z) = \tanh(z) = \frac{e^z - e^z}{e^z + e^z}$$



其导数为：

$$f'(z) = 1 - (f(z))^2$$



可以发现：

$$\tanh(z) = 2sigmoid(2z) - 1$$

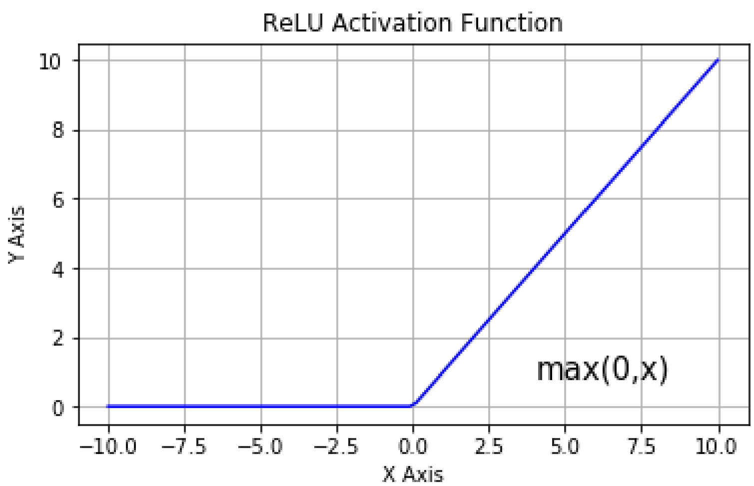
Tanh主要有如下几个问题：

- Tanh将输入z映射到区间$(-1,1)$，当z很大时，$f(z)$趋近于1，z很小时，$f(z)$趋近于-1，而此时其导数都会趋近于0，也会导致梯度消失的现象；
- 也有幂运算$exp()$，计算成本比较高。
  但Tanh是zero-centered的，正值输入输出正值，0值输入输出0值，负值输入输出负值，因此实践中Tanh的优先级高于Sigmoid。

3、修正线性单元ReLU(Rectified Linear Units)

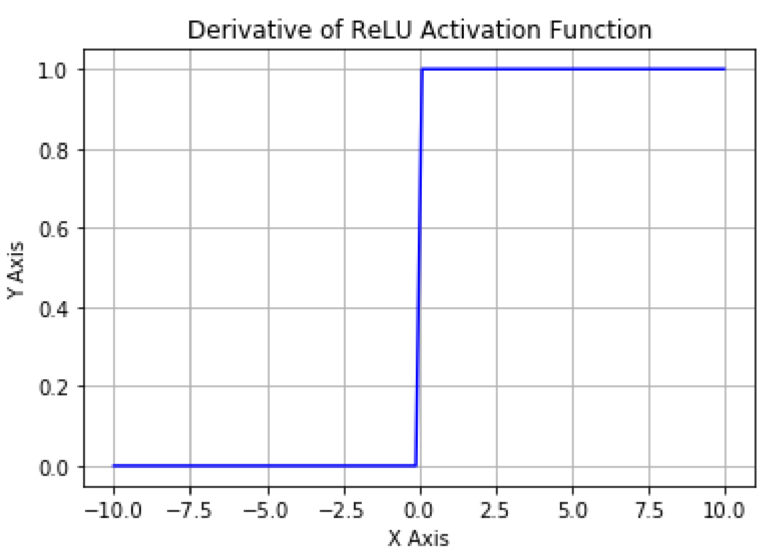
ReLU激活函数形式为：

$$f(z) = \max(0, z)$$



其导数为：

$$f'(z) = \begin{cases} 1, & z > 0 \\ 0, & z \leq 0 \end{cases}$$



ReLU优点：

- 在正数区域其导数为1，因此可以有效对抗梯度消失的问题，提供相对宽的激活边界；
- ReLU的正向计算和反向梯度计算效率都非常高，只需要一个阈值判断；
- ReLU的单侧抑制能力提供了网络的稀疏表达能力[23]。

ReLU的缺点：

- 在$x \leq 0$时，负梯度在经过该ReLU单元时被置为0，且在之后也不再被任何数据激活，流经该神经元的梯度永远为0，如果学习率较大，会导致一些神经元不可逆死亡，参数无法更新，网络无法学习；
- 也不以0为中心，non-zero-centered；

4、Leaky ReLU(LReLU)及其变种

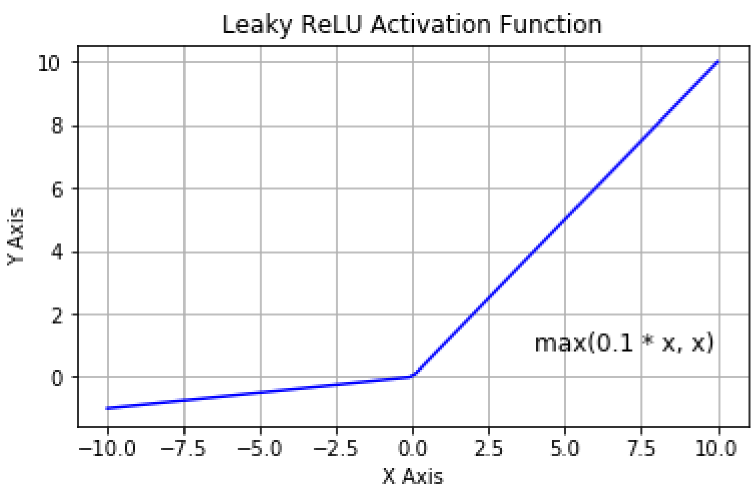
LReLU激活函数形式为：

$$f(z) = \begin{cases} z, & z > 0 \\ \alpha z, & z \leq 0 \end{cases}$$

或者也可以简写成这种形式：

$$f(z) = \max(\alpha z, z)$$

$\alpha = 0.1$时其图像：

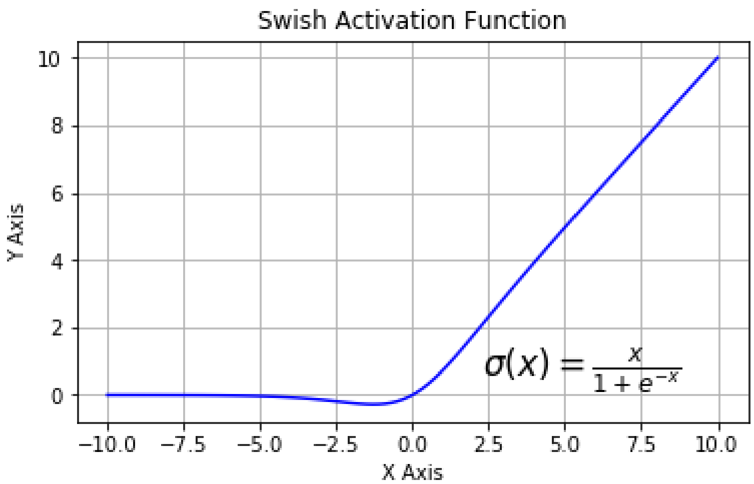


当α是事先确的好的固定超参，就是普通的Leaky ReLU；当α作为网络中一个可学习的参数时，那就是参数化的LReLU：Parametric ReLU，简称PReLU。还有的把α作为一个满足某种分布的随机采样，测试时再固定下来，就成了Random ReLU简称RReLU，RReLU能在一定程度上起到正则化作用。LReLU及其变种都能在一定程度上解决ReLU在$z \leq 0$时梯度消失神经元死亡的问题，同时仍然保留一定的单侧抑制能力。

5、Swish

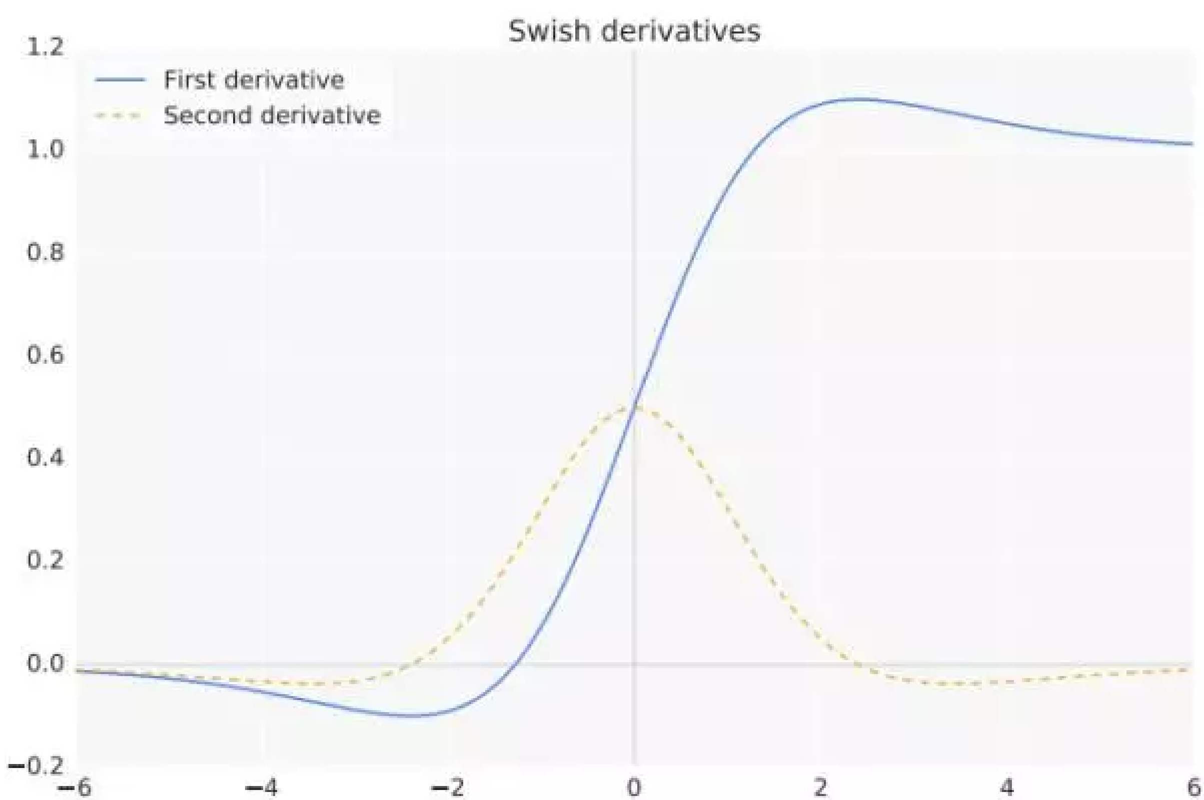
Swish由谷歌大脑提出，据称效果比ReLU要好[24][25]，其函数形式为：

$$f(z) = z \cdot sigmoid(z) = \frac{z}{1+e^{-z}}$$



其导数：

$$f'(z) = f(z) + sigmoid(z)(1 - f(z))$$



1. http://www.csuldw.com/2016/03/26/2016-03-26-loss-function/，开头部分 ↩
2. https://blog.csdn.net/zouxy09/article/details/24971995 ↩
3. 《统计学习方法 第2版》P18，李航 ↩
4. 《统计学习方法 第2版》P16，李航 ↩
5. https://blog.csdn.net/google19890102/article/details/50522945，第1部分 ↩
6. 《百面机器学习》P142，葫芦娃 ↩
7. http://www.csuldw.com/2016/03/26/2016-03-26-loss-function/，第四部分 ↩
8. https://www.cnblogs.com/hejunlin1992/p/8158933.html ↩
9. 《百面机器学习》P143，葫芦娃 ↩ ↩
10. https://blog.csdn.net/google19890102/article/details/50522945，第4部分 ↩
11. http://www.hongliangjie.com/wp-content/uploads/2011/10/logistic.pdf, 第3节Logistic Loss ↩
12. https://blog.csdn.net/walilk/article/details/51107380 ↩
13. https://blog.csdn.net/google19890102/article/details/50522945, 第2部分 ↩
14. https://blog.csdn.net/u012223913/article/details/75112246 ↩
15. 《程序员的数学-概率统计》，第6章 ↩
16. https://blog.csdn.net/guolindonggld/article/details/87856780 ↩
17. https://www.jiqizhixin.com/articles/2018-06-21-3 ↩
18. 《百面机器学习》P25，葫芦娃 ↩
19. https://baike.baidu.com/item/双曲函数 ↩
20. https://blog.csdn.net/sjokes/article/details/84504436 ↩
21. 《百面机器学习》P207，葫芦娃 ↩
22. https://www.jiqizhixin.com/articles/2017-11-02-26 ↩
23. https://www.cnblogs.com/neopenx/p/4453161.html ↩
24. https://arxiv.org/abs/1710.05941 ↩
25. https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzA3MzI4MjgzMw==&mid=2650732184&idx=1&sn=7e7ded430f5884d6d099980267fcfb15&chksm=871b32e6b06cbbf07c133e826351bae045858699d72f65474c7cebcbc5b2762c3522dfc62ef7&scene=21#wechat_redirectk ↩