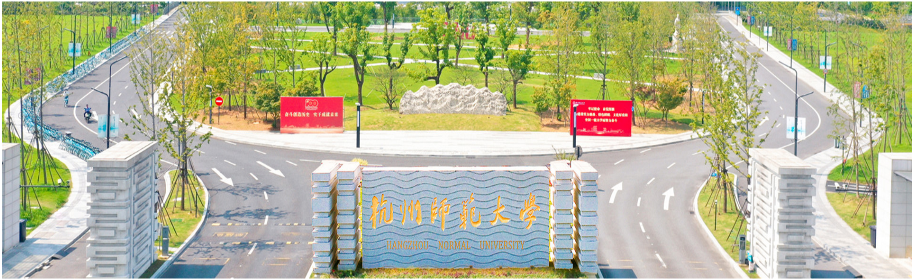
第五讲 - NLP基础算法：逻辑回归

张建章

阿里巴巴商学院
杭州师范大学

2025-02-01



目录

1. 生成模型与判别模型的对比

朴素贝叶斯是一种生成模型，它通过建模类别如何生成输入数据(即计算似然$P(d|c)$与先验$P(c)$)，来间接推导后验概率$P(c|d)$；而逻辑回归则是一种判别模型，直接学习输入与类别之间的映射，即，直接估计$P(c|d)$。

直观比喻说明：生成模型会尝试了解“狗长什么样”和“猫长什么样”，而判别模型只关心“如何区分狗和猫”。这种区别使得逻辑回归能更直接地关注那些对区分不同类别最有用的特征，而不必刻意去理解每个类别的完整分布。

2. 逻辑回归的特点

逻辑回归是一种用于**发现输入特征与某个特定结果之间联系的监督学习算法**，可以用于将观察实例划分为两个类别，也可以扩展为多类别情形，即，**多项逻辑回归 (softmax回归)**。

它不仅是社会科学和自然科学中极为重要的分析工具，也是NLP领域中**最常用的分类基线模型之一**。此外，逻辑回归与神经网络有密切关系，神经网络可以看作是由多个逻辑回归分类器逐层堆叠而成的。

3. 概率分类器的组成要素

构建一个概率分类器所需的四个核心组件 (以逻辑回归为例)：

① **特征表示**：将每个输入实例 $x^{(i)}$ 表示为一个特征向量，例如 $[x_1, x_2, \ldots, x_n]$；

① **分类函数**：一个通过计算 $p(y \mid x)$ 来产生估计类别 $\hat{y}$ 的函数，如，用于二分类的Sigmoid函数以及多分类中的Softmax函数；

① **目标函数**：通常以损失函数形式定义，用来衡量模型输出与真实标签之间的差异，进而作为模型学习的优化目标，如，交叉熵损失函数；

① **优化算法**：用于最小化目标函数，教材介绍了随机梯度下降（SGD）等算法作为参数更新的方法。

训练与测试阶段：训练阶段旨在通过优化目标函数来学习分类函数中的参数，而测试阶段则利用学到的参数对新的输入实例进行类别概率的计算，并依据概率大小作出最终分类决策。

目录

二元逻辑回归的核心思想：通过对输入特征进行线性加权求和得到一个实数得分 z，再利用Sigmoid函数将 z 映射为一个介于0和1之间的数值，从而实现概率估计，并最终用于二元分类决策。Sigmoid函数是将线性模型输出转化为概率的关键步骤。

1. 二元逻辑回归分类的背景

对每个输入实例 x（通常以特征向量 $[x_1, x_2, \ldots, x_n]$ 表示）进行二分类决策，输出 y 的取值为 1（表示正类）或 0（表示负类）。模型的目标是估计 $P(y = 1 \mid x)$，即**给定输入 x 属于正类的概率**。

2. 线性组合与得分（Logit）的计算

为了做出分类决策，模型首先为每个特征分配一个权重 w_i（权重可以为正也可以为负，反映了该特征对分类决策的正向或负向影响），并设有一个偏置项 b。将所有特征与对应权重进行线性组合，再加上偏置项，得到一个实数值得分 z，即

$$z = w \cdot x + b$$

这里的 z 称为logit，它反映了**输入 x 对正类的“证据总量”**，但 z 本身可能取任意实数值，不能直接作为概率解释。

3. Sigmoid函数及其作用

为了将得分 z 映射到概率区间 $(0, 1)$ 内，逻辑回归采用了Sigmoid（或称Logistic）函数，其定义为

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$$

Sigmoid函数具有以下3个重要性质：

- **区间映射**：它能将任意实数 z 映射到区间 $(0, 1)$，正好符合概率的定义；

- **非线性特性**：在 z 附近近似线性，而当 z 远离 0 时迅速饱和于0或1，这有助于抑制极端得分的影响；

- **可微性**：Sigmoid函数是光滑且处处可导的，为后续的梯度下降优化提供了数学基础。

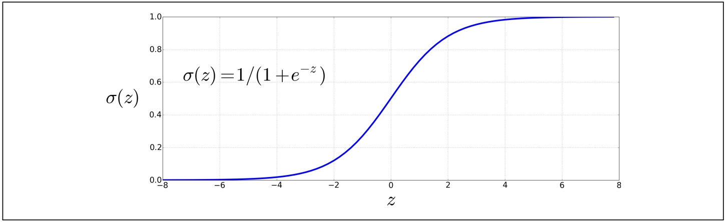


Figure 5.1 The sigmoid function $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ takes a real value and maps it to the range $(0,1)$. It is nearly linear around 0 but outlier values get squashed toward 0 or 1.

4. 概率输出与对偶关系

应用Sigmoid函数后，逻辑回归模型将得分 z 转换为正类概率：

$$P(y = 1 \mid x) = \sigma(w \cdot x + b)$$

由于 $1 - \sigma(z) = \sigma(-z)$，负类的概率可以表示为：

$$P(y = 0 \mid x) = 1 - \sigma(w \cdot x + b) = \sigma(-(w \cdot x + b))$$

在逻辑回归中，线性组合 $z = w \cdot x + b$被称为 logit，它实际上代表了正类概率 p 的对数几率，即

$$\text{logit}(p) = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$$

而 Sigmoid 函数正好是这个 logit 函数的逆函数，它将任意实数 z 映射回一个介于 0 和 1 之间的概率值，即

$$\sigma(z) = \frac{1}{1+\exp(-z)}$$

因此，称 z 为 logit 意味着**可以将 z 看作是由概率通过 logit 转换得到的数值，再通过 Sigmoid 函数将其逆转换回来得到原始的概率。**

目录

利用逻辑回归模型进行分类决策

1. 利用Sigmoid函数进行概率估计

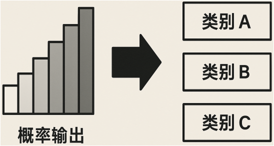
- 给定一个输入实例 x（通常表示为特征向量 $[x_1, x_2, \ldots, x_n]$），通过将输入与模型参数（权重 w 和偏置 b）线性组合得到得分 $z = w \cdot x + b$；

- 将得分 z 通过Sigmoid函数 $\sigma(z) = \frac{1}{1+\exp(-z)}$ 转化为一个介于 0 和 1 之间的数值，从而估计正类概率 $P(y = 1 \mid x) = \sigma(w \cdot x + b)$；

2. 分类决策规则

- 决策边界设定为 0.5：如果 $P(y = 1 \mid x) > 0.5$ 则判定输入 x 属于正类（例如正面情感），否则判定为负类（例如负面情感）；

- 这种基于概率阈值的决策机制使得逻辑回归能够直接将连续的概率输出转换为离散的类别标签。



情感分类应用示例

以电影评论情感分类为例，提取文档的多个特征（如正向词计数、负向词计数、否定词标识、代词计数、感叹号出现与否、文档长度等）构成特征向量。

Var	Definition	Value in Fig. 5.2
x_1	count(positive lexicon words $\in$ doc)	3
x_2	count(negative lexicon words $\in$ doc)	2
x_3	$\begin{cases} 1 & \text{if “no”} \in \text{doc} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$	1
x_4	count(1st and 2nd pronouns $\in$ doc)	3
x_5	$\begin{cases} 1 & \text{if “!”} \in \text{doc} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$	0
x_6	$\ln(\text{word count of doc})$	$\ln(66) = 4.19$

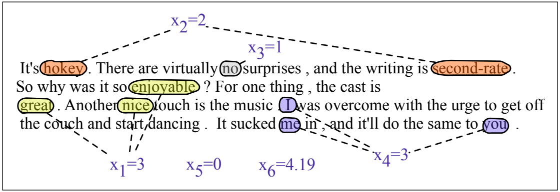


Figure 5.2 A sample mini test document showing the extracted features in the vector x.

假设已经通过训练学得权重向量$[2.5, -5.0, -1.2, 0.5, 2.0, 0.7]$）和偏置 $b = 0.1$，模型计算得到 $z = w \cdot x + b$ 后，通过Sigmoid函数转化为 $P(y = 1 \mid x) = 0.70$；因此，该电影评论被判定为正面情感。

$$
\begin{aligned}
P(y = 1 \mid x) &= \sigma(w \cdot x + b) \\
&= \sigma\Big([2.5,\ -5.0,\ -1.2,\ 0.5,\ 2.0,\ 0.7] \cdot [3,\ 2,\ 1,\ 3,\ 0,\ 4.19] + 0.1\Big) \\
&= \sigma(0.833) \\
&= 0.70 \\
P(y = 0 \mid x) &= 1 - \sigma(w \cdot x + b) \\
&= 0.30
\end{aligned}
$$

特征值标准化 (standardization)

1. 为何需要对输入特征进行缩放

不同特征可能**取值范围差异很大**，这会导致在模型训练过程中，各特征对损失函数梯度的贡献不均，从而影响参数更新的效率和最终模型的收敛速度。当特征值处于可比较的数值范围内时，模型更容易平衡各个特征的影响，进而加快梯度下降的过程，提高学习效率。

2. z-score标准化方法

将每个特征的数据转化为均值为0、标准差为1的分布，使得各特征具有相似的尺度，具体操作是：

首先，计算特征 x_i 在所有 m 个样本中的均值 $\mu_i = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} x_i^{(j)}$ 和标准差 $\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}(x_i^{(j)} - \mu_i)^2}$；然后，用公式

$$x_i' = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i}$$

将原始特征 x_i 转换为标准化后的特征 x_i'。

3. 归一化 (normalization)方法

将特征值缩放到固定区间内（通常是0到1），这种方法有助于在模型中直接比较不同特征的数值。归一化操作的公式为：

$$x_i' = \frac{x_i - \min(x_i)}{\max(x_i) - \min(x_i)}$$

其中，$\min(x_i)$ 和 $\max(x_i)$ 分别表示特征 x_i 在数据集中出现的最小值和最大值。

4. 其他任务与特征设计

- 除了情感分类，逻辑回归还可以应用于其他文本分类任务（如句末标点的歧义消解等），在这些任务中，任何能够反映输入信息的属性都可作为特征；

- 特征既可以由**人工设计**，也可以**通过表示学习自动获得**；此外，还可以**考虑特征之间的交互作用**，以提高分类性能。

5. 批量处理与向量化实现

为了提高计算效率，逻辑回归通常采用矩阵运算对多个测试实例进行并行处理。将所有测试实例的特征向量构成一个矩阵 X（每行为一个实例），利用矩阵乘法 $Xw + b$ 计算所有实例的得分，再对每个得分应用Sigmoid函数，快速获得所有实例的预测概率。这种向量化实现充分利用了现代计算硬件的并行处理能力，显著加快了模型的预测速度。

6. 分类器选择的讨论

- 相较于生成模型（如朴素贝叶斯），逻辑回归作为判别模型能更直接地关注对类别判定有帮助的特征，尤其在处理多个相关特征时更稳健。

- 尽管朴素贝叶斯在某些小规模数据或短文本任务上可能表现不错，但在大规模数据集或长文本中，逻辑回归通常能提供更精确的概率估计和更好的分类性能。

1. 多类别问题背景与模型表述

- 当分类任务中类别数大于2时（例如三分类的情感分析），传统的二元逻辑回归不足以直接处理，此时采用多项逻辑回归模型。

- 在多类别逻辑回归中，每个输入实例 x 被映射为一个长度为 K 的输出向量，其中 K 表示类别数。对于正确类别 c，将其输出设为1，而其他类别均为0，这种表示方式称为 one-hot 编码。

2. Softmax函数的引入

- 多项逻辑回归使用softmax函数来将模型输出（得分向量）转化为概率分布。softmax函数是sigmoid函数的推广，能够接受一个 K 维的任意实数向量 $z = [z_1, z_2, \ldots, z_K]$，并将其映射到一个所有元素非负、总和为1的概率向量：

$$\text{softmax}(z_i) = \frac{\exp(z_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(z_j)} \quad (1 \leq i \leq K)$$

这一公式确保了当某个 z_i 显著大于其他分量时，其对应的概率接近1，而其他分量的概率则接近0。

3. softmax函数在逻辑回归中的应用

- 在多项逻辑回归中，对于每个类别 k，模型为输入 x 分别学习一个权重向量 w_k 以及偏置 b_k。对于每个类别，其得分为 $w_k \cdot x + b_k$;

- 利用softmax函数，类别 k 的预测概率被计算为：

$$p(y_k = 1 \mid x) = \frac{\exp(w_k \cdot x + b_k)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(w_j \cdot x + b_j)}$$

为了充分利用现代向量处理硬件，多个类别对应的权重向量 $\{w_1, w_2, \ldots, w_K\}$ 被组合成一个权重矩阵 W（其每一行对应一个 w_k），偏置项则构成一个向量 b。于是，所有类别的预测概率可以通过一条矩阵运算表达为：

$$\hat{y} = \text{softmax}(Wx + b)$$

上式实现了对所有 K 个类别概率的并行计算。

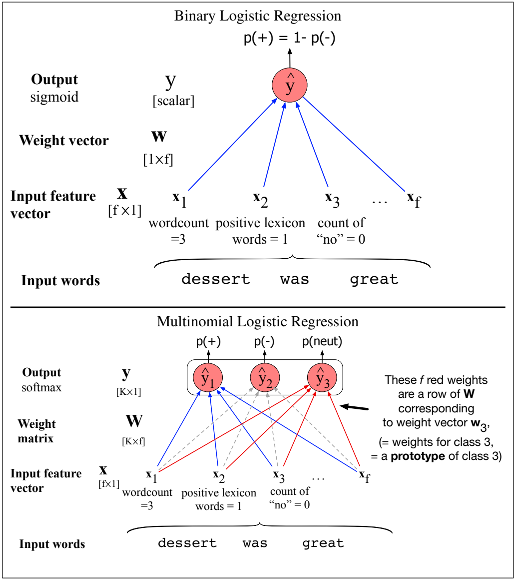


Figure 5.3 Binary versus multinomial logistic regression. Binary logistic regression uses a single weight vector **w**, and has a scalar output $\hat{y}$. In multinomial logistic regression we have K separate weight vectors corresponding to the K classes, all packed into a single weight matrix **W**, and a vector output $\hat{\mathbf{y}}$. We omit the biases from both figures for clarity.

4. 多元逻辑回归模型的解释性

- 一个有趣的解释是，将 W 的每一行 w_k 看作是类别 k 的原型或模板。**输入向量与 w_k 的点积衡量了输入与类别 k 的相似度，因而逻辑回归实际上是在寻找与每个类别原型最相似的输入实例；**

- 此外，多项逻辑回归中，每个特征在不同类别下可以拥有不同的权重，这使得同一特征能够为不同类别提供正向或负向的证据，从而更细粒度地区分各类别。

目录

参数学习的过程：利用交叉熵损失函数作为目标指标，将逻辑回归参数学习问题转化为一个凸优化问题，并通过梯度下降（特别是随机梯度下降）算法不断更新参数，即权重向量 w 和偏置 b，使得模型在训练数据上的预测概率尽可能接近真实标签，从而实现有效的分类。

1. 参数学习目标

逻辑回归是一种监督学习方法，每个训练样本 $(x^{(i)}, y^{(i)})$ 已经带有正确标签 $y^{(i)}$（对于二元分类，y 为0或1）。模型根据输入 x 通过计算 $z = w \cdot x + b$ 并应用 Sigmoid 函数，输出预测概率 $\hat{y} = \sigma(w \cdot x + b)$；**学习目标就是使得 $\hat{y}$ 尽可能接近真实标签** y。

2. 损失函数的引入

为了衡量模型输出 $\hat{y}$ 与真实标签 y 之间的差距，引入损失函数（cost function）。逻辑回归采用了交叉熵损失 (cross-entropy loss)函数，对于单个样本，其形式为：

$$L_{CE}(\hat{y}, y) = -\left[y \log \hat{y} + (1 - y) \log(1 - \hat{y})\right]$$

这一损失函数的设计鼓励模型为正确标签赋予高概率，而对错误标签赋予低概率。

3. 优化问题的形式化

逻辑回归模型的学习问题可以形式化为一个凸优化问题，其目标是找到参数 $\theta = \{w, b\}$ 使得所有训练样本上的平均交叉熵损失最小：

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L_{CE}\big(f(x^{(i)}; \theta), y^{(i)}\big)$$

由于交叉熵损失函数在逻辑回归中是凸的，这意味着不存在局部最小值，任何初始点通过适当的梯度下降都能达到全局最优解。

4. 梯度下降法及其变种

为了最小化损失函数，通常使用梯度下降算法，利用损失函数关于参数的梯度（即偏导数）来更新参数：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_\theta L_{CE}\big(f(x^{(i)}; \theta), y^{(i)}\big)$$

其中 η 是学习率，决定了每次更新的步长大小。

实践中，为了提高计算效率，经常使用随机梯度下降算法，即每次只利用单个或一小批训练样本来近似计算梯度，从而实现在线式参数更新，这在大规模数据训练中尤为常用。

目录

1. 学习目标与参数定义

逻辑回归的学习 (训练)目标就是使得 $\hat{y}$ 尽可能接近真实标签 y，即，对于任一观测 x，**分类器的输出** $\hat{y} = \sigma(w \cdot x + b)$ **(取值为0-1之间的概率值)** 与**正确输出** y （**取值为0或1**）之间的差距：

$$L(\hat{y}, y) = \text{预测值与真实值之间的差异}$$

参数为Sigmoid函数中的w和b。

2. 损失函数的引入

为了实现上述目标，采用一种**使得训练样本中正确类别标签的概率更高**的损失函数。这种方法被称为**条件最大似然估计**，即选择参数 w 和 b 来最大化在给定观测 x 条件下训练数据中真实 y 标签的对数概率。最终得到的损失函数为**负对数似然损失**，通常称为**交叉熵损失**。

交叉熵损失函数推导

1. 概率模型的构建

针对单个观测 x，目标是学习出一组权重，**最大化模型对单个观测 x 生成正确标签的概率** $p(y \mid x)$，

$$p(y \mid x) = \hat{y}^{y}(1-\hat{y})^{1-y}$$

当 $y=1$ 时，$p(y \mid x) = \hat{y}$；当 $y=0$ 时，$p(y \mid x) = 1-\hat{y}$。

2. 对数似然的计算

为了使数学处理更简洁，同时将乘法转换为加法，对概率 $p(y \mid x)$ 取自然对数，得到对数似然：

$$\log p(y \mid x) = y \log \hat{y} + (1-y) \log(1-\hat{y}),$$

对数函数保留了最大化概率的性质，即最大化概率的 $p(y \mid x)$ 等价于最大化其对数。

3. 构造损失函数：负对数似然

在机器学习中，通常是通过最小化一个损失函数来训练模型。为此，将对数似然取负，构造出损失函数：

$$L_{CE}(\hat{y}, y) = -\left[y \log \hat{y} + (1-y)\log(1-\hat{y})\right]$$

上式称为交叉熵损失函数。损失值越低，说明模型输出的概率分布与真实标签越接近。

4. 将模型输出与损失函数联系起来

在逻辑回归中，模型通过计算线性组合 $w \cdot x + b$ 并将其传入Sigmoid函数得到预测概率 $\hat{y} = \sigma(w \cdot x + b)$。将这一结果代入交叉熵损失函数，得到：

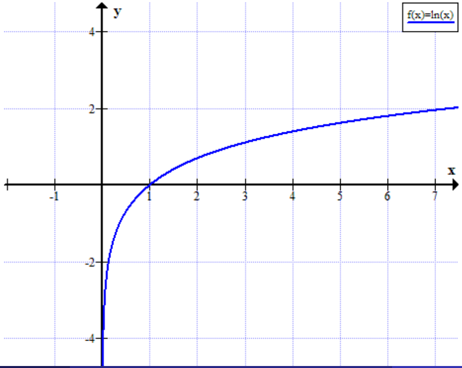
$$L_{CE}(\hat{y}, y) = -\left[y \log \sigma(w \cdot x + b) + (1-y)\log\left(1 - \sigma(w \cdot x + b)\right)\right]$$

通过最小化这个损失函数，模型会调整参数 w 和 b，使得对于每个训练样本，**预测概率** $\sigma(w \cdot x + b)$ **尽可能接近真实标签** y。

5. 交叉熵损失的意义

- 交叉熵损失函数不仅衡量了模型输出与真实分布之间的“距离”，对数似然衡量模型输出与真实分布之间的“相似度”；

- 交叉熵损失函数具有较好的数学性质——当预测概率接近真实标签（即为1或0）时，损失趋近于0；当预测概率与真实标签相差较大时，损失会迅速增大 (如下图所示)。这一特性促使模型在训练过程中不断提升对正确标签的置信度，从而提高分类性能。



目录

1. 目标与背景

- 在逻辑回归中，目标是通过调整参数 $\theta = \{w, b\}$ 使得模型对训练数据的预测概率 $\hat{y} = \sigma(w \cdot x + b)$ 尽可能接近真实标签 y;

- 损失函数（交叉熵损失）刻画了模型输出与真实标签之间的差距，而梯度下降法则用于在参数空间中寻找使得**平均损失最小**的参数集，即：

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L_{CE}\big(f(x^{(i)}; \theta), y^{(i)}\big).$$

其中，m为测试集中的样本数量。

- **逻辑回归的交叉熵损失函数是凸函数** (在函数图像上任意两点连线都不会低于函数图像本身)，凸函数最多只有一个全局最小值，也就是说不存在多个局部最小值使得优化过程陷入困境。因此，**从任意初始点出发使用梯度下降法都能保证找到全局最小值**。多层神经网络的损失函数通常是非凸的，具有多个局部最小值。在这种情况下，梯度下降可能会在某个局部最小值停滞，无法达到全局最优解，这也是深度学习模型训练中常见的挑战之一。

2. 梯度下降的基本原理

- **梯度的概念：** 多变量函数在某一点的梯度是所有偏导数组成的向量，指向该函数**上升最快的方向**，为了使损失函数值下降，需要**向反方向更新参数**，即向梯度的相反方向移动。

- **直观解释：** 类似于在峡谷中寻找下坡路径，梯度给出了上升最快的方向，因此我们选择沿着其反方向更新参数，从而快速降低损失。

- **更新规则：** 考虑一个由参数 θ（如权重 w 和偏置 b）构成的损失函数L，为了使损失函数下降，梯度下降法按照下面的规则更新参数：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla_\theta L\big(f(x;\theta), y\big)$$

其中 η 是学习率，控制每次更新的步长大小。**逻辑回归交叉熵损失函数对单个权重 w_j 的偏导数为：**

$$\frac{\partial L_{CE}(\hat{y}, y)}{\partial w_j} = [\sigma(w \cdot x + b) - y]\, x_j = (\hat{y} - y)x_j$$

因此，预测误差与输入特征值的乘积决定了参数更新的方向和幅度。

单变量损失函数梯度下降示例

在单变量情况下，梯度可以理解为损失函数在该点的斜率。

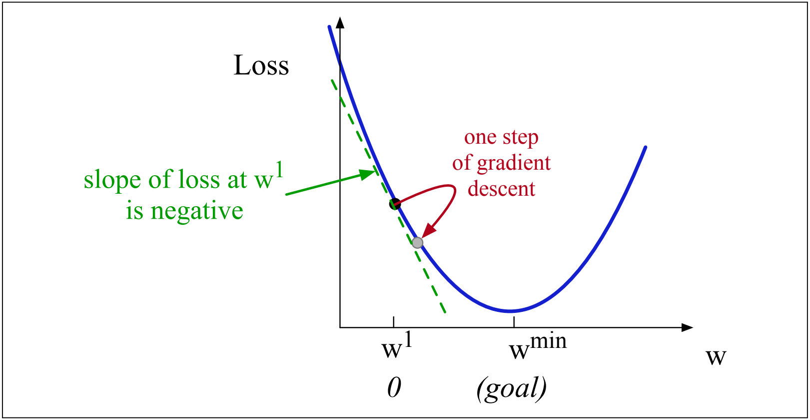


Figure 5.4 The first step in iteratively finding the minimum of this loss function, by moving w in the reverse direction from the slope of the function. Since the slope is negative, we need to move w in a positive direction, to the right. Here superscripts are used for learning steps, so w^1 means the initial value of w (which is 0), w^2 the value at the second step, and so on.

多变量损失函数梯度下降示例

对于多维参数，每个参数都有对应的偏导数，其集合构成梯度向量。

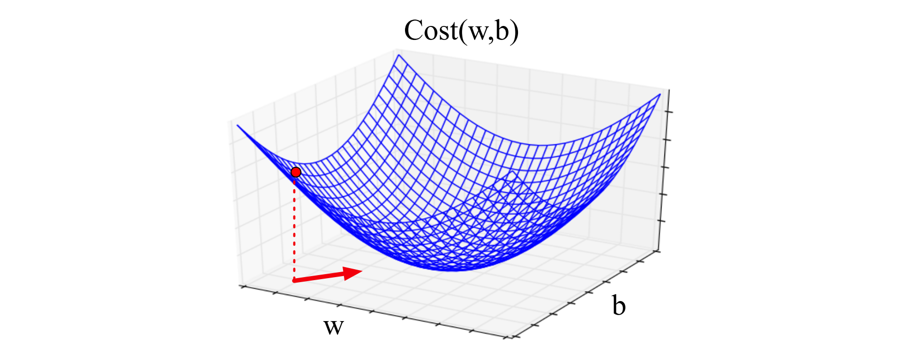


Figure 5.5 Visualization of the gradient vector at the red point in two dimensions w and b, showing a red arrow in the x-y plane pointing in the direction we will go to look for the minimum: the opposite direction of the gradient (recall that the gradient points in the direction of increase not decrease).

梯度下降的实际实现与优化策略

- **随机梯度下降（SGD）**：为了提高大规模数据训练的效率，梯度下降通常采用随机梯度下降，即每次仅利用一个（或一小批）训练样本来计算梯度，并据此更新参数；

- **Mini-batch训练**：为了平衡梯度估计的噪声和计算效率，还可以采用 mini-batch 训练方法，每次利用一组小批量样本进行参数更新，从而获得更稳定的梯度估计并加速并行计算；

- **学习率调整**：选择合适的学习率 η 至关重要，过高可能导致参数更新过快而越过最优点，过低则会使收敛速度缓慢。常见策略是初始采用较高学习率，随后逐渐降低（例如，使学习率成为训练迭代次数的函数）。

末完待续