人工智能与深度学习

1 课程简介

王中雷

经济学院、王亚南经济研究院、邹至庄经济研究院

厦门大学

（第一版）

内容摘要

1. 回顾已学内容

2. 学习目标

3. 交叉熵

回顾已学内容

1. 数据集类型：
   - 训练集（Training data）样本量n：$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i) : i = 1, \ldots, n\}$
     - $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^{d\times 1}$：第$i$ 个训练样本的特征向量
     - $y_i \in \mathbb{R}$：第i 个样本的标签
   - 测试集（Test data）
2. 回归模型：
   - 线性回归：$y_i = b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w} + \epsilon_i \quad (i = 1, \ldots, n)$
   - 逻辑回归：$P(y_i = 1 \mid \boldsymbol{x}_i) = \sigma(b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}) \quad (i = 1, \ldots, n)$
     - $\sigma(z) = \{1 + \exp(-z)\}^{-1} \quad (\forall z \in \mathbb{R})$
   - 多元逻辑回归 (Softmax regression)

符号

1. n：训练集样本量
2. d：特征向量维度
3. $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n \times d}$：设计矩阵
4. $\boldsymbol{Y} = (y_1, \ldots, y_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$：标签向量

线性回归--模型设定

1. 训练集

- 特征向量 $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^{d\times 1}$，标签 $y_i \in \mathbb{R}$ $\quad (i = 1, \ldots, n)$

2. 目标

- 学习特征$\boldsymbol{x}$ 和标签y 之间的关系

3. 真实模型（用于产生数据）

- $y_i = b_0 + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}_0 + \epsilon_i \quad (i = 1, \ldots, n)$
  - $\boldsymbol{\theta}_0 = (b_0, \boldsymbol{w}_0{}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$：真实模型参数
  - ϵ_i：满足$E(\epsilon_i \mid \boldsymbol{x}_i) = 0$，以及$\mathrm{var}(\epsilon_i \mid \boldsymbol{x}_i) = \sigma^2 > 0$ 的残差项

线性回归--模型设定

1．所提出模型（假设的，用于拟合数据）

- $E(y_i \mid \boldsymbol{x}_i) = b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w} \quad (i = 1, \ldots, n)$
  - $\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$：（提出）模型的参数
  - 训练模型是指，基于训练集，估计所提出模型的参数
  - 与真实模型形式相同，但我们需要学习模型参数

线性回归--参数估计

1．损失函数：对于第i 个训练样本，

- l_2-损失：$\mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i) = (y_i - \hat{y}_i)^2/2$
- $\hat{y}_i = b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}$
- $\hat{y}_i$ 是模型参数$\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ 的函数
- $\mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i)$ 实际上，也是模型参数$\boldsymbol{\theta}$ 的函数
- 但简单起见，我们在上述表达式中，忽略模型参数
- 以上这个损失函数，是模型参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的凸函数

线性回归--参数估计

1．代价函数（均方误差，Mean Squared Error，MSE）

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathcal{L}(y_i, \hat{y}_i) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - b - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w})^2$$

2．我们通常不区分损失函数和代价函数

3．求解

$$\frac{\mathcal{J}}{\partial b} = 0, \quad \frac{\mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}} = 0$$

4．陷阱：求和运算导致算法计算效率低下

5．问题：对于 Python 而言，为什么当数据量很大时，基于 for 循环的求和会变成一个“计算灾难”？

向量化

1．考虑

$$\sum_{i=1}^{m} a_i b_i$$

- $a_i \in \mathbb{R}, \quad b_i \in \mathbb{R}$

2．对于 Python 或者其他软件，用 for 循环计算加和，是非常低效的

3．然而，矩阵运算是高效的

4．因此，我们可对加和进行向量化处理

向量化

1. 向量化结果：

$$\sum_{i=1}^{m} a_i b_i = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{b}$$

- $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$
- $\boldsymbol{b} = (b_1, \ldots, b_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$

2. 能用线性代数整体计算的，不要拆成大量细碎循环

向量化

1. 例 1：考虑

$$\sum_{i=1}^{m} a_i$$

- $a_i \in \mathbb{R}$

2. 向量化结果：

$$\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{i=1}^{m} a_i \times 1 = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{1} (= \mathbf{1}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{a})$$

- $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$
- $\mathbf{1} = (1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$：由 1 组成的长度为 m 的列向量

向量化

1. 例 2：考虑

$$\sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \boldsymbol{b}_i$$

- $a_i \in \mathbb{R}$：一个可能取值为 1 的标量
- $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^{k\times 1}$

2. 向量化结果：

$$\sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{a}$$

- $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m\times 1}$
- $\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m) \in \mathbb{R}^{k\times m}$

向量化

1. 例 3：考虑

$$\sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \boldsymbol{b}_i{}^{\mathrm{T}}$$

- $a_i \in \mathbb{R}$：一个可能取值为 1 的标量
- $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^{k\times 1}$

2. 向量化结果：

$$\sum_{i=1}^{m} a_i \cdot \boldsymbol{b}_i{}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{B}$$

- $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m\times 1}$
- $\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m\times k}$

向量化

1. 例 4：考虑

$$\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_i{}^{\mathrm{T}}$$

- $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^{k\times 1}$
- $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^{l\times 1}$

2. 向量化结果：

$$\sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_i{}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}$$

- $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m) \in \mathbb{R}^{k\times m}$
- $\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{m\times l}$

向量化

1. 记$\hat{\boldsymbol{Y}} = b \cdot \mathbf{1}_n + \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$
   - $\mathbf{1}_n = (1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$： 由 1 组成的长度为$n$ 的向量
2. 代价函数

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) &= \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{2n}(\boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}})^{\mathrm{T}} \cdot (\boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}}) \\ &= \frac{1}{2n}(\boldsymbol{Y} - b \cdot \mathbf{1}_n - \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{w})^{\mathrm{T}} \cdot (\boldsymbol{Y} - b \cdot \mathbf{1}_n - \boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{w}) \\ &= \frac{1}{2n}(\boldsymbol{Y} - \tilde{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{\theta})^{\mathrm{T}} \cdot (\boldsymbol{Y} - \tilde{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{\theta})\end{aligned}$$

   - $\tilde{\boldsymbol{X}} = (\tilde{\boldsymbol{x}}_1, \ldots, \tilde{\boldsymbol{x}}_n)^{\mathrm{T}}$ (将b 和$\boldsymbol{w}$ 放在一起考虑)
   - $\tilde{\boldsymbol{x}}_i = (1, \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$

向量化

1．考虑

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0$$

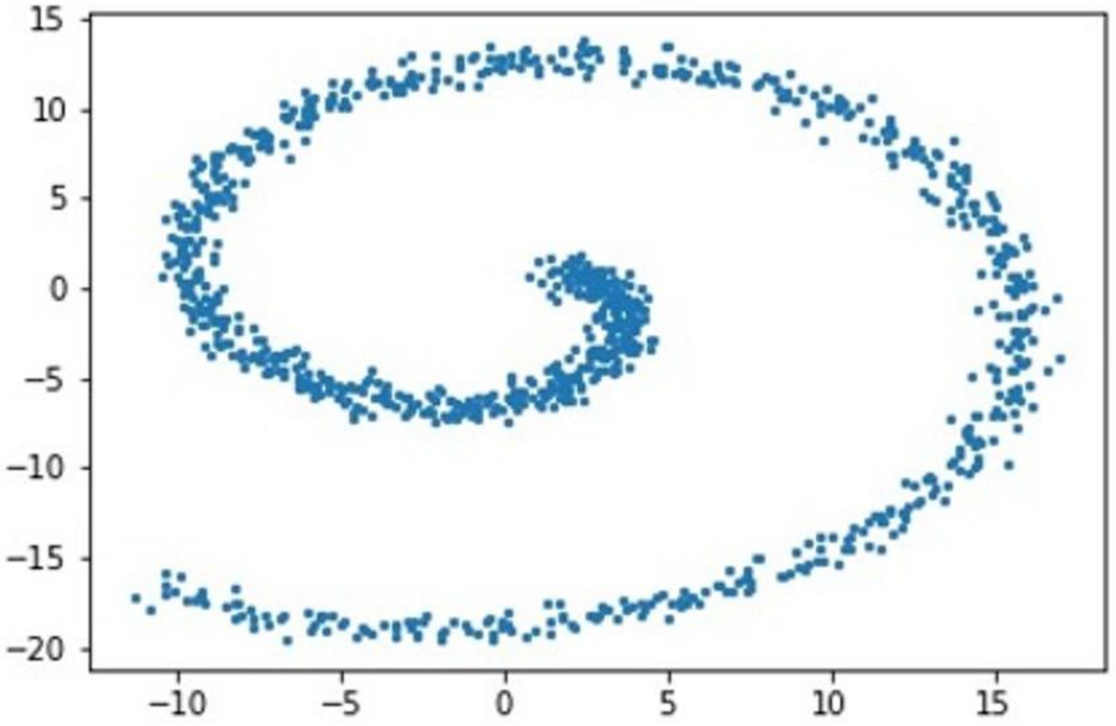
2．得到正则方程（Normal equation）

$$\tilde{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{\theta} = \tilde{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{Y}$$

3．解 (显式解)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\tilde{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{\boldsymbol{X}})^{-1} \tilde{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{Y}$$

例子



逻辑回归--模型设定

1．训练集

- 特征向量 $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^{d\times 1}$，标签 $y_i \in \{0,1\}$ $\quad (i=1,\ldots,n)$

2．目标

- 学习特征$\boldsymbol{x}$ 和标签 y 之间的关系

3．真实模型（用于产生数据）

$$E(y_i \mid \boldsymbol{x}_i) = P(y_i = 1 \mid \boldsymbol{x}_i) = \sigma(b_0 + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}_0) \quad (i=1,\ldots,n)$$

- $\sigma(z) = \{1+\exp(-z)\}^{-1}$ (我们为什么需要这步变换?)

逻辑回归--模型设定

1．所提出模型（假设的，用于拟合数据）

- $P(y_i = 1 \mid \boldsymbol{x}_i) = \sigma(b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}) \quad (i = 1, \ldots, n)$
  - $\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$：（提出）模型的参数
  - 训练模型是指：基于训练集，估计所提出模型的参数
  - 与真实模型形式相同，但我们需要学习模型参数

2．问题：如果我们用线性模型分析二分类问题，会有什么后果呢？

逻辑回归--参数估计

1．损失函数：对于第i 个训练样本，

- 交叉熵（负对数似然函数）

$$\mathcal{L}(y_i, a_i) = -\{y_i \log a_i + (1 - y_i) \log(1 - a_i)\}$$

  - $a_i = \sigma(z_i)$ （估计概率）
  - $z_i = b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}$

- a_i 是模型参数$\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$ 的函数
- 交叉熵，实际上也是模型参数$\boldsymbol{\theta}$ 的函数
- 但简单起见，我们在上述表达式中，忽略了该模型参数
- 以上这个交叉熵，是模型参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的凸函数

逻辑回归--参数估计

1．代价函数

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) = n^{-1}\sum_{i=1}^{n}\mathcal{L}\{y_i, a_i\}$$

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

- $\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$
- $a_i = \sigma(b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w})$

逻辑回归--参数估计

1．求解

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0$$

2．没有显式解

牛顿-拉裴森（Newton-Raphson）算法

步骤1. 随机初始化$\boldsymbol{\theta}^{(0)}$

步骤2. 基于$\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 得到

$$\nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)=\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}^{(t)}),$$

$$H(\mathcal{J})\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)=\frac{\partial^2 \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}}(\boldsymbol{\theta}^{(t)})$$

步骤3. 更新模型参数

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}=\boldsymbol{\theta}^{(t)}-\left\{H(\mathcal{J})\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)\right\}^{-1} \cdot \nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

步骤4. 回到步骤 2 直至收敛，或达到最大迭代次数

备注

1．代价函数是一维的

2．在本课程中，我们假设 $\partial J/\partial \boldsymbol{\theta}$ 的维度与 $\boldsymbol{\theta}$ 相同

3．也就是说，当 $\boldsymbol{\theta}$ 是列向量时，$\partial J/\partial \boldsymbol{\theta}$ 也是一个列向量

4．这样，牛顿-拉裴森算法的第三步，在数学上是严谨的

5．注意：在一些教材中，当 $\boldsymbol{\theta}$ 为一个列向量时，$\partial J/\partial \boldsymbol{\theta}$ 被定义为一个行向量

6．本课程中，我们不采取其他教材的定义

讨论

1. 收敛速度快（得益于 Hessian 矩阵的使用）
2. 计算效率低下（涉及到对 Hessian 矩阵求逆）
3. 适用于当模型参数规模较小的情况
4. 不适用于深度学习模型参数的训练
5. 什么算法适用于深度学习模型的训练呢？

批量梯度下降（Batch gradient descent）法

步骤1. 随机初始化$\boldsymbol{\theta}^{(0)}$

步骤2. 基于$\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 计算

$$\nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)=\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

步骤3. 更新模型参数

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}=\boldsymbol{\theta}^{(t)}-\alpha \cdot \nabla \mathcal{J}\left(\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

步骤4. 回到步骤 2 直至收敛，或达到最大迭代次数

批量梯度下降（Batch gradient descent）法

1．α：学习率（Learning rate）

- 控制算法收敛速度
- 影响训练模型的好坏
- 将在后续学习中展开讨论

算法比较

1．牛顿-拉裴森算法

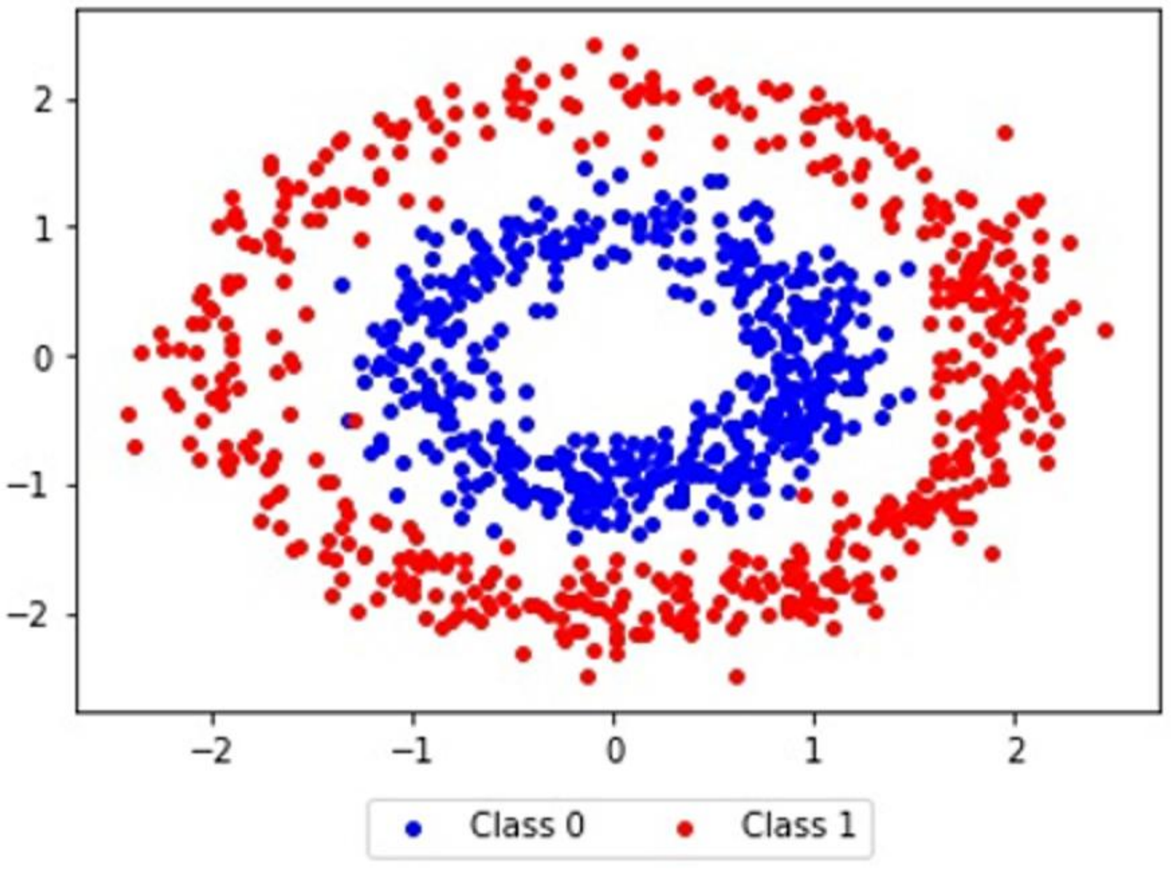
- 优势：
  - 收敛速度快
  - 算法精度高
- 缺点：
  - 计算效率低（Hessian 矩阵求逆）
  - 稳定性差（当 Hessian 矩阵出现病态时）

算法比较

1．批量梯度下降法

- 优势：
  - 计算效率高
  - 便于操作
- 缺点：
  - 收敛速度较慢
  - 对学习率较为敏感

例子



总结

1．我们通常利用如下步骤进行数据建模

问题	提出的模型	代价函数	算法
$y \in \mathbb{R}$	$E(y \mid \boldsymbol{x}) = b + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}$	$n^{-1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - b - \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w})^2$	正则方程
$y \in \{0, 1\}$	$E(y \mid \boldsymbol{x}) = \sigma(b + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w})$	$-n^{-1} \sum_{i=1}^{n} \{y_i \log a_i + (1 - y_i) \log(1 - a_i)\}$	梯度下降

2．梯度下降法广泛应用于人工智能模型的训练

3．梯度下降法的关键步骤是计算

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{\theta}}$$

问题

1. 目前为止，我们假设真实模型和所提出的模型，具有相同的形式

2. 然而，这种假设在现实生活中，通常不成立

3. 模型错误设定 (Model misspecification)

   - 被提出的（统计）模型过于简单
   - 然而，真实模型往往很复杂

学习目标

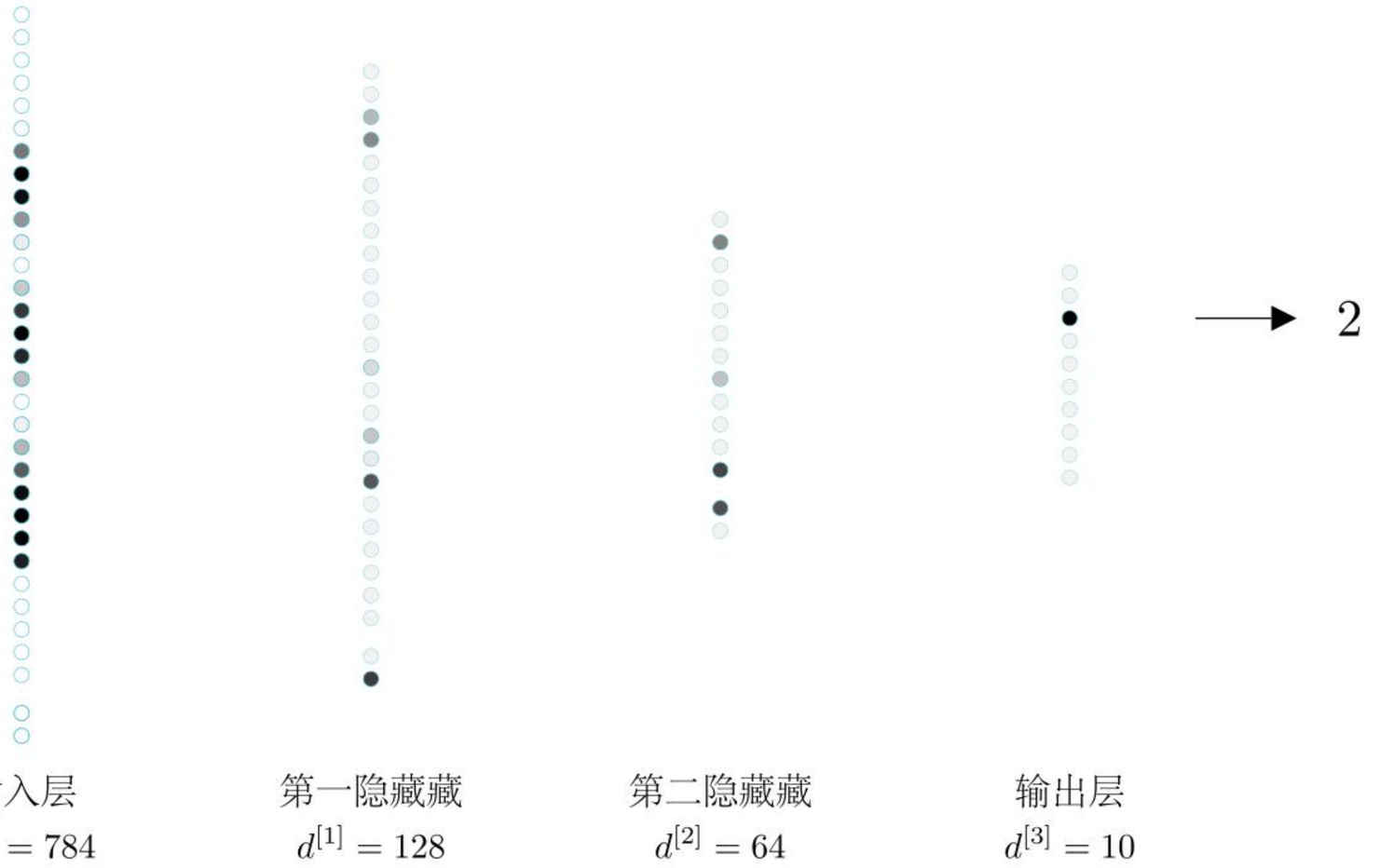
1. 全连接神经网络（多层感知机）
2. 卷积神经网络（CNN, ...）
3. 序列模型（RNN, LSTM, transformers, ...）
4. （自行学习）其他话题（GNN, GCN, ...）

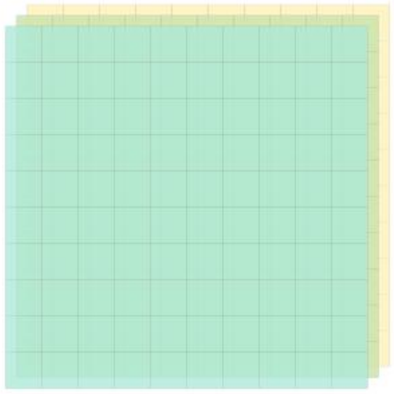
全连接神经网络例子

测试图片

模型 (具有两个隐藏藏的全连接神经网络)

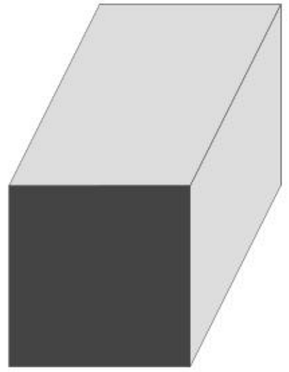
估计结果





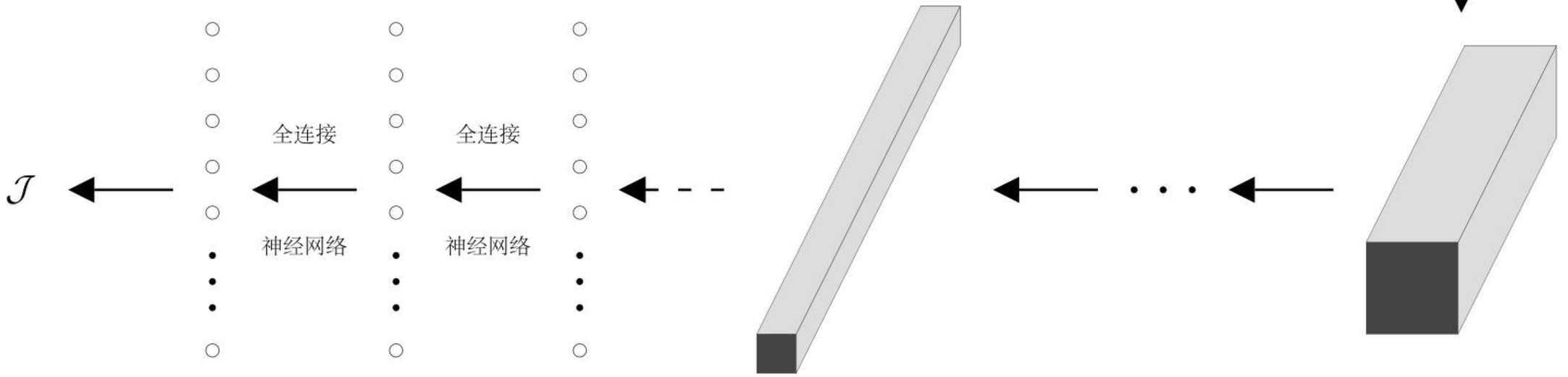
卷积

池化



输入($\mathbb{R}^{d_C \times d_H \times d_W}$)

后续讨论



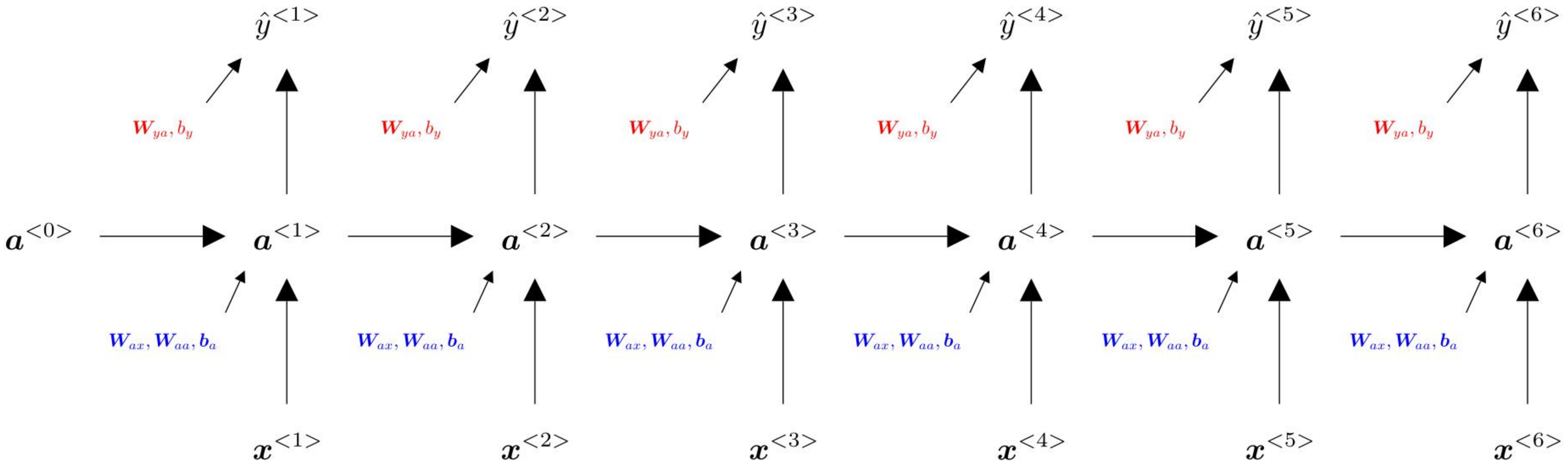
$\boldsymbol{A}^{[L-1]} \in \mathbb{R}^{d^{[L-1]} \times 1 \times 1}$

$\boldsymbol{A}^{[L-2]} \in \mathbb{R}^{d_C^{[L-2]} \times d_W^{[L-2]} \times d_H^{[L-2]}}$

$\boldsymbol{A}^{[L]} \in \mathbb{R}^{d^{[L]} \times 1 \times 1}$

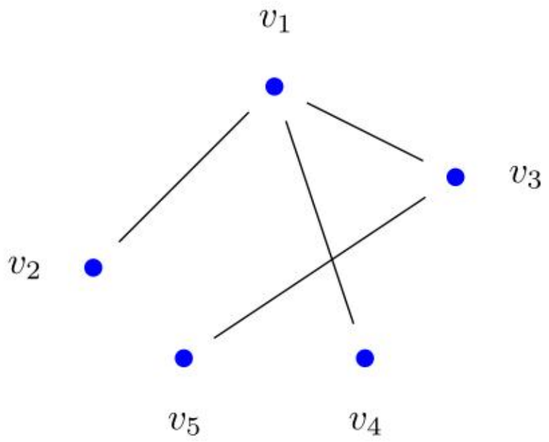
循环神经网络模块

$$\hat{y}^{<i>} = \sigma_{ya}(\boldsymbol{W}_{ya} \cdot \boldsymbol{a}^{<i>} + b_y) \quad (i = 1, \ldots, 6)$$



$$\boldsymbol{a}^{<i>} = \sigma_{ax}(\boldsymbol{W}_{ax} \cdot \boldsymbol{x}^{<i>} + \boldsymbol{W}_{aa} \cdot \boldsymbol{a}^{<i-1>} + \boldsymbol{b}_a) \quad (i = 1, \ldots, 6)$$

无向图



顶点集$\mathcal{V} = \{v_i : i = 1, \ldots, n\}$

边集: $\mathcal{E}$

无向图: $\mathcal{G} = \mathcal{V} \cup \mathcal{E}$

邻接矩阵（{0,1}; [0,1]）

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

度矩阵（对角阵, 邻接矩阵A的每行求和）

$$D = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

回顾

1. $X \sim P$: 随机变量X 产生于分布P
2. $E_{X\sim P}\{f(X)\}$: 随机变量 $f(X)$ 的期望
   - 我们用 "$X \sim P$" 以强调随机变量 X 的分布
   - $f(x)$: 一个可测函数
3. 实际问题中，我们往往观测不到整个分布 P
4. 我们往往只能观测到，一个产生于分布 P 的随机样本 $\{x_i : i = 1, \ldots, n\}$

回顾

1. 基于这个随机样本 $\{x_i : i = 1, \ldots, n\}$，我们可以得到它的经验分布函数 P_n

样本	x_1	x_2	x_3	$\cdots$	x_n
概率	$\frac{1}{n}$	$\frac{1}{n}$	$\frac{1}{n}$	$\cdots$	$\frac{1}{n}$

2. 备注

- 由于样本 $\{x_i : i = 1, \ldots, n\}$ 是随机的，经验分布也是随机的
- （相对于计数测度而言）经验分布的密度函数为 $p_n(x) = n^{-1} \sum_{i=1}^{n} \delta(x = x_i)$
  - $\delta(x = y)$：示性函数。当 $x = y$ 时，其结果为 1；否则，结果为 0
- 通过简单验证可知，样本均值可以被表示成 $E_{X \sim P_n}(X) = n^{-1} \sum_{i=1}^{n} x_i$

交叉熵

1. 一个事实：在一般条件下，

$$E_{X\sim P}\{\log p(X)\} \geq E_{X\sim P}\{\log q(X)\}$$

- $p(x)$：分布P 的概率密度函数
- $q(x)$：其他任意概率密度函数

2.（信息）熵的概念来自于信息论

- 一个事件的“信息量”被定义，为其发生概率的负对数
- （信息）熵是指该分布中，所有事件信息量的期望值

3. 对于两个密度函数的p 和q 的交叉熵

$$H(p,q) = -E_{X\sim P}\{\log q(X)\} = -E\{\log q(X)\}$$

- 衡量概率密度函数q，对随机变量X 分布的近似程度

交叉熵

1. 只观测到随机样本$\{x_1, \ldots, x_n\}$
2. 一般条件下，交叉熵$H(p, q)$ 可被如下公式近似（大数定律）

$$\hat{H}(p, q) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log q(x_i)$$

   - 等价地，以上是经验密度函数$p_n(x) = n^{-1} \sum_{i=1}^{n} \delta(x = x_i)$ 和密度函数$q(x)$ 的交叉熵

3. 目标: 寻找密度函数$q(x)$ 用来最小化$\hat{H}(p, q)$
   - 即为了近似随机变量的经验密度函数

回顾逻辑回归

1. 假设随机变量$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i) : i = 1, \ldots, n\}$ 是独立同分布的，对应的概率密度函数为

$$p(\boldsymbol{x}, y) = p(\boldsymbol{x})p(y \mid \boldsymbol{x})$$

- $p(\boldsymbol{x})$：（不是很重要的）$\boldsymbol{x}$ 的边际概率密度函数
- $p(y \mid \boldsymbol{x}) = \sigma(b_0 + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w}_0)$：关于$y$ 的（我们感兴趣的）参数化的条件密度函数

2. 目标: 寻找概率密度函数$q(\boldsymbol{x}, y)$ 以最小化

$$\hat{H}(p, q) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \log q(\boldsymbol{x}_i, y_i)$$

回顾逻辑回归

1．一些数学推导

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log q(\boldsymbol{x}_i, y_i) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{\log q(\boldsymbol{x}_i) + \log q(y_i \mid \boldsymbol{x}_i)\}$$

$$= -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log q(\boldsymbol{x}_i) - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[y_i \log a_i(\boldsymbol{\theta}) + (1-y_i)\log\{1-a_i(\boldsymbol{\theta})\}]$$

- $q(\boldsymbol{x}, y) = q(\boldsymbol{x})q(y \mid \boldsymbol{x})$
- $q(\boldsymbol{x})$：不假定具体形式
- $q(y \mid \boldsymbol{x}) = a(\boldsymbol{\theta})^y\{1-a(\boldsymbol{\theta})\}^{1-y}$
- $a_i(\boldsymbol{\theta}) = \sigma(b + \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{w})$：模型参数为 $\boldsymbol{\theta} = (b, \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$

回顾逻辑回归

1．因此，我们有

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log q(\boldsymbol{x}_i, y_i) = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log q(\boldsymbol{x}_i) - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[y_i \log a_i(\boldsymbol{\theta}) + (1-y_i)\log\{1-a_i(\boldsymbol{\theta})\}]$$

- 其中，我们对第一部分不感兴趣
- 我们对第二部分中的模型参数感兴趣

2．因此，等价于我们需要最小化

$$-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[y_i \log a_i(\boldsymbol{\theta}) + (1-y_i)\log\{1-a_i(\boldsymbol{\theta})\}]$$

- 以上便是从交叉熵出发，推导出的逻辑回归模型的代价函数

课程总结

1. 回顾了线性回归和逻辑回归
   - 目标：构建一套统一的建模流程
     - 数据 → （所提出的）模型 → 代价（损失）函数 → 优化算法
2. 向量化提高计算效率
3. 比较了两个优化算法：牛顿拉裴森算法和梯度下降法
4. 基于简单模型错误设定的缺点，展望了即将学习的神经网络框架
5. 介绍了分类问题中，常用的代价函数–交叉熵