中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

《人工智能数学原理与算法》
第2章：机器学习基础

2.5 逻辑回归I

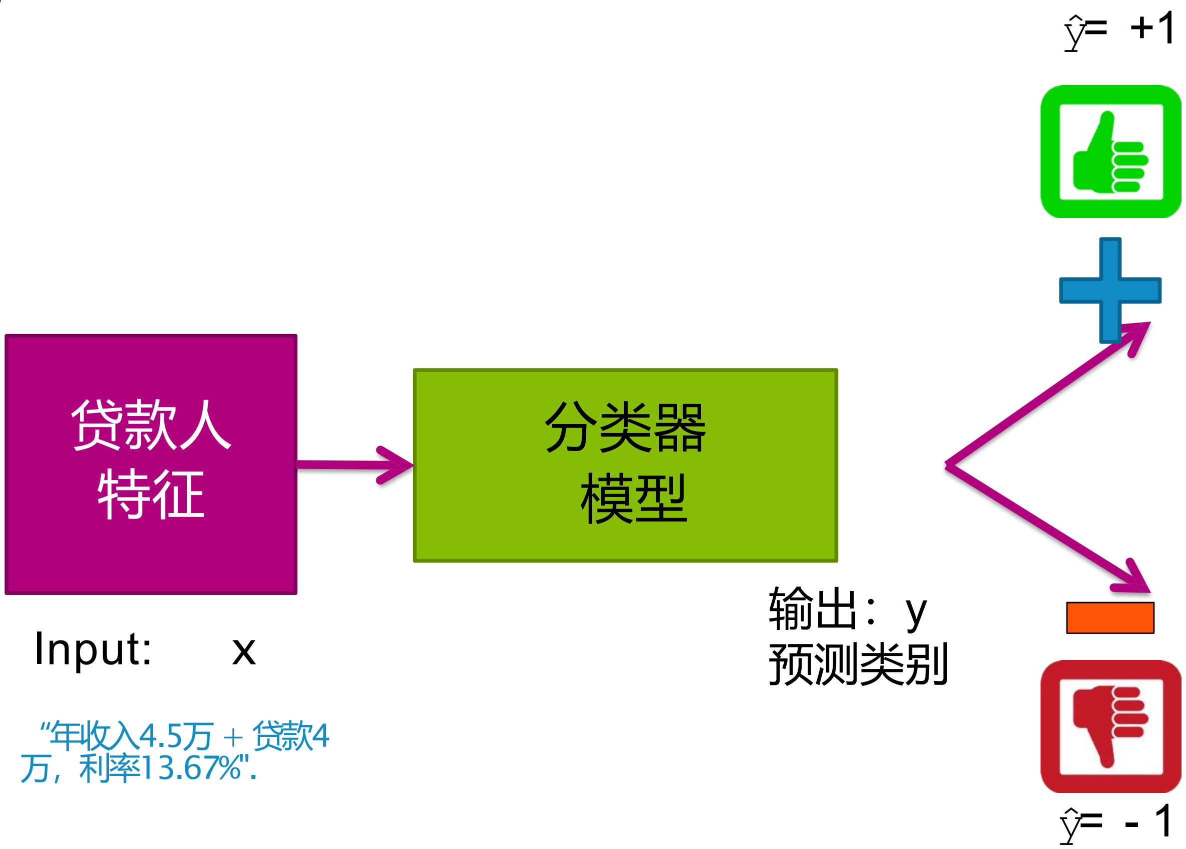
王翔

xiangwang@ustc.edu.cn

目录

分类

□ 分类器



线性分类器

特征	系数
…	…

贷款人特征

Input: x

简单线性分类器

Score(x) = 各特征的加权和

If *Score (x)* > *0*:

$\hat{y}$ = +1

Else:

$\hat{y}$ = -1

线性分类器

Model: $\hat{y}_i = \text{sign}(\text{Score}(\mathbf{x}_i))$

$$\text{Score}(\mathbf{x}_i) = w_0\, h_0(\mathbf{x}_i) + w_1\, h_1(\mathbf{x}_i) + \ldots + w_D\, h_D(\mathbf{x}_i)$$

$$= \sum_{j=0}^{D} w_j\, h_j(\mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^T h(\mathbf{x}_i)$$

特征 *1* = $h_0(x)$ … e.g., 1

特征 *2* = $h_1(x)$ … e.g., x[1] = #贷款金额

特征 *3* = $h_2(x)$ … e.g., x[2] = # 年收入
或者, log(x[1]) x[2] = log(#贷款金额) / #年收入…

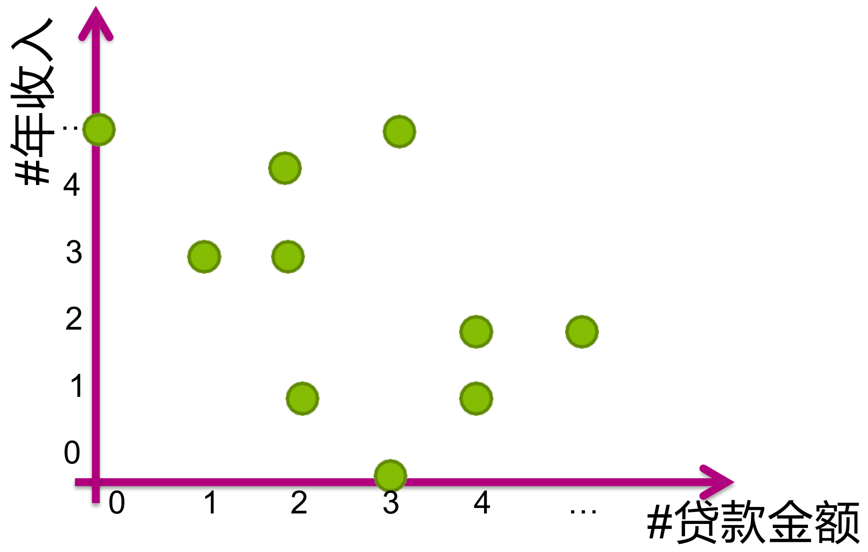
特征 *D+1* = $h_D(x)$ … 关于x[1],…, x[d]的函数

决策边界

- 假设只有两个特征具有非零系数

特征	系数	值
	w_0	0.0
#贷款金额	w_1	1.0
#年收入	w_2	-1.5

Score(x) = 1.0 #贷款金额– 1.5 #年收入

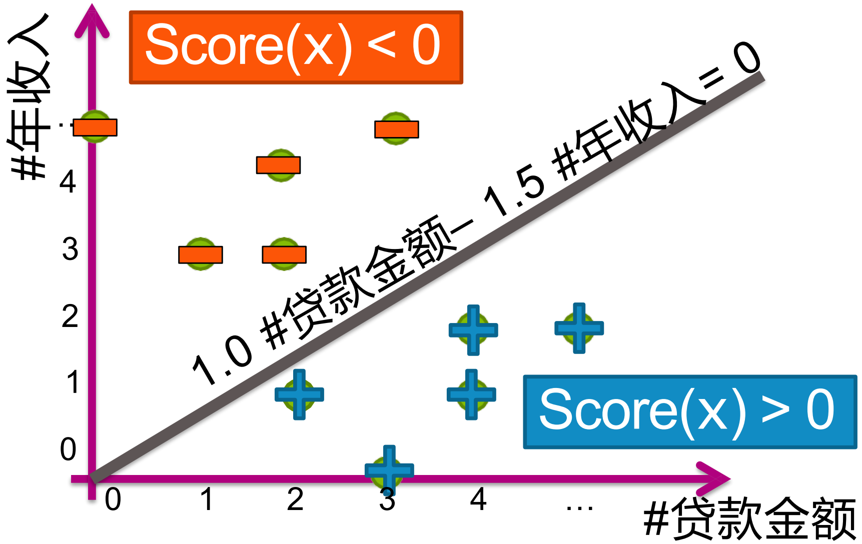


决策边界

口 决策边界示例

特征	系数	值
	w_0	0.0
#贷款金额	w_1	1.0
#年收入	w_2	-1.5

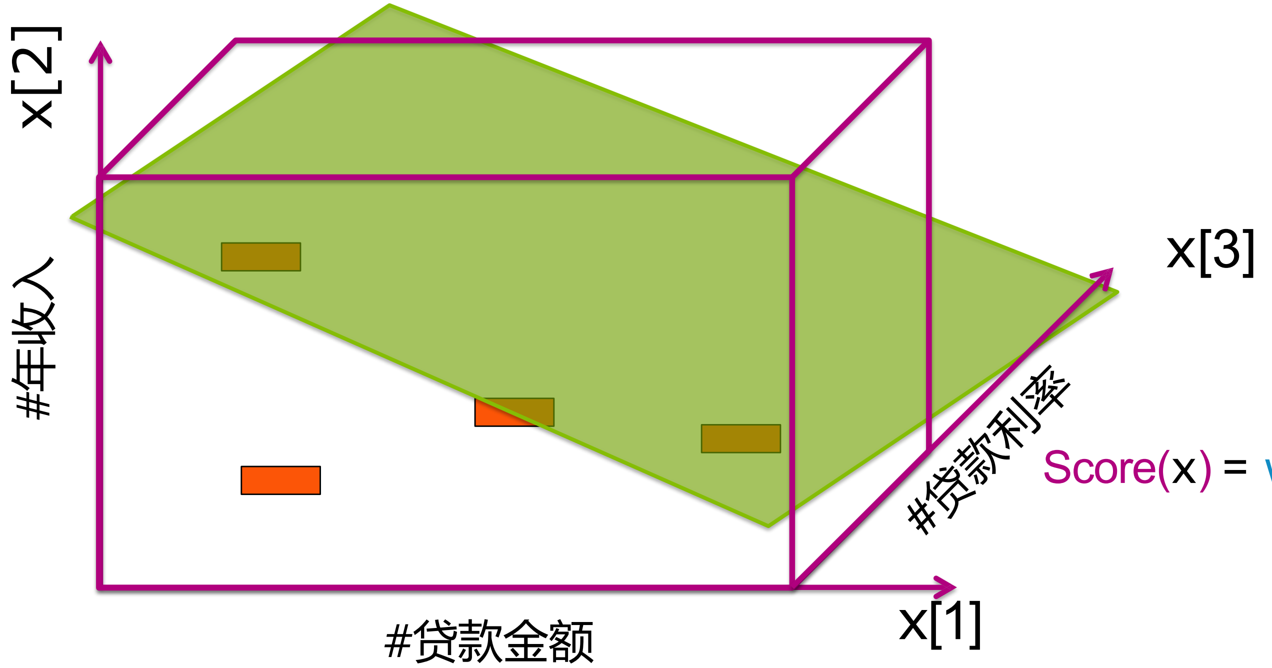
Score(x) = 1.0 #贷款金额– 1.5 #年收入



决策边界将 +
和 - 区分开

决策边界

- 对于更多输入（线性特征）…

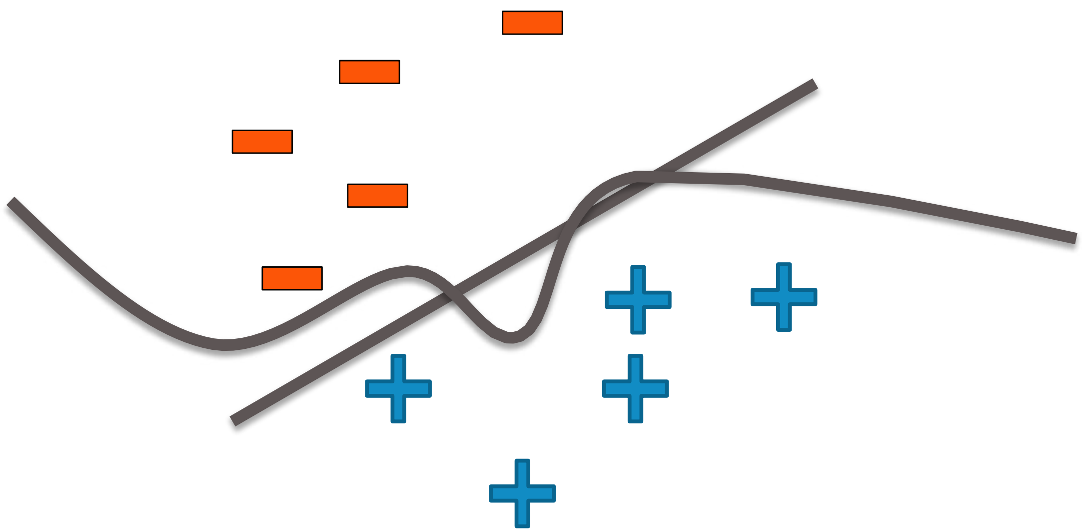


$$\text{Score}(x) = w_0 + w_1\,\#\text{贷款金额} + w_2\,\#\text{年收入} + w_3\,\#\text{贷款利率}$$

决策边界

- □ **对于更一般的特征…**

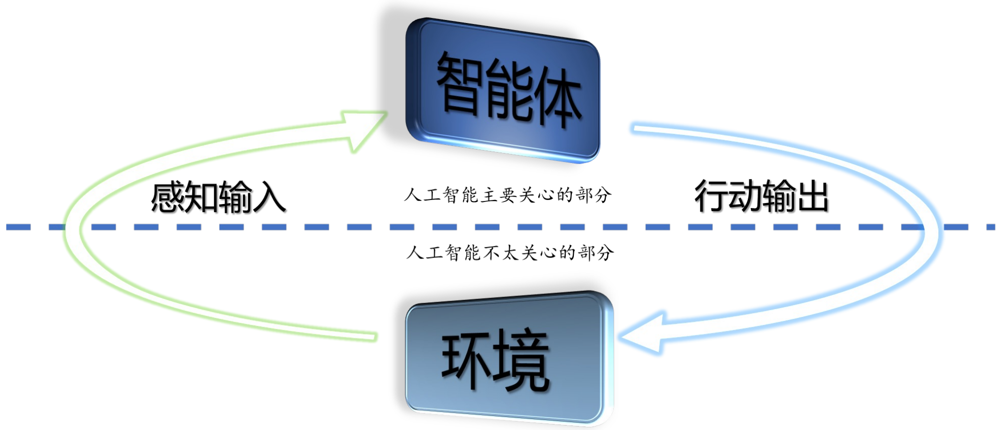
更一般的分类器（非线性特征） → 更复杂的形状



目录

逻辑回归

- 每一种智能行为X都对应着一种人工X智能，行为X与环境需要进行交互



	贷款违约预测
input	申请人的信息，共47种特征，包含了如贷款金额、贷款年限、贷款利率、年收入、工作年限等
output	申请人贷款是否违约
feedback	正确与否

逻辑回归四要素与数据形态

1. 算法/模型： f（及部分θ）
2. 计算： f_θ/input/output/feedback转换
3. 数据： <input，output，feedback>
4. 知识： θ（及部分f）

- 表示：逻辑回归模型长什么样？
  机器编码 f_θ、 input、output、feedback。
- 推理：逻辑回归模型怎么用来解决问题？
  给定input，机器实现f_θ计算output。
- 学习：逻辑回归模型怎么来的？
  基于数据<input，output，feedback>集，
  给定f，更新计算θ。
- 数据： <input，output，feedback>
  <申请人的信息，是否违约，模型判断正确与否>

你确定这个预测吗？
类别概率

逻辑回归

☐ 你对预测有多大信心?

目前为止，我们已经输出了一个**+1** 或 **-1** 的预测。
然而，我们对这个预测到底有多确定?

“年收入4.5万 + 贷款4万，利率13.67%"

很确定 **+1**

“年收入7.5万 + 贷款2.8万”

不那么确定

逻辑回归

在分类中使用概率

“年收入4.5万 + 贷款4万，利率13.67%"

很确定 +1

P(y=+1|x= “年收入4.5万 + 贷款4万，利率13.67%")

= 0.99

“年收入7.5万 + 贷款2.8万”

不那么确定

P(y=+1|x= “年收入7.5万 + 贷款2.8万”)

= 0.55

许多分类器提供了一定程度的确定性：

输出类别

输入特征

P(y|x)

可以在实践中提供很大帮助

逻辑回归

- **目标：从数据中学习条件概率**

训练数据: N个 观测值 (x_i,y_i)

x[1] = #贷款金额	x[2] = #年收入	y = 是否违约
317.96k	635k	-1
866.1k	305k	+1
136.08k	45k	+1
95.21k	100k	-1
…	…	…

在训练数据上
优化质量指标

通过寻找最优的$\hat{w}$
找到最佳模型$\hat{P}$

可以用于预测 $\hat{y}$

逻辑回归

贷款人特征

输入：x

预测最似然的类别

$\hat{P}(y|x)$= 对类别概率的估计

If $\hat{P}(y=+1|x) > 0.5$:

$\hat{y} = +1$

Else:

$\hat{y} = -1$

估算 $\hat{P}(y|x)$ 可以提高可解释性:

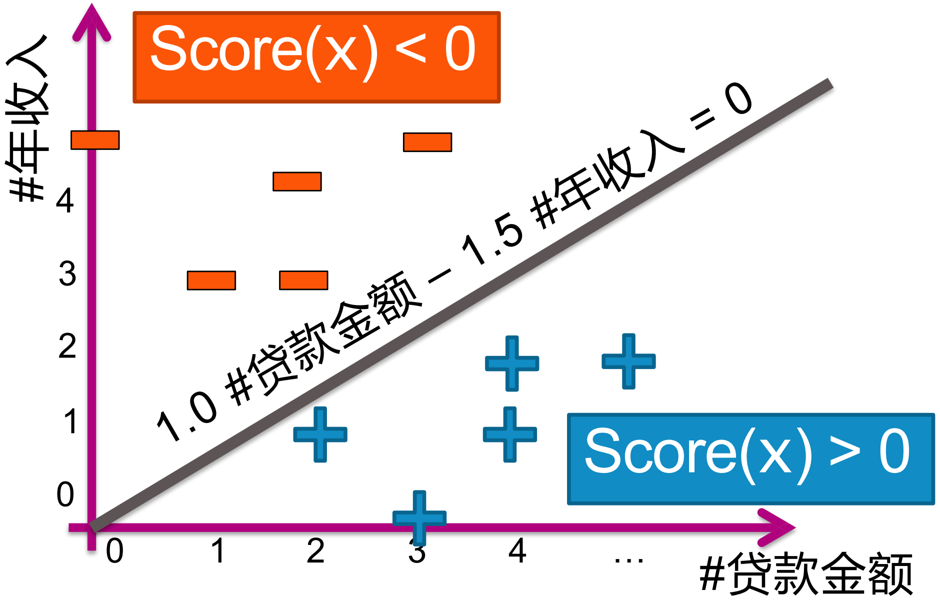
- 预测 $\hat{y} = +1$并告诉我你有多确定

使用逻辑回归预测类别概率

逻辑回归

- 到目前为止，我们专注于决策边界

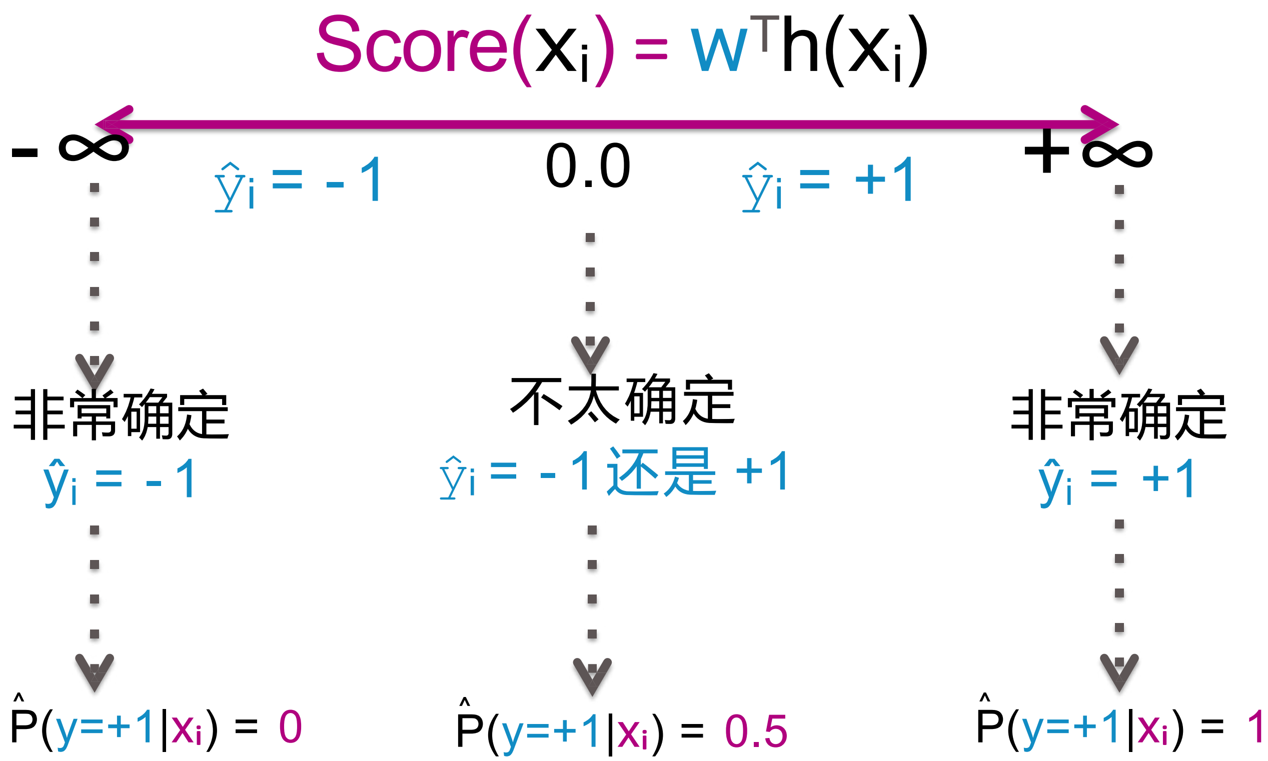
$$\mathrm{Score}(x_i) = w_0\, h_0(x_i) + w_1\, h_1(x_i) + \ldots + w_D\, h_D(x_i)$$
$$= w^T h(x_i)$$



是否要将 $\mathrm{Score}(x_i)$ 与 $\hat{P}(y=+1|\mathbf{x},\hat{\mathbf{w}})$关联?

逻辑回归

- 如何理解 $Score(x_i)$?



逻辑回归

□ 为什么不直接使用回归来构建分类器?

$-\infty < \text{Score}(x_i) < +\infty$

$\text{Score}(x_i) = w_0 h_0(x_i) + w_1 h_1(x_i) + \ldots + w_D h_D(x_i)$

$-\infty$ 0.0 $+\infty$

我们如何将

$-\infty, +\infty$

映射到 0,1???

0.0 0.5 1.0

$P(y=+1|x_i)$

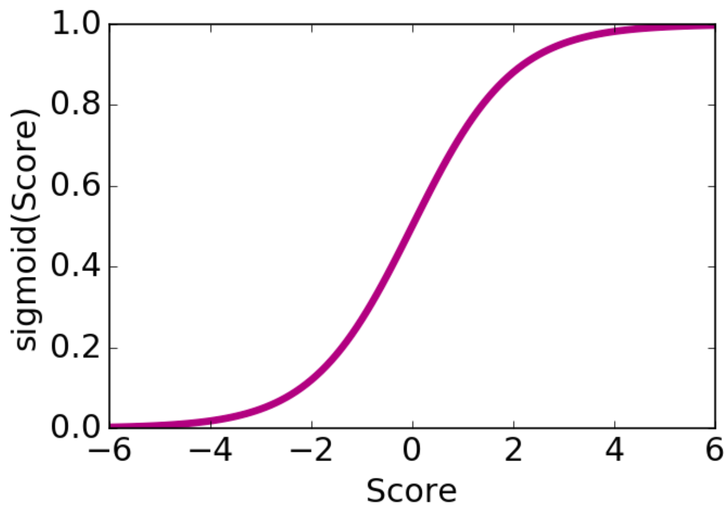
但概率处于 0 到 1 之间

逻辑回归

- 逻辑函数 (Logistic，也称sigmoid, logit)

$$sigmoid(Score) = \frac{1}{1 + e^{-Score}}$$

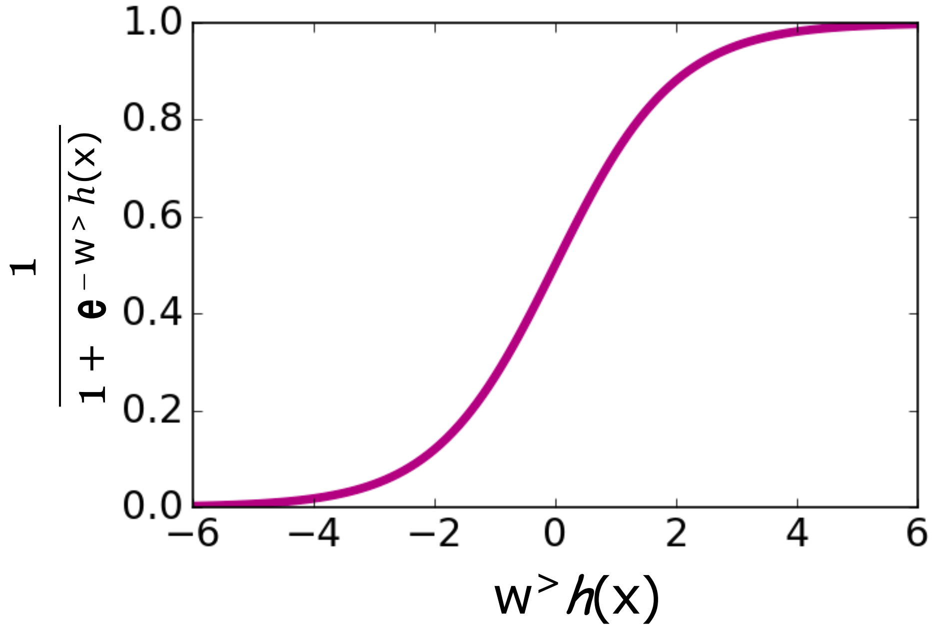
Score	- ∞	-2	0.0	+2	+ ∞
Sigmoid (Score)	0	0.12	0.5	0.88	1



逻辑回归

□ 了解逻辑回归模型

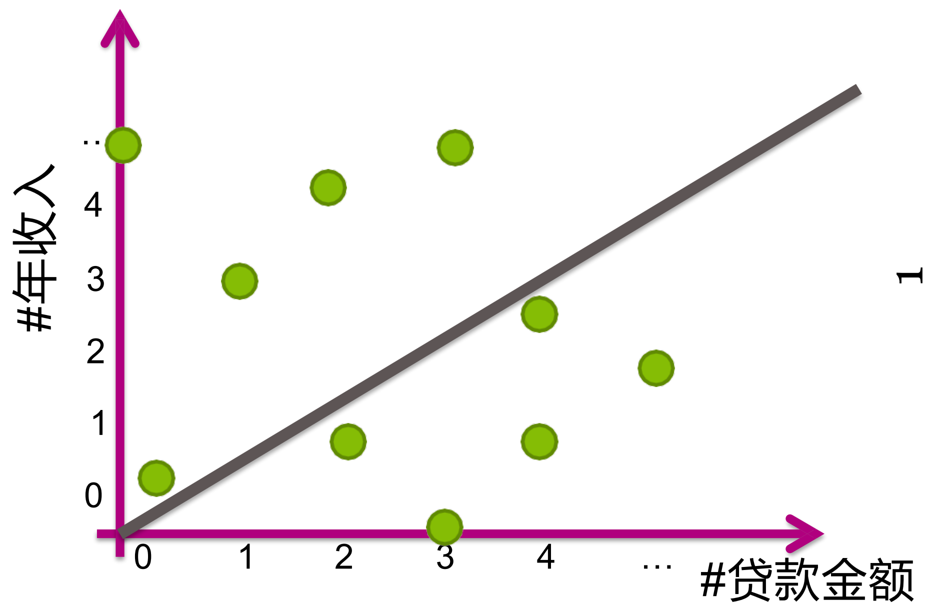
$$P(y=+1|x_i,w) = \text{sigmoid}(\text{Score}(x_i)) = \frac{1}{1+e^{-w^{T}h(x)}}$$

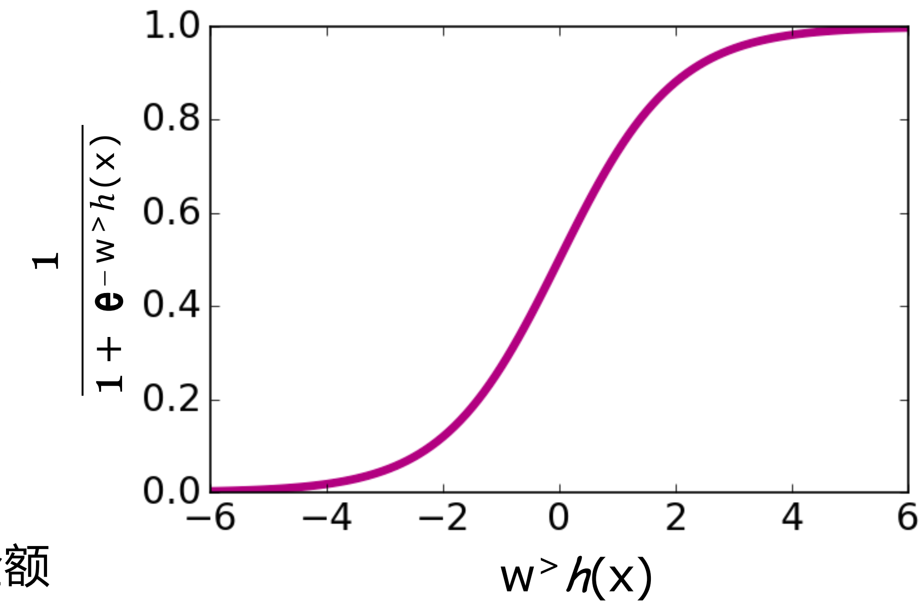


$\text{Score}(x_i)$	$P(y=+1\|x_i,w)$
0	0.5
-2	0.12
2	0.88
4	0.98

逻辑回归

□ 逻辑回归 → 线性决策边界

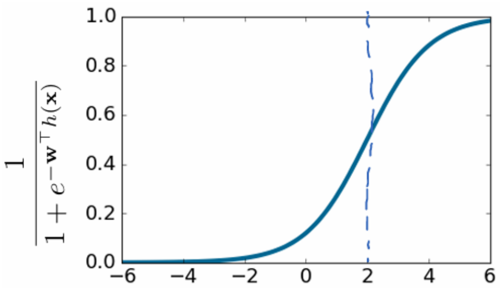




逻辑回归

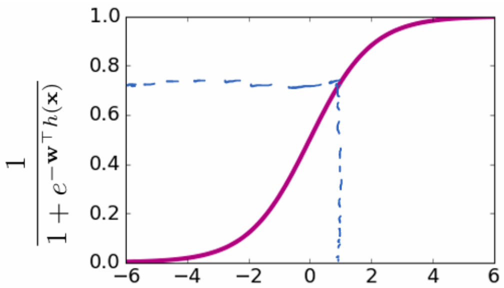
逻辑回归模型系数的影响

w_0	-2
$w_{\#贷款金额}$	$+1$
$w_{\#年收入}$	-1



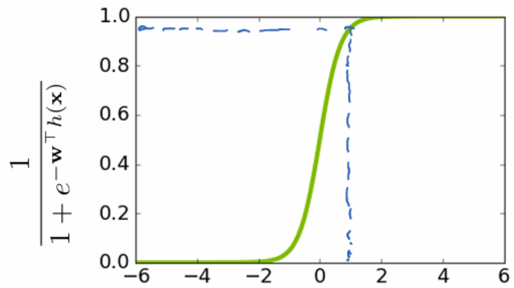
#贷款金额 - #年收入

w_0	0
$w_{\#贷款金额}$	$+1$
$w_{\#年收入}$	-1



#贷款金额 - #年收入

w_0	0
$w_{\#贷款金额}$	$+3$
$w_{\#年收入}$	-3



#贷款金额 - #年收入

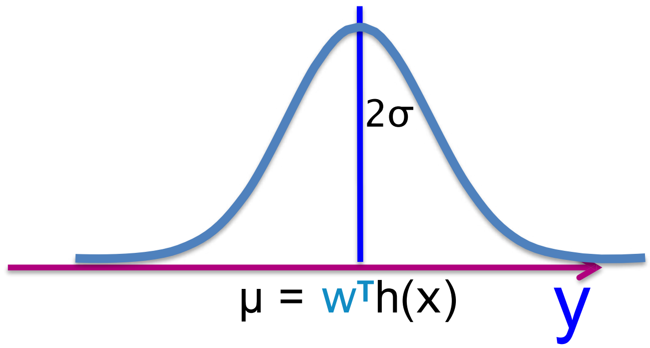
逻辑回归

□ 比较和对比回归模型

- 具有高斯误差的线性回归

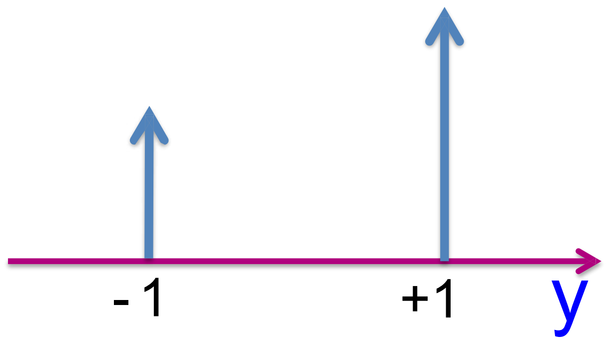
$$y_i = w^T h(x_i) + \epsilon_i \qquad \epsilon_i \sim N(0,\sigma^2)$$

$$\Rightarrow p(y|x,w) = N(y;\, w^T h(x),\, \sigma^2)$$



- 逻辑回归

$$P(y|x,w) = \begin{cases} \dfrac{1}{1+e^{-w^T h(x)}} & y = +1 \\[2ex] \dfrac{e^{-w^T h(x)}}{1+e^{-w^T h(x)}} & y = -1 \end{cases}$$

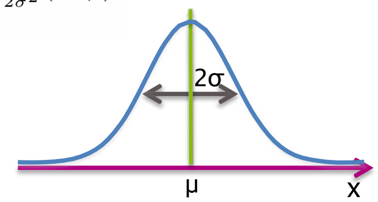


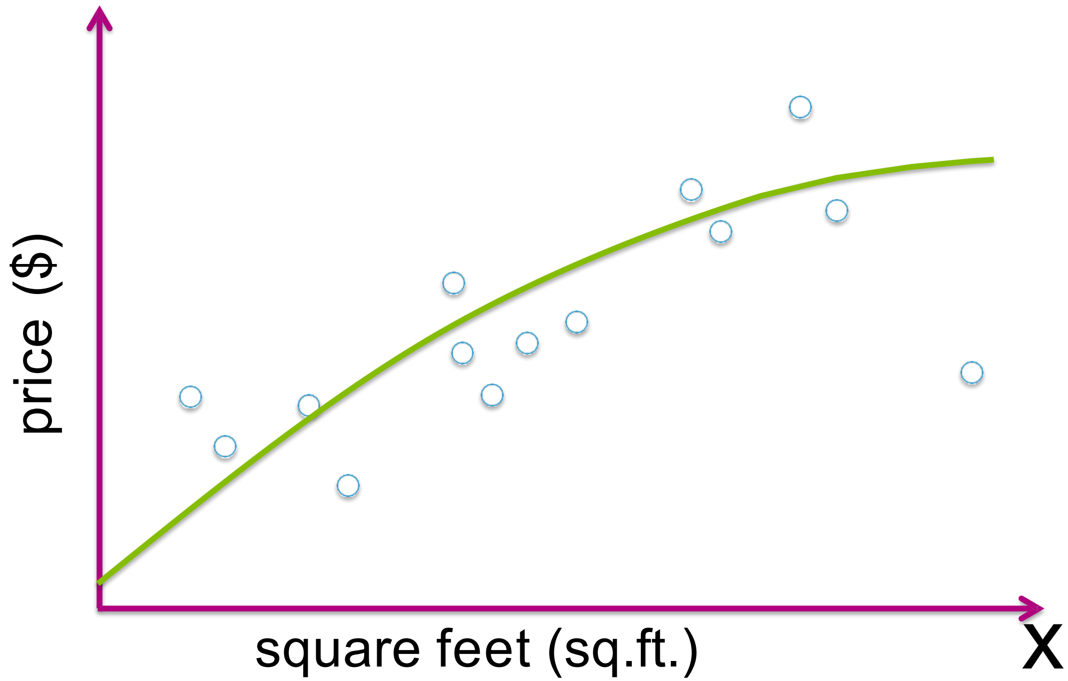
逻辑回归的损失函数：
最大似然估计（MLE）的负对数似然

逻辑回归

□ 回顾：高斯线性回归模型

$$N\underbrace{(\mu, \sigma^2)}_{\text{参数}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}$$





逻辑回归

☐ 寻找最佳系数

x[1] = #贷款金额	x[2] = #年收入	y = 是否违约
384.85k	476k	-1
741.68k	75k	+1
403.05k	121k	+1
317.96k	63.5k	+1
86.61k	305k	-1
13.61k	45k	-1
952.08k	100k	+1
421.83k	45k	+1
42.43k	93.6k	-1

逻辑回归

寻找最佳系数

x[1] = #贷款金额	x[2] = #年收入	y = 是否违约
741.68k	75k	+1
403.05k	121k	+1
317.96k	63.5k	+1
952.08k	100k	+1
421.83k	45k	+1

$$\underbrace{\qquad}_{P(y=+1|x_i,w) = 1.0}$$

x[1] = #贷款金额	x[2] = #年收入	y = 是否违约
384.85k	476k	-1
86.61k	305k	-1
13.61k	45k	-1
42.43k	93.6k	-1

$$\underbrace{\qquad}_{P(y=+1|x_i,w) = 0.0}$$

我们希望 $\hat{w}$ 满足

逻辑回归

▢ 学习具有最大似然估计（MLE）的逻辑回归模型

数据点	x[1]	x[2]	y	选择 w 以优化
x_1,y_1	741.68k	75k	+1	P(y=+1|x[1]=2, x[2]=1,w)
x_2,y_2	384.85k	476k	-1	P(y=-1|x[1]=0, x[2]=2,w)
x_3,y_3	86.61k	305k	-1	P(y=-1|x[1]=3, x[2]=3,w)
x_4,y_4	403.05k	121k	+1	P(y=+1|x[1]=4, x[2]=1,w)

$$\ell(w) = \underbrace{\underbrace{P(y_1|x_1,w)}\ \underbrace{P(y_2|x_2,w)}\ \underbrace{P(y_3|x_3,w)}\ \underbrace{P(y_4|x_4,w)}}_{\prod_{i=1}^{N} P(y_i \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w})}$$

逻辑回归

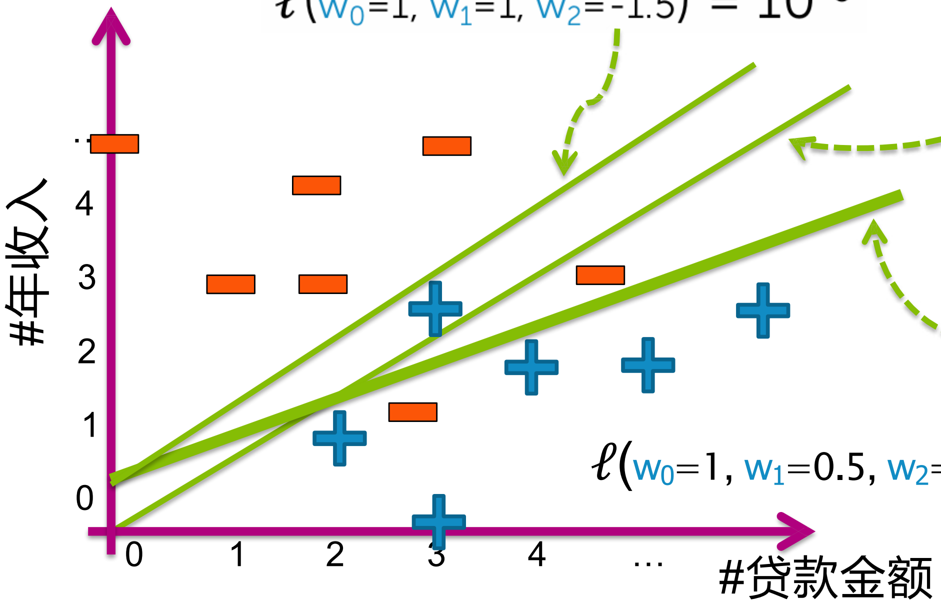
□ 找到“最佳”分类器

对于所有可能的w_0,w_1,w_2，选择似然性最大的

$$\ell(\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w})$$

$\ell(w_0=0,\ w_1=1,\ w_2=-1.5) = 10^{-6}$

$\ell(w_0=1,\ w_1=1,\ w_2=-1.5) = 10^{-5}$



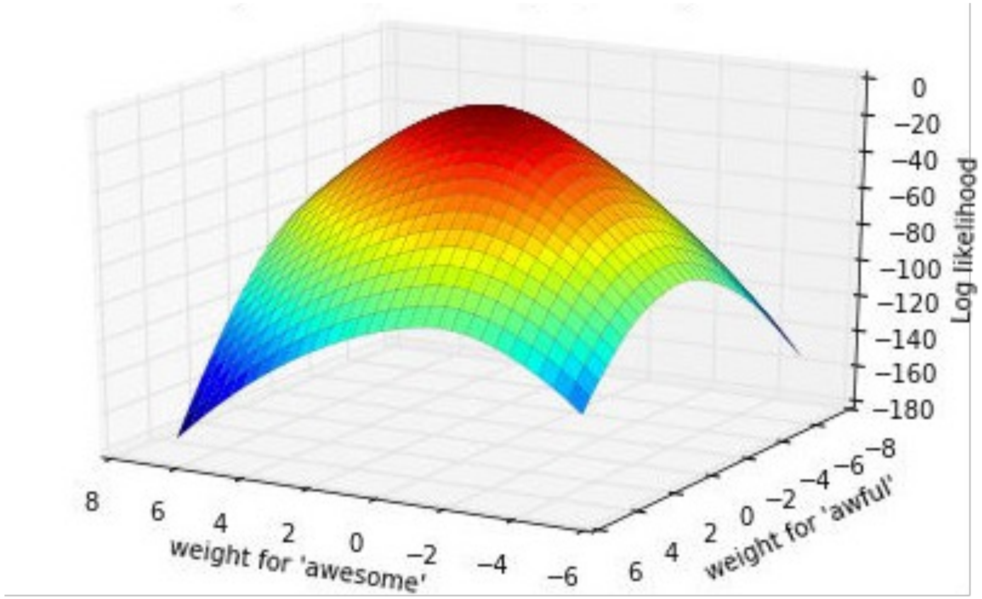
$\ell(w_0=1,\ w_1=0.5,\ w_2=-1.5) = 10^{-4}$

最佳模型:
最大化似然函数 $\ell(w)$
$\hat{w} = (w_0=1,\ w_1=0.5,\ w_2=-1.5)$

逻辑回归的梯度上升

逻辑回归

□ 最大化似然性



对于所有可能的w_0, w_1, w_2，最大化函数

$$\max_{w_0, w_1, w_2} \underbrace{\prod_{i=1}^{N} P(y_i \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w})}$$

$\ell(w_0, w_1, w_2)$ 为三变量函数

逻辑回归

□ 我们的优化目标

- 可以计算梯度，但没有以下问题的闭式解:

$$\nabla \ell(w) = 0$$

- 使用梯度下降

- 与高斯的 MLE 一样，将目标重写为:

log -likelihood

$$\hat{w} = \underset{\hat{w}}{argmax}\ \ell(w) = \underset{\hat{w}}{argmax}\ \ell\ell(w)$$

逻辑回归

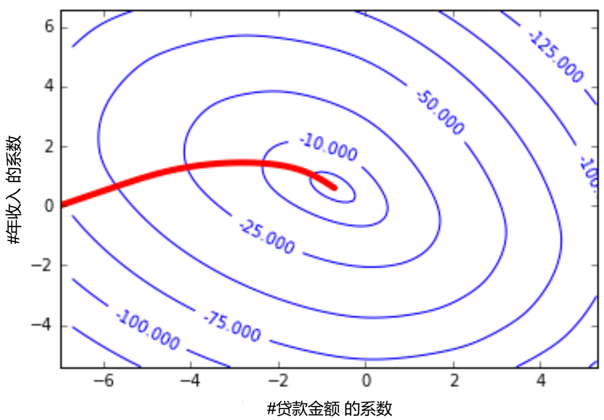
□ 逻辑对数似然的梯度

$$\frac{\partial \ell\ell(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}_j} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N}}_{\text{对数据点求和}} \underbrace{h_j}_{\text{特征}}(\mathbf{x}_i)\overbrace{\left(\mathbb{1}[y_i = +1] - P(y = +1 \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w})\right)}^{\text{预测与真值的差异}}$$

	P(y=+1|xᵢ,w) ≈ 1	P(y=+1|xᵢ,w) ≈ 0
y_i=+1	$\Delta_i = 0$, $P(y = +1 \vert x_i, w)$ 不变	$\Delta_i = 1$, $P(y = +1 \vert x_i, w)$ 上升
y_i=-1	$\Delta_i = -1$, $P(y = +1 \vert x_i, w)$ 下降	$\Delta_i = 0$, $P(y = +1 \vert x_i, w)$ 不变

逻辑回归

□ 逻辑回归的梯度上升



init $\mathbf{w}^{(1)}=0$, $t=1$

while $||\nabla \ell(\mathbf{w}^{(t)})|| > \varepsilon$

for $j=0,\ldots,D$

$$\text{partial}[j] = \sum_{i=1}^{N} h_j(\mathbf{x}_i)\overbrace{\left(\mathbb{1}[y_i=+1] - P(y=+1 \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w}^{(t)})\right)}^{\text{预测与真值的差异}}$$

$$w_j^{(t+1)} \leftarrow w_j^{(t)} + \eta\ \text{partial}[j]$$

$$t \leftarrow t+1$$

线性分类器和逻辑回归的总结（以线性分类器为例）

逻辑回归

- 描述决策边界与线性分类器
- 使用类别概率表达预测结果的置信度
- 定义逻辑回归模型
- 将逻辑回归输出结果解释为类别概率
- 分析系数取值对逻辑回归输出的影响
- 使用似然函数衡量分类器质量
- 通过梯度上升法优化负对数似然损失函数来训练逻辑回归模型