Logistic Regression Model

陈欣鸿　刘金杨

前次实验的问题

- 实验原理

1. 算法原理

PLA 算法就是预先初始化向量 W，根据训练集的数据来修正 W 向量，使得在已知的验证集真实数据中的准确率增高，最后得到的 W 可以用来判断测试集中数据的二元分类问题。

1. 算法原理

PLA 算法是指感知机尝试找到一个能够线性划分训练集数据的平面（如将本次实验训练集中的样本划分为 1 或-1 两种）。过程中用梯度下降法使误差减小。

经过一系列数学运算后可以用权值向量和样本特征向量的点乘的 sign 函数得到结果。(sign 函数：当 k>0 时, sign(k)=+1；当 k<0 时, sign(k)=-1。）

前次实验的问题

- 伪代码正例

Algorithm 1 PLA原始算法

```
for each epoch do
    newY ← sign(w, X)
    a⃗ ← vectors of zero
    for each i ∈ shape of newY do
        if newY[i] ≠ Y[i] then
            a[i] ← Y[i]
        end if
    end for
    w⃗ ← w⃗ + dot(a, X)
end for
```

前次实验的问题

- 伪代码正例

Input: Train Data matrix $X = \{x_{ji}\}_{i=1}^{d} \in R_{+}^{m\times d}$ and Label matrix $Y = \{y_j\}_{j=1}^{m} \in R_{+}^{m\times 1}$

Output: Best Weight matrix $\widetilde{W}_{(t+1)} = \{w_j\}_{j=0}^{d} \in R_{+}^{1\times(d+1)}$

Begin

Change matrix X into $X = \{+1, x_{j1}, x_{j2}, \dots, x_{ji}, \dots, x_{jd}\}_{i=1}^{d} \in R_{+}^{m\times(d+1)}$

Initialize W to $W = \{w_0, w_1, \dots, w_i, \dots, w_d\}_{i=0}^{d} = 1$

Repeat

Error = 0

For i = 0 to m **do**

If $\mathrm{sign}(\widetilde{W}_t^T \widetilde{X}_i) \neq y_j$

$\widetilde{W}_{(t+1)} \leftarrow \widetilde{W}_{(t)} + y_{i(t)}\widetilde{X}_{i(t)}$

Error += 1

break

End

End

Until Error = 0

End

前次实验的问题

• 实验结果

三、 实验结果及分析

1. 实验结果展示示例（可图可表可文字，尽量可视化）

按照 ppt 上小数据集，预测正确。

2. 评测指标展示即分析（如果实验题目有特殊要求，否则使用准确率）

Accuracy:0.812

Recall:18125

Precision:0.335772

F1:0.235772

实验结果及分析

1. 实验结果展示示例（可图可表可文字，尽量可视化）

-1
-1
-1
-1
1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1
-1

**2. 评测指标展示即分析（如果实验题目有特殊要求，否则使用准确

前次实验的问题

- 思考题

1. 有什么其他的手段可以解决数据集非线性可分的问题？

改变一些导致非线性的点的标签：

发现陷入死循环后，将$abs(w^T x)$的值（“距离”）最大的一个的标签反转，然后继续迭代

有什么其他的手段可以解决数据集非线性可分的问题？
【交叉验证】

基础概念

- 软分类模型
  - 概率模型，对每个分类求概率后取概率最大的分类
  - 如 NB
- 硬分类模型
  - 非概率模型，由决策函数决定
  - 如决策树，PLA等
- 逻辑回归（Logistic Regression Model）
  - 属于软分类算法
  - 通过计算数据权重，根据权重了解预测目标的可能性

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 对于一个软分类问题，目标函数定义如下：
  - $f(x) = P(label|x) \in [0,1]$
  - 即在给定特征向量 x 的情况下，属于 $label$ 类的可能性多大

  - 特征向量的每一个维度，都会对结果产生影响，那么与 PLA 一样，可以模拟一个带权重的分数：
  - $s = \sum_{t=0}^{d} w_i x_i = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$
  - 这里为什么 t 从0开始，以及为何把 s 这样表示就不再细讲了，有问题的参照 PLA
  - 表达式中的 w_i 表示第 i 维特征的权重，$w_i > 0$ 表示该特征对**正类别**有正面影响，且值越大，正面影响越大，反之亦然

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 既然对于软分类来说，要算出属于每个分类的概率，而我们之前所学习过的模型均属于硬分类模型，即结果非此即彼，无法知道相关概率，所以需要一个**新的决策函数**
  - 利用**某种函数**将加权分数映射到另一个更合理的数据空间，使加权分数的大小能够反映概率的大小
  - 在逻辑回归里使用的是：*logistic*（*sigmoid*）函数

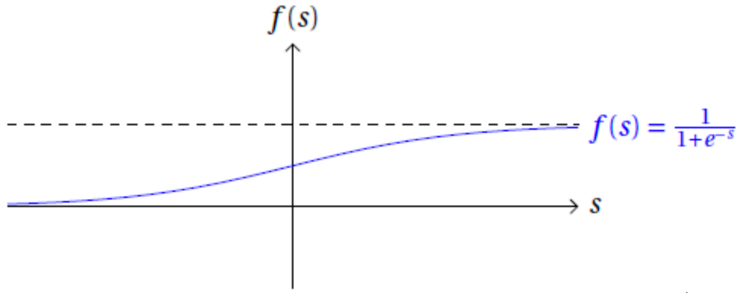
$$\theta(s)=\frac{e^{s}}{1+e^{s}}=\frac{1}{1+e^{-s}}$$

逻辑回归

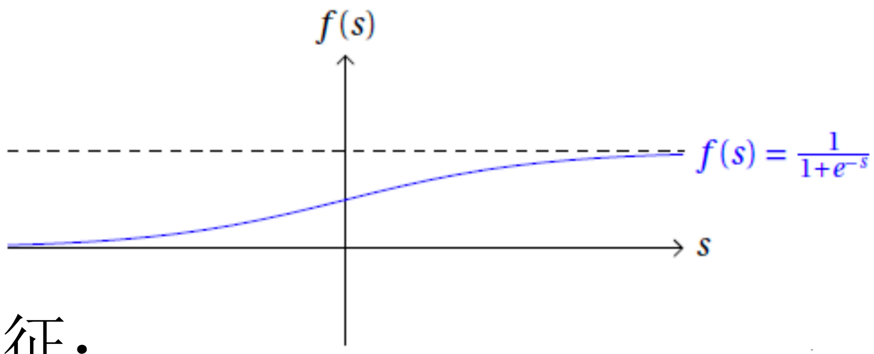
- **理论推导（非常重要！）**
  - 在逻辑回归里使用的是：*logistic*（*sigmoid*）函数

$$\theta(s)=\frac{e^s}{1+e^s}=\frac{1}{1+e^{-s}}$$

  - 将数据从 $(-\infty,\infty)$ 映射到 $(0,1)$



逻辑回归



- **理论推导（非常重要！）**
  - *logistic*（*sigmoid*）函数的特征：
  - $\theta(-\infty) = 0$，当加权分数无穷小，该数据属于正类别的概率为 0
  - $\theta(0) = 0.5$，当加权分数为 0，该数据属于正/负类别的概率为 0.5，即该数据属于任一类别的概率相同
  - $\theta(+\infty) = 1$，当加权分数无穷大，该数据属于正类别的概率为 1

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 利用 logistic 函数，我们可以构成一个新的假说模型：
  - $h(x) = \frac{1}{1+e^{-w^T x}}$
  - 要求解的是 w
  - 根据上面的假说模型，***h(x)* 算得的是属于正类的概率，属于负类别的概率即为 *1 - h(x)***
  - 当 h(x) 大于 0.5 的时候，说明该数据更大可能属于正类别；

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 那么我们可以把最开始提及的目标函数 $f(x)$ 与 $h(x)$ 联合起来:
  - $f(x) = P(label|x) = h(x)^y\left(1 - h(x)\right)^{1-y}$
  - y 表示 x 对应的分类标签
  - 当 $y = 1$，$f(x) = P(label|x) = h(x)$
  - 当 $y = 0$, $f(x) = P(label|x) = 1 - h(x)$

  - 用贝叶斯派的观点来看待这个问题
  - 不同的参数设置代表着不同的模型，**在某种模型下利用给定数据 x 得到给定标签 y 的概率，是这个问题中的似然（*likelihood*）**

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 考虑整个数据集，似然函数如下：
  - $likelihood = \prod_{i=1}^{M} P(label|x_i) = \prod_{i=1}^{M} h(x_i)^{y_i}\left(1 - h(x_i)\right)^{1-y_i}$
  - 根据最大似然估计算法，要找到一组模型参数，使得上式最大
  - 对 $likelihood$ 取对数，再取负数之后，即可得到以下的函数：
  - $-log(likelihood) = -log \prod_{i=1}^{M} P(label|x_i)$
  - $= -\sum_{i=1}^{M} y_i log(h(x_i)) + (1 - y_i) log(1 - h(x_i))$
  - **对以上的函数取最小**，即达到最大似然的目的

逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - $-\sum_{i=1}^{M} y_i log(h(x_i)) + (1-y_i) log(1-h(x_i))$对 w 求导
  - 利用**梯度下降法**，通过不断地迭代使 w 逼近最优解直至收敛
  - 求导的步骤在最后，有需要的同学查看辅助文档

$$\text{Repeat:}\ \tilde{\mathbf{W}}_{new}^{(j)} = \tilde{\mathbf{W}}^{(j)} - \eta \frac{\partial C(\tilde{\mathbf{W}})}{\partial \tilde{\mathbf{W}}^{(j)}}$$

$$= \tilde{\mathbf{W}}^{(j)} - \eta \sum_{i=1}^{n} \left[\left(\frac{e^{\tilde{\mathbf{W}}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{x}}_i}}{1 + e^{\tilde{\mathbf{W}}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{x}}_i}} - y_i \right) \tilde{\mathbf{X}}_i^{(j)} \right]$$

Until convergence

  - η 表示学习率，j 表示第几维, i 表示第几个样本

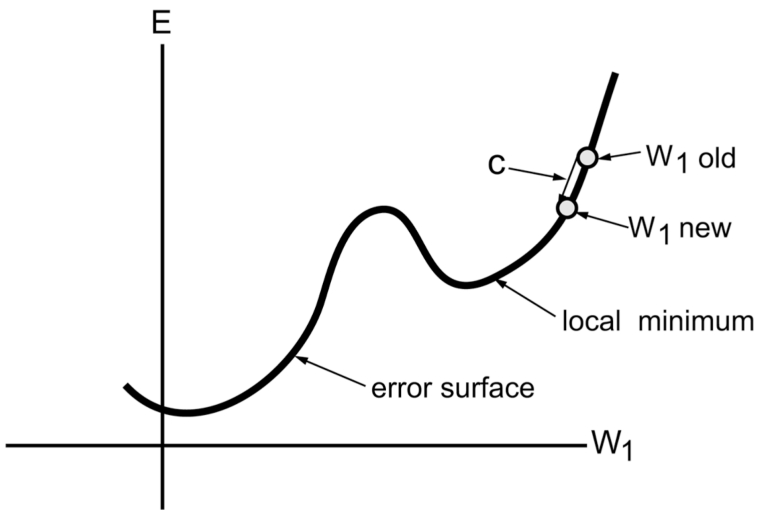
逻辑回归

- **理论推导（非常重要！）**
  - 综上，逻辑回归算法流程如下：
  - 输入：特征向量集合 {x}，标签集合 {y}
  - 输出：最优解 w
  - 初始化 w_0
  - 利用梯度下降法更新 w
  - **直至梯度为 0 或者迭代足够多次**
  - 利用最优 w 来预测测试集特征向量所对应的标签，计算属于正/负类别的概率

- 思考题：如果把 **梯度为 0** 作为算法停止的条件，可能存在怎样的弊端？

梯度下降

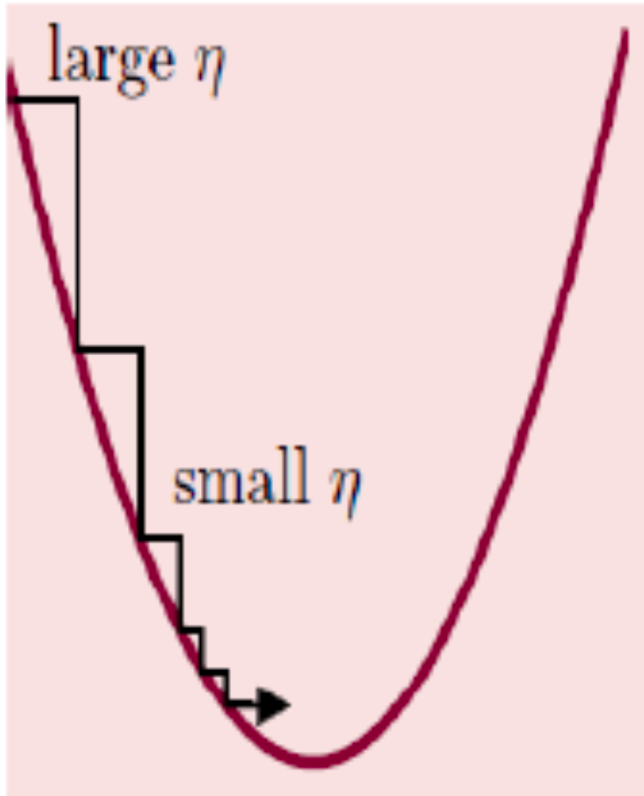
- 学习率 η
  - 也叫学习步长，计算梯度是找到了更新 w 的方向，往这个方向更新的幅度则由 η 确定
  - η 的设置会直接影响迭代解能否求解到梯度的**全局最优值**



思考题： η 的大小会怎么影响梯度下降的结果？给出具体的解释，可视化的解释最好，比如图形展示等

梯度下降

- 学习率 η
  - 一般来说没有一个通用的办法和理论来确定这个学习步长，下面给出两个方法：
  - **动态学习率**：初始学习率较大，当梯度下降到接近最优值时，将学习率降低



梯度下降

- 学习率 η
  - 除此之外还可以通过**验证集**的方式确定学习率
  - 设置不同的学习率，如果模型都可以较好拟合数据，选择该模型为最优模型，用于测试集的预测。

例子讲解

- 数据集如下，学习步长设为 1，只迭代 1 次
- 初始化 w_0 为{1，1，1}
- 更新 w
  - 计算每一维梯度
  - 更新每一维的权重

No	Attribute 1	Attribute 2	Label
train 1	1	2	1
train 2	2	-1	0
test 1	3	3	?

例子讲解

- 计算每个样例的权重分数
  - s1=1*1+1*1+2*1=4
  - s2=1*1+2*1+(−1)*1=2

No	Attribute1	Attribute2	Label
train 1	1	2	1
train 2	2	-1	0
test 1	3	3	?

- 每一维的梯度计算
  - $\nabla Cost(w_{0,0}) = \left(\frac{1}{1+e^{-4}} - 1\right) * (1) + \left(\frac{1}{1+e^{-2}} - 1\right) * (1) = -0.1372$
  - $\nabla Cost(w_{0,1}) = \left(\frac{1}{1+e^{-4}} - 1\right) * (1) + \left(\frac{1}{1+e^{-2}} - 1\right) * (2) = -0.2564$
  - $\nabla Cost(w_{0,2}) = \left(\frac{1}{1+e^{-4}} - 1\right) * (2) + \left(\frac{1}{1+e^{-2}} - 1\right) * (-1) = 0.0832$

例子讲解

No	Attribute1	Attribute2	Label
train 1	1	2	1
train 2	2	-1	0
test 1	3	3	?

- 更新每一维的权重
  - $w_{1,0} = w_{0,0} - \nabla Cost(w_{0,0}) = 1.1372$
  - $w_{1,1} = w_{0,1} - \nabla Cost(w_{0,1}) = 1.2564$
  - $w_{1,2} = w_{0,2} - \nabla Cost(w_{0,2}) = 0.9168$
- 迭代 1 次，结束学习，利用 w_1 对测试集进行预测
  - $P(1|test1, w_1) = \frac{1}{1+e^{-(1*w_{1,0}+3*w_{1,1}+3*w_{1,2})}} = 0.9995 > 0.5$

优化思路（参考）

- 随机梯度下降
- 向量化运算(python/matlab)
- 标准化
- 正则化
- 动态学习率调整

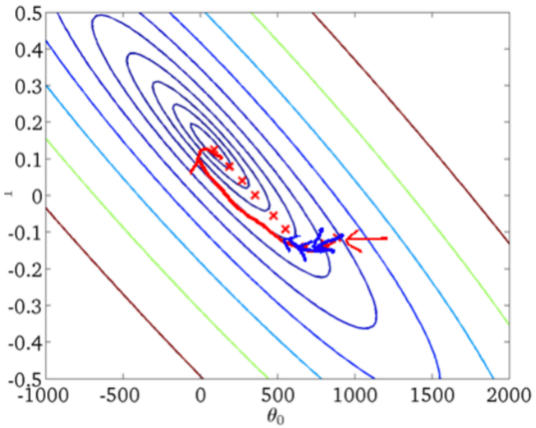
随机梯度下降

思考题：思考这两种优化方法的优缺点

批梯度下降

每次更新参数，考虑所有样本

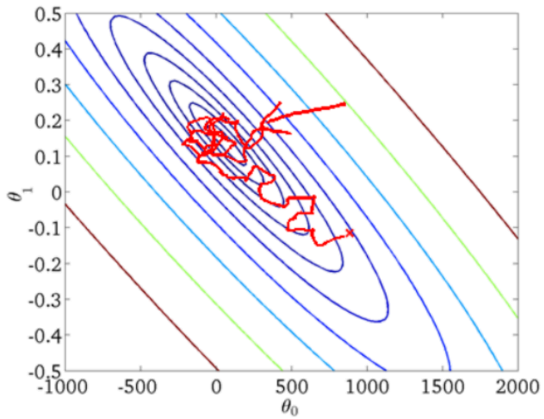
$$\tilde{\mathbf{W}}^{(j)} - \eta\sum_{i=1}^{n}\left[\left(\frac{e^{\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}_i}}{1+e^{\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}_i}} - y_i\right)\tilde{\mathbf{X}}_i^{(j)}\right]$$



随机梯度下降

每次更新参数，考虑1个样本

$$\tilde{\mathbf{W}}^{(j)} - \eta\left[\left(\frac{e^{\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}_i}}{1+e^{\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}_i}} - y_i\right)\tilde{\mathbf{X}}_i^{(j)}\right]$$



向量化运算(python)

```python
a = np.random.rand(1000000)
b = np.random.rand(1000000)

tic = time.time()
c = np.dot(a,b)
toc = time.time()

print(c)
print("Vectorized version:" + str(1000*(toc-tic)) +"ms")

c = 0
tic = time.time()
for i in range(1000000):
    c += a[i]*b[i]
toc = time.time()

print(c)
print("For loop:" + str(1000*(toc-tic)) + "ms")
```

```
250286.989866
Vectorized version:1.5027523040771484ms
250286.989866
For loop:474.29513931274414ms
```

向量化：
1.50ms

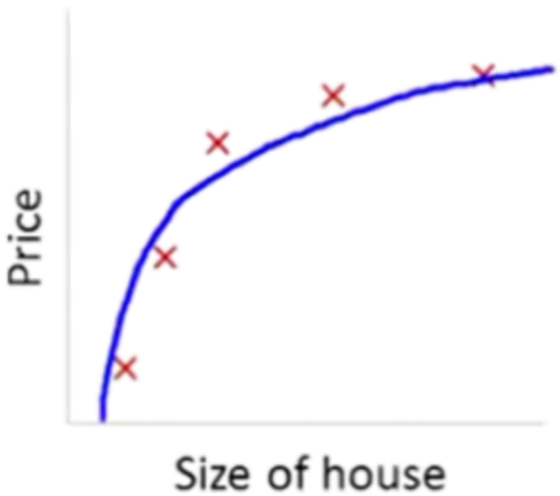
for循环：
474ms

使用matlab或python的同学
尽量不显式使用for循环可以大幅度加速计算

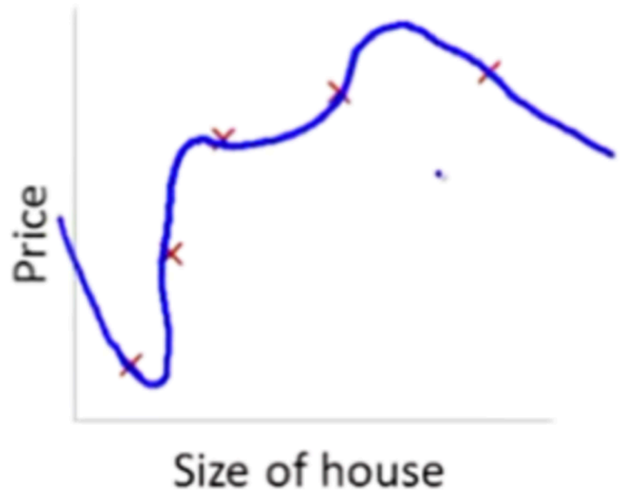
https://mooc.study.163.com/smartSpec/detail/1001319001.htm
第二周—神经网络基础

正则化

目的：减轻过拟合现象



$$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$



$$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \boxed{\theta_3 x^3 + \theta_4 x^4}$$

尽量使这两个参数的值变小

正则化

我们并不会事先知道要减小哪一个参数的值。但是，一般来讲参数的值越小，通常对应更加简单的函数，就不容易发生过拟合的问题。
因此，我们通常在损失函数中惩罚比较大的参数，以得到更为简单的模型。

通过增加正则化项，惩罚较大的参数

$$-\sum_{i=1}^{M} y_i h(x_i) + (1-y_i)\big(1-h(x_i)\big) + \lambda \sum_{j=1} W_j^2$$

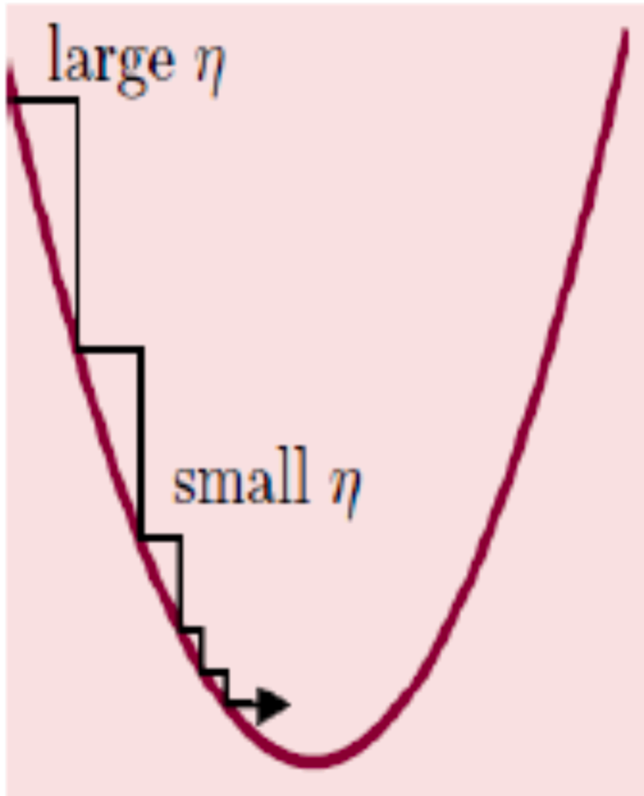
正则化项

增加正则化项后，更新公式需要重新推导，请自行推导，可作为优化。

注意：实现正则化的同学，报告中需要附上推导过程

动态调整学习率

动态学习率： 初始学习率较大，
当梯度下降到接近最优值时，
将学习率降低



数据集介绍

- 训练集：8000个样本，40维度，二分类
- 验证集：自己划分
- 测试集：2000个样本，40维度，二分类

任务布置

- 必须实现梯度下降法
- 必须在给出的优化建议中任意选择一项实现
- 自己划分验证集（报告里说明是怎么分的）调整参数
- 在测试集上预测，提交预测结果

注意事项

- 实验报告截止日期：
- **2017.11.22 晚 23:59:59 前**提交至 FTP 文件夹
- 提交文件：
  - 测试集结果：15******_wangxiaoming.txt 每一行对应的是测试样例的标签。
  - 实验报告：15******_wangxiaoming.pdf
  - 代码：15******_wangxiaoming.zip 如果代码分成多个文件，最好写份readme