根据贝叶斯法则,可得

likelihood(logistic h) = L(w)

$$\propto \prod_{n=1}^{N} P(y_n | \mathbf{x}_n, \mathbf{w})$$

$$= \prod_{i=1}^{N} h(\mathbf{x}_n)^{y_n} (1 - h(\mathbf{x}_n))^{1 - y_n}$$
(2.7)

故我们只需要让此似然函数取得最大值即可

$$\max_{\boldsymbol{w}} \quad L(\boldsymbol{w}) \tag{2.8}$$

为了后续求解方便,我们将上述问题做一些变换,上面最大化的问题等价于如下的 最小化的问题。

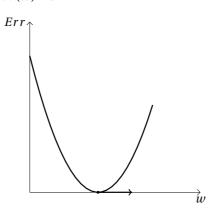
$$\min_{\boldsymbol{w}} \quad -\log L(\boldsymbol{w}) \tag{2.9}$$

主要做了两个处理,取对数不改变函数的极值点和最优解,添加了一个负号,将最大化问题转换为了一个最小化问题。这个新的误差函数在统计学叫做为交叉熵,交叉熵 误差为

$$\min_{\mathbf{w}} \qquad Err(\mathbf{w}) = -\log \prod_{i=1}^{N} h(\mathbf{x}_n)^{y_n} (1 - h(\mathbf{x}_n))^{1 - y_n}
= -\sum_{n=1}^{N} y_n \log(h(\mathbf{x}_n)) + (1 - y_n) \log(1 - h(\mathbf{x}_n))$$
(2.10)

log是以e为底。

由于误差函数 $Err(\mathbf{w})$ 是一个连续可导,并且二阶可微的凸函数。根据凸优化理论,存在全局最优解,即为 $\nabla Err(\mathbf{w}) = 0$



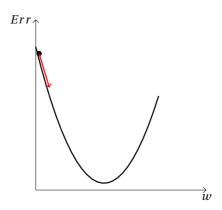
故我们首先要推导得到 $\nabla Err(w_i)$, 令 $u=1+e^{-\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_n}$ 和 $v=-\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_n$, 则

$$\frac{\partial Err(w_{i})}{\partial w_{i}} = -\sum_{n=1}^{N} \left[(y_{n}) \left(\frac{\partial \log(h(\mathbf{x}_{n}))}{\partial h(\mathbf{x}_{n})} \right) \left(\frac{\partial h(\mathbf{x}_{n})}{\partial u} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial w_{i}} \right) + (1 - y_{n}) \left(\frac{\partial \log(1 - h(\mathbf{x}_{n}))}{\partial h(\mathbf{x}_{n})} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial w_{i}} \right) \right] \\
= -\sum_{n=1}^{N} \left[(y_{n}) \left(\frac{1}{h(\mathbf{x}_{n})} \right) + (1 - y_{n}) \left(\frac{-1}{1 - h(\mathbf{x}_{n})} \right) \right] \left[\left(\frac{-1}{u^{2}} \right) (e^{v}) (-\mathbf{x}_{n,i}) \right] \\
= -\sum_{n=1}^{N} \left[(y_{n}) \left(\frac{1}{h(\mathbf{x}_{n})} \right) - (1 - y_{n}) \left(\frac{1}{1 - h(\mathbf{x}_{n})} \right) \right] [h(\mathbf{x}_{n}) (1 - h(\mathbf{x}_{n}))] (\mathbf{x}_{n,i}) \\
= -\sum_{n=1}^{N} \left[(y_{n}) (1 - h(\mathbf{x}_{n})) - (1 - y_{n}) h(\mathbf{x}_{n}) \right] (\mathbf{x}_{n,i}) \\
= -\sum_{n=1}^{N} \left[(y_{n} - h(\mathbf{x}_{n})) (\mathbf{x}_{n,i}) \right] (2.11)$$

故 $Err(w_i)$ 的梯度如下:

$$\nabla Err(w_i) = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}}} - y_n \right) (x_{n,i})$$
 (2.12)

不幸的是,这个梯度表达式为一个非线性函数,故要求解函数零点非常困难,故我们采用了迭代最优化的方式去求解。由于Err(w)是一个凸函数,故我们只要沿着梯度下降的方向去更新求解w,就一定能较迅速找到最优解,因为梯度是函数变化最快的方向。



假设第t步我们已经得到了权重 w_t ,那么,根据梯度下降法,我们可以得到如下更新公式:

$$\boldsymbol{w}_{t+1} = \boldsymbol{w}_t - \eta \nabla Err(\boldsymbol{w}_t) \tag{2.13}$$

其中, $\eta > 0$ 表示梯度下降的步长,为人工设置参数。 于是逻辑回归算法去求解分类问题如下:

Algorithm 1 逻辑回归训练算法

输入: 特征向量集合{x}和标签集合{y}

输出: 最优解 w_{t+1} 初始化: 随机初始化 w_0

 $for \quad t=0,1,\dots$

1. 通过公式2.12 计算每一个维度的梯度

for i = 0, 1, ..., d

$$\nabla Err(w_{t,i}) = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{1 + e^{-\boldsymbol{w}_t^T \boldsymbol{x}_n}} - y_n \right) (x_{n,i})$$

2. 通过公式2.13迭代更新权重的每一个维度

for
$$i = 0, 1, ..., d$$

$$w_{t+1,i} = w_{t,i} - \eta \nabla Err(w_{t,i})$$

直到 $\nabla Err(\mathbf{w}) = 0$ 或者迭代足够多次

由于我们模型的目标函数为一个光滑的凸函数,故我们有很多可以优化数值计算的方法,保证全局最优解,常用的改进方式可以为牛顿法,拟牛顿法,共轭梯度等。除此之外由于每一次更新都需要重新计算整个训练集的梯度,如果是大数据这种方式就很慢了,相应的办法为随机梯度下降(SGD),上述提到的改进就不在这里详细展开说明了。

故我们最终可以得到特征权重 w_{t+1} ,它是基于已有数据集产生的加权参数。接下来只需要用这个参数去进行预测分类。对于一个测试样本 x_{test} ,计算它属于类别1(positive)的概率 $\frac{1}{1+e^{-w^T}x_{test}}$ 。如果该值大于0.5即为类别1(positive),否则就是类别2(positive)。