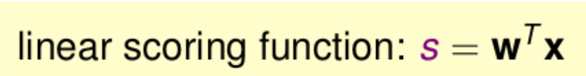
linear regression for classification +随机梯度下降+多分类之logistic回归+多分类之线性分类投票法

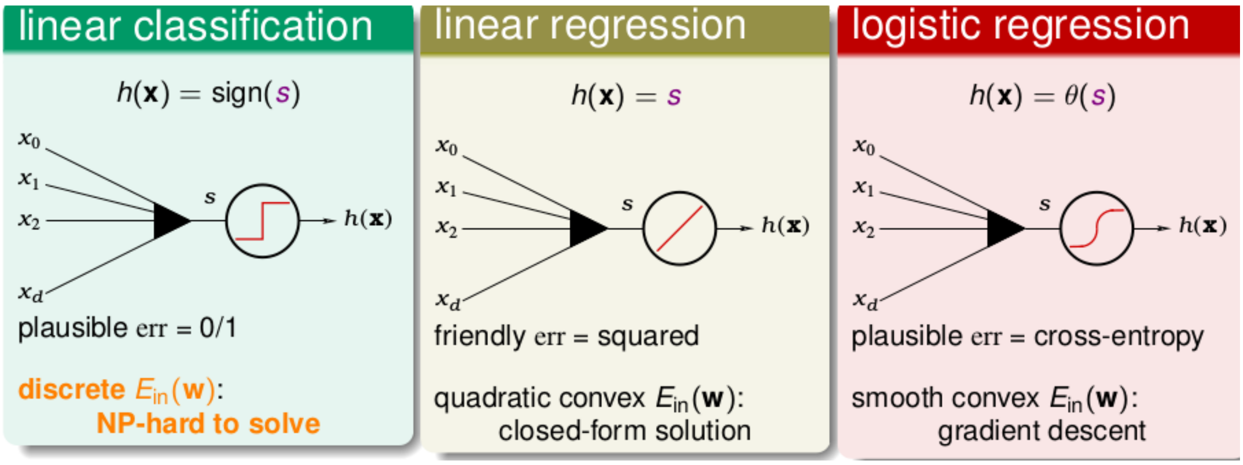
原创 2016年08月10日 19:39:13 标签：线性回归用再分类上面 / 随机梯度法-SGD / SGD与PLA的关系 / 用逻辑回归做多分类 / 二分类做多分类

将 线性回归，logistic 回归 用在 分类 上面

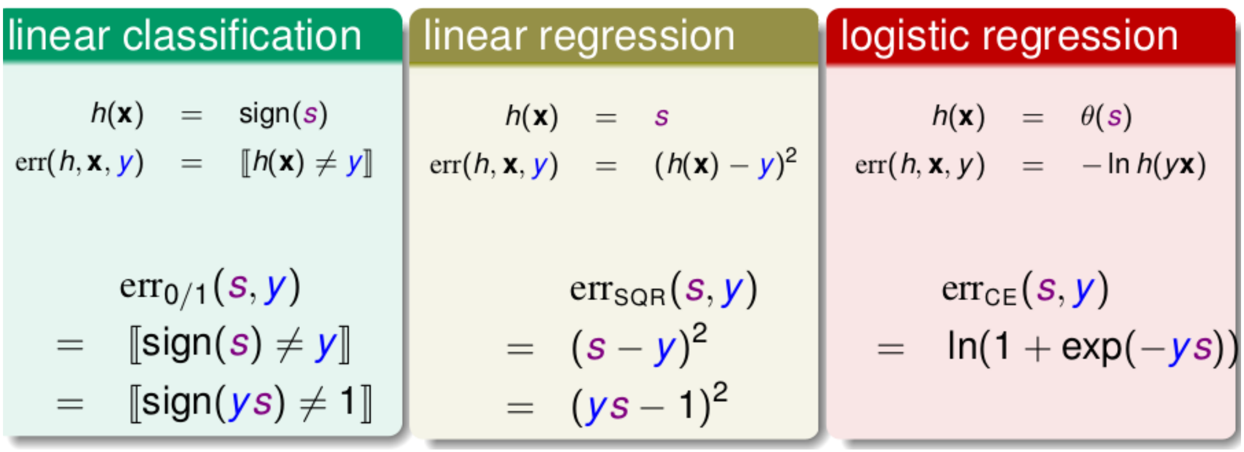
我们回顾一下上节所学习的内容。总共学习了三种线性模型（线性分类，线性回归，logistic 回归），他们的核心都是



他们三种情况分别为



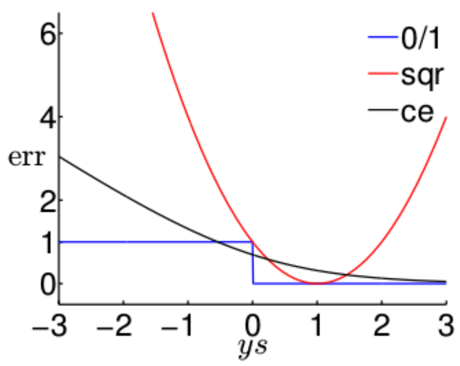
那么问题是，能否将线性回归，logistic 回归 运用到 线性分类 呢？？
其实，分类是一种特殊的回归，只是输出的结果y仅仅为{-1,1}罢了！
分类问题，对于某一个样本，其y仅为-1或者1。该样本的误差为err(s,y)。注意：不是E_{in}，err(s,y)表示某一个样本的误差，而E_{in}表示的是将所有样本的err(s,y)相加的和再除以N，得到的平均值。
那么三种模型的err(s,y)分别为



注意：由于是分类问题，那么上图的y只能为1或者-1。但是s的值就不是仅仅只有1或者-1了。
那求得的三种模型的err(s,y)就分别为

$$
\begin{aligned}
0/1 \quad & \mathrm{err}_{0/1}(s, y) &=& [\![\mathrm{sign}(ys) \neq 1]\!] \\
\mathrm{sqr} \quad & \mathrm{err}_{\mathrm{SQR}}(s, y) &=& (ys - 1)^2 \\
\mathrm{ce} \quad & \mathrm{err}_{\mathrm{CE}}(s, y) &=& \ln(1 + \exp(-ys))
\end{aligned}
$$

0/1表示 线性分类的。 sqr表示线性回归的。ce表示logistic回归的。
以ys为横坐标，err值为纵坐标。则可汇出图形为



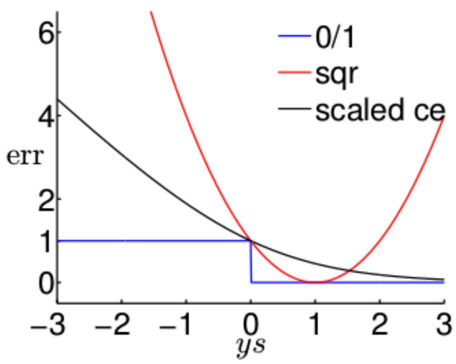
我们来看看ys的物理意义。y是样本的标签，s是模型对这个样本预测的值,s=$w^T x$为实数,无穷多个取值。如果y=1，那么我们肯定希望s>0，如果y=-1，那么我们肯定希望s<0。所以，ys>0表示 模型分类正确，ys<0表示模型分类错误。

1. 我们来看看0/1模型的情况，ys>0,err=0；ys<0,err=1.
2. 但是，我们看sqr模型就不一样了。ys<<1,err很大，(哎，大就大呗，反正ys<0，是应该受点惩罚，只是这惩罚有点大)。但是当ys>>1，时，为什么sqr模型的err却依然那么大啊！！！ ys>>1,表示的是模型分类是正确，err为0 才对，为什么还越来越大。所以，只有使得sqr的err很小时，此时的sqr才会和0/1的err相接近，才会一样小。所以我们是sqr的err小的话，可以使得0/1的err也小；但是0/1的err小，并不代表sqr的err小。
3. 再看ce模型。很显然，ce的err小的话，0/1的err也小；0/1的err小的话（不管怎么小，都为0），ce 也小。

为了方便，我们对ce err的表达式除了$ln2$，可以使得图型的ys为0是，err为1。

$$
\text{scaled ce} \quad \mathrm{err}_{\mathrm{SCE}}(s, y) = \log_2(1 + \exp(-ys))
$$

得到图形为



- 0/1: 1 iff $ys \le 0$
- sqr: large if $ys \ll 1$
  but over-charge $ys \gg 1$
  small $\mathrm{err}_{\mathrm{SQR}} \rightarrow$ small $\mathrm{err}_{0/1}$
- ce: monotonic of ys
  small $\mathrm{err}_{\mathrm{CE}} \leftrightarrow$ small $\mathrm{err}_{0/1}$
- scaled ce: a proper upper bound of 0/1
  small $\mathrm{err}_{\mathrm{SCE}} \leftrightarrow$ small $\mathrm{err}_{0/1}$

这样曲线恒再0/1曲线的上方。err是一个样本的误差,E_{in}是把所有的err求和去平均就有

For any ys where $s = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$

$$
\mathrm{err}_{0/1}(s, y) \le \mathrm{err}_{\mathrm{SCE}}(s, y) = \frac{1}{\ln 2} \mathrm{err}_{\mathrm{CE}}(s, y).
$$

$$
\begin{aligned}
\Longrightarrow \quad E_{\mathrm{in}}^{0/1}(\mathbf{w}) &\le E_{\mathrm{in}}^{\mathrm{SCE}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{\ln 2} E_{\mathrm{in}}^{\mathrm{CE}}(\mathbf{w}) \\
E_{\mathrm{out}}^{0/1}(\mathbf{w}) &\le E_{\mathrm{out}}^{\mathrm{SCE}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{\ln 2} E_{\mathrm{out}}^{\mathrm{CE}}(\mathbf{w})
\end{aligned}
$$

对0/1和ce模型分别用之前讨论的VC bound

VC on 0/1:

$$E_{out}^{0/1}(\mathbf{w}) \le E_{in}^{0/1}(\mathbf{w}) + \Omega^{0/1} \le \frac{1}{\ln 2} E_{in}^{CE}(\mathbf{w}) + \Omega^{0/1}$$

VC-Reg on CE:

$$E_{out}^{0/1}(\mathbf{w}) \le \frac{1}{\ln 2} E_{out}^{CE}(\mathbf{w}) \le \frac{1}{\ln 2} E_{in}^{CE}(\mathbf{w}) + \frac{1}{\ln 2}\Omega^{CE}$$

即

即可知，只要我们保证 ce E_{in}足够小，就可以保证0/1分类的 E_{in}小。同理 只要我们保证 linear regression E_{in}足够小，就可以保证0/1分类的 E_{in}小。所以以可以将线性回归和逻辑回归用再分类上面。

方法就是，我们用线性回归或逻辑回归用分类的样本（y={-1，1}）求出权重w,再得到 即可.

1. run **logistic/linear reg.** on $\mathcal{D}$ with $y_n \in \{-1, +1\}$ to get $\mathbf{w}_{REG}$
2. return $g(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}_{REG}^T \mathbf{x})$

即

PLA，linear regression , logistic regression 进行classification的优缺点

PLA	linear regression	logistic regression
• pros: efficient + strong guarantee if lin. separable • cons: works only if lin. separable, otherwise needing pocket heuristic	• pros: 'easiest' optimization • cons: loose bound of $\text{err}_{0/1}$ for large $\lvert ys \rvert$	• pros: 'easy' optimization • cons: loose bound of $\text{err}_{0/1}$ for very negative ys

一般的，我们用 linear regression为PLA/pocket/logistic 设定初始化值w_0.

一般不用pocket，用logistic取代他。

随机梯度法 SGD

我们回顾以前讲的内容，发现 总共学习了两种迭代优化的方法–PLA和logistic 回归

这两种方法的核心为

For $t = 0, 1, \ldots$

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + \eta \mathbf{v}$$

when stop, return last $\mathbf{w}$ as g

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + 1 \cdot [\![y_n \ne \text{sign}(\mathbf{w}_t^T \mathbf{x}_n)]\!] (y_n \mathbf{x}_n)$$

PLA的思想是，每次迭代我只取出一个样本，进行处理。即 ，那么他每次迭代的复杂度仅仅只有O(1) time。

$$\underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \theta\left(-y_n \mathbf{w}_t^T \mathbf{x}_n\right)(y_n \mathbf{x}_n)}_{-\nabla E_{in}(\mathbf{w}_t)}$$

而logistic 回归的思想是，每次迭代取出所有的样本来求出梯度值 。那么他的复杂度为O(N) time。

所以，我们能否也让logisitc 回归每次迭代的复杂度为O(1)呢?

我们以前用logistic回归的公式为

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + \eta \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\theta\left(-y_n\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n\right)\left(y_n\mathbf{x}_n\right)}_{-\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}_t)}$$

这是我们用梯度下降法得到的，他的E_{in}是沿着梯度的方向向下走的。那么为了能让复杂度为O(1)，我们不强求下降方向一定要是梯度，也就是大概梯度方向就行。即

update direction $\mathbf{v} \approx -\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}_t)$

发现公式里是“约等号”，以前的方法是等号。

那怎样做到这一点呢？？？

$$\underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\theta\left(-y_n\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n\right)\left(y_n\mathbf{x}_n\right)}_{-\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}_t)}$$

其实我们可以把上图看成是，期望值（也就是均值）。你有10000个数字，求他们的期望，由于太复杂，我就随机抽取几个点去求这几个点的期望。这就好比我们现在的随机梯度法，只是随机梯度法随机仅仅抽取的1个点，求这一个点的期望（就是他本身）。我们就用这一个点的期望去替代总体样本的期望。这就把原始的梯度下降法改成了我们现在的随机梯度法。

所以运用随机梯度法替代原来的梯度下降法，最终得到的公式为

SGD logistic regression, **looks familiar? :-)**:

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + \eta \underbrace{\theta\left(-y_n\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n\right)\left(y_n\mathbf{x}_n\right)}_{-\nabla \text{err}(\mathbf{w}_t, \mathbf{x}_n, y_n)}$$

优点：快，运输量低，适于大数据，适于在线学习online learning

缺点：稳定性会降低，

由于无法达到最低，所以停止条件是：循环足够多次

一般取η为0.1（个人习惯，和个人经验）

SGD logistic回归与PLA的关系

SGD logistic regression:

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + \eta \cdot \theta\left(-y_n\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n\right)\left(y_n\mathbf{x}_n\right)$$

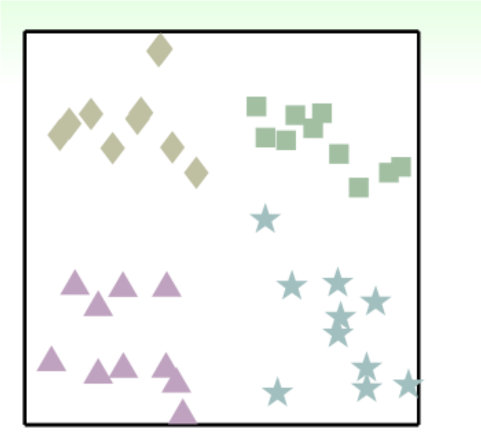
PLA:

$$\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t + 1 \cdot [\![y_n \neq \text{sign}(\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n)]\!] \left(y_n\mathbf{x}_n\right)$$

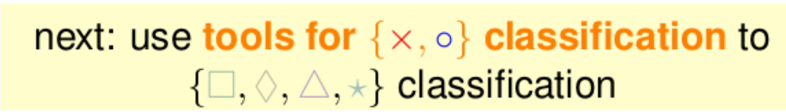
- SGD logistic regression $\approx$ ‘soft’ PLA
- PLA $\approx$ SGD logistic regression with $\eta = 1$ when $\mathbf{w}_t^T\mathbf{x}_n$ large

用logistic回归做多分类问题

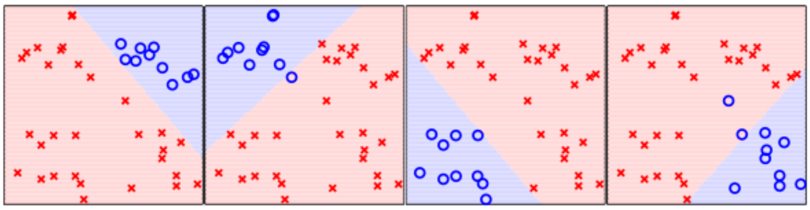
现在我们想分类成为下图的样本进行分类



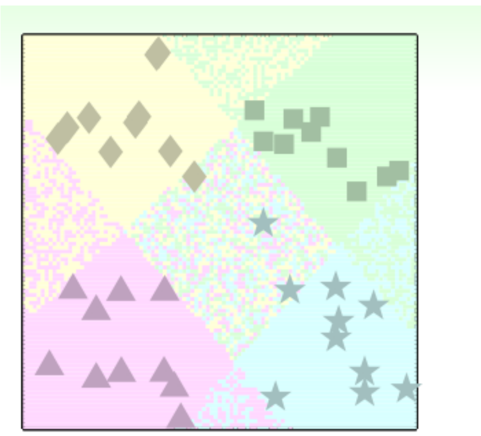
方法一:
我们用二分类的分类器帮助我们进行多分类



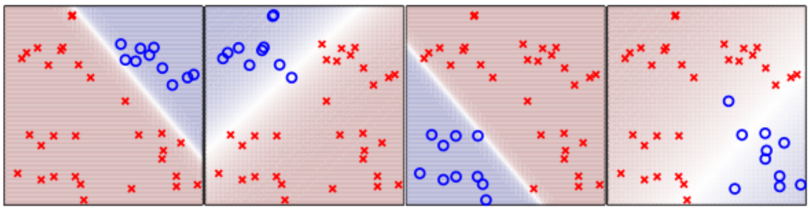
思想：我们每次抽取一个类别比如“方块”，将其作为“o”，其他的所有的类别作为“×”，依次这样，我们可以做出4个分类器。



以上4个分类器依次对方块，菱形，三角，五角星 分类。
现在，我有一个新样本，他位于方框的右上角。很显然，第一个分类器说是“o”,而其他的分类器几乎都说是”×”，那么我们就可以说这个新样本的类别就是“方框”。也就是说，以后来的新样本，一般（仅一般情况）有一个分类器说是“o”，其他三个说是“×”。那么就可以说这个样本属于这个说“o”的分类器对应的标签了。
但是存在一个很大的问题



就是在上图中的正中心，每个分类器都会说是“×”，在正中心的正上，正下，正左，正右，四个小块都会有两个分类器说是“o”。
所以，这种用二分类，结果仅能是“×”或者“o”的方法，存在不可解的情况。
那么我们就不那么绝对，一定要是“×”或者“o”。我们用概率的形式来做。
现在就来介绍，这一部分的主人公：
多分类之logistic回归 OVA(1对多 one versus all)
该方法与上面的思路基本相同。也是对每个类别和其他所有的类做分类器，所以也是做4个分类器。不同之处是，每一个小 分类器的输出，不在是绝对的“o”或者“×”，而是属于“o”的概率。假如我有一个样本，把他带入4个分类器，计算出该样本在每一个分类器上面属于“o”的概率值，取出概率值最大的那个分类器，该分类器对应的类别就是新样本的类别。



上面四个分类器，把新样本带入4个分类器，计算出该样本在每一个分类器上面属于“o”的概率值，取出概率值最大的那个分类器，该分类器对应的类别就是新样本的类别。

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{argmax}_{k\in\mathcal{Y}}\, \theta\left(\mathbf{w}_{[k]}^T\mathbf{x}\right)$$

即
算法总结为：
1. 对于k个类别，循环k次
第i次，取出第i个类作为“o”，其他所有类（k-1个)都作为“×”，用logistic 回归训练概率模型（输出结果为 属于“o”的概率）
循环k次，则有k个logistic模型
2. 把新样本依次带入k个分类器，计算出该样本在每一个分类器上面的输出（属于“o”的概率值），输出值（属于”o”概率值）最大的那个分类器对应的类别就是新样本的类别。

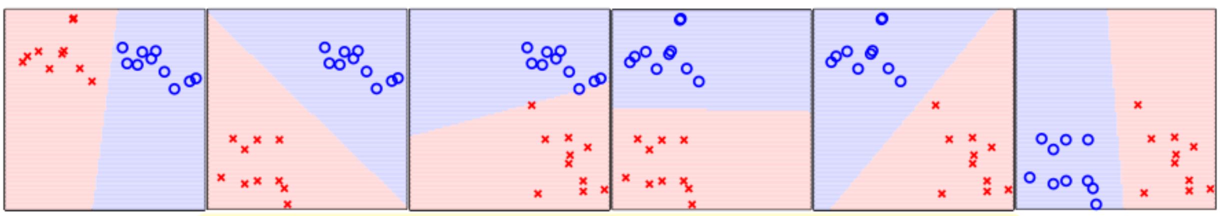
One-Versus-All (OVA) Decomposition

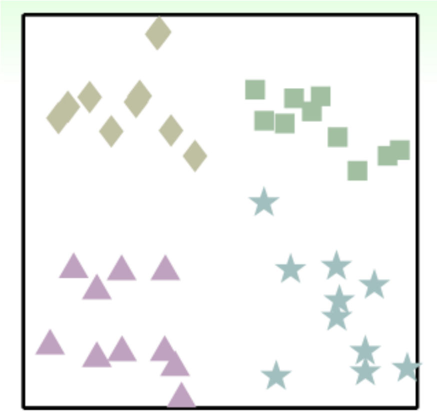
1. for $k \in \mathcal{Y}$
   obtain $\mathbf{w}_{[k]}$ by running logistic regression on
   $$\mathcal{D}_{[k]} = \{(\mathbf{x}_n, y_n' = 2\,[\![y_n = k]\!] - 1)\}_{n=1}^N$$
2. return $g(\mathbf{x}) = \operatorname{argmax}_{k\in\mathcal{Y}} \left(\mathbf{w}_{[k]}^T\mathbf{x}\right)$

即
优点：效率高，用的是logistic回归
缺点：当k很大，每个类对应的样本数相对于N就会很小，那么就会很不稳定。原因：见下：（但这依然是个很好的方法，在k不大的情况下）
一对多有个问题
当你的类别k很大的时候，即每个类别样本的数量相对于N都很小，那么每个类别的分类器都会努力的去猜‘×’。假如N=100，你的类别K=100，那么对于每一个类别分类器，都是，仅有一个样本为“o”,其他99个都是”×”。也就是说模型都会去猜“×”，那么每个小模型都有99%的正确率。那么你的最终模型就是在一堆都爱猜“×”的模型里选一个最大的类别。很显然，这样结果就会不稳定，并不是很好，并且你还会以为很好。

用线性分类投票法做多分类问题 （1对1 ）（one versus one)

上面的算法是对于K个类别，每次选取1个类别作为“o”，其他所有的类别作为“×”，所以叫 1对多（one versus all）。总共循环k次。
而这次这个算法，每次选取1个作为“o”，再选一个类别作为“×”，用这两个类的数据训练小模型，所以称为 1对1（one versus one）。总共循环C_k^2次。共C_k^2个模型。
比如有4个类，k=4，那么总共有C_4^2=6个模型，如下图





假设有一个新样本，假设他位于右上角，我们把他依次放在这6个模型中。那么第一个模型输出结果为“方块”，第二个模型输出结果为“方块”，第三个模型输出结果为“方块”，第四个模型输出结果为“菱形”，第五个模型输出结果为“五角星”，第六个模型输出结果为“五角星”。那么经过投票，得到最终这个新样本的类别为“方块”。
算法总结：
1. 有k个类别，那么我们循环C_k^2次
对于第i次循环，取出一个类别数据作为“o”，再取出一个类别数据作为“×”，用linear classfication 训练小模型。
所以总共有C_k^2次
2. 把新样本依次投入C_k^2个小模型里，运用投票的方法，选出k个类别中获得票数最佳的类别作为新样本的类标签。

One-versus-one (OVO) Decomposition

1. for $(k, \ell) \in \mathcal{Y} \times \mathcal{Y}$
   obtain $\mathbf{w}_{[k,\ell]}$ by running linear binary classification on
   $$\mathcal{D}_{[k,\ell]} = \{(\mathbf{x}_n, y_n' = 2\,[\![y_n = k]\!] - 1) : y_n = k \text{ or } y_n = \ell\}$$
2. return $g(\mathbf{x}) = \text{tournament champion}\left\{\mathbf{w}_{[k,\ell]}^T \mathbf{x}\right\}$

优缺点：

- pros: efficient (‘smaller’ training problems), stable,
  can be coupled with any binary classification approaches
- cons: use $O(K^2)$ $\mathbf{w}_{[k,\ell]}$
  —**more space, slower prediction, more training**

OVO: another simple multiclass
meta-algorithm to keep in your toolbox