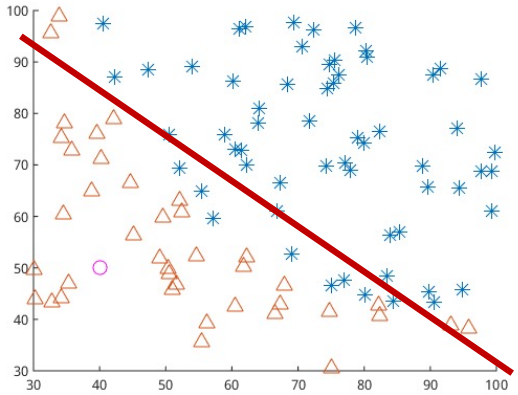
第6章　对数几率回归

Outline

- 对数几率回归
- 对数几率回归的损失函数
- 对数几率回归的优化求解
- 多类分类任务的对数几率回归
- 分类任务中的样本不均衡问题
- 分类模型的评价指标
- 对数几率回归案例分析

分类

- 监督学习中，给定训练数据$\mathcal{D} = \{\boldsymbol{x}_i, y_i\}_{i=1}^{N}$，其中$N$为训练样本数目，$i$为样本索引，$\boldsymbol{x}_i$为第$i$个样本的输入特征，$y_i$ 为对应的输出/响应，
- 当$y_i \in \{1, 2, \ldots, \mathrm{C}\}$时，该监督学习任务为一个分类任务。根据训练样本$\mathcal{D}$学习一个从输入$\boldsymbol{x}$到输出$y$的映射$f$。
- 测试：对新的测试数据$\boldsymbol{x}$ ，用学习到的映射f对其进行预测：$\hat{y} = f(\boldsymbol{x})$



两类分类任务

- 考虑两类分类任务，样本的输出$y_i \in \{0,1\}$。
- 在概率分布中，贝努利（Bernoulli）试验的输出为$\{0,1\}$，
- 贝努利分布：$y \sim \text{Bernoulli}(\mu)$，其中$\mu$为分布的期望，表示$y = 1$的概率。
- 概率密度函数为：$p(y;\mu) = \mu^y(1-\mu)^{(1-y)}$。
- 在分类任务中，在给定输入$\boldsymbol{x}$的情况下，输出y用贝努利分布描述：$y|\boldsymbol{x} \sim \text{Bernoulli}(\mu(\boldsymbol{x}))$，其中期望$\mu(\boldsymbol{x})$ 表示在给定$\boldsymbol{x}$的情况下，$y = 1$的概率。
- 概率密度函数为：$p(y|\boldsymbol{x}\,;\mu) = \mu(\boldsymbol{x})^y(1-\mu(\boldsymbol{x}))^{1-y}$，即

$$p(y=1|\boldsymbol{x}) = \mu(\boldsymbol{x}), \qquad p(y=0|\boldsymbol{x}) = 1-\mu(\boldsymbol{x})$$

对数几率回归模型

- 在分类任务中，在给定输入$\boldsymbol{x}$的情况下，概率密度函数为：

$$p(y|\boldsymbol{x};\mu) = \mu(\boldsymbol{x})^{y}(1-\mu(\boldsymbol{x}))^{1-y}$$

- 期望$\mu(\boldsymbol{x})$ 如何表示？
- 最简单的模型：线性模型

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$

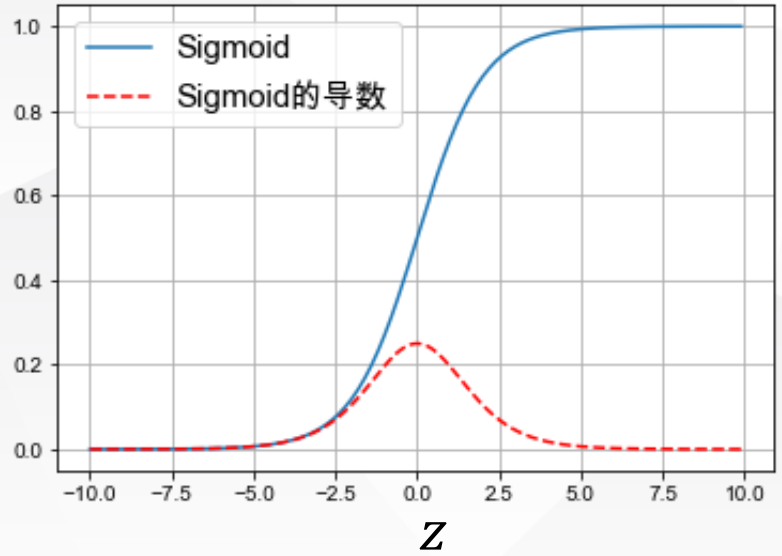
- 但是$\mu(\boldsymbol{x})$表示给定$\boldsymbol{x}$的情况下，$y=1$的概率，取值为区间$[0,1]$。
- 所以，将$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$的输出范围转换到$[0,1]$ ：sigmoid函数（S形函数）

Sigmoid函数

- Sigmoid函数为：

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

$$\frac{d\sigma(z)}{dz} = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$$



- 亦被称为对数几率函数或logit函数。
- 对数几率回归亦被称为logit回归。

对数回归虽然从名字上来看是回归算法，但其实际上是一个分类算法。

对数几率

- 在对数几率回归模型中：

$$p(y=1|\boldsymbol{x})=\mu(\boldsymbol{x})=\sigma\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right),$$

$$p(y=0|\boldsymbol{x})=1-\mu(\boldsymbol{x})=1-\sigma\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)$$

- 定义一个事件的几率(odds)为该事件发生的概率与不发生的概率的比值：

$$\frac{p(y=1|\boldsymbol{x})}{p(y=0|\boldsymbol{x})}=\frac{\sigma\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}{1-\sigma(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}=\frac{1/\left(1+e^{-\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)}{e^{-\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}/\left(1+e^{-\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)}=e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}$$

- 两边同取log运算，得到对数几率：$\ln\frac{p(y=1|\boldsymbol{x})}{p(y=0|\boldsymbol{x})}=\ln\left(e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$

决策边界

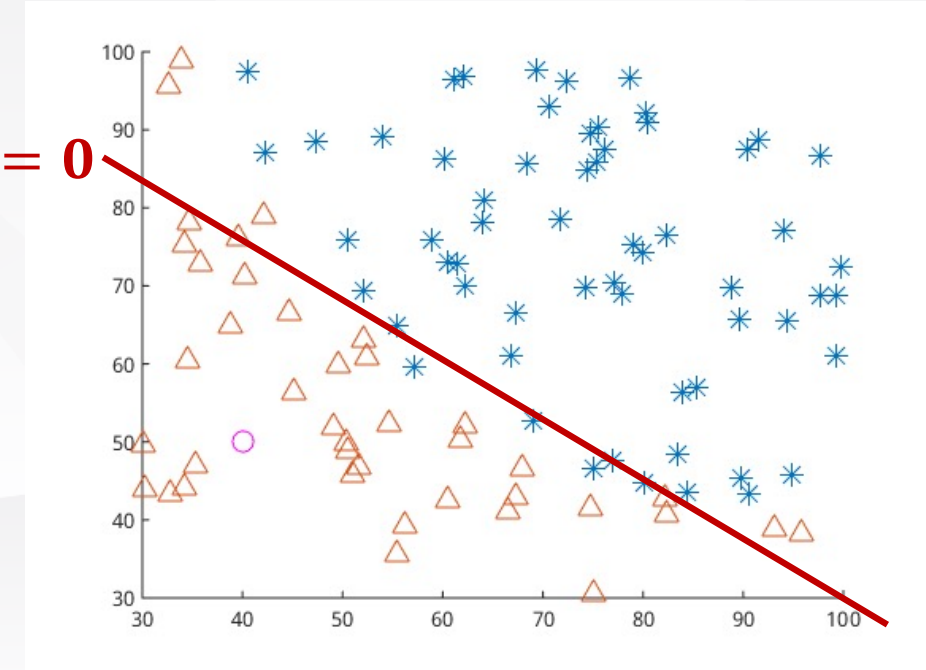
- 对数几率：$\ln \frac{p(y=1|\boldsymbol{x})}{p(y=0|\boldsymbol{x})} = \ln\left(e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$
- 当$p(y=1|\boldsymbol{x}) > p(y=0|\boldsymbol{x})$时，如果取最大后验概率，$\boldsymbol{x}$的类别取$y=1$

  $\frac{p(y=1|\mathbf{v})}{p(y=0|\boldsymbol{x})} > 1$，$\ln \frac{p(y=1|\boldsymbol{x})}{p(y=0|\boldsymbol{x})} = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} > 0$。

- 当$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} > 0$时，$\boldsymbol{x}$的类别取$y=1$；
- 当$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} < 0$时，$\boldsymbol{x}$的类别取$y=0$；
- 当$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = 0$时，$y=1$的概率和$y=0$的概率相等，此时$\boldsymbol{x}$位于决策面上。可将$\boldsymbol{x}$分类到任意一类，或拒绝作出判断。

决策边界

- 决策函数$f(x) = w^{\mathrm{T}}x$根据$w^{\mathrm{T}}x$的符号将输入空间$\mathcal{X}$分出两个区域。
- $w^{\mathrm{T}}x$ 为输入 x 的线性函数，所以对数几率回归模型是一个线性分类模型。



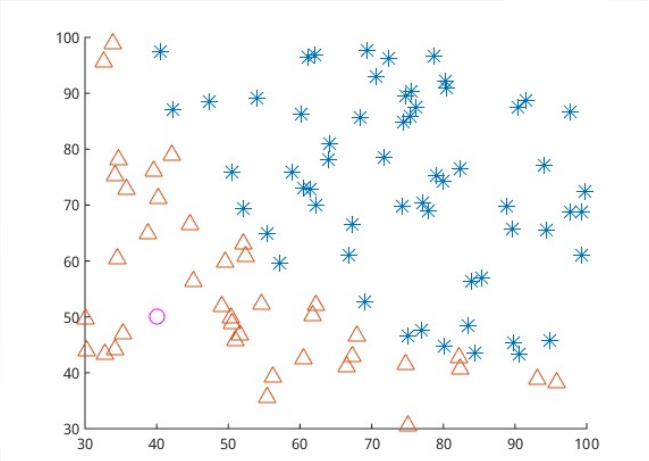
Outline

- 对数几率回归
- **对数几率回归的损失函数**
- 对数几率回归的优化求解
- 多类分类的对数几率回归
- 分类任务中的样本不均衡问题
- 分类模型的评价指标
- 对数几率回归案例分析

分类任务的损失函数

- 0/1 损失：预测类别正确损失为0，否则为1，记为

$$L(\hat{y}, y) = \begin{cases} 0 & \hat{y} = y \\ 1 & \hat{y} \neq y \end{cases}$$



- 0/1 损失不连续，优化计算不方便。
- 寻找其他替代损失函数（Surrogate Loss Function）
  - 通常是凸函数，计算方便且和0/1损失是一致的

交叉熵损失

■对数几率回归模型： $y|\boldsymbol{x} \sim \text{Bernoulli}(\mu(\boldsymbol{x}))$

$$p(y|\boldsymbol{x};\mu(\boldsymbol{x})) = \mu(\boldsymbol{x})^{y}(1-\mu(\boldsymbol{x}))^{(1-y)}$$

$$\mu(\boldsymbol{x}) = \sigma\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)$$

■log似然函数为：

$$\ell(\mu) = \ln p(\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} \ln p(y_i|\boldsymbol{x}_i)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \ln\left(\mu(\boldsymbol{x}_i)^{y_i}(1-\mu(\boldsymbol{x}_i))^{(1-y_i)}\right)$$

交叉熵损失

- 定义负log似然损失为：

$$L(\mu(\boldsymbol{x}), y) = -y \ln\big(\mu(\boldsymbol{x})\big) - (1-y) \ln\big(1-\mu(\boldsymbol{x})\big)$$

- 则极大似然估计等价于最小训练集上的负log似然损失：

$$J(\mu) = \sum_{i=1}^{N} L\big(y_i, \mu(\boldsymbol{x}_i)\big) = \sum_{i=1}^{N} -y_i \ln\big(\mu(\boldsymbol{x}_i)\big) - (1-y_i) \ln\big(1-\mu(\boldsymbol{x}_i)\big)$$

$$= -\ell(\mu)$$

交叉熵损失

- 负log似然损失 $L(\mu(\boldsymbol{x}), y) = -y \ln\big(\mu(\boldsymbol{x})\big) - (1-y)\ln\big(1-\mu(\boldsymbol{x})\big)$
- 亦被称为交叉熵损失（Cross Entropy Loss）。
- 交叉熵：两个分布之间的差异（已知真实分布情况下，预测分布与真实分布之间的差异）
  - 假设已知真值$y = 1$，即$y|\boldsymbol{x} \sim \text{Bernoulli}(1)$，
  - 假设$\hat{y} = 1$的概率为$\mu(\boldsymbol{x})$，$\hat{y}|\boldsymbol{x} \sim \text{Bernoulli}\big(\mu(\boldsymbol{x})\big)$
  - 即这两个分布之间的交叉熵为：

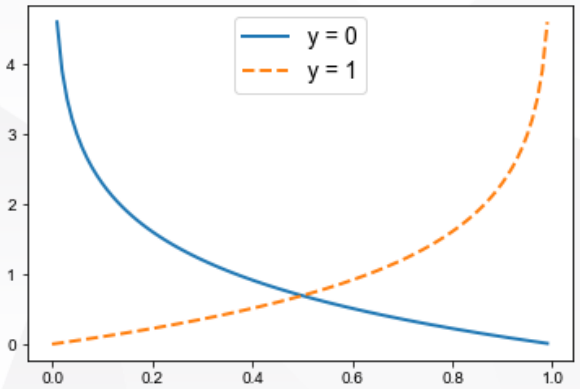
$$CE\big(y, \mu(\boldsymbol{x})\big) = -\sum_{y} p(y|\boldsymbol{x}) \ln p(\hat{y}|\boldsymbol{x}) = -p(y=1|\boldsymbol{x}) \ln p(\hat{y}=1|\boldsymbol{x}) - p(y=0|\boldsymbol{x}) \ln p(\hat{y}=0|\boldsymbol{x})$$
$$= -\ln \mu(\boldsymbol{x})$$

综合：$$CE\big(y, \mu(\boldsymbol{x})\big) = \begin{cases} -\ln \mu(\boldsymbol{x}) & if\ y = 1 \\ -\ln\big(1-\mu(\boldsymbol{x})\big) & otherwise \end{cases}$$

定义Probability of ground truth class为：

$$p_t = \begin{cases} \mu(\boldsymbol{x}) & if\ y = 1 \\ 1-\mu(\boldsymbol{x}) & otherwise \end{cases}$$

则 $CE\big(y, \mu(\boldsymbol{x})\big) = -\ln(p_t)$



预测输出与真值y 差得越多，损失的值越大。

对数几率回归的目标函数

- 对数几率回归的损失函数采用交叉熵损失

$$L(\mu(\boldsymbol{x}), y) = -y \ln\big(\mu(\boldsymbol{x})\big) - (1-y) \ln\big(1-\mu(\boldsymbol{x})\big)$$

- 其中y 为真值，$\mu(\boldsymbol{x}) = \sigma\big(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\big)$为预测值为1的概率。

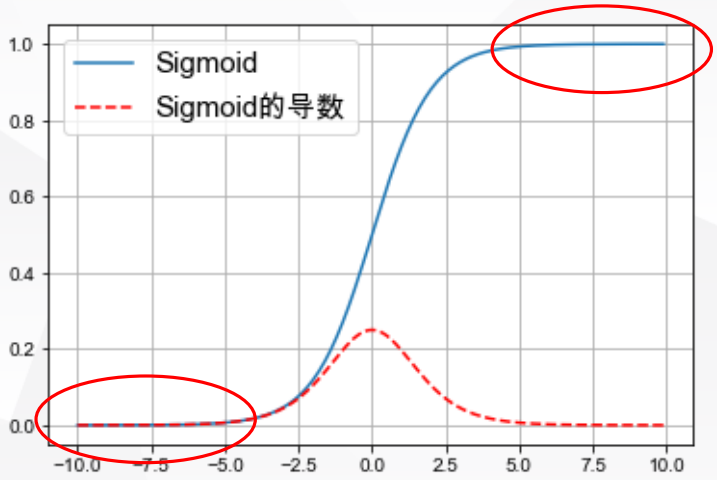
- 同其他机器学习模型一样，对数几率回归的目标函数也包括两项：训练集上的损失和正则项

$$J(\boldsymbol{w}; \lambda) = \sum_{i=1}^{N} L(\mu(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}), y_i) + \lambda R(\boldsymbol{w})$$

- 类似回归任务，正则项$R(\mathbf{w})$可为L1正则、L2正则、 L1正则+L2正则

对数几率回归中正则的必要性

- 线性回归：目标函数可以不加正则项（OLS）
- 但对数几率回归：必须加正则
  - 当训练完全可分时，为了使交叉熵损失和最小（0），每个$L(\mu(\boldsymbol{x}_i), y_i) = 0$，$\mu(\boldsymbol{x}_i) = 1/0$。
  - 而$\mu(\boldsymbol{x}_i) = \sigma(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i) = 1/0$，要求$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i = \infty/-\infty$，$|w_j| = \infty$。
  - 因此必须加正则，找到与训练数据拟合好的最简单模型。



Sklearn中的对数几率回归

Class sklearn.linear_model.LogisticRegression(*penalty='l2', dual=False, tol=0.0001, C=1.0, fit_intercept=True, intercept_scaling=1, class_weight=None, random_state=None, solver='liblinear', max_iter=100, multi_class='ovr', verbose=0, warm_start=False, n_jobs=1*)

- 实现的目标函数为

$$J(\boldsymbol{w}; C) = C\sum_{i=1}^{N} L\left(y_i, \mu(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w})\right) + R(\boldsymbol{w})$$

- 其中超参数C起到正则作用， C越大，正则越少。

Outline

- 对数几率回归
- 对数几率回归的损失函数
- **对数几率回归的优化求解**
- 多类分类的对数几率回归
- 分类任务中的样本不均衡问题
- 分类模型的评价指标
- Sklearn中的对数几率回归API
- 对数几率回归案例分析

对数几率回归的梯度下降求解

- 对数几率回归模型没有解析解，迭代求解
  - 一阶：梯度下降、随机梯度下降（SGD）、随机平均梯度法（SAG）、随机平均梯度法改进版（SAGA）、共轭梯度、坐标轴下降
  - 二阶：牛顿法及拟牛顿法（BFGS、L-BFGS）

- 目标函数：

$$J(\boldsymbol{w}, \lambda) = \sum_{i=1}^{N} L(\mu(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}), y_i) + \lambda R(\boldsymbol{w})$$

- 正则项处理同线性回归。
  - L2正则函数连续，可采用梯度下降法/牛顿法等优化方法
  - 由于L1正则函数不连续，所以梯度下降法/牛顿法不适用。类似Lasso求解，可采用坐标轴下降法

梯度

■我们先来看训练集上的损失函数和部分

$$J_1(\boldsymbol{w}) = \sum_{i=1}^{N} \left(-y_i \ln\left(\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\right) - (1-y_i) \ln\left(1-\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\right)\right)$$

■则梯度

$$g_1(\boldsymbol{w}) = \frac{\partial J_1(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}} = -\sum_{i=1}^{N} \left(y_i \frac{1}{\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})} - (1-y_i) \frac{1}{1-\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})}\right) \frac{\partial \mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}$$

$$= -\sum_{i=1}^{N} \left(y_i \frac{1}{\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})} - (1-y_i) \frac{1}{1-\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})}\right) \mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\left(1-\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\right) \frac{\partial\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_i\right)}{\partial \boldsymbol{w}}$$

$$= -\sum_{i=1}^{N} \left(y_i\left(1-\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\right) - (1-y_i)\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w})\right) \boldsymbol{x}_i$$

$$= \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})$$

形式同线性回归模型

$$\mu(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = \sigma\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}\right)$$

$$\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

$$\frac{d\sigma(z)}{dz} = \sigma(z)(1-\sigma(z))$$

$$\frac{\partial\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{x}$$

Hessian矩阵

- 损失函数和的梯度为：$g(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})$
- 则Hessian矩阵为：

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w}) = \frac{\partial g(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}} = \frac{\partial\left(\sum_{i=1}^{N}(\mu(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w}) - y_i)\boldsymbol{x}_i\right)}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \mu_i(1-\mu_i)\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}$$

$$= \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{X}$$

$$\frac{\partial(\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{y}} = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}$$

$$\frac{\partial \mu(\boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\mu_i(1-\mu_i)$$

$$\boldsymbol{S} \triangleq diag(\mu_i(1-\mu_i))$$

- $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w})$为正定矩阵，梯度下降能找到全局最小值。

牛顿法求解目标函数极值

- 对多元函数$f(x_1,\dots,x_D)$，一阶导数换成梯度：$\boldsymbol{g}=\nabla f(x_1,\dots,x_D)$，二阶导数换成海森（Hessian）矩阵$\boldsymbol{H}$

$$\mathbf{H}(\mathbf{x})=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_D}\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_D}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_D} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_D \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_D^2}\end{bmatrix}$$

- 则牛顿法迭代公式为：$\boldsymbol{x}^{(t+1)}=\boldsymbol{x}^{(t)}-\boldsymbol{H}^{-1}\left(\boldsymbol{x}^{(t)}\right)\boldsymbol{g}\left(\boldsymbol{x}^{(t)}\right)$

牛顿法求解目标函数极值

- 1. 从$t=0$开始，初始化$\boldsymbol{x}^{(0)}$为随机值；
- 2. 计算目标函数$f(\boldsymbol{x})$在点$\boldsymbol{x}^{(t)}$的梯度$\boldsymbol{g}^{(t)}=\nabla f\left(\boldsymbol{x}^{(t)}\right)$和海森矩阵$\boldsymbol{H}^{(t)}=\boldsymbol{H}\left(\boldsymbol{x}^{(t)}\right)$；
- 3. 计算移动方向：$\boldsymbol{d}^{(t)}=(\boldsymbol{H}^{(t)})^{-1}\boldsymbol{g}^{(t)}$（一般用线性方程组计算$\boldsymbol{d}^{(t)}$：$\boldsymbol{H}^{(t)}\boldsymbol{d}^{(t)}=\boldsymbol{g}^{(t)}$。线性方程组求解可用共轭梯度等方法求解）；
- 4. 根据迭代公式，更新$\boldsymbol{x}$的值：$\boldsymbol{x}^{(t+1)}=\boldsymbol{x}^{(t)}-\boldsymbol{d}^{(t)}$；
- 5. 判断是否满足迭代终止条件。如果满足，循环结束，返回最佳参数$\boldsymbol{x}^{(t+1)}$和目标函数极小值$f\left(\boldsymbol{x}^{(t+1)}\right)$；否则转到第2步。

一阶梯度法：$\boldsymbol{d}^{(t)}=-\eta\boldsymbol{g}^{(t)}$

二阶牛顿法：$\boldsymbol{d}^{(t)}=-(\boldsymbol{H}^{(t)})^{-1}\boldsymbol{g}^{(t)}$

拟牛顿法

- 牛顿法比一般的梯度下降法收敛速度快。
- 但在高维情况下，计算目标函数的二阶偏导数的复杂度高，而且有时候目标函数的海森矩阵无法保持正定，不存在逆矩阵，此时牛顿法将不再能使用。
- 因此人们提出了拟牛顿法：不用二阶偏导数构造出可以近似Hessian矩阵(或Hessian矩阵的逆矩阵)的正定对称矩阵，进而再逐步优化目标函数。
- 不同的Hessian矩阵构造方法产生了不同的拟牛顿法
  - BFGS / L-BFGS

推荐阅读：
1.谈谈常见的迭代优化方法
https://blog.csdn.net/aws3217150/article/details/50548177
2. Mathematical optimization: finding minima of functions
https://www.scipy-lectures.org/advanced/mathematical_optimization/

Logistic回归的牛顿求解：IRLS

- 损失函数和的梯度为：$g(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})$
- Hessian矩阵为：$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{X}$
- 迭代公式:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w}^{(t+1)} &= \boldsymbol{w}^{(t)} - \left(\boldsymbol{H}\left(\boldsymbol{w}^{(t)}\right)\right)^{-1} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{w}) \\
&= \boldsymbol{w}^{(t)} - \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y}) \\
&= \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\left[\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^{(t)} - \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})\right] \\
&= \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\left[\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^{(t)} - \left(\boldsymbol{S}^{(t)}\right)^{-1}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})\right] \\
&= \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{z}^{(t)}
\end{aligned}$$

$\boldsymbol{z}^{(t)} \triangleq \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^{(t)} - \left(\boldsymbol{S}^{(t)}\right)^{-1}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{y})$

Iteratively Reweighted least Squares

最小二乘： $\hat{\boldsymbol{w}}_{OLS} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$

加权最小二乘（每个样本的权重为$s_i^{-1/2}$）： $\hat{\boldsymbol{w}}_{OLS\_weight} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$

Logistic回归的牛顿求解：IRLS

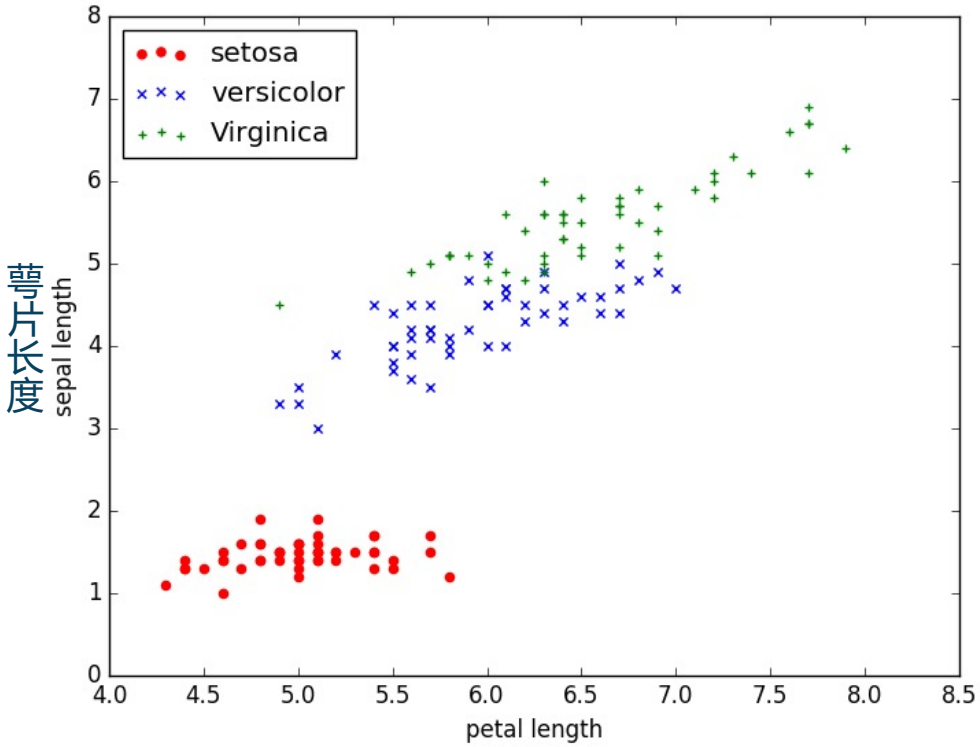
- 初始值：$\boldsymbol{w}^{(0)} =$
- IRLS代入迭代公式为：$\boldsymbol{w}^{(t+1)} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{(t)}\boldsymbol{z}^{(t)}$
- 加权最小二乘又通过共轭梯度法求解，因此Scikit-Learn中的采用牛顿法求解的算法取名为“Newton-CG”。

Outline

- 对数几率回归
- 对数几率回归的损失函数
- 对数几率回归的优化算法
- **多类分类任务的对数几率回归**
- 分类任务中的样本不均衡问题
- 分类模型的评价指标
- Logistic回归案例分析

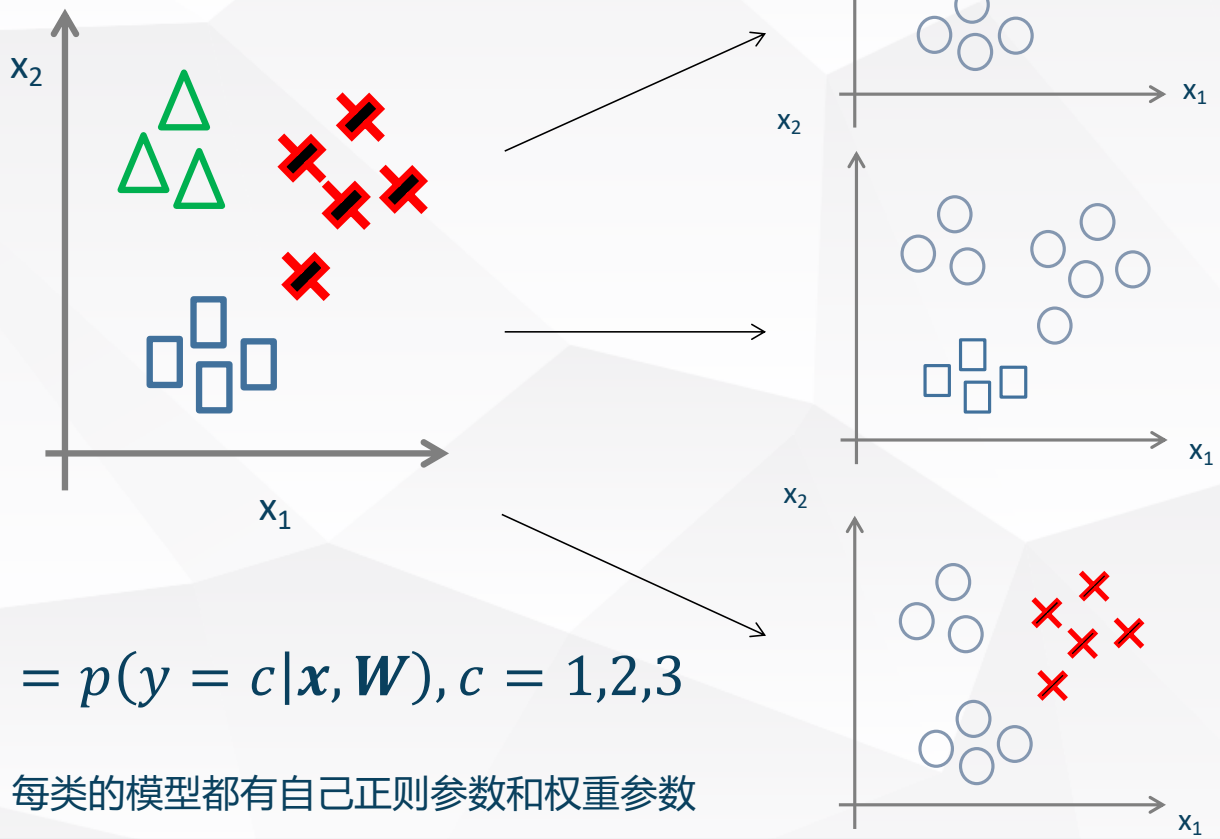
多类分类任务

- 例：Iris花分类中，一共有3种鸢尾花



1 vs. 其他

■一对其他(One-vs-Rest，OvR)



$$f_w^c(\boldsymbol{x}) = p(y = c|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{W}), c = 1,2,3$$

每类的模型都有自己正则参数和权重参数

1 vs. 其他

- 对每个类别c，训练一个对数几率回归分类器$f_{\boldsymbol{w}}^{c}(\boldsymbol{x})$，预测$y = c$概率

- 对新的输入$\boldsymbol{x}$，选择使得$f_{\boldsymbol{w}}^{c}(\boldsymbol{x})$最大的类别作为预测（最大后验估计，MAP）

$$\hat{y} = \underset{c}{\operatorname{argmax}} f_{\boldsymbol{w}}^{c}(\boldsymbol{x})$$

多项分布直接实现多类分类

- 贝努利（Bernoulli）分布的输出只有两种取值。
- Multinoulli分布，或称为范畴分布(categorical distribution)，输出有K种取值。
- 类似用Bernoulli分布描述两类分类的概率分布，可用Multinoulli分布描述多类分类的概率分布，其参数为向量$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_C)$，其中$\sum_{c=1}^{C} \theta_c = 1$，其中每一个分量$\theta_c$表示第$c$个状态的概率。我们用符号$Cat(y; \boldsymbol{\theta})$表示

- 注意：
- Multinoulli是个人造词，经典概率书并没有将其作为一种概率分布单独表示，而是用多项（Multinomial）分布统称（Scikit-Learn采用的是Multinoulli ）。有些参考书种称其为广义Bernoulli分布，或离散分布。
- 多重贝努利试验成功次数输出用二项（ Binnomial）分布表示
- 多重Multinoulli（如掷骰子）的输出用多项（ Multinomial ）分布表示： Multinoulli 是多项 Multi+oulli（Bernoulli的后几个字母）

- 将类别y用独热编码（编码为C维向量，当$y = c$时，第c维为1，其他元素均为0），记为向量$\boldsymbol{y}$
- 则Multinoulli分布的概率函数为：$Cat(\boldsymbol{y}; \boldsymbol{\theta}) = \prod_{c=1}^{C} \theta_c^{y_c}$，
- 其中y_c表示向量$\boldsymbol{y}$的第c个元素。

- 或者用标量形式记为：$Cat(y; \boldsymbol{\theta}) = \prod_{c=1}^{C} \theta_c^{I(y=c)}$，
- 其中 $I(.)$ 为示性函数，当括号中条件满足时函数值为1，否则为0。

- 类似两类分类模型推导，假设输出$y = c$的概率可以由$\mathbf{x}$的线性组合再经过sigmoid函数变换得到

$$p(y = c|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{W}) = \frac{\exp\left(\boldsymbol{w}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}{\sum_{c'=1}^{C}\exp\left(\boldsymbol{w}_{c'}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}$$

- 上述等式右边为Softmax函数。Softmax函数为sigmoid函数的推广，将C维向量的每个元素转换为$[0,1]$的数，且变换后元素之和为1：

$$\sigma(z_c) = \frac{e^{z_c}}{\sum_{c'=1}^{C} e^{z_{c'}}}$$

- 因此得到的分类器被称为Softmax分类器。

- 将类别y用独热编码为向量$\boldsymbol{y}$：$y_c = I(y = c)$
- 向量$\boldsymbol{\mu}$表示Multinoulli分布的参数：

$$\mu_c = p(y = c|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{W}) = \frac{\exp\left(\boldsymbol{w}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}{\sum_{c'=1}^{C}\exp\left(\boldsymbol{w}_{c'}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}$$

- 令$\mu_{i,c} = \frac{\exp\left(\boldsymbol{w}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i\right)}{\sum_{c'=1}^{C}\exp\left(\boldsymbol{w}_{c'}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i\right)}$，$y_{i,c}$为第$i$个样本的类别，则Softmax分类模型的log似然函数为：

$$\ell(\boldsymbol{W}) = \sum_{i=1}^{N}\ln\left(\prod_{c=1}^{C}\mu_{i,c}^{y_{i,c}}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N}\sum_{c=1}^{C}y_{i,c}\ln(\mu_{i,c})$$

$$Cat(\boldsymbol{y};\boldsymbol{\theta}) = \prod_{c=1}^{C}\theta_c^{y_c}$$

损失函数

■定义Softmax损失为负log似然：

$$L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{y}) = -\sum_{c=1}^{C} y_c \ln(\mu_c)$$

■则极大似然估计等价于最小训练集上的Softmax损失/负log似然损失:

$$J(\mathbf{W}) = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{c=1}^{C} y_{i,c} \ln(\mu_{i,c})$$

$$= -\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{c=1}^{C} y_{i,c}\mathbf{w}_c^T\mathbf{x}\left(-log\left(\sum_{c'=1}^{C}\exp(\mathbf{w}_{c'}^T\mathbf{x})\right)\right)\right)$$

$$\mu_c = p(y = c|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{W}) = \frac{\exp(\boldsymbol{w}_c^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}{\sum_{c'=1}^{C}\exp(\boldsymbol{w}_{c'}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})}$$

Scikit-Learn中实现Logistic回归的类

class sklearn.linear_model.LogisticRegression(*penalty='l2'*, *dual=False*, *tol=0.0001*, *C=1.0*, *fit_intercept=True*, *intercept_scaling=1*, *class_weight=None*, *random_state=None*, *solver='liblinear'*, *max_iter=100*, *multi_class='ovr'*, *verbose=0*, *warm_start=False*, *n_jobs=1*)

- 参数multi_class决定了多类分类的实现方式，可选：

a) 'ovr' ：即1对其他（one-vs-rest，OvR），将多类分类转化为多个二类分类任务。为了完成第*c*类的分类决策，将所有第*c*类的样本作为正例，除了第*c*类样本以外的所有样本都作为负例，每个类别的二分类器单独训练。
b) 'multinomial' ：Softmax回归分类，对多项分布概率整体进行训练。

注意：multi_class选择会影响优化算法solver参数的选择
OvR：可用所有的slover
Multinomial： 只能选择newton-cg, lbfgs和sag / saga（liblinear不支持）

Outline

- 对数几率c回归
- 对数几率回归的损失函数
- 对数几率c回归的优化算法
- 多类分类任务的对数几率回归
- **分类任务中的样本不均衡问题**
- 分类模型的评价指标
- 对数几率c回归案例分析

不平衡数据的出现场景

- 搜索引擎的点击预测：点击的网页往往占据很小的比例
- 电子商务领域的商品推荐：推荐的商品被购买的比例很低
- 信用卡欺诈检测
- 网络攻击识别
- 医疗中得病的案例少

解决方案

- 从数据的角度：抽样，从而使得不同类别的数据相对均衡
- 从算法的角度：考虑不同误分类情况代价的差异性对算法进行优化

抽样

- 随机下抽样：从多数类中随机选择少量样本再合并原有少数类样本作为新的训练数据集
  - 有放回抽样
  - 无放回抽样
  - 会造成一些信息缺失，选取的样本可能有偏差
- 随机上抽样：随机复制少数类样本
  - 扩大数据集，造成模型训练复杂度加大，另一方面也容易造成模型的过拟合

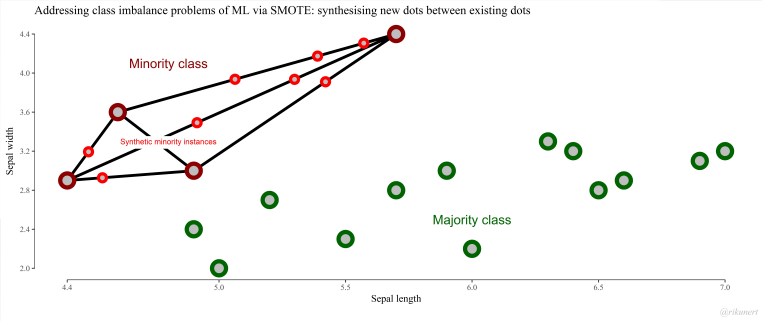
下采样与集成学习

- EasyEnsemble算法
  - 对于多数类样本，通过n次有放回抽样生成n份子集
  - 少数类样本分别和这n份样本合并训练一个模型：n个模型
  - 最终模型：n个模型预测结果的平均值

- BalanceCascade（级联）算法
  - 从多数类中有效地选择一些样本与少数类样本合并为新的数据集进行训练
  - 训练好的模型每个多数类样本进行预测。若预测正确，则不考虑将其作为下一轮的训练样本
  - 依次迭代直到满足某一停止条件，最终的模型是多次迭代模型的组合

上采样与样本合成

- SMOTE（Synthetic Minority Over-sampling Technique）：基于“插值”为少数类合成新的样本
- 对少数类的一个样本i，其特征向量为$\mathbf{x}_i$
  - 1. 从少数类的全部N 个样本中找到样本$\mathbf{x}_i$的K个近邻（如欧氏距离），记为$\mathbf{x}_{i(near)}, near \in \{1, \ldots, K\}$
  - 2. 从这K个近邻中随机选择一个样本$\mathbf{x}_{i(nn)}$，再生成一个 0到 1之间的随机数ζ，从而合成一个新样本：$\mathbf{x}_{i1} = (1-\zeta)\mathbf{x}_i + \zeta\mathbf{x}_{i(near)}$。



http://rikunert.com/SMOTE_explained

Nitesh V. Chawla, Kevin W. Bowyer, Lawrence O. Hall, W. Philip Kegelmeyer. SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique. Journal of Artificial Intelligence Research 16 (2002), 321 -- 357
https://jair.org/index.php/jair/article/view/10302/24590

SMOTE

- SMOTE算法摒弃了随机过采样复制样本的做法，可以防止随机过采样易过拟合的问题。实践证明此方法可以提高分类器的性能。
- SMOTE对高维数据不是很有效。
- 当生成合成性实例时，SMOTE并不会把来自其他类的相邻实例考虑进来，这导致了类重叠的增加，并会引入额外的噪音。
- 为了解决SMOTE算法的这一缺点提出一些改进算法，如Borderline-SMOTE算法。

https://github.com/scikit-learn-contrib/imbalanced-learn

代价敏感学习

- 在算法层面上解决不平衡数据学习的方法主要是基于代价敏感学习算法(Cost-Sensitive Learning)。
- 代价敏感学习方法的核心要素是代价矩阵：不同类型的误分类情况导致的代价不一样。

$\hat{y}$ \ y	0	1
0	L_{00}	L_{01}
1	L_{10}	L_{10}

代价敏感学习

- 基于代价矩阵分析，代价敏感学习方法主要有以下三种实现方式
  - 从贝叶斯风险理论出发，把代价敏感学习看成是分类结果的一种后处理，按照传统方法学习到一个模型，以实现损失最小为目标对结果进行调整
    - 不依赖所用具体的分类器
    - 缺点：要求分类器输出值为概率
  - 从学习模型出发，对具体学习方法的改造，使之能适应不平衡数据下的学习
    - 如：代价敏感的支持向量机，决策树，神经网络
  - 从预处理的角度出发，将代价用于权重的调整，使得分类器满足代价敏感的特性
    - 如不同类别的样本的权值不同

Scikit-Learn中的不均衡样本分类处理

- 类别权重class_weight
- 样本权重sample_weight

类别权重class_weight

- class_weight参数用于标示分类模型中各类别样本的权重
- 1. 不考虑权重，即所有类别的权重相同
- 2. balanced：自动计算类别权重
  - 某类别的样本量越多，其权重越低；样本量越少，则权重越高
  - 类权重计算方法为：n_samples / (n_classes * np.bincount(*y*))：n_samples为样本数，n_classes为类别数量，np.bincount(*y*)输出每个类的样本数
- 3. 手动指定各个类别的权重
  - 如对于0,1二类分类问题，可以定义class_weight={0:0.9, 1:0.1}，即类别0的权重为90%，而类别1的权重为10%

样本权重sample_weight

- 模型训练：fit(*X, y, sample_weight=None*)
  - 其中参数sample_weight为样本权重参数
- 如果既用了class_weight，又用了sample_weight，那么样本的真正权重是：class_weight*sample_weight

- 判断一个分类器对所用样本的分类能力或者在不同的应用场合时，需要有不同的指标。
- Scikit-Learn中，评价指标计算可对每个样本施加权重，权重通过参数sample_weight指定。

Outline

- 对数几率回归
- 对数几率回归的损失函数
- 对数几率回归的优化算法
- 多类分类任务的对数几率回归
- 分类任务中的样本不均衡问题
- **分类模型的评价指标**
- 对数几率回归案例分析

分类模型的评价指标

■1. 正确率：Sklearn中分类任务的默认评价指标

$$\text{Accuracy}(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{\text{N}} I(\hat{y}_i = y_i)$$

- 其中$I(.)$为示性函数，当括号中条件满足时函数值为1，否则为0

■2. 负log似然损失（交叉熵损失）

$$\text{logloss}(\hat{\boldsymbol{Y}}, \boldsymbol{Y}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{c=1}^{C} y_{i,c} \ln(\hat{y}_{i,c})$$

分类模型的评价指标

■3. 合页损失（SVM中的损失函数）

$$\text{HingeLoss}(\hat{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{y}) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{\text{N}} \max(1, \hat{y}_i y_i)$$

分类模型的评价指标

■混淆矩阵：对C类分类问题，混淆矩阵为$C \times C$的矩阵

例：手写数字识别的混淆矩阵

真值

```
[[87  0  0  0  1  0  0  0  0  0]
 [ 0 88  1  0  0  0  0  0  1  1]
 [ 0  0 85  1  0  0  0  0  0  0]
 [ 0  0  0 79  0  3  0  4  5  0]
 [ 0  0  0  0 88  0  0  0  0  4]
 [ 0  0  0  0  0 88  1  0  0  2]
 [ 0  1  0  0  0  0 90  0  0  0]
 [ 0  0  0  0  0  1  0 88  0  0]
 [ 0  0  0  0  0  0  0  0 88  0]
 [ 0  0  0  1  0  1  0  0  0 90]]
```

预测值

矩阵的第i行第j列的元素值表示将真实类别标签为i类的样本预测为第j类的样本数目。

对角线元素越大越好。

两类分类任务的评价指标

■混淆矩阵

预测值

y	$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	Σ
$y=1$	TP	FN	N_+
$y=0$	FP	TN	N_-
Σ	$\hat{N}_+$	$\hat{N}_-$	

真值

$$\text{Precison} = \frac{TP}{\hat{N}_+}$$

精准率/查准率：在所有被预测为正的样本中实际为正的样本的比例
正样本结果中的预测准确程度

$$\text{Recall} = \frac{TP}{N_+}$$

召回率/查全率: 在实际为正的样本中被预测为正样本的比例
TPR (True Positive Rate)

$$\text{FPR} = \frac{TP}{N_-}$$

假阳率: 在实际为负的样本中被预测为正样本的比例
FPR (False Positive Rate)

注意：准确率和召回率是互相影响的。一般情况下准确率高、召回率就低；召回率低、准确率高。

两类分类任务的评价指标

■混淆矩阵

预测值

y	$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	Σ
$y=1$	TP	FN	N_+
$y=0$	FP	TN	N_-
Σ	$\hat{N}_+$	$\hat{N}_-$	

真值

$$\text{Precison} = \frac{TP}{\hat{N}_+}$$

精准率/查准率：在所有被预测为正的样本中实际为正的样本的比例
正样本结果中的预测准确程度

$$\text{Recall} = \frac{TP}{N_+}$$

召回率/查全率: 在实际为正的样本中被预测为正样本的的比例 TPR
（True Positive Rate）

$$F1 = \frac{2(\text{Precison} \times \text{Recall})}{\text{Precison} + \text{Recall}}$$

F1分数： Precision 和Recall调和平均值

两类分类任务的评价指标

■混淆矩阵

预测值

y	$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	Σ
$y=1$	TP	FN	N_+
$y=0$	FP	TN	N_-
Σ $\hat{N}_+$	$\hat{N}_+$	$\hat{N}_-$	

真值

PR曲线

精准率：预测结果为真的样本中真正为真的比例

$$\text{Precison} = \frac{TP}{\hat{N}_+}$$

召回率：预测结果召回了多少真正的真样本；
真阳率：有多少真正的正样本被预测为真

$$\text{TPR} = \text{Recall} = \frac{TP}{N_+}$$

假阳率：预测结果将多少假的样本预测预测成了真

$$\text{FPR} = \frac{FP}{N_-}$$

ROC曲线

两类分类任务的评价指标

- Matthews相关性系数用一个值综合混淆矩阵，度量真实值和预测值之间的相关性，定义为

$$\mathrm{MCC} = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$

- 分母中任意一对括号相加之和如果为0，那么整个MCC的值就为0。
- MCC值在[-1,1]之间
  - 1：完美分类器
  - 0：随机分类器
  - -1: 分类器是最差，所有预测结果和实际相反

真值

预测值

y	$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	Σ
$y=1$	TP	FN	N_+
$y=0$	FP	TN	N_-
Σ $\hat{N}_+$	$\hat{N}_+$	$\hat{N}_-$	

例：垃圾邮件分类

- 假如我们有100封测试邮件，其中50封为垃圾50封为非垃圾，某分类器的预测结果：TP=40封，TN=40封，FP = 10封，FN = 10封

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN} = 0.8$$

$$\text{Precison} = \frac{TP}{TP + FP} = 0.8\ ,\ \text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} = 0.8$$

$$F1 = \frac{2(\text{Precison} \times \text{Recall})}{(\text{Precison} + \text{Recall})} = 0.8$$

$$\text{MCC} = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}} = 0.6$$

例：垃圾邮件分类

- 还是100封测试邮件，其中垃圾邮件为98封，非垃圾邮件为2封（分布不均衡）。
- 假设如果有一个傻傻的分类器，永远只做出垃圾邮件判断，那么TP=98，TN=0，FN=0，FP=2

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN} = 0.98$$

$$\text{Precison} = \frac{TP}{TP + FP} = 0.98，\ \text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} = 1$$

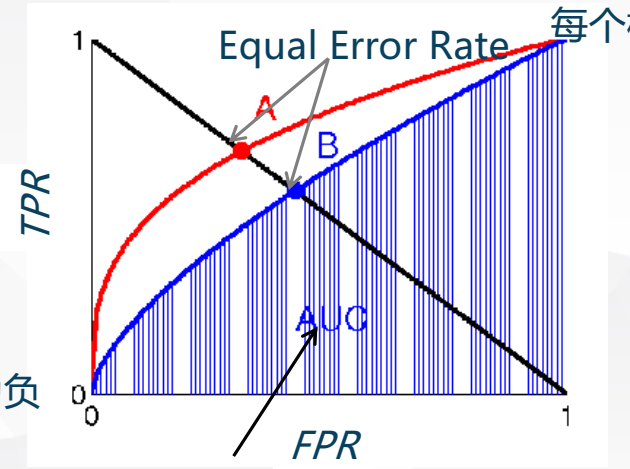
$$F1 = \frac{2(\text{Precison} \times \text{Recall})}{(\text{Precison} + \text{Recall})} = 0.989$$

$$\text{MCC} = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}} = 0$$

随机分类器

Receiver Operating Characteristic (ROC)曲线

- 上面我们讨论给定阈值τ的TPR（真阳率）和FPR（假阳率）。
- 如果不是只考虑一个阈值，而是在一些列阈值上运行检测器，并画出TPR和FPR为阈值τ的隐式函数，得到ROC曲线。



每个样本都被判断为正

每个样本都被判断为负

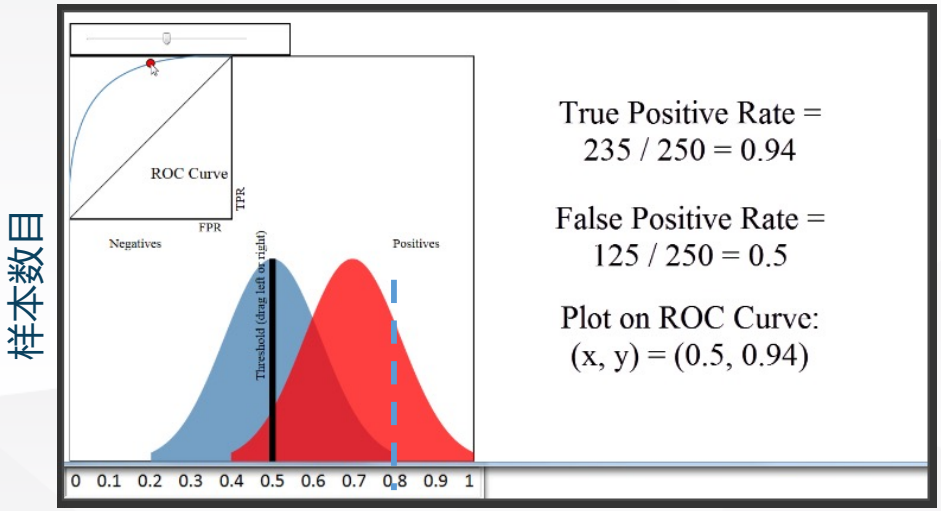
$$TPR = \frac{TP}{N_+}$$

$$FPR = \frac{FP}{N_-}$$

Area Under Curve (AUC)

例：ROC曲线

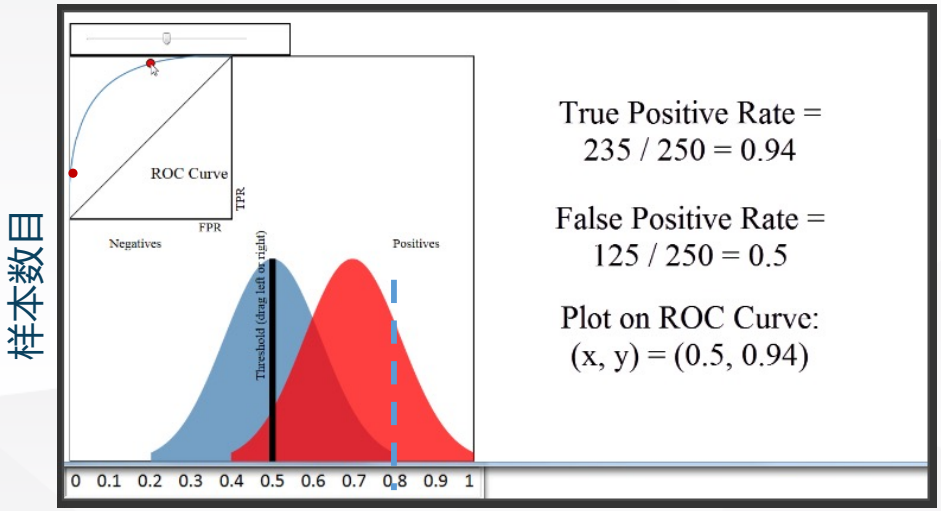
- 例：根据文章特征x（文章长度、作者的数目、作者之前投递给该杂志的文章数据、…），判断该文章是否会杂志被接收。
- 测试样本数目：500，其中250篇被接收（红色），250被拒绝（蓝色）。
- 现有一个分类器1，给定文章特征，输出该文章被接收的概率。下图为分类器1输出的被接收概率概率对应的正样本数目和负样本数目



- 假设取阈值为概率阈值0.5: 判断140篇文章被拒绝，360篇文章被接收。线右边共有235个红色样本被正确接收，125个蓝色样本被错误接收。$\mathrm{TPR}=\frac{235}{250}=0.94$，$\mathrm{FPR}=\frac{125}{250}=0.5$，对应ROC曲线上的点$(x,y)=(0.5，0.94)$。

例：ROC曲线

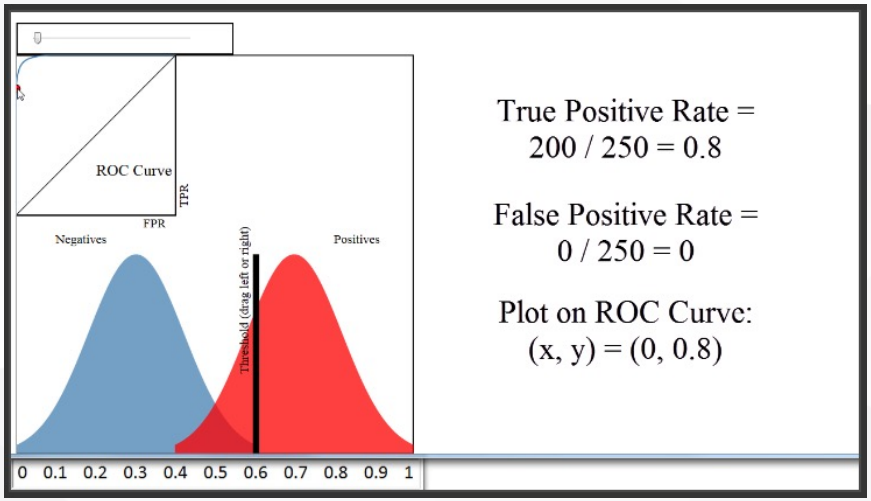
- 例：根据文章特征x（文章长度、作者的数目、作者之前投递给该杂志的文章数据、…），判断该文章是否会杂志被接收。
- 测试样本数目：500，其中250篇被接收（红色），250被拒绝（蓝色）。
- 现有一个分类器1，给定文章特征，输出该文章被接收的概率。下图为分类器1输出的被接收概率概率对应的正样本数目和负样本数目



- 假设取阈值为概率阈值0.8: 判断50篇文章被接收，450篇被拒绝。线的右边有50个红色被正确接收，线的右边有0个蓝色样本被错误接收，$\mathrm{TPR}=\frac{50}{250}$，$\mathrm{FPR}=0$，对应ROC曲线上的点$(x,y)=(0,0.2)$。
- …

例：ROC曲线

- 例：根据文章特征x（文章长度、作者的数目、作者之前投递给该杂志的文章数据、…），判断该文章是否会杂志被接收。
- 测试样本数目：500，其中250篇被接收（红色），250被拒绝（蓝色）。
- 现有一个分类器2，给定文章特征，输出该文章被接收的概率。下图为分类器2输出的被接收概率对应的正样本数目和负样本数



样本数目

文章被接收的概率

- 假设取阈值为概率阈值0.6: 线的右边有200个红色样本，线的右边有0个蓝色样本，$\mathrm{TPR} = \frac{200}{250} = 0.8$，$\mathrm{FPR} = 0$，对应ROC曲线上的点$(x, y) = (0, 0.8)$。
- …

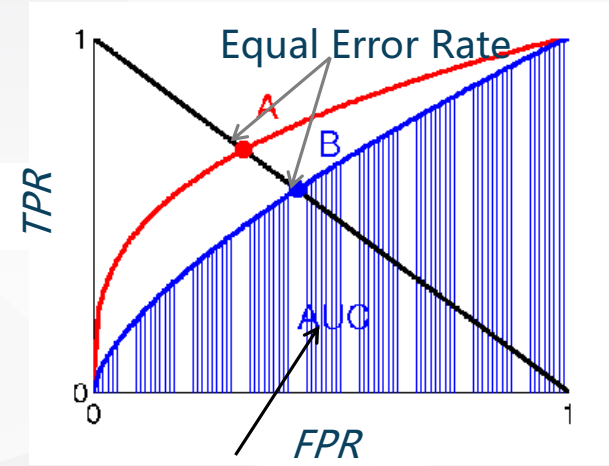
From： https://www.dataschool.io/roc-curves-and-auc-explained/

ROC曲线

- ROC曲线越偏左上角表示分类器性能越好
- AUC（Area Under Curve）：ROC曲线下的面积，取值在[0.5,1.0]， 0.5表示随机猜测分类器，1表示完美分类

$$TPR = \frac{TP}{N_+}$$

$$FPR = \frac{FP}{N_-}$$



Area Under Curve (AUC)

TPR和FPR是针对单一类别的预测结果而言的。
例：假设总样本中，90%是正样本，10%是负样本
TPR只关注90%正样本中有多少被预测正确，与10%负样本无关；
FPR只关注10%负样本中有多少被预测错误，与90%正样本无关。

ROC曲线：对整体样本是否均衡并不敏感。

https://zhuanlan.zhihu.com/p/258596465

Precision and Recall (PR)曲线

- PR（ Precision and Recall ）曲线：用于稀有事件检测，如目标检测、信息检索、推荐系统
- 负样本非常多（$N_$很大），因此$FPR = FP/N_$很小，比较TPR和FPR没有太大意义（ROC曲线中只有左边很小一部分有意义）→只讨论正样本。

- Precision（精准率，查准率）：预测结果为真的样本中真正为真的比例。
- Recall（召回率，查全率）：预测结果召回了多少真正的真样本。

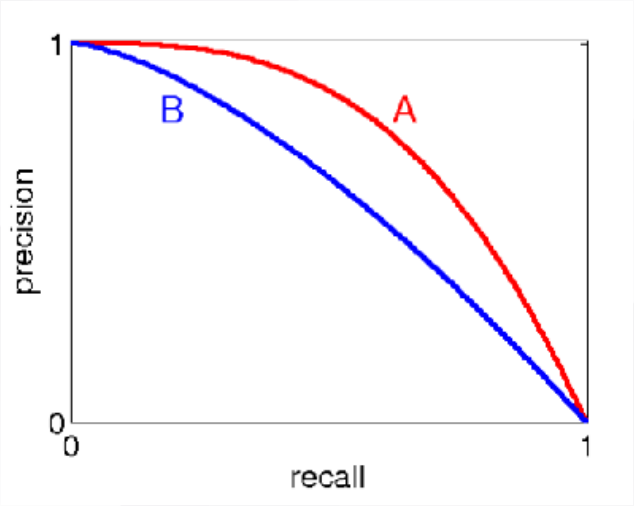
Precision and Recall (PR)曲线

■PR曲线：阈值变化时的Precision和Recall

Precision: the fraction of our detection are actually positive
Recall: the fraction of the positives we actually detected

$\text{Precison} = \frac{TP}{\widehat{N}_+}$ ：检测结果真正为正的比例

$\text{Recall} = \frac{TP}{N_+}$ ：被正确检测到的正样本的比例



注意：精准率和召回率是互相影响的。一般情况下精准率高、召回率就低；召回率低、精准率高。

AP：Average Precision

- Precision只考虑了返回结果中相关文档的数目，没有考虑文档之间的顺序。
- 对一个搜索引擎或推荐系统而言，返回的结果是有序的，且越相关的文档越靠前越好，于是有了AP（ Average Precision ）的概念。
- AP: 对不同召回率点上的精准率进行平均

$$AP = \int_0^1 P(R)dR = \sum_{k=0}^{n} P(k)\Delta R(k)$$

- 即PR曲线下的面积（Recall： AUC为ROC下的面积）。

mAP：Mean AP

- 平均AP（Mean Average Percision, mAP）：多个AP的平均。
- 如：物体检测中经常用mAP评价模型性能：多个物体类别的AP的平均

Scikit-Learn中分类模型性能评价

- 类似回归模型的性能评价，Scikit-Learn中对分类模型性能评价提供3 不同的 API
  - estimator的score方法：每个学习器都有score方法，提供一个缺省的评估方法（分类为正确率）
  - Scoring参数：使用交叉验证评估模型的工具有Scoring 参数
  - Metric： metrics模块实现了一些函数，用来评估预测误差

多分类与多标签

- 多类（Multiclass）分类：相对于两类（binary）分类而言，标签y的取值有多种，如对水果进行分类，水果可能是橙子、苹果或梨。多类分类的假设是，每个样本被分配到一个和唯一一个标签：一个水果可以是苹果或梨，但不是同时两个。
- 多标签（Multilabel）分类：给每个样本分配一套目标标签，这些标签不相互排斥（类似物体属性，可以有多种属性）。例如与文档相关的主题，文本可能同时是关于宗教、政治、金融或教育的，或着不属于这些主题。

Scikit-Learn中metrics的分类模型评价指标

■只能用于两类分类

precision_recall_curve(y_true, probas_pred)	计算不同概率阈值对应的precision-recall对
roc_curve(y_true, y_score[, pos_label, ...])	计算收器操作特性(ROC)曲线

■亦可用于多类分类

cohen_kappa_score(y1, y2[, labels, weights, ...])	Kappa分数（Cohen‘s kappa）：衡量两种标注结果的吻合程度
confusion_matrix(y_true, y_pred[, labels, ...])	计算混淆矩阵
hinge_loss(y_true, pred_decision[, labels, ...])	平均合页损失（非正则的）
matthews_corrcoef(y_true, y_pred[, ...])	计算Matthews相关系数 (MCC)

■可用于多标签

accuracy_score(y_true, y_pred[, normalize, ...])	正确率
classification_report(y_true, y_pred[, ...])	创建一个包含主要分类评价指标的文本报告
f1_score(y_true, y_pred[, labels, ...])	F1分数
fbeta_score(y_true, y_pred, beta[, labels, ...])	F-beta 分数 $F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} \times \text{recall}}{\beta^2\text{precision} + \text{recall}}.$
hamming_loss(y_true, y_pred[, labels, ...])	平均Hamming损失
jaccard_similarity_score(y_true, y_pred[, ...])	Jaccard相似度分数
log_loss(y_true, y_pred[, eps, normalize, ...])	Logloss，logistic损失或交叉熵损失
precision_recall_fscore_support(y_true, y_pred)	计算每个类的precision, recall, F-measure and support
precision_score(y_true, y_pred[, labels, ...])	precision
recall_score(y_true, y_pred[, labels, ...])	recall
zero_one_loss(y_true, y_pred[, normalize, ...])	0/1分类损失

- 可用于两类和多标签场合（但不能用于多类场合）：

average_precision_score(y_true, y_score[, ...])	计算平均精度 (AP)
roc_auc_score(y_true, y_score[, average, ...])	计算ROC曲线下的面积 (AUC)

- 更多请见Scikit-Learn文档
  - http://scikit-learn.org/stable/modules/model_evaluation.html#classification-metrics

从两类分类到多类分类和多标签

- 好些评价指标（如 f1_score, roc_auc_score） 都是用于二分类任务。
- 将两类分类指标扩展到多类或多标签问题：在多类或多标签问题中，可将其视为多个两类分类问题的集合，每个类别一个
- 采用不同的平均方式（通过average参数指定），可将多个两类分类指标合并得到多类或多标签问题相应的评价指标：
  - 宏观“macro” ：每个类别（二分类）评价指标，再求平均，每个类别的权重相同，会放大少数类（样本数目较少的类的影响）
  - 微观“micro” ：对每个样本（不分类别）计算全局的评价指标，每个样本的权重相同。 多标签任务中首选，也可用于多类分类
  - 加权“weighted” ：计算每个类别的指标，每类的权重与该类样本数目有关，可处理不同类别样本数目不均衡问题

Scikit-Learn中的Scoring参数

Scoring	Function	Comment
Classification		
‘accuracy’	metrics.accuracy_score	
‘average_precision’	metrics.average_precision_score	
‘f1’	metrics.f1_score	for binary targets
‘f1_micro’	metrics.f1_score	micro-averaged
‘f1_macro’	metrics.f1_score	macro-averaged
‘f1_weighted’	metrics.f1_score	weighted average
‘f1_samples’	metrics.f1_score	by multilabel sample
‘neg_log_loss’	metrics.log_loss	requires predict_proba support
‘precision’ etc.	metrics.precision_score	suffixes apply as with ‘f1’
‘recall’ etc.	metrics.recall_score	suffixes apply as with ‘f1’
‘roc_auc’	metrics.roc_auc_score	

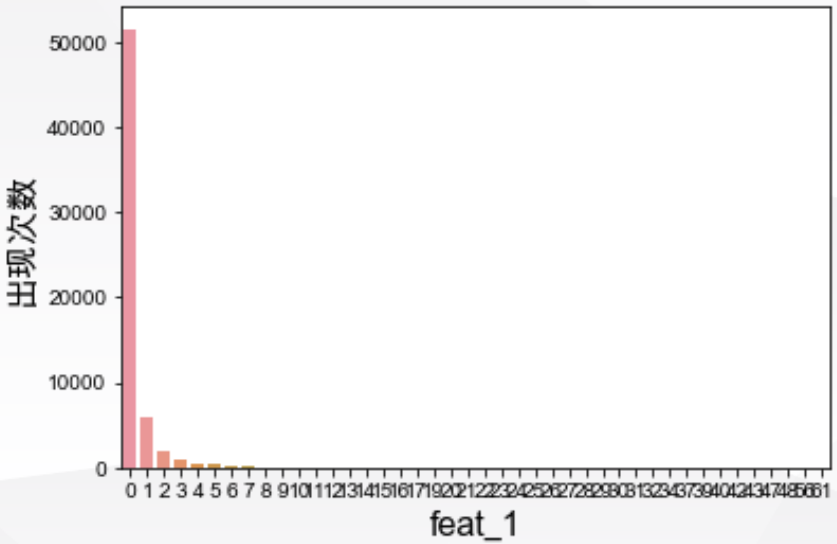
注意：scoring越大的模型性能越好，所以如果采用损失 / 误差，需要加neg，如 ‘neg_log_loss’

Outline

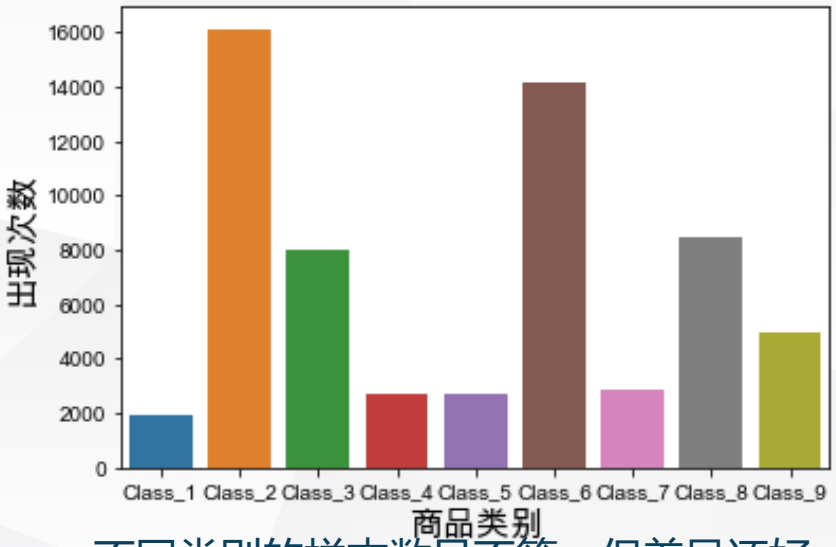
- 对数几率回归
- 对数几率回归的损失函数
- 对数几率回归的优化算法
- 多类分类任务的对数几率回归
- 分类任务中的样本不均衡问题
- 分类模型的评价指标
- 对数几率回归案例分析

Otto商品分类——数据分析

- 训练集 61,878个样本，测试集144,368个样本
  - 每个样本有93个数值型特征： 表示某种事件发生的次数
  - 标签：9种商品类别



特征稀疏：大部分样本的特征值为0



不同类别的样本数目不等，但差异还好（不少于0.1倍）

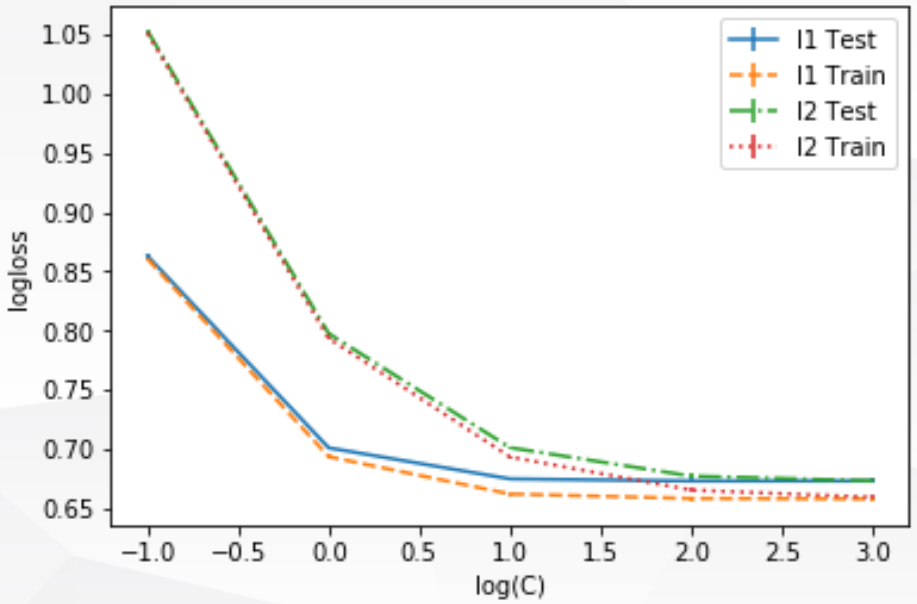
Otto商品分类——特征工程

- 特征均为数值型特征
  - 计数：可以考虑log变换
  - TF-IDF：事件计数可类比文档分类任务中的词频特征，可进一步更有判别力的（Term Frequency–Inverse Document Frequency，TF-IDF）
  - 标准化处理

Otto商品分类——模型选择

- 正则函数：L1正则、L2正则
- 正则超参数C
- GridSearchCV （3折交叉验证）
- 评价指标：logloss

3_Train_Test_Advertising.ipynb



可以看出在训练集上C越大（正则越少）的模型性能越好；
但在测试集上（交叉验证估计）当$C = 100$时性能最好（L1正则）

Otto商品分类——模型性能

- 测试数据上的性能

特征编码方案	分类性能（Logloss）
原始特征	0.66683
log特征编码	0.67317
TF-IDF特征	0.63319

对数几率回归在该任务上的性能并不好，
可能是该任务比较复杂，对数几率回归只是一个线性模型，
不足以处理这么复杂的任务

本章总结

- 对数几率回归
  - 函数集合：输入特征的线性组合
  - 目标函数
    - 损失函数： 交叉熵损失
    - 正则项：L2正则、L1正则
  - 优化方法：梯度下降、牛顿法
- Sklearn中的线性回归实现
  - LogisticRegression/ LogisticRegressionCV
  - SGDClasscification
- 分类模型评价指标
- 类别不均衡的分类