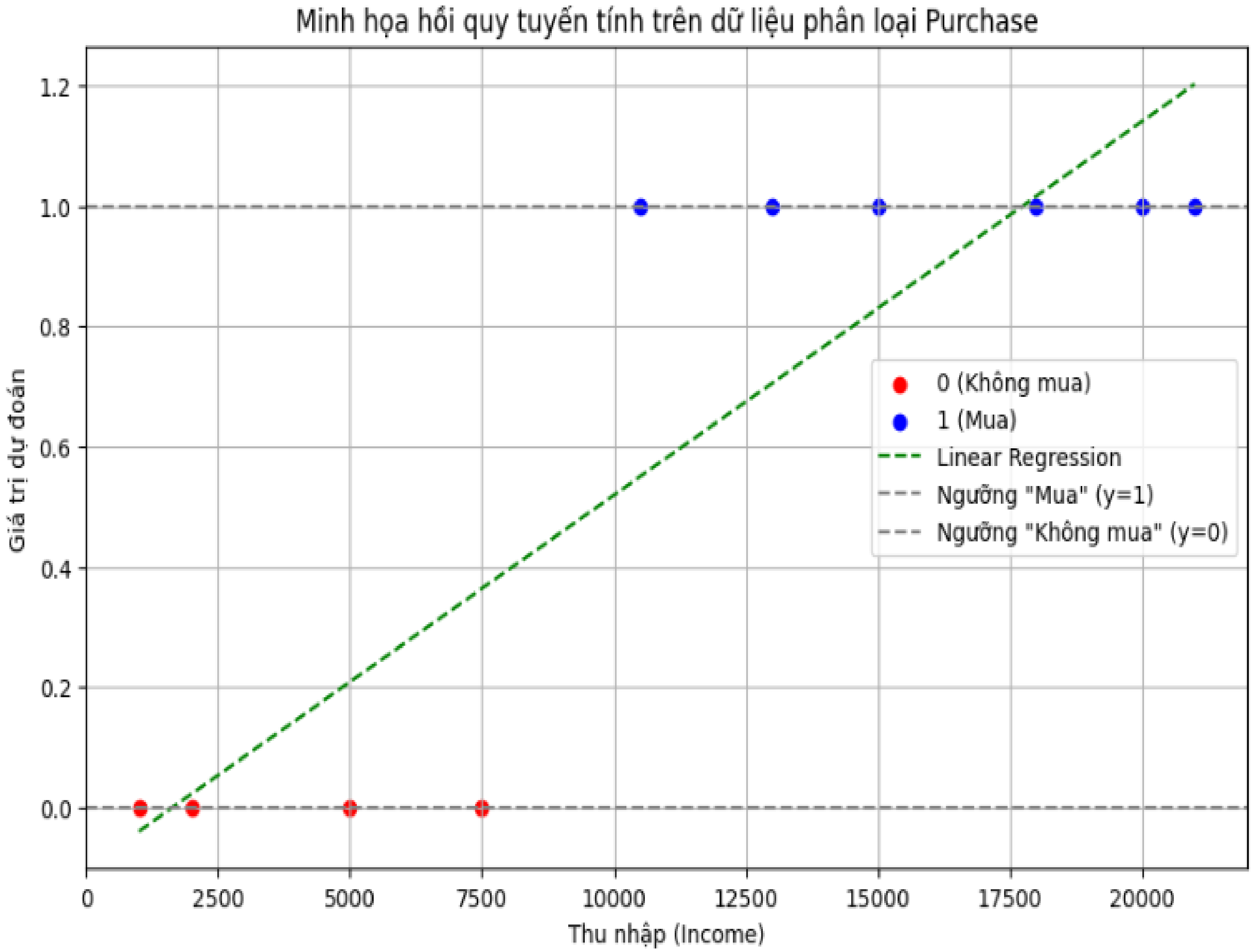
LOGISTIC REGRESSION

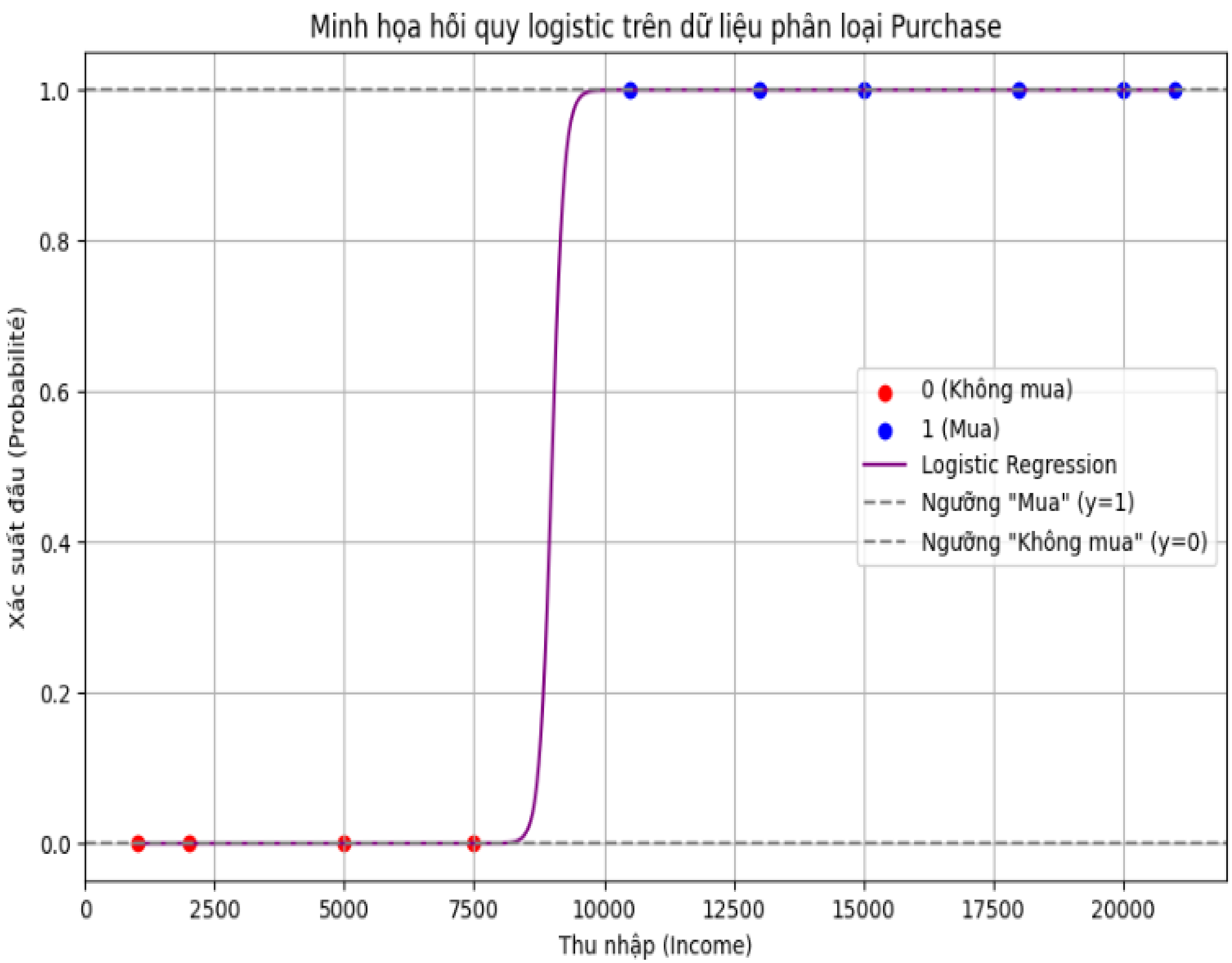
Giới thiệu

Income	Purchase
3000	0
5000	0
7000	0
9000	0
11000	1
13000	1
15000	1
17000	1
19000	1
21000	1
10800	???



Giới thiệu

Income	Purchase
3000	0
5000	0
7000	0
9000	0
11000	1
13000	1
15000	1
17000	1
19000	1
21000	1
10800	???



Phân loại nhị phân

- Phân loại nhị phân:
  - Một bài toán học máy nhằm dự đoán đầu ra thuộc về một trong hai nhóm, thường được gán nhãn là 0 hoặc 1.
- Logistic Regression:
  - Mô hình học máy dùng cho bài toán phân loại nhị phân. Mô hình này dự đoán xác suất một đối tượng thuộc về 1 lớp

Income	Purchase
3000	0
5000	0
7000	0
9000	0
11000	1
13000	1
15000	1
17000	1
19000	1
21000	1
10800	???

Hàm Sigmoid (Hàm Logistic)

- Hàm Logistic:
  - Một hàm số thuộc họ Sigmoid
  - Một hàm số có đồ thị hình chữ S dùng để ”nén“ một số thực bất kỳ, ví dụ như đầu ra của Linear Regression, vào khoảng từ 0 đến 1.
- Công thức:

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

Trong đó: z là đầu ra của hàm tuyến tính

$z = wx + b$

Income	Purchase
3000	0
5000	0
7000	0
9000	0
11000	1
13000	1
15000	1
17000	1
19000	1
21000	1
10800	???

Quy trình thực hiện

- Bước 1: Khởi tạo w, b, LR, …
- Bước 2: Duyệt qua từng epoch:
  - Duyệt qua từng dòng dữ liệu:
    - Tính giá trị dự đoán:
      - Tính đầu vào tuyến tính: $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
      - Tính xác suất dự đoán: $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
    - Tính hàm mất mát:

Hàm mất mát

- Có thể dùng hàm mất mát như mô hình Linear Regression không?

$$L(\widehat{y_i}, y_i) = (\widehat{y_i} - y_i)^2 = \left(\frac{1}{1 + e^{-z_i}} - y_i\right)^2$$

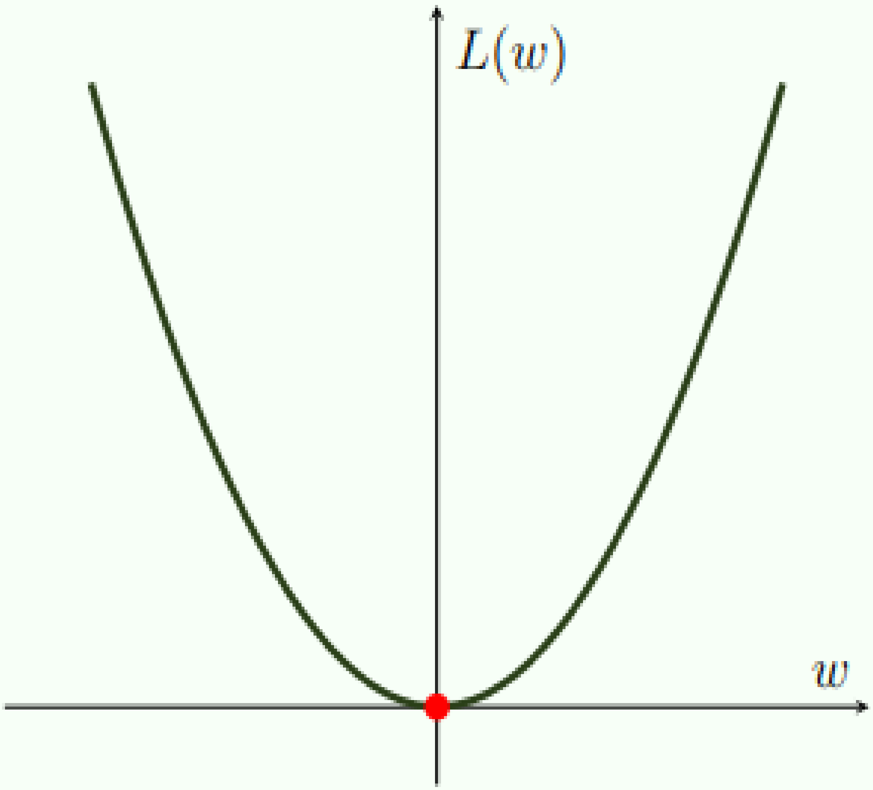
Hàm mất mát

- Có thể dùng hàm mất mát như mô hình Linear Regression không?

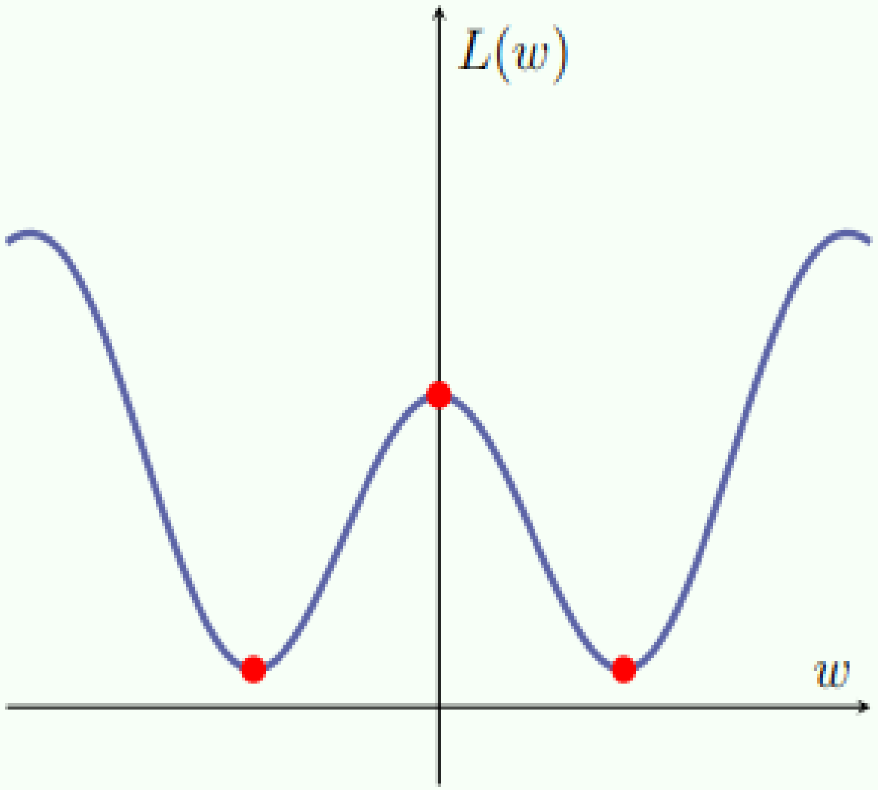
$$L(\widehat{y_i}, y_i) = (\widehat{y_i} - y_i)^2 = (\frac{1}{1+e^{-z_i}} - y_i)^2$$

- Không? Hàm Squared Error là một hàm lồi, nhưng khi kết hợp Hàm sigmoid và Squared Error thì nó không lồi

Hàm mất mát

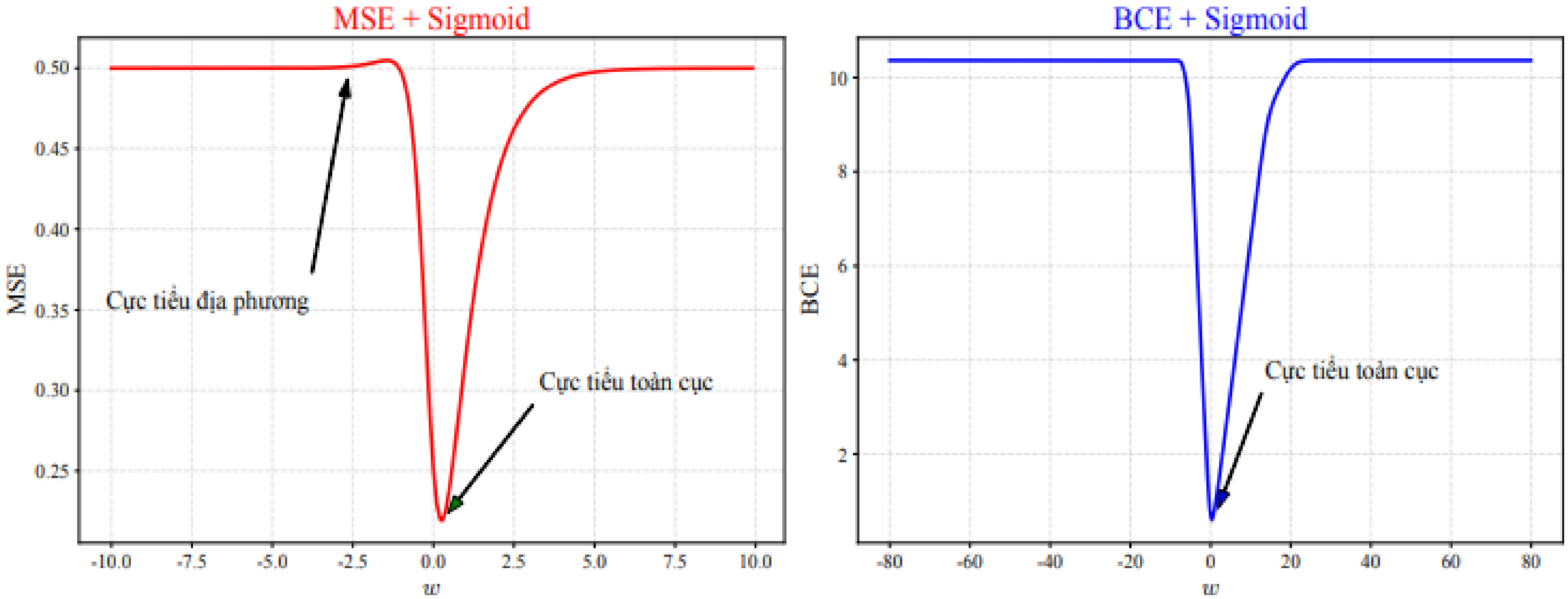


(a) Hàm lồi (Convex).



(b) Hàm không lồi (Non-convex).

Hàm mất mát



- hàm mất mát được thiết kế riêng cho bài toán phân loại xác suất, đó là Binary Cross-Entropy (BCE), hay còn gọi là Log Loss.

Quy trình thực hiện

- Bước 1: Khởi tạo w, b, LR, …
- Bước 2: Duyệt qua từng epoch:
    - Duyệt qua từng dòng dữ liệu:
        - Tính giá trị dự đoán:
            - Tính đầu vào tuyến tính: $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
            - Tính xác suất dự đoán: $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
        - Tính hàm mất mát: $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
        - Tính đạo hàm:

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Để áp dụng Gradient Descent => tính đạo hàm riêng của L theo w và b
- Để tính đạo hàm của hàm $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$ => áp dụng quy tắc chuỗi:
  - Hàm L phụ thuộc vào $\widehat{y_i}$
  - Xác suất $\widehat{y_i}$ phụ thuộc vào z_i vì $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - Giá trị z_i phụ thuộc vào w và b vì $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$

- Các đạo hàm cần tính:
  - Mục tiêu 1: $\frac{\partial L}{\partial w}$
  - Mục tiêu 2: $\frac{\partial L}{\partial b}$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$

- Mục tiêu 1: Các đạo hàm cần tính:
  - $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - $\frac{\partial L}{\partial b}$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$

- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - Tính $\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i}$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - Tính $\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i}$

Lấy đạo hàm L_i theo $\hat{y}_i$:

$$\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} = -\left[y_i \cdot \frac{1}{\hat{y}_i} + (1 - y_i) \cdot \frac{1}{1 - \hat{y}_i} \cdot (-1)\right] = -\left[\frac{y_i}{\hat{y}_i} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{y}_i}\right].$$

Quy đồng mẫu số và rút gọn:

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i)\log(1 - \hat{y}_i)]$
  - $\hat{y}_i = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính:
  - Tính $\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i}$

Lấy đạo hàm L_i theo $\hat{y}_i$:

$$\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} = -\left[y_i \cdot \frac{1}{\hat{y}_i} + (1 - y_i) \cdot \frac{1}{1 - \hat{y}_i} \cdot (-1)\right] = -\left[\frac{y_i}{\hat{y}_i} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{y}_i}\right].$$

Quy đồng mẫu số và rút gọn:

$$\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} = \frac{-(y_i(1 - \hat{y}_i) - \hat{y}_i(1 - y_i))}{\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)} = \frac{-(y_i - y_i\hat{y}_i - \hat{y}_i + y_i\hat{y}_i)}{\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)}.$$

$$\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} = \frac{-(y_i - \hat{y}_i)}{\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)} = \frac{\hat{y}_i - y_i}{\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)}.$$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - Tính $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i}$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - Tính $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i}$

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} = -1 \cdot (1 + e^{-z_i})^{-2} \cdot (e^{-z_i} \cdot -1) = \frac{e^{-z_i}}{(1 + e^{-z_i})^2}.$$

Chúng ta có thể biến đổi nó một cách thông minh:

$$= \left(\frac{1}{1 + e^{-z_i}}\right) \cdot \left(\frac{e^{-z_i}}{1 + e^{-z_i}}\right) = \left(\frac{1}{1 + e^{-z_i}}\right) \cdot \left(\frac{1 + e^{-z_i} - 1}{1 + e^{-z_i}}\right),$$

$$= \left(\frac{1}{1 + e^{-z_i}}\right) \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-z_i}}\right).$$

Vì $\hat{y}_i = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$, nên ta có kết quả:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} = g(z_i) \cdot (1 - g(z_i)) = \hat{y}_i(1 - \hat{y}_i).$$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$
  - Tính $\frac{\partial z_i}{\partial w}$ = x_i

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial w}$

$$\frac{\partial L_i}{\partial w} = \left(\frac{\hat{y}_i - y_i}{\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)}\right) \cdot (\hat{y}_i(1 - \hat{y}_i)) \cdot (x_i)$$

$$\frac{\partial L_i}{\partial w} = (\hat{y}_i - y_i) \cdot (x_i)$$

Tính đạo hàm của hàm Log Loss

- Ta có các công thức:
  - $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
  - $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
  - $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
- Mục tiêu 2: Các đạo hàm cần tính: $\frac{\partial L_i}{\partial b} = \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}_i} \cdot \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial z_i} \cdot \frac{\partial z_i}{\partial b}$

=> Tương tự với mục tiêu 1, chỉ khác $\frac{\partial z_i}{\partial b}$=1

Và kết hợp lại ta cũng có:

$$\frac{\partial L_i}{\partial b} = (\hat{y}_i - y_i)$$

Quy trình thực hiện

- Bước 1: Khởi tạo w, b, LR, …
- Bước 2: Duyệt qua từng epoch:
  - Duyệt qua từng dòng dữ liệu:
    - Tính giá trị dự đoán:
      - Tính đầu vào tuyến tính: $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
      - Tính xác suất dự đoán: $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
    - Tính hàm mất mát: $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
    - Tính đạo hàm: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = (\hat{y}_i - y_i) \cdot (x_i)$ và $\frac{\partial L_i}{\partial b} = (\hat{y}_i - y_i)$

Quy trình thực hiện

- Bước 1: Khởi tạo w, b, LR, …
- Bước 2: Duyệt qua từng epoch:
  - Duyệt qua từng dòng dữ liệu:
    - Tính giá trị dự đoán:
      - Tính đầu vào tuyến tính: $z_i = f(x_i) = w \times x_i + b$
      - Tính xác suất dự đoán: $\widehat{y_i} = g(z_i) = \frac{1}{1+e^{-z_i}}$
    - Tính hàm mất mát: $L_i = -[y_i \log(\widehat{y_i}) + (1 - y_i)\log(1 - \widehat{y_i})]$
    - Tính đạo hàm: $\frac{\partial L_i}{\partial w} = (\hat{y}_i - y_i) \cdot (x_i)$ và $\frac{\partial L_i}{\partial b} = (\hat{y}_i - y_i)$
    - Cập nhật w, b

$$w = w - \eta \frac{\partial L_i}{\partial w}$$

$$\mathrm{b} = b - \eta \frac{\partial L_i}{\partial b}$$

- Bước 3: Sau khi hoàn thành, chúng ta thu được các giá trị w và b đã được tối ưu.

THỰC HÀNH

- Xét bài toán ví dụ: dự đoán khách hàng mua (1) hay không mua (0) dựa trên thu nhập của họ. Chúng ta sẽ lấy ra 6 điểm dữ liệu (N = 6) để thực hành tính toán:
- Mục tiêu:
  - 1. Thực hiện cập nhật w và b theo one-sample
  - 2. Thực hiện cập nhật w và b theo full-sample
- Gợi ý: w=0; b=0; LR=0.2; n_epoch=2

Income	Purchase
5000	0
7000	0
9000	0
11000	1
13000	1
15000	1
10800	???

THỰC HÀNH: Huấn luyện mô hình theo cơ chế one-sample

Đọc và hoàn thiện các đoạn code sau để có một chương trình huấn luyện mô hình hoàn chỉnh

```
W, b = initialize_params()
N = len(y_train)
LEARNING_RATE = 1e-2
epoch_max = 100

t_e = 1e-8    # tránh log(0)

for epoch in range(epoch_max):
    for i in range(N):
        # get a sample
        x = X_train[i]      # vector shape (d,)
        y = y_train[i]

        # compute output
        z = np.dot(x, W) + b
        y_pred = 1 / (1 + np.exp(-z))

        # compute loss (cross-entropy cho 1 sample)
        loss = -y * np.log(y_pred + t_e) - (1 - y) * np.log(1 - y_pred + t_e)

        # In mỗi 10 epoch
        if epoch % 10 == 0 and i == 0:     # chỉ in 1 lần/epoch
            print(f"Epoch: {epoch}, Loss: {loss:.3f}")

        # compute gradients
        dW = (y_pred - y) * x
        db = (y_pred - y)

        # update parameters
        W -= LEARNING_RATE * dW
        b -= LEARNING_RATE * db
```

THỰC HÀNH

```
# Evaluation
z_train = X_train.dot(W) + b
z_test  = X_test.dot(W) + b

y_pred_train = 1 / (1 + np.exp(-z_train))
y_pred_test  = 1 / (1 + np.exp(-z_test))

# Avoid log(0)
t_e = 1e-8

# Binary Cross Entropy for Train
train_bce = np.mean(
    -(y_train * np.log(y_pred_train + t_e)
      + (1 - y_train) * np.log(1 - y_pred_train + t_e))
)

# Binary Cross Entropy for Test
test_bce = np.mean(
    -(y_test * np.log(y_pred_test + t_e)
      + (1 - y_test) * np.log(1 - y_pred_test + t_e))
)

print(f"train_BCE: {train_bce:.4f}, test_BCE: {test_bce:.4f}")
```

Đọc và hoàn thiện các đoạn code sau để có một chương trình huấn luyện mô hình hoàn chỉnh

THỰC HÀNH

Huấn luyện mô hình theo cơ chế full-sample

```
NUM_EPOCHS = 100
N = len(y_train)
# Avoid log(0)
t_e = 1e-8

# Initialize
W = 0.01 * np.random.randn(INPUT_DIM, OUTPUT_DIM)
b = np.zeros((1,))

# Training loop
for epoch in range(NUM_EPOCHS):

    # Forward pass
    z = np.dot(X_train, W) + b
    y_pred = 1 / (1 + np.exp(-z))

    # Loss (BCE)
    loss = -np.mean(
        y_train * np.log(y_pred + t_e) +
        (1 - y_train) * np.log(1 - y_pred + t_e)
    )

    # Show progress
    if epoch % 10 == 0:
        print(f"Epoch: {epoch}, loss: {loss:.4f}")

    # Gradient (vectorized)
    dW = (1 / N) * np.dot(X_train.T, y_pred - y_train)
    db = (1 / N) * np.sum(y_pred - y_train)

    # Update weights
    W -= LEARNING_RATE * dW
    b -= LEARNING_RATE * db
```

Đọc và hoàn thiện các đoạn code sau để có một chương trình huấn luyện mô hình hoàn chỉnh

THỰC HÀNH

```
# Evaluation
z_train = X_train.dot(W) + b
z_test  = X_test.dot(W) + b

y_pred_train = 1 / (1 + np.exp(-z_train))
y_pred_test  = 1 / (1 + np.exp(-z_test))

# Avoid log(0)
t_e = 1e-8

# Binary Cross Entropy for Train
train_bce = np.mean(
    -(y_train * np.log(y_pred_train + t_e)
      + (1 - y_train) * np.log(1 - y_pred_train + t_e))
)

# Binary Cross Entropy for Test
test_bce = np.mean(
    -(y_test * np.log(y_pred_test + t_e)
      + (1 - y_test) * np.log(1 - y_pred_test + t_e))
)

print(f"train_BCE: {train_bce:.4f}, test_BCE: {test_bce:.4f}")
```

Đọc và hoàn thiện các đoạn code sau để có một chương trình huấn luyện mô hình hoàn chỉnh