Logistic Regression

Ngoc Hoang Luong

University of Information Technology (UIT), VNU-HCM

May 22, 2023

Hồi quy logistic

Lư ơ ng Ngọc Hoàng

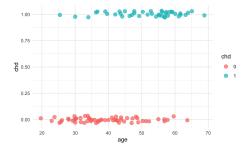
Trư ờng Đại học Công nghệ Thông tin (UIT), ĐHQG-HCM

22 Tháng Năm, 2023



Motivation

 Example: Predicting heart attack (coronary heart disease (chd)) with only one predictor: age.

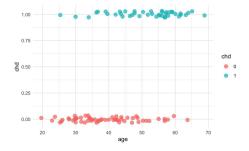


- For age, we have values ranging from small x's to large x's.
- For the binary response, there are only 0's and 1's (for better visualization, there are some jitter).
- For $y_i = 0$, there are more small values x than large ones. For $y_i = 1$, there are more large values x than small ones.

Machine Translated by Google

Động lực

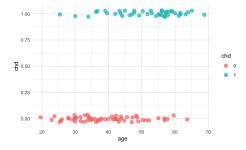
• Ví dụ: Dự đoán cơ n đau tim (bệnh mạch vành (chd)) chỉ với một vếu tố dự đoán: tuổi.



- Đối với tuổi, chúng tôi có các giá trị từ x nhỏ đến x lớn. • Đối với phản hồi nhị phân, chỉ có 0 và 1 (để tốt hơ n trực quan hóa, có một số jitter).
- Với yi = 0, có nhiều giá trị x nhỏ hơ n giá trị lớn. Với yi = 1, có nhiều giá trị x lớn hơ n giá trị nhỏ.

Motivation

• Example: Predicting heart attack (coronary heart disease (chd)) with only one predictor: age.



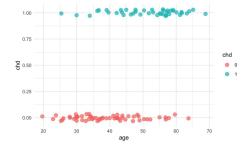
• The goal is to fit a model that predicts chd from age.

$$\mathtt{chd} = f(\mathtt{age}) + \varepsilon$$

Machine Translated by Google

Động lực

• Ví dụ: Dự đoán cơ n đau tim (bệnh mạch vành (chd)) chỉ với một yếu tố dự đoán: tuổi.



Mục tiêu là để phù hợp với một mô hình dự đoán chd theo độ tuổi.

chd =
$$f(tuổi) + \epsilon$$



• We could try to fit a linear model:

$$\hat{\mathbf{y}} = b_0 + b_1 \mathbf{x} = \mathbf{X} \mathbf{y}$$

where

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix}$$

Machine Translated by Google

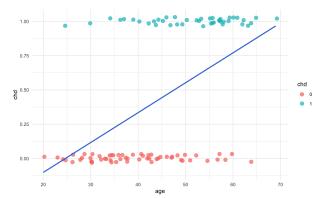
Cách tiếp cận đầu tiên: Lắp một dòng

• Chúng ta có thể thử điều chỉnh một mô hình tuyến tính:

$$y^{-} = b0 + b1x = Xy$$

ở đâu

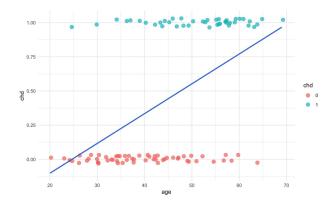
$$X = \begin{array}{c} 1 \times 1 \\ 1 \times 2 \\ \\ \end{array}$$
 ; b = (b\(b 1 \))



- There seems to be some positive relation between age and chd.
- The regression line extends beyond the range [0,1], which does not make sense.

Machine Translated by Google

Cách tiếp cận đầu tiên: Lắp một dòng



• Dư ờng như có một số mối quan hệ tích cực giữa tuổi tác và chd. • Đư ờng hồi quy mở rộng ra ngoài phạm vi [0,1], không có lý.

Second Approach: Harsh Thresholding

• We can set some threshold c and compare $\hat{y}_i = b_0 + b_1 x_i$ to c.

$$\hat{y}_i = \begin{cases} 1 & \text{if } b_0 + b_1 x_i \ge c \\ 0 & \text{if } b_0 + b_1 x_i < c \end{cases}$$

We can arrange the terms to get:

$$\hat{y}_i = \hat{f}(x_i) = b_0 + b_1 x_i - c = (b_0 - c) + b_1 x_i$$

= $b'_0 + b_1 x_i = \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i$

• By paying attention to the sign of the signal $\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}$, we can transform our fitted model into:

$$\hat{y} = \text{sign}(\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x})$$

Machine Translated by Google

Cách tiếp cận thứ hai: Ngư ỡng khắc nghiệt

• Chúng ta có thể đặt một số ngư ỡng c và so sánh y^i = b0 + b1xi với c.

$$1 \text{ n\'eu b0} + \text{b1xi} \ge \text{c}$$

$$\text{y^i = 0 n\'eu b0} + \text{b1xi} < \text{c}$$

· Ta có thể sắp xếp các điều kiên để có được:

$$y^i = f(xi) = b0 + b1xi$$
 $c = (b0 c) + b1xi + b1xi$
= $b b' = b$ xi

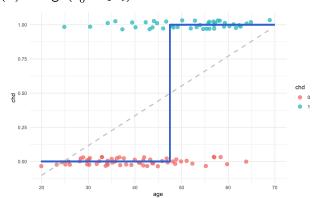
• Bằng cách chú ý đến dấu của tín hiệu b x, chúng ta có thể chuyển đổi mô hình được trang bị của chúng tôi thành:

$$y^* = d\hat{a}u(b x)$$

We have a classification rule:

$$\hat{y}_i = \begin{cases} 1 & \text{if } & \text{sign}(b'_0 + b_1 x_i) \ge 0 \\ 0 & \text{if } & \text{sign}(b'_0 + b_1 x_i) < 0 \end{cases}$$

• The signal is still linear but we apply a non-linear transformation to it: $\phi(x) = \operatorname{sign}(b_0' + b_1 x_i)$

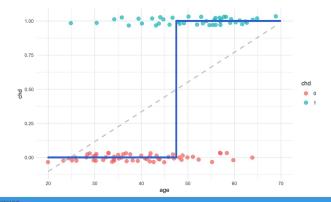


Machine Translated by Google

Cách tiếp cận thứ hai: Ngư ỡng khắc nghiệt

• Ta có quy tắc phân loại:

• Tín hiệu vẫn là tuyến tính như ng chúng tôi áp dụng phép biến đổi phi tuyến tính cho nó: φ(x) = dấu(b)0 + b1xi)



22/7

- For example, we consider a patient x = 24 years old, and we count the relative frequency of chd cases. We compute the conditional mean: $avq(y_i \mid x_i = 24)$
- Similarly, we could compute all conditional means for all age values:

$$(\bar{y} \mid x_i = 25), \quad (\bar{y} \mid x_i = 26), \quad \dots (\bar{y} \mid x_i = 70),$$

• If we do not have data points for a specific x-value, we can use groups of ages. For example, we compute the proportion of chd cases in the group of ages 20 - 29 years:

$$avq(y_i \mid x_i \in \{20 - 29 \text{ years}\})$$

Cách tiếp cận thứ ba: Phư ơ ng tiện có điều kiện

- Ví du: chúng tôi xem xét một bệnh nhân x = 24 tuổi và chúng tôi tính tần suất tương đối của các trư ờng hợp mắc bênh chd. Chúng tôi tính giá tri trung bình có điều kiên: avg(yi xi = 24)
- Tư ơ ng tư, chúng ta có thể tính tất cả các phư ơ ng tiên có điều kiên cho tất cả các giá tri tuổi:

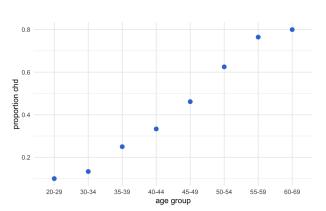
$$(y^- xi = 25), (y^- xi = 26), ... (y^- xi = 70),$$

• Nếu chúng tôi không có điểm dữ liệu cho một giá trị x cụ thể, chúng tôi có thể sử dụng các nhóm tuổi. Ví du: chúng tôi tính tỷ lê các trư ờng hợp mắc bệnh chd trong nhóm tuổi 20 - 29 tuổi:



• For each age group, we calculate the proportion of chd cases:

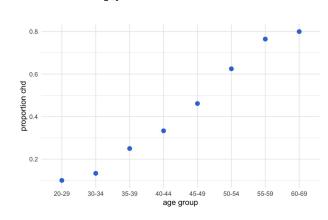
$$avg(y_i \mid x_i \in \mathsf{age} \; \mathsf{group}\})$$



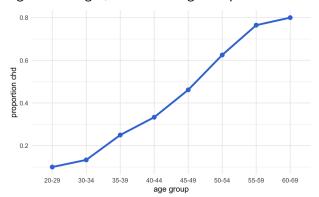
Machine Translated by Google

Cách tiếp cận thứ ba: Phư ơng tiện có điều kiện

Với mỗi nhóm tuổi, chúng tôi tính tỷ lệ mắc bệnh chd:



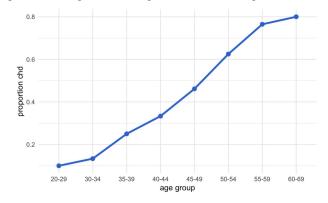
- Theoretical we are modeling the conditional expectations: $\mathbb{E}(y\mid x)$. This is the regression function.
- Connecting the averages, we have a sigmoid pattern:



Cách tiếp cận thứ ba: Phư ơng tiện có điều kiện

• Về mặt lý thuyết, chúng tôi đang mô hình hóa các kỳ vọng có điều kiện: $E(y \hspace{0.5cm} x) \hspace{0.5cm} . \hspace{0.5cm} \text{Dây là hàm hồi quy} \hspace{0.5cm} .$

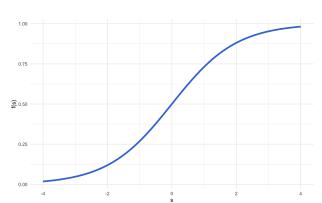
Nối các giá trị trung bình, chúng ta có một mẫu sigmoid:





- The pattern can be approximated by some mathematical functions.
- The most popular is the logistic function:

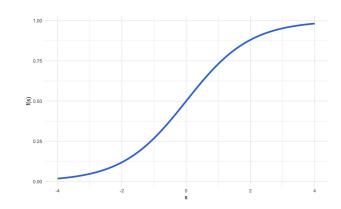
$$f(s) = \frac{e^s}{1 + e^s} = \frac{1}{1 + e^{-s}}$$



Cách tiếp cận thứ ba: Phư ơ ng tiện có điều kiện

• Mẫu có thể được tính qần đúng bằng một số hàm toán học. • Phổ biến nhất là chức năng logistic:

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



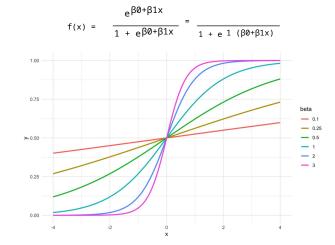
• Replacing the signal s by a linear model $\beta_0 + \beta_1 x$, we have:

$$\hat{f}(x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 x}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 x}} = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 x)}}$$
beta
- 0.1
- 0.25
- 0.25
- 0.3

• Since probability values range inside [0,1], instead of using a line to approximate these values, we should use a more adequate curve.

Cách tiếp cận thứ ba: Phư ơ ng tiện có điều kiện • Thay tín

hiệu s bằng mô hình tuyến tính β0 + β1x, ta có:



· Vì các qiá trị xác suất nằm trong khoảng [0,1] nên thay vì sử dụng một đường để tính qần đúng các qiá trị này, chúng ta nên sử dụng một đường cong phù hợp hơ n.

Logistic Regression Model

We consider the model:

$$Prob(y \mid \mathbf{x}; \mathbf{b}) = f(\mathbf{x})$$

- However, we don't observe the true probability $\in [0,1]$. We only observe the noisy targets $y_i \in \{0,1\}$ that is generated by the probability $f(\mathbf{x})$.
- We model the probability by using a mathematical function that has the sigmoid shape, and the most popular function is the logistic function.

$$Prob(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{b}) = \frac{e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}{1 + e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}$$

where \mathbf{x}_i represents the vector of features of individual i.

Machine Translated by Google

Mô hình hồi quy logistic

· Ta xét mô hình:

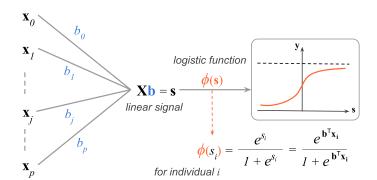
$$P c u' dp(y x;b) = f(x)$$

- Tuy nhiên, chúng tôi không quan sát thấy xác suất thực [0, 1]. Chúng tôi chỉ quan sát các mục tiêu nhiễu yi $\{0, 1\}$ đư ợc tạo bởi xác suất f(x).
- · Chúng tôi lập mô hình xác suất bằng cách sử dụng hàm toán học có dạng sigmoid và hàm phổ biến nhất là hàm logistic.

$$P c u' dp(yi xi;b) = \frac{e^{b xi}}{1 + e^{b xi}}$$

trong đó xi đại diện cho vectơ đặc trư ng của cá nhân i.

Logistic Regression Model



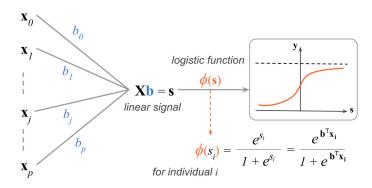
$$Prob(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{b}) = \begin{cases} h(\mathbf{x}_i) & \text{for } y_i = 1\\ 1 - h(\mathbf{x}_i) & \text{for } y_i = 0 \end{cases}$$

where h() denotes the logistic function $\phi()$:

$$h(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x})$$

Machine Translated by Google

Mô hình hồi quy logistic



$$P \ cu' \, dp(yi \qquad xi \ ;b) \\ = 1 \qquad h(xi) \ vdi \ yi = 0$$

trong đó h() biểu thị hàm logistic φ (): h(x) = φ (b

x)



• Assuming that our model is true, i.e., h(x) = f(x), we ask "how likely is it that we observe the data we already observed (y_i) ?"

$$Prob(\mathbf{y} \mid x_1, x_2, \dots, x_p; \mathbf{b}) = \prod_{i=1}^n P(y_i \mid \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)$$
$$= \prod_{i=1}^n h(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)^{y_i} [1 - h(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)]^{1-y_i}$$

Machine Translated by Google

Tiêu chí đư ơc tối ư u hóa

• Giả sử rằng mô hình của chúng ta là đúng, tức là h(x) = f(x), chúng ta hỏi "khả năng chúng ta quan sát dữ liệu mà chúng ta đã quan sát (yi) là bao nhiêu?"

The Criterion Being Optimized

Take the logarithm (log-likelihood)

$$l(\mathbf{b}) = \ln [L(\mathbf{b})]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \ln [P(y_i \mid \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \{y_i \ln [h(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)] + (1 - y_i) \ln [1 - h(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)]\}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[y_i \ln \left(\frac{e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}{1 + e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}} \right) + (1 - y_i) \ln \left(1 - \frac{e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}{1 + e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}} \right) \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i - \ln \left(1 + e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i} \right) \right]$$

 Differentiating and setting to 0 yields an equation for which no closed-form solution exists.

Tiêu chí đư ơc tối ư u hóa

Lấy logarit (log-likelihood)

· Vi phân và đặt thành 0 sẽ tạo ra một phư ơng trình không tồn tại nghiệm dạng đóng.

The Criterion Being Optimized

- We need to use gradient ascent.
- The gradient of the likelihood function is:

$$\nabla l(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i \mathbf{x}_i - \left(\frac{e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}{1 + e^{\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}} \right) \mathbf{x}_i \right]$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \left[y_i \mathbf{x}_i - \phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \mathbf{x}_i \right]$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - \phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right] \mathbf{x}_i$$

• In gradient ascent, we would update the parameters b:

$$\mathbf{b}^{(s+1)} = \mathbf{b}^{(s)} + \alpha \nabla l(\mathbf{b}^{(s)})$$

Machine Translated by Google

Tiêu chí được tối ưu hóa

Chúng ta cần sử dụng độ dốc

tăng dần. • Độ dốc của hàm khả năng là:

$$l(b) = \begin{cases} & & b & xi \\ & i=1 \text{ [yixi } & (^1e^{+e}b & xi \text{)xi} \end{cases}$$

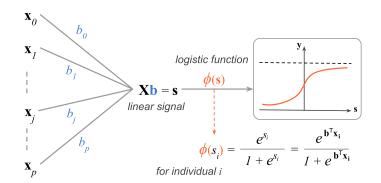
$$= & & & [yixi & \phi(b & xi)xi]$$

$$= & & & [yi & \phi(b & xi)]xi$$

$$= & & & [yi & \phi(b & xi)]xi$$

Khi tăng dần độ dốc, chúng tôi sẽ cập nhật các tham số b:

$$b (s+1) = b (s) + \alpha l(b (s))$$



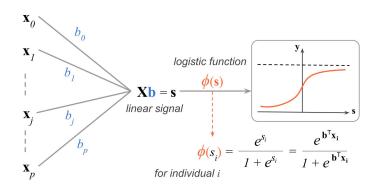
What it used to be $y_i = 0$, let's encode it as $y_i = -1$

$$Prob(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{b}) = \begin{cases} h(\mathbf{x}_i) & \text{for } y_i = 1\\ 1 - h(\mathbf{x}_i) & \text{for } y_i = -1 \end{cases}$$

where h() denotes the logistic function $\phi()$: $h(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x})$

Machine Translated by Google

Một cách khác để giải quyết hồi quy logistic



Nó từng là yi = 0, hãy mã hóa nó thành yi = 1

trong đó h() biểu thị hàm logistic φ (): h(x) = φ (b x)

The logistic function has the property:

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

We can update the expression for the conditional probability:

$$Prob(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{b}) = \begin{cases} h(\mathbf{x}_i) &= \phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}) \text{ for } y_i = 1\\ 1 - h(\mathbf{x}_i) &= \phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}) \text{ for } y_i = -1 \end{cases}$$

This implies that we only need one case regardless of y_i:

$$Prob(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{b}) = \phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x})$$

Machine Translated by Google

Một cách khác để giải quyết hồi quy logistic

· Hàm hâu cần có thuộc tính:

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

Chúng ta có thể cập nhật biểu thức cho xác suất có điều kiện:

• Điều này ngụ ý rằng chúng ta chỉ cần một trường hợp bất kể yi :

P cướp(yi xi ;b) =
$$\varphi$$
(yib x)



• We can compute the likelihood as previously:

$$Prob(\mathbf{y} \mid x_1, x_2, \dots, x_p; \mathbf{b}) = \prod_{i=1}^n P(y_i \mid \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)$$
$$= \prod_{i=1}^n \phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)$$

• then log-likelihood:

$$l(\mathbf{b}) = \ln[L(\mathbf{b})] = \sum_{i=1}^{n} \ln[\phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i])$$
$$\Rightarrow \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln[\phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i)]$$

 Instead of maximizing the log-likelihood, we can minimize the negative log-likelihood

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln \left[\phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right] \right\}$$

Một cách khác để giải quyết hồi quy logistic • Chúng ta có

thể tính toán khả năng xảy ra như trước đây:

thì log-likelihood:

$$1(b) = \ln [L(b)] = \lim_{\substack{\text{thi : :} \\ \hline n_{i=1}}} \ln [\phi(yib \quad xi])$$

 Thay vì tối đa hóa khả năng đăng nhập, chúng ta có thể giảm thiểu khả năng đăng nhập tiêu cực

6

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln \left[\phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right] \right\} \Leftrightarrow \min_{\mathbf{b}} \left\{ \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\ln \left(1 + e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i} \right)}_{\text{pointwise error}} \right\}$$

- Focus on the product term between the response and the linear signal: $y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i = y_i \mathbf{s}$ where \mathbf{s} represents "signal".
- A small signal means that the probability $\phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i)$ will be small.
- A large signal means that the probability $\phi(\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_i)$ will be large.
- The term y_i can be either -1 or +1.

Một cách khác để giải quyết hồi quy logistic

 Tập trung vào thuật ngữ tích giữa phản hồi và tín hiệu tuyến tính: yib xi = yis trong đó s đại diện cho "tín hiệu". • Tín hiệu nhỏ nghĩa là xác suất φ(b xi) sẽ nhỏ. • Tín hiệu lớn có nghĩa là xác suất φ(b xi) sẽ lớn. • Số hang vi có thể là -1 hoặc +1.

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln \left[\phi(y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i) \right] \right\} \Leftrightarrow \min_{\mathbf{b}} \left\{ \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\ln \left(1 + e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i} \right)}_{\text{cross-entropy error}} \right\}$$

- With correct predictions, $e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}$ will be small, and will give a small error.
- With incorrect predictions, $e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}$ will be large, and will give a large error.
- We need to find b to minimize $E_{in}(\mathbf{b})$. We need to use gradient descent with the gradient w.r.t. b can be computed as:

$$\nabla E_{in}(\mathbf{b}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}}{1 + e^{-y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}} \right) y_i \mathbf{x}_i = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{1}{1 + e^{y_i \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_i}} \right) y_i \mathbf{x}_i$$

Machine Translated by Google

Một cách khác để giải quyết hồi quy logistic

Với dự đoán đúng, e sai yib xi sẽ nhỏ và sẽ cho • số nhỏ.

đoán sai, e vsidu sốxilómē. lớn và sẽ cho kết quả • Với dự

 Ta cần tìm b để Ein(b) nhỏ nhất. Chúng ta cần sử dụng giảm độ dốc với độ dốc wrt b có thể được tính như sau:

Ein(b) =
$$\frac{1}{N} = \frac{yib}{\frac{1}{1}e^{+e}} = \frac{1}{yib} = \frac{1}{n} = \frac{1}{n} = \frac{1}{1 + eyib} = \frac{1}{1 + eyi$$