

人工智能与自动化学院

模式识别与机器学习

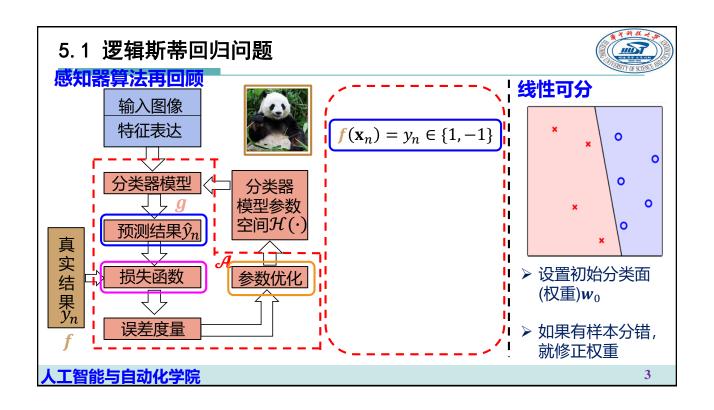


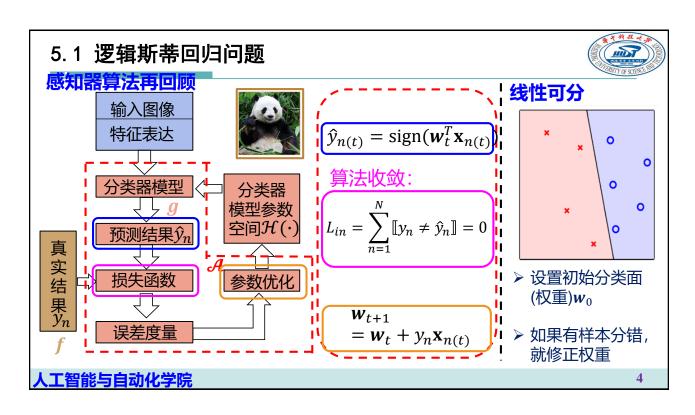
第五讲 逻辑斯蒂回归 (Logistic Regression)

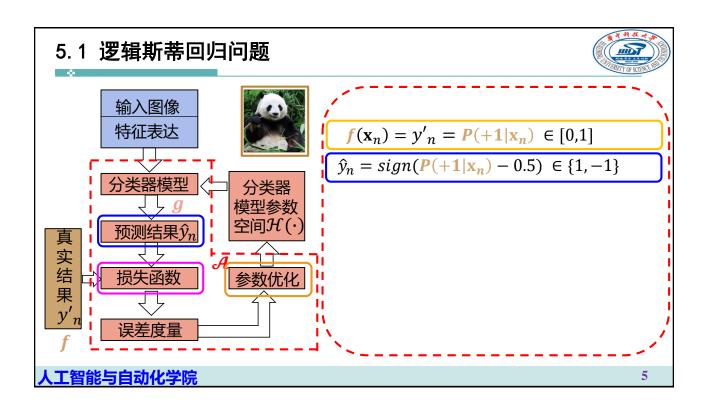


- 5.1 逻辑斯蒂回归问题 (Logistic Regression Problem)
- 5.2 逻辑斯蒂回归损失 (Logistic Regression Loss)
- 5.3 逻辑斯蒂回归算法 (Logistic Regression Algorithm)
- 5.4 二元分类线性模型讨论 (Linear Models for Binary Classification)

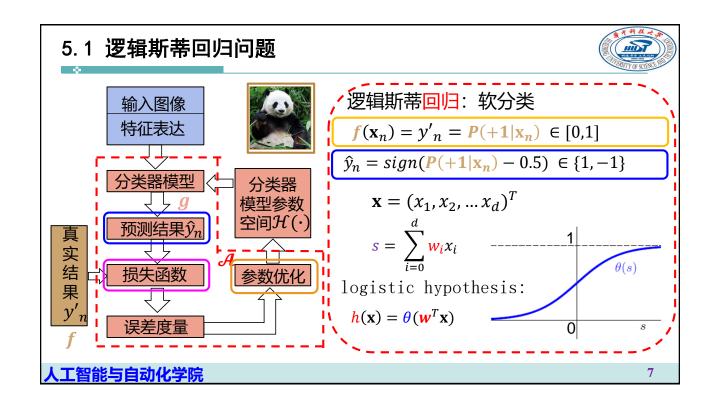
人工智能与自动化学院











5.1 逻辑斯蒂回归问题



逻辑斯蒂函数

$$\theta(-\infty)=0$$
;

$$\theta(0)=\frac{1}{2};$$

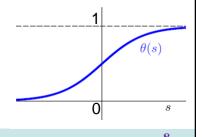
$$\theta(\infty)=1$$

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

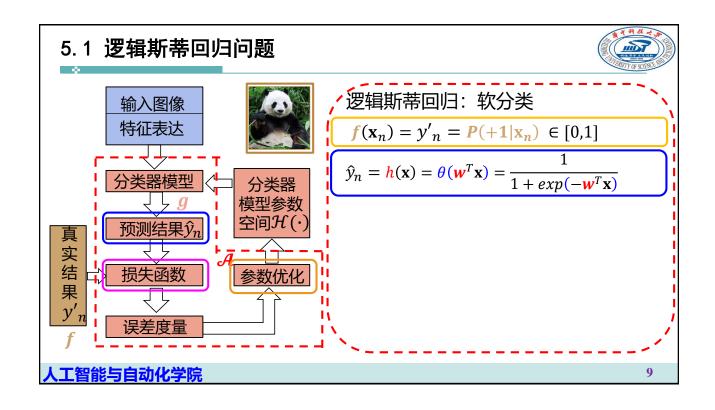
---- Sigmoid 函数: 平滑 (Smooth)、单调 (Monotonic)

逻辑斯蒂回归用如下模型来估计 $f(\mathbf{x}_n)$

$$h(\mathbf{x}) = \theta(\mathbf{w}^T \mathbf{x}) = \frac{1}{1 + exp(-\mathbf{w}^T \mathbf{x})}$$



人工智能与自动化学院

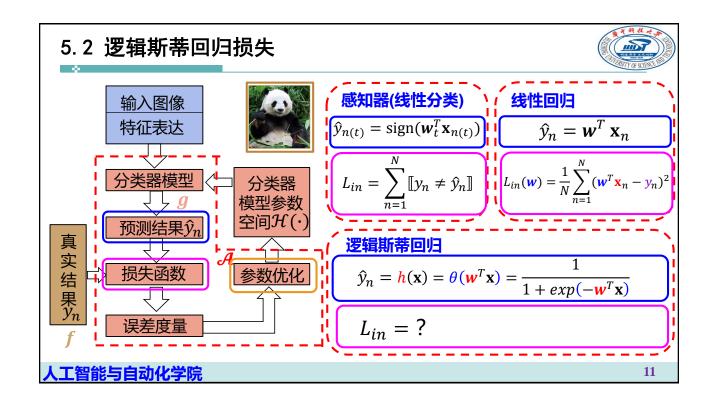


第五讲 逻辑斯蒂回归(Logistic Regression)



- 5.1 逻辑斯蒂回归问题 (Logistic Regression Problem)
- 5.2 逻辑斯蒂回归损失 (Logistic Regression Loss)
- 5.3 逻辑斯蒂回归算法 (Logistic Regression Algorithm)
- 5.4 二元分类线性模型讨论 (Linear Models for Binary Classification)

人工智能与自动化学院





逻辑斯蒂回归可以使用平方误差作为损失函数吗?

$$L_{in}(\mathbf{w}) = (\mathbf{w}^T \mathbf{x} - y)^2$$

人工智能与自动化学院



逻辑斯蒂回归可以使用平方误差作为损失函数吗?

$$L_{in}(\mathbf{w}) = (\theta(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) - y')^2$$

人工智能与自动化学院

13

5.2 逻辑斯蒂回归损失

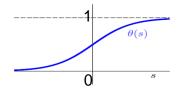


逻辑斯蒂回归可以使用平方误差作为损失函数吗?

$$L_{in}(\mathbf{w}) = (\theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x}) - 1)^2$$

$$\frac{\partial L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y)}{\partial w_i} = 2(\theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x}) - 1)\theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x})(1 - \theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x}))yx_i$$

$$\frac{\partial \theta(z)}{\partial z}$$



$$if (y\mathbf{w}^{T}\mathbf{x})) > 0 \quad \nabla L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y) = 0$$
$$if (y\mathbf{w}^{T}\mathbf{x})) < 0 \quad \nabla L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y) = 0$$

人工智能与自动化学院



逻辑斯蒂回归

$$f(\mathbf{x}_n) = y'_n = P(+1|\mathbf{x}_n) \in [0,1]$$

(理想)训练样本:

$$(\mathbf{x_1}, \ y_1' = 0.9 = P(+1|\mathbf{x_1}))$$

$$(\mathbf{x_2}, \ y_2' = 0.2 = P(+1|\mathbf{x_2}))$$

:

$$(\mathbf{x}_N, y_N' = 0.6 = P(+1|\mathbf{x}_N))$$

实际训练样本(含噪标签):

$$(\mathbf{x_1}, y_1 = \mathbf{0} = 1 \sim P(+1|\mathbf{x_1}))$$

$$(\mathbf{x_2}, \ y_2 = \times = -1 \sim P(+1|\mathbf{x_2}))$$

:

$$(\mathbf{x}_{N}, y_{N} = \mathbf{x} = -1 \sim P(+1|\mathbf{x}_{N}))$$

$$L_{in} = ?$$

人工智能与自动化学院

15

5.2 逻辑斯蒂回归损失



逻辑斯蒂回归的最佳解:

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} -\ln\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$$

$$\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \frac{1}{1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}$$

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

交叉熵损失 (Cross-Entropy Loss)

$$L_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

人工智能与自动化学院



交叉熵介绍:

Distribution p(x)

$$p(x = 1) = f(x_n)$$

$$p(x = 0) = 1 - f(x_n)$$

entropy

Distribution q(x) $q(x = 1) = \theta(x_n)$ $q(x=0) = 1 - \theta(x_n)$

$$s = w^T x$$

$$\theta(s) = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

$$H(p,q) = -\sum_{x} p(x) \ln(q(x))$$

$$\theta(s) = \frac{1}{1 + \exp(-s)}$$

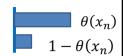
$$H(f(x_n), \theta(x_n))) = \sum_{n} -[f(x_n)ln\theta(x_n) + (1 - f(x_n))ln(1 - ln\theta(x_n))]$$

$$H(f(x_n),\theta(x_n))) = \sum_n -[ln\theta(x_n)]$$

$$H(f(x_n), \theta(x_n))) = \sum_{n} [\ln(1 + \exp(-ys))]$$







 $f(x_n) = 1$

17

人工智能与自动化学院

5.2 逻辑斯蒂回归损失



逻辑斯蒂回归的最佳解:

$$\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \frac{1}{1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}$$

$$y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \frac{1}{1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}$$

交叉熵损失 (Cross-Entropy Loss)

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} -\ln\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$$

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

$$L_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$



逻辑斯蒂回归的最佳解:

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} -\ln\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$$

$$\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \frac{1}{1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}$$

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

交叉熵损失 (Cross-Entropy Loss)

$$L_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + exp(-ys))$$

$$\Leftrightarrow$$
: $s = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$

人工智能与自动化学院

19

5.2 逻辑斯蒂回归损失



逻辑斯蒂回归的最佳解:

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} -\ln\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$$

$$\theta(y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \frac{1}{1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)}$$

$$\mathbf{g} = \underset{\mathbf{w}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + \exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

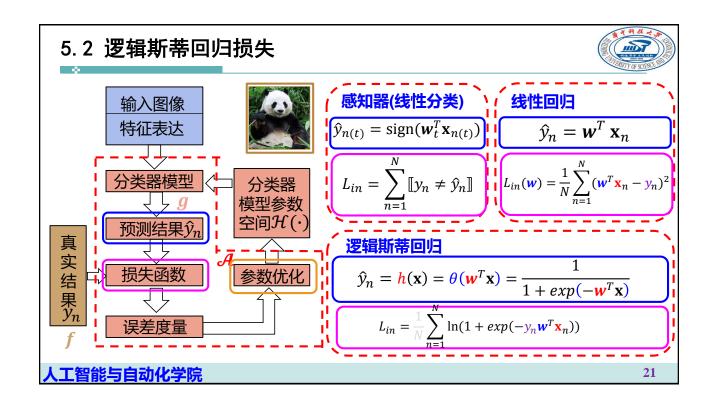
交叉熵损失 (Cross-Entropy Loss)

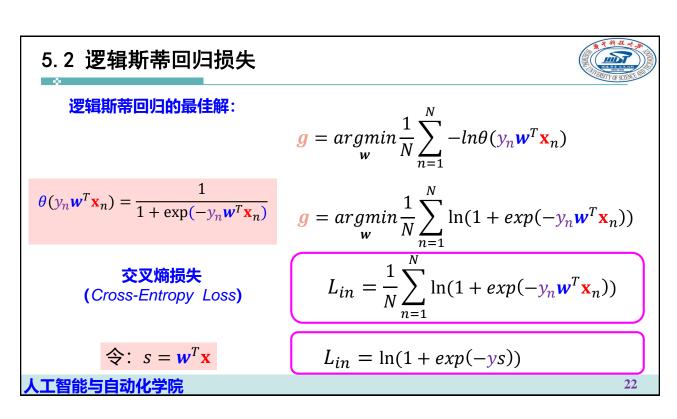
$$L_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + exp(-ys))$$

会:
$$s = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

$$H(f(x_n), \theta(x_n))) = \sum_{n} [\ln(1 + \exp(-ys))]$$

人工智能与自动化学院







交叉熵损失梯度:

$$L_{in} = \ln(1 + exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

$$\frac{\partial L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y)}{\partial w_i} = \frac{\partial \ln(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} \frac{\partial (1 + \exp(\mathbf{w}))}{\partial \mathbf{w}} \frac{\partial (-y\mathbf{w}^T\mathbf{x})}{\partial w_i}$$

$$= \frac{1}{\mathbf{w}} \exp(\mathbf{w}) (-yx_i) = \frac{\exp(\mathbf{w})}{1 + \exp(\mathbf{w})} (-yx_i)$$

$$\nabla L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y) = \theta(-y\mathbf{w}^T\mathbf{x})(-y\mathbf{x})$$

人工智能与自动化学院

23

5.2 逻辑斯蒂回归损失

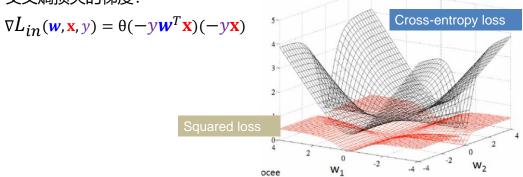


交叉熵损失与平方损失的梯度对比:

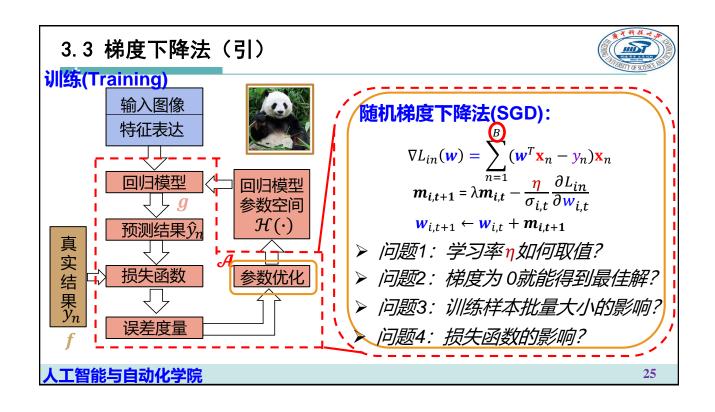
平方损失的梯度:

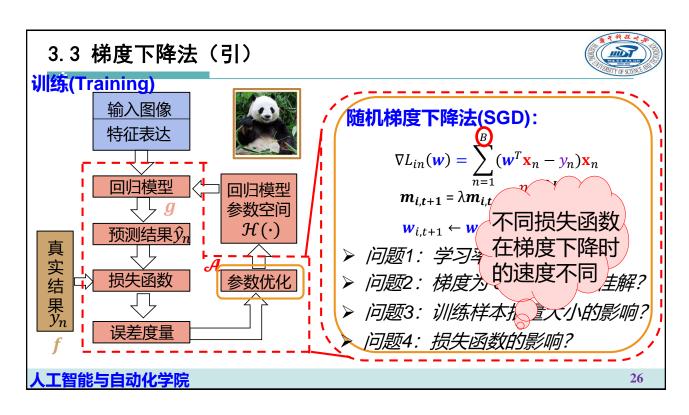
$$\nabla L_{in}(\mathbf{w}, \mathbf{x}, y) = 2(\theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x}) - 1)\theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x})(1 - \theta(y\mathbf{w}^T\mathbf{x}))y\mathbf{x}$$

交叉熵损失的梯度:



人工智能与自动化学院





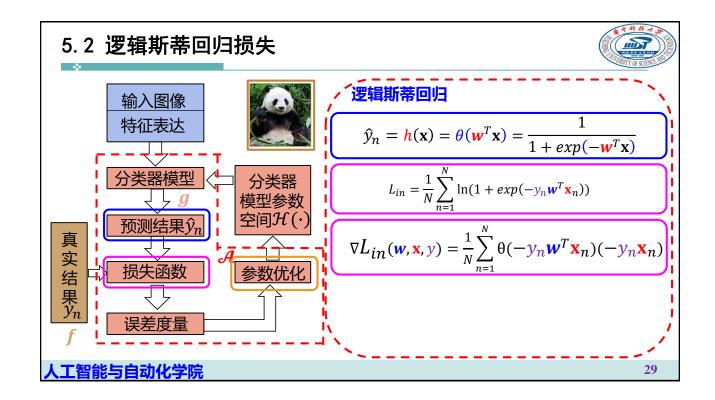
第五讲 逻辑斯蒂回归 (Logistic Regression)



- 5.1 逻辑斯蒂回归问题 (Logistic Regression Problem)
- 5.2 逻辑斯蒂回归损失 (Logistic Regression Loss)
- 5.3 逻辑斯蒂回归算法 (Logistic Regression Algorithm)
- 5.4 二元分类线性模型讨论 (Linear Models for Binary Classification)

人工智能与自动化学院

27



3.2 线性回归算法



梯度下降法实现逻辑斯蒂回归

- 初始化权向量w₀
- for t = 0,1,2,... (t 代表迭代次数)
 - ① 计算梯度: $\nabla L_{in}(\mathbf{w}_t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \Theta(-y_n \mathbf{w}_t^T \mathbf{x}_n)(-y_n \mathbf{x}_n)$
 - ② 对权向量 \mathbf{w}_t 进行更新: $\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t \mathbf{\eta} \nabla L_{in}(\mathbf{w}_t)$

…直到 $\nabla L_{in}(\mathbf{w}) = \mathbf{0}$,或者迭代足够多次数

返回最终的 w_{t+1} 作为学到的g

人工智能与自动化学院

3.2 线性回归算法



梯度下降法实现逻辑斯蒂回归

- 初始化权向量w。 Stochastic Gradient Descent(SGD)
- **for** t = 0,1,2,... (t 代表迭代次数)
 - ① 计算梯度: $\nabla L_{in}(\mathbf{w}_t) = \frac{1}{B} \sum_{n=1}^{B} \Theta(-y_n \mathbf{w}_t^T \mathbf{x}_n)(-y_n \mathbf{x}_n)$
 - ② 对权向量 \mathbf{w}_t 进行更新: $\mathbf{w}_{t+1} \leftarrow \mathbf{w}_t \mathbf{\eta} \nabla L_{in}(\mathbf{w}_t)$

…直到 $\nabla L_{in}(\mathbf{w}) = \mathbf{0}$,或者迭代足够多次数

返回最终的 w_{t+1} 作为学到的g

人工智能与自动化学院

31

第五讲 逻辑斯蒂回归(Logistic Regression)



- 5.1 逻辑斯蒂回归问题 (Logistic Regression Problem)
- 5.2 逻辑斯蒂回归损失 (Logistic Regression Loss)
- 5.3 逻辑斯蒂回归算法 (Logistic Regression Algorithm)
- 5.4 二元分类线性模型讨论 (Linear Models for Binary Classification)

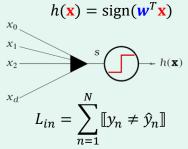
<u>工智能与自动化学院</u>

5.4 二元分类线性模型讨论



三种线性模型比较

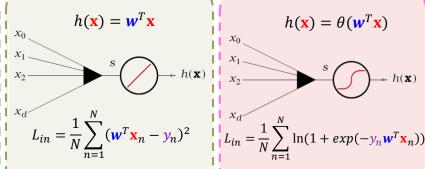




NP难问题

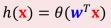
人工智能与自动化学院

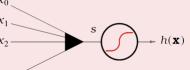
线性回归:



凸函数、易优化、解析解

逻辑斯蒂回归:





$$L_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln(1 + exp(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n))$$

凸函数、平滑、梯度下降

33

5.4 二元分类线性模型讨论



三种线性模型用于二元分类时(即: $y \in \{+1, -1\}$)损失函数比较

样本特征向量 \mathbf{x} 与模型的权向量 \mathbf{w} 的内积用 \mathbf{s} 表示: $\mathbf{s} = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$

线性分类(感知器):

$$h(\mathbf{x}) = \operatorname{sign}(s)$$

$$L_{in} = [\![h(\mathbf{x}) \neq y]\!]$$

$$L_{0/1}(s,y) = [sign(s) \neq y]$$

$$= [sign(ys) \neq 1]$$

$$L_{sqr}(s,y) = (s-y)^{2}$$

$$= (ys-1)$$

线性回归:

$$h(\mathbf{x}) = s$$

$$L_{in} = (h(\mathbf{x}) - y)^2$$

$$L_{sqr}(s, y) = (s - y)^2$$

= $(ys - 1)^2$

逻辑斯蒂回归:

$$h(\mathbf{x}) = \theta(s)$$

$$L_{in} = -\ln(h(y\mathbf{x}))$$

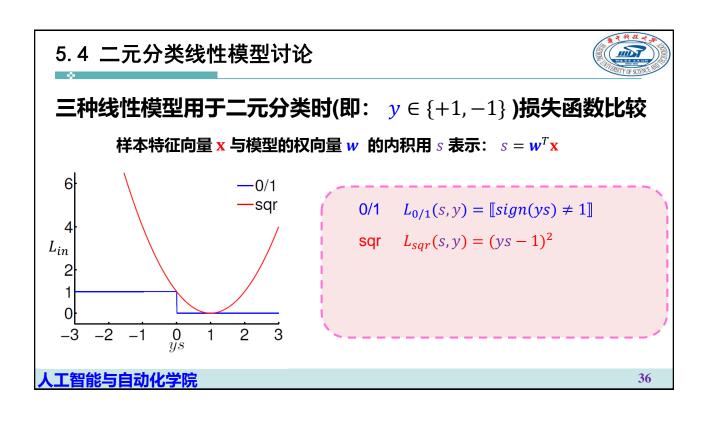
$$L_{ce} = \ln(1 + exp(-ys))$$

工智能与自动化学院

35

5.4 二元分类线性模型讨论 三种线性模型用于二元分类时(即: $y \in \{+1, -1\}$) 損失函数比较 样本特征向量 x 与模型的权向量 w 的内积用 s 表示: $s = w^T x$ -0/1 0/1 $L_{0/1}(s, y) = [sign(ys) \neq 1]$

工智能与自动化学院

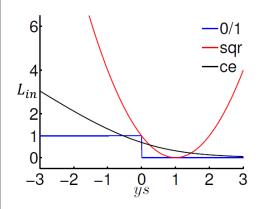


5.4 二元分类线性模型讨论



三种线性模型用于二元分类时(即: $y \in \{+1, -1\}$)损失函数比较

样本特征向量 x 与模型的权向量 w 的内积用 s 表示: $s = w^T x$



$$0/1$$
 $L_{0/1}(s,y) = [sign(ys) \neq 1]$

$$sqr L_{sqr}(s,y) = (ys-1)^2$$

ce
$$L_{ce}(s,y) = ln(1 + exp(-ys))$$

人工智能与自动化学院

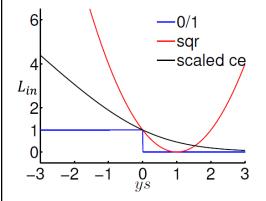
37

5.4 二元分类线性模型讨论



三种线性模型用于二元分类时(即: $y \in \{+1, -1\}$)损失函数比较

样本特征向量 \mathbf{x} 与模型的权向量 \mathbf{w} 的内积用 s 表示: $s = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$



$$0/1$$
 $L_{0/1}(s,y) = [sign(ys) \neq 1]$

$$sqr L_{sqr}(s,y) = (ys-1)^2$$

ce
$$L_{ce}(s, y) = ln(1 + exp(-ys))$$

Scaled ce $L_{sce}(s, y) = log_2(1 + exp(-ys))$

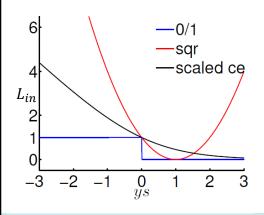
<u> 【工智能与自动化学院 曹治国</u>

5.4 二元分类线性模型讨论



三种线性模型用于二元分类时(即: $y \in \{+1, -1\}$)损失函数比较

样本特征向量 \mathbf{x} 与模型的权向量 \mathbf{w} 的内积用 s 表示: $s = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$



$$L_{0/1}(s,y) \le L_{sqr}(s,y)$$

$$L_{0/1}(s,y) \le L_{sce}(s,y)$$

$$L_{0/1}(s,y) \leq L_{ce}(s,y)$$

训练或测试时,只要做到 $L_{sqr}(s,y)$ 或者 $L_{ce}(s,y)$ 很小, $L_{0/1}(s,y)$ 也会很小

线性回归与逻辑斯蒂回归可用于线性分类

<u>人工智能与自动化学院</u>

39

5.4 二元分类线性模型讨论



- ① 在标签为 $\{+1, -1\}$ 的训练样本集 \mathcal{D} 上运行线性回归/逻辑斯蒂回归算法,得到 \mathbf{w}^*
- ② 返回分类结果: $g(\mathbf{x}) = sign(\mathbf{w}^{*T}\mathbf{x})$

线性分类(感知器):

优点: 样本线性可分时, 算法收敛有理论保障

不足: 样本非线性可分时 NP难问题,可用Pocket 算法实现

线性回归:

↓ 优点: 凸函数, 最容易优 ↓ 化, 有解析解

不足: 当|ys|很大时, $L_{0/1}(s,y)$ 的上界过于宽松

逻辑斯蒂回归:

优点: 凸函数, 易于优化

不足: 当ys ≪ 0时, L_{0/1}(s,y)的上界过于宽松

人工智能与自动化学院

第五讲 逻辑斯蒂回归 (Logistic Regression)



5.1 逻辑斯蒂回归问题

模型的理论输出为概率值,分类面假设空间模型用Sigmoid函数

 $f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + R_n$

 $f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n + R_n$

5.2 逻辑斯蒂回归损失

用交叉熵(cross-entropy)作为损失函数

5.3 逻辑斯蒂回归算法

用梯度下降法迭代实现参数更新

5.4 二元分类线性模型讨论

三个线性模型的特点及用途

人工智能与自动化学院

41

Taylor公式



$$e^{x}=1+rac{1}{1!}x+rac{1}{2!}x^{2}+rac{1}{3!}x^{3}+o\left(x^{3}
ight)$$

$$\ln(1+x) = x - rac{1}{2}x^2 + rac{1}{3}x^3 + o\left(x^3
ight)$$

$$\sin x = x - rac{1}{3!}x^3 + rac{1}{5!}x^5 + o\left(x^5
ight)$$

$$rcsin x = x + rac{1}{2} imes rac{x^3}{3} + rac{1 imes 3}{2 imes 4} imes rac{x^5}{5} + rac{1 imes 3 imes 5}{2 imes 4 imes 6} imes rac{x^7}{7} + o\left(x^7
ight)$$

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 + o(x^4)$$

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + o(x^3)$$