经典模型

第三章 逻辑斯蒂回归

1. 二项逻辑斯蒂回归
2. 多项逻辑斯蒂回归
3. 小练习

1. 二项逻辑斯蒂回归

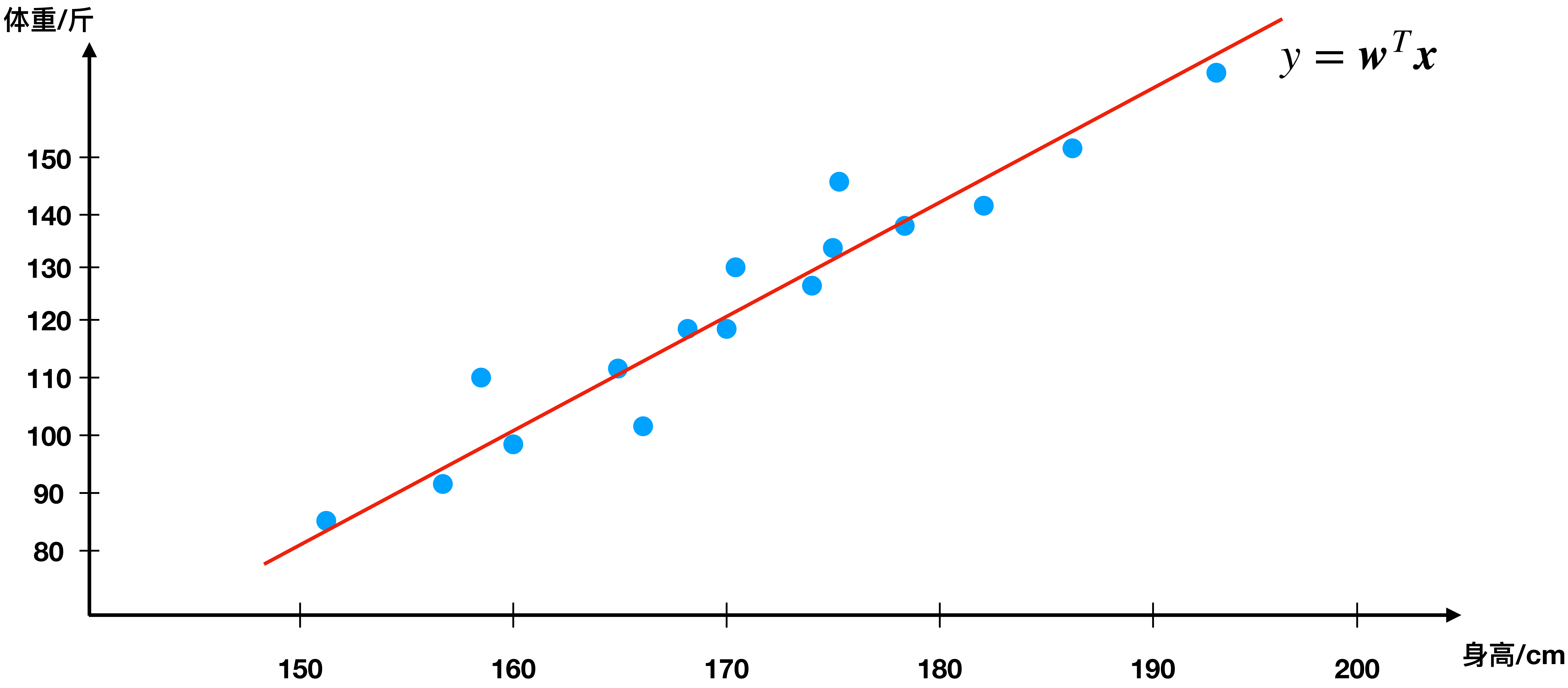
1.1 二项逻辑斯蒂回归简介

二项逻辑斯蒂回归

- **二项逻辑斯蒂回归**（binomial logistic regression），简称**逻辑回归**也被称为**对数几率回归**，是一种**二分类模型**。
- 从概率的角度，研究分类变量与样本特征之间的关系。属于概率型、非线性回归方法。

考虑：如何使用线性模型做分类任务?

找一个单调可微函数将分类任务的真实标记 y 与线性回归模型的预测值联系起来。

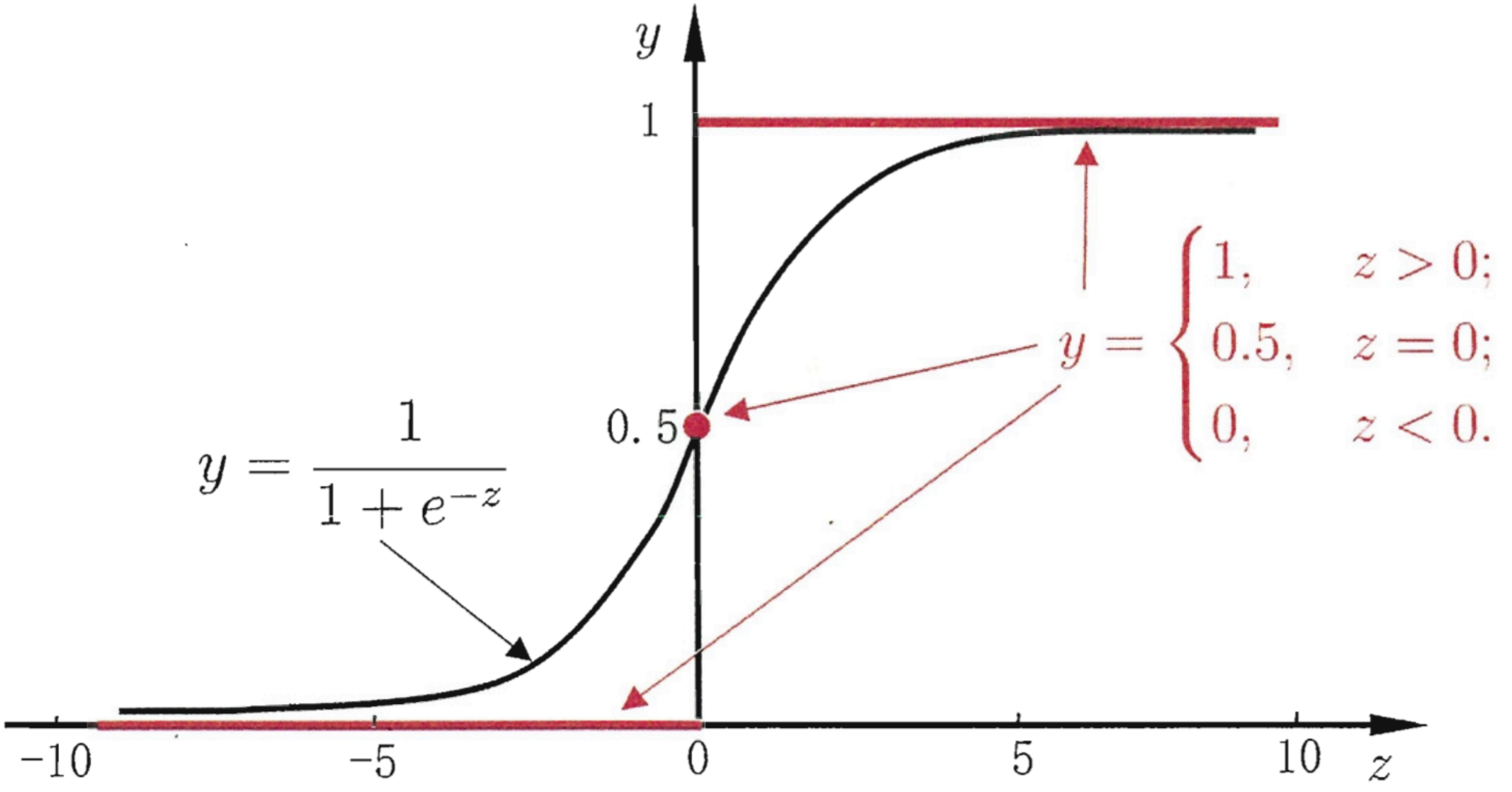


二项逻辑斯蒂回归

- 考虑二分类任务，其输出标记 $y \in \{0,1\}$，而线性回归模型产生的预测值 $z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$ 是实值，于是，我们将实值 z 转换为 0/1 值，最理想的是**单位阶跃函数**（unit-step function）$y = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ 0.5, & z = 0 \\ 1 & z > 0 \end{cases}$

- 单位阶跃函数不连续，我们希望找到在一定程度上接近单位阶跃函数的替代函数，并希望它单调可微，对数几率函数正是这样一个常用的替代函数，**对数几率函数** $y = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$

若预测值 z 大于零就判为正例，小于零就判为反例，预测值为临界值则可任意判别。



1.2 对数几率函数

对数几率函数的意义

- 若将 y 视为样本 $\boldsymbol{x}$ 作为正例的可能性，则 $1-y$ 是其反例的可能性，两者的比值 $\frac{y}{1-y}$ 称为**几率**（**odds**），反映了 $\boldsymbol{x}$ 作为正例的相对可能性，对几率取对数则得到**对数几率**（**log adds，即logit**）$\ln\frac{y}{1-y}$。令 $z=\ln\frac{y}{1-y}$，可得 $y=\frac{1}{1+e^{-z}}$，即如果输入 z 表示对数几率时，对数几率函数将 z 转化为正例的概率。

对数几率函数

- 对数几率函数 $y = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$ 是一种**Sigmoid函数**（即形似S的函数），它的值域是 $(0,1)$，它将 z 值转化为一个接近 0 或 1 的 y 值，并且其输出值在 $z=0$ 附近变化很陡。

- 将 $z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$ 带入对数几率函数得到 $h = \dfrac{1}{1+e^{-(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b)}}$，即得到逻辑回归模型形式。

- 可以看出，实际上是在用线性回归模型的预测结果去逼近真实标记的对数几率，因此也将逻辑回归叫做对数几率回归。

1.3 模型参数估计

训练样本集 $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i), i = 1,2,\ldots,n\}$，**样本彼此独立**，类别标号 $y_i \in \{0,1\}$

则样本 $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 出现的概率：

$$P(\boldsymbol{x}_i, y_i) = [P(y_i | \boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1 - P(y_i | \boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}P(\boldsymbol{x}_i)$$

n 个独立样本出现的**似然函数**为 $l = \prod_{i=1}^{n} P(\boldsymbol{x}_i, y_i)$

似然函数为 $l=\prod_{i=1}^{n}P(\boldsymbol{x}_i,y_i)$，带入 $P(\boldsymbol{x}_i,y_i)=[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}P(\boldsymbol{x}_i)$，

可得 $l=\prod_{i=1}^{n}[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}\prod_{i=1}^{n}P(\boldsymbol{x}_i)$

其中 $\prod_{i=1}^{n}P(\boldsymbol{x}_i)$ 与模型参数无关，

所以似然函数可简化为 $l=\prod_{i=1}^{n}[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}$。

对似然函数取对数 $l=\prod_{i=1}^{n}[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}$，

得到对数似然函数：

$$
\begin{aligned}
l' = \ln l &= \ln\left\{\prod_{i=1}^{n}[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}\right\} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\ln\{[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{y_i}[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]^{1-y_i}\} \\
&= \sum_{i=1}^{n}y_i\ln[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]+(1-y_i)\ln[1-P(y_i|\boldsymbol{x}_i)]
\end{aligned}
$$

平均对数似然函数为：

$$\hat{l} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i \ln[P(y_i \,|\, \boldsymbol{x}_i)] + (1 - y_i) \ln[1 - P(y_i \,|\, \boldsymbol{x}_i)]$$

目标　最大化平均对数似然求解参数：$\arg\max_{\boldsymbol{w},b} \hat{l}$

等价于　最小化负的平均对数似然：$\arg\min_{\boldsymbol{w},b} (-\hat{l})$

$P(y_i|\boldsymbol{x}_i)$ 表示类后验概率，即模型预测结果，所以将 $h = \dfrac{1}{1 + e^{-(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b)}}$ 带入平均负平均对数似然函数得到：

$$J = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \ln h(\boldsymbol{x}_i) + (1 - y_i)\ln[1 - h(\boldsymbol{x}_i)]$$ ，即为代价函数。

最小化代价函数求得参数 $(\boldsymbol{w}*, b*)$ 即可。

1.4 使用GD方法求解参数

使用小批量梯度下降法求解参数

训练集$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i), i=1,2,\ldots,n\}, \boldsymbol{x} \in R^d, y \in \{0,1\}$，随机打乱样本顺序。设小批量大小为 m，使用固定学习率 α，设定一种停止迭代规则。

① 从打乱训练集中顺序选择 m 个样本，组成一个小批次样本

② 使用抽取出的小批次样本计算模型代价 $J(\boldsymbol{w}, b) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i \ln h(\boldsymbol{x}_i) + (1-y_i)\ln[1-h(\boldsymbol{x}_i)]$

③ 计算 m 个样本的平均梯度 $\bar{\boldsymbol{g}}_{\boldsymbol{w}}, \bar{g}_b$

④ 更新模型参数 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{w} - \alpha\bar{\boldsymbol{g}}$，$b = b - \alpha\bar{g}_b$,判断是否满足停止迭代规则，如满足，则停止迭代，将此时参数作为最优参数，如不满足，则回到 ① 继续迭代。

1.5 逻辑回归模型分类决策

- 若 $logit(\boldsymbol{x}) = \ln \dfrac{h(\boldsymbol{x})}{1 - h(\boldsymbol{x})} = \boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x} + b^* > 0$，即 $h(\boldsymbol{x}) > 0.5$ 判别为正类
- 若 $logit(\boldsymbol{x}) = \ln \dfrac{h(\boldsymbol{x})}{1 - h(\boldsymbol{x})} = \boldsymbol{w}^{*T}\boldsymbol{x} + b^* < 0$，即 $h(\boldsymbol{x}) < 0.5$ 判别为负类

2. 多项逻辑斯蒂回归

2.1 多项逻辑斯蒂回归简介

多项逻辑斯蒂回归

- **多项逻辑斯蒂回归（multi-nominal logistic regression）**也被称为**softmax回归**，是二项逻辑斯蒂回归的推广，用于**多类别分类**。
- 从概率的角度，研究分类变量与样本特征之间的关系。属于概率型、非线性回归方法。

2.2 模型

对于多类问题，设训练样本集 $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i) \mid i = 1,2,\ldots,n\}$，样本彼此独立，类别标号 $y_i \in \{1,2,\ldots,C\}$ 。

几率定义为 $odds_j(\boldsymbol{w}) = \ln \dfrac{P(y = j \mid \boldsymbol{x})}{P(y = C \mid \boldsymbol{x})} \quad j = 1,2,\ldots,C-1$,

可得 $P(y = j \mid \boldsymbol{x}) = P(y = C \mid \boldsymbol{x}) e^{odds_j(\boldsymbol{x})}$

对一个样本 $\boldsymbol{x}$ 预测各类概率之和为 $P(y=C|\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^{C-1}P(y=j|\boldsymbol{x})=1$，带入

$P(y=j|\boldsymbol{x})=P(y=C|\boldsymbol{x})e^{odds_j(\boldsymbol{x})}$ 得：

$$P(y=C|\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^{C-1}P(y=C|\boldsymbol{x})e^{odds_j(\boldsymbol{x})}=1,$$

$$P(y=C|\boldsymbol{x})\left[1+\sum_{j=1}^{C-1}e^{odds_j(\boldsymbol{x})}\right]=1,$$

根据 $odds_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x} + b_j$，$P(y = C|\boldsymbol{x})\left[1 + \sum_{j=1}^{C-1} e^{odds_j(\boldsymbol{x})}\right] = 1$，得到

$$P(y = C|\boldsymbol{x})\left[1 + \sum_{j=1}^{C-1} e^{\boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x}+b_j}\right] = 1$$

，所以模型预测类别概率为：

$$\begin{cases} P(y = j|\boldsymbol{x}) = \dfrac{e^{\boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x}+b_j}}{1 + \sum_{j=1}^{C-1} e^{\boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x}+b_j}} \quad j = 1,2,\ldots,C-1 \\ P(y = C|\boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1 + \sum_{j=1}^{C-1} e^{\boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x}+b_j}} \end{cases}$$

2.3 模型参数估计

训练样本集 $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i), i = 1,2,...,n\}$，样本彼此独立，类别标号 $y_i \in \{1,2,...,C\}$

则样本 $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 出现的概率：

$$P(\boldsymbol{x}_i, y_i) = \left[\prod_{k=1}^{C}\left[P(y_i \mid \boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)}\right]\right]P(\boldsymbol{x}_i)$$

n 个独立样本出现的似然函数为 $l = \prod_{i=1}^{n} P(\boldsymbol{x}_i, y_i))$

将 $P(\boldsymbol{x}_i, y_i) = \left[\prod_{k=1}^{C}\left[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)}\right]\right]P(\boldsymbol{x}_i)$ 带入似然函数得：

$$l = \prod_{i=1}^{n} P(\boldsymbol{x}_i, y_i) = \prod_{i=1}^{n}\prod_{k=1}^{C}\left[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)}\right]\prod_{i=1}^{n}P(\boldsymbol{x}_i)$$

其中 $\prod_{i=1}^{n}P(\boldsymbol{x}_i)$ 与模型参数无关，

故似然函数简化为 $l = \prod_{i=1}^{n}\prod_{k=1}^{C}\left[P(y_i|\boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)}\right]$

取对数得对数似然代价函数：$\hat{J} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{C} \left[\ln P(y_i \mid \boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)} \right]$

带入 $\begin{cases} P(y=j \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{e^{\boldsymbol{w}_j^T \boldsymbol{x}+b_j}}{1+\sum_{j=1}^{C-1} e^{\boldsymbol{w}_j^T \boldsymbol{x}+b_j}} \quad j = 1,2,\ldots,C-1 \\ P(y=C \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\sum_{j=1}^{C-1} e^{\boldsymbol{w}_j^T \boldsymbol{x}+b_j}} \end{cases}$ 可得到完整形式

负平均对数似然函数即代价函数为：

$J = -\dfrac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{C} \left[\ln P(y_i \mid \boldsymbol{x}_i)^{I(y_i=k)} \right]$，最终可使用梯度下降法等方法求得模型参数。

2.4 分类决策

- 若 $\boldsymbol{w}_j^T\boldsymbol{x} + b_j = \max_{k \in \{1,2,...,C-1\}} (\boldsymbol{w}_k^T\boldsymbol{x} + b_k) > 0$ 则将 $\boldsymbol{x}$ 判断为第 j 类，否则，将 $\boldsymbol{x}$ 判断为第 C 类。

2.5 softmax回归的其它形式

softmax 函数 $y_j = \frac{e^{z_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{z_i}}$，将 $z_j = \boldsymbol{w}_j^T \boldsymbol{x} + b_j$ 带入，得到

$$P(y = j \mid \boldsymbol{x}) = \frac{e^{\boldsymbol{w}_j^T \boldsymbol{x} + b_j}}{\sum_{i=1}^{C} e^{\boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x} + b_i}} \quad j = 1,2,\ldots,C$$

同样使用最大似然估计可得代价函数 $J = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{C} \left[\ln P(y_i \mid \boldsymbol{x}_i)^{I(y_i = k)} \right]$

相比于前面所述的多项逻辑斯蒂回归它的形式更加简单，但冗余了一组参数。

3. 小练习

1. 求对数几率函数的导函数，观察导函数值与原函数值有什么关系？

2. 画出 y_i 分别为 $0,1$ 时的代价函数 $J = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \ln h(\boldsymbol{x}_i) + (1-y_i)\ln[1-h(\boldsymbol{x}_i))]$ 图像（设 $n=1$），观察代价函数随 h 如何变化？求对数似然代价函数对 h 的偏导数 $\frac{\partial J}{\partial h_i}$，观察 y_i 分别为$0,1$时，$\frac{\partial J}{\partial h_i}$ 是什么？

3. 梯度下降法求解模型逻辑回归模型参数时，$\bar{\boldsymbol{g}}_{\boldsymbol{w}}, \bar{g}_b$ 具体的形式是什么？

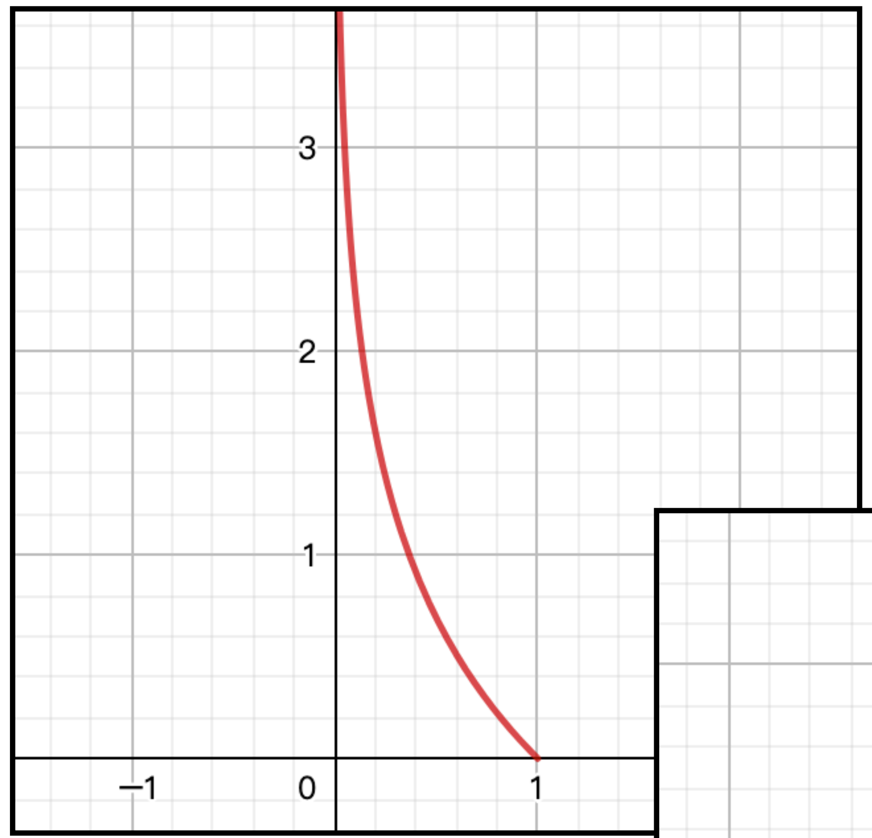
4. 思考：为什么不使用均方误差代价函数作为逻辑回归模型的代价函数？尝试使用均方误差作为代价函数，观察求得的 $\bar{\boldsymbol{g}}_{\boldsymbol{w}}, \bar{g}_b$ 有什么不同？

答案

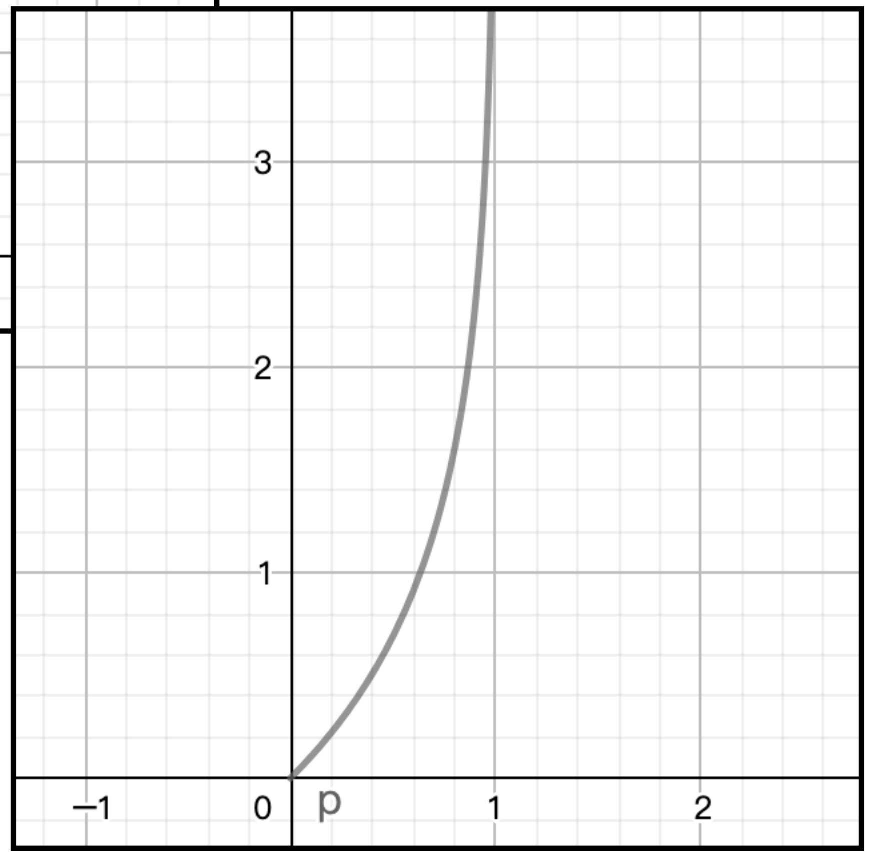
1. $y=\dfrac{1}{1+e^{-z}}$ 的导函数为 $y'=\dfrac{e^{-z}}{(1+e^{-z})^2}=y(1-y)$，关系：$y'=y(1-y)$

2. 如下：

    1. 若 $y_i=1$，则 $J=-\ln h_i$，$\dfrac{\partial J}{\partial h_i}=-\dfrac{1}{h_i}$，代价函数图像：

    2. 若 $y_i=0$，则$J=\ln(1-h_i)$，$\dfrac{\partial J}{\partial h_i}=\dfrac{1}{1-h_i}$，代价函数图像：

3. $\bar{\boldsymbol{g}}_w = \frac{1}{n}(\boldsymbol{h} - \boldsymbol{y})^T \boldsymbol{x}$, $\bar{b} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(h_i - y_i)$

4. 使用均方误差代价函数后，代价函数为非凸函数（证明请参考此处），求解容易陷入局部极值点，且使用均方误差代价函数后，函数值在接近$0,1$时，梯度接近于 0，使得模型参数更新速度变慢。

THANKS