Logistic Regression

อ. ปรัชญ์ ปิยะวงศ์วิศาล

Pratch Piyawongwisal

Today

- Recap - Linear Regression
- Logistic Regression
  - Sigmoid Function
  - Class probability
  - Softmax Regression
- Extra: Probabilistic Interpretation of Linear Regression & Logistic Regression
- Lab: IRIS dataset

Recap: Supervised Learning

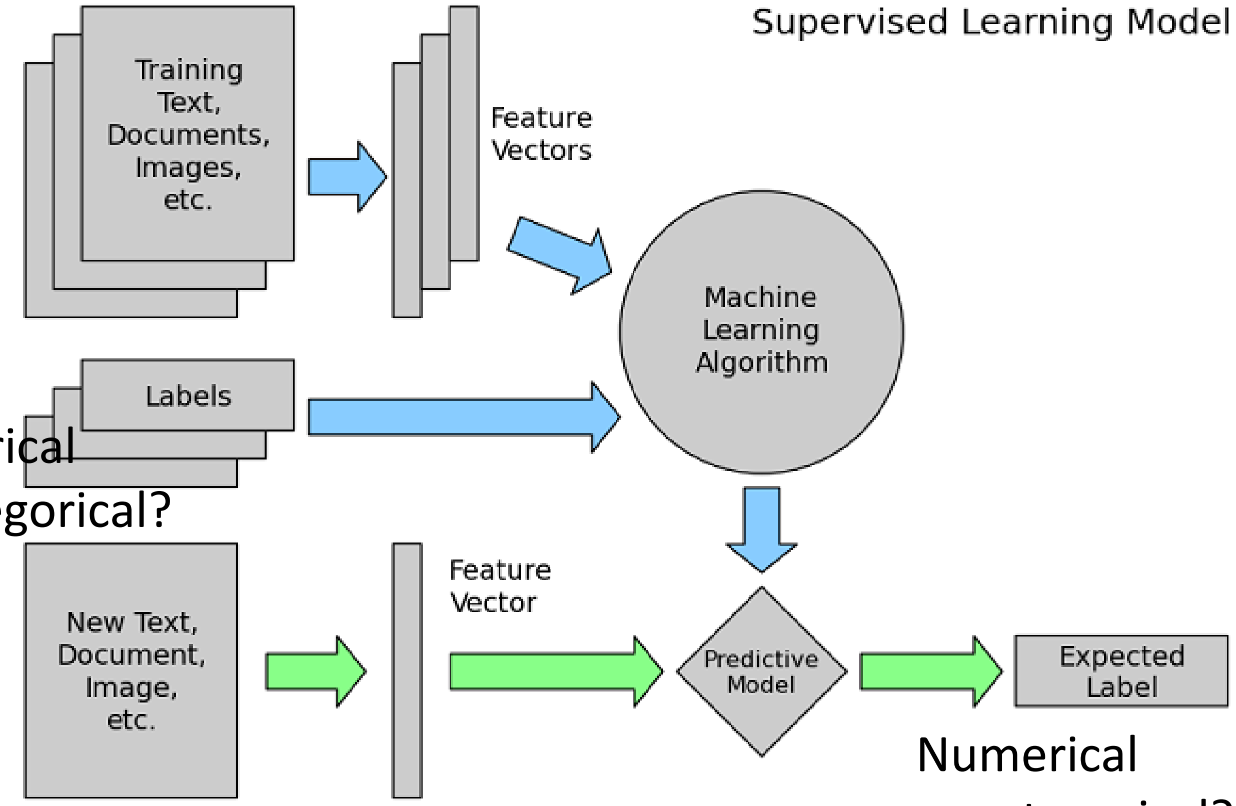
- Classification
  - Predicts class labels/categories
  - ทำนายค่าที่เป็นหมวดหมู่ = จำแนกประเภท
  - อาจมองเป็นการหา boundary ที่แบ่งข้อมูลในแต่ละหมวดหมู่ ออกจากกัน

kNN

Logistic Regression

- Regression
  - Predicts continuous values
  - ทำนายค่าที่เป็นจำนวนจริง
  - อาจมองเป็นการหา hyperplane ที่ fit กับข้อมูลที่มีมากที่สุด

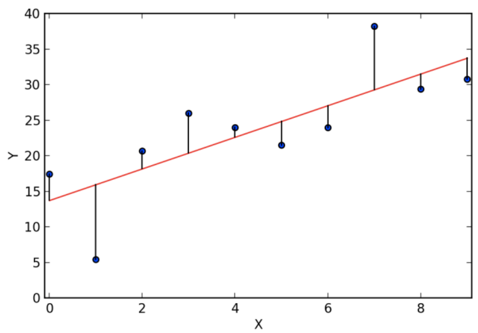
Linear Regression



Numerical or categorical?

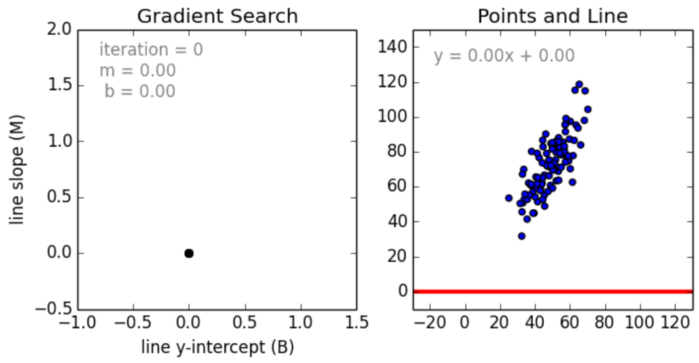
Numerical or categorical?

Linear Regression - Summary



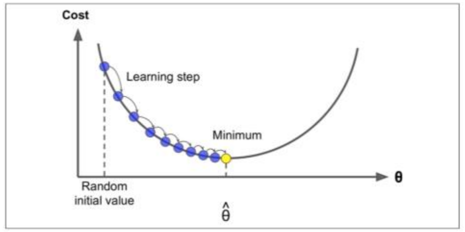
- Regression: หาโมเดลที่ fit กับข้อมูลได้ดีที่สุดได้อย่างไร?
- โมเดล: $\hat{y} = h_\theta(x) = \boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{x}$
- cost function ของโมเดล: mean-square error (MSE)

$$J(\theta) = MSE(\theta) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}(\theta^T x^{(i)} - y^{(i)})^2$$



- การ train โมเดล คือ การหาค่าของ $\hat{\theta}_{MSE} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}}\, J(\theta)$
- Solution 1: แก้สมการตรง ๆ จะได้ Normal equation: $\hat{\theta}_{MSE} = (\mathbf{X}^\mathbf{T}.\mathbf{X})^{-1}.\mathbf{X}^\mathbf{T}.\mathbf{y}$
- Solution 2: หรือใช้วิธี Gradient Descend โดยค่อยๆ update θ:

$$\theta^{(\textbf{next step})} = \theta - \eta\nabla_\theta MSE(\theta)$$



ภูเขา MSE

Exercise: Housing Price Prediction

- ข้อมูล training

ขนาด (Sq. ft.)	จำนวนห้องนอน	ระยะทางไปห้างสรรพสินค้า	ราคา (ล้านบาท)
1000	2	5	9.5
1500	3	30	8.0
2000	5	40	12.5
1700	1	5	9.0
1200	2	30	5.5

โมเดล Linear Regression (ราคาสำหรับ 1 หลัง) คือ

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 \mathrm{x}_1 + \theta_2 \mathrm{x}_2 + \theta_3 \mathrm{x}_3$$

เราสามารถเขียนข้อมูลในรูป matrix (สำหรับ m หลัง) ได้ดังนี้

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 & 1000 & 2 & 5 \\ 1 & 1500 & 3 & 30 \\ 1 & 2000 & 5 & 40 \\ 1 & 1700 & 1 & 5 \\ 1 & 1200 & 30 & 5.5 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 9.5 \\ 8.0 \\ 12.5 \\ 9.0 \\ 5.5 \end{bmatrix}$$

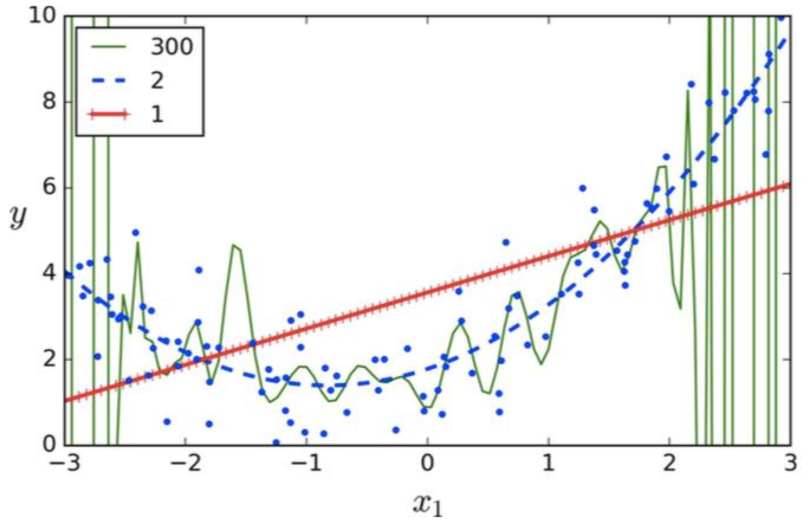
โมเดลในรูป matrix: $\mathbf{y} = \boldsymbol{X\theta}$

จากนั้นคำนวณหา $\hat{\theta}_{MSE}$ โดยใช้ normal equation:

$$\hat{\theta}_{MSE} = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}.\mathbf{X}\right)^{-1}.\mathbf{X}^{\mathrm{T}}.\mathbf{y}$$

Polynomial Regression, Regularization

- สามารถทำ Polynomial Regression โดยเพิ่มมิติข้อมูล training เช่น
  - x_i เดิม = [น้ำหนัก,ส่วนสูง,อายุ] = [70, 150, 30]
  - x_i ใหม่ = [70, 150, 30, 70^2, 150^2, 30^2]
- แต่ถ้า poly degree สูงไปอาจทำให้ overfit ☹
- Solution: เพิ่มพจน์ regularization ใน cost function



$$J(\theta) = \mathrm{MSE}(\theta) + \boxed{\alpha \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \theta_i^2}$$

Ridge (L2) regularization

ช่วยลดอิทธิพลของ polynomial degree สูงๆ อย่าง x^4, x^5 = ลด overfitting

Supplement: Probabilistic Interpretation of Linear Regression (ไม่ออกสอบ)

- ทำไม MSE จึงเป็น cost ที่ reasonable ?
- การตีความ Linear Regression จากมุมมองทางสถิติ
- การมอง training data เป็นตัวแปรสุ่ม X, y
- การประมาณ (estimate) parameter θ จากข้อมูล
  - Maximum Likelihood Estimation (MLE)

Logistic Regression

How to apply?

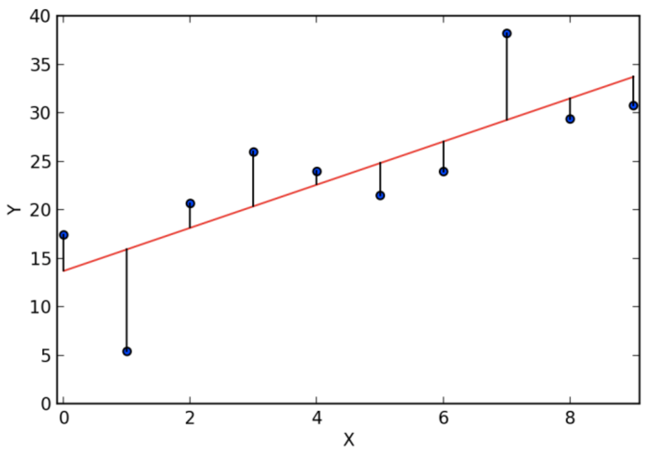
Linear Regression ➔ (Binary) Classification

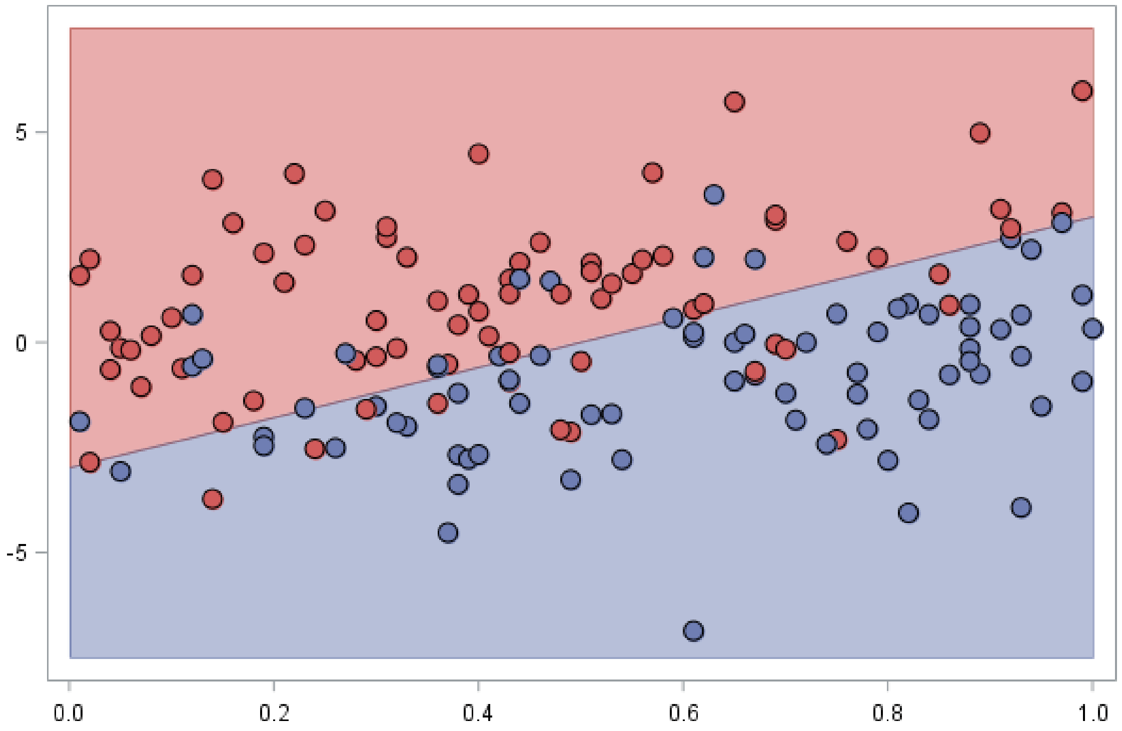
Linear Regression

- Input: $\boldsymbol{x}$ คือ input features
- Output: $\hat{y}$ เป็นจำนวนจริง

โมเดล: $\hat{y} = h_\theta(x) = \boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{x}$

- ความสัมพันธ์แบบ linear





พิจารณาปัญหา binary classification เช่น

- อีเมลเป็น spam (label=1) หรือไม่เป็นสแปม (label=0)
- คนไข้เป็นมะเร็ง (label=1) หรือไม่เป็นมะเร็ง (label=0)

* $\hat{p}$ คือค่าเป็นความน่าจะเป็น

Logistic Regression

- **Key Idea:** เราต้องการเปลี่ยนให้โมเดล $h_\theta(x)$ ทำนายเป็นค่า
  - $\hat{p}(y=1|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 1**
  - $\hat{p}(y=0|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 0**

- จากนั้นเราสามารถใช้ค่าของ $\hat{p}$ ในการ classify ข้อมูลด้วยกฎง่ายๆ นี้ได้

$$\hat{y} = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{p} < 0.5, \\ 1 & \text{if } \hat{p} \geq 0.5. \end{cases}$$

Logistic Regression

- **Key Idea:** เราต้องการให้โมเดล $h_\theta(x)$ ทำนายค่า
  - $\hat{p}(y = 1|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 1**
  - $\hat{p}(y = 0|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 0**

- Q: ใช้ $h_\theta(x)$ เดียวกันกับ Linear Regression เลยได้ไหม?

$$\hat{p}(y = 1|x;\theta) = h_\theta(x) = \boldsymbol{\theta}^T\boldsymbol{x}$$

Logistic Regression

- **Key Idea:** เราต้องการให้โมเดล $h_\theta(x)$ ทำนายค่า
  - $\hat{p}(y=1|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 1**
  - $\hat{p}(y=0|x;\theta)$ **ความน่าจะเป็นที่ label จะเป็น 0**

- Q: ใช้ $h_\theta(x)$ เดียวกันกับ Linear Regression เลยได้ไหม?

$$\hat{p}(y=1|x;\theta) = h_\theta(x) = \boldsymbol{\theta}^T\boldsymbol{x}$$

- **ปัญหา:** <u>ความน่าจะเป็น</u>ต้องมีค่าในช่วง 0-1 เท่านั้น ในขณะที่ $\boldsymbol{\theta}^T\boldsymbol{x}$ มีค่าเป็นเท่าใดก็ได้ ☹

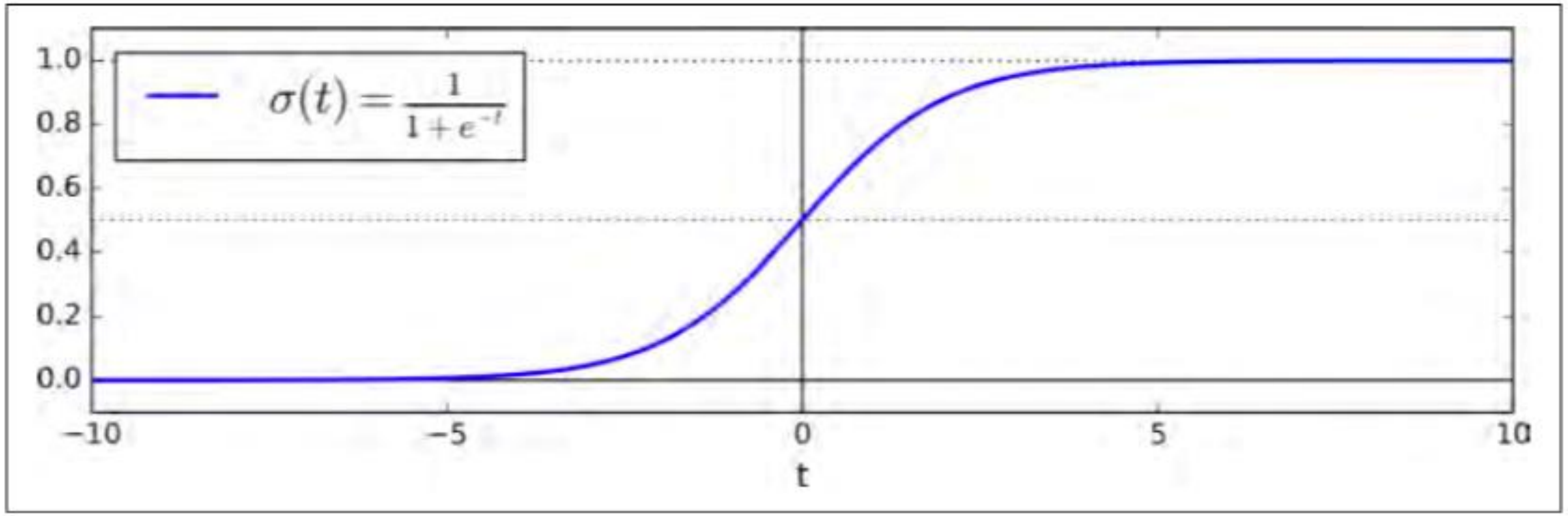
Sigmoid Function

- Solution: เปลี่ยน model เป็น

$$\hat{p} = h_\theta(x) = \sigma(\theta^T x)$$

- โดยที่ $\sigma(t)$ คือ logistic (sigmoid) function

$$\sigma(t) = \frac{1}{1 + \exp(-t)}$$

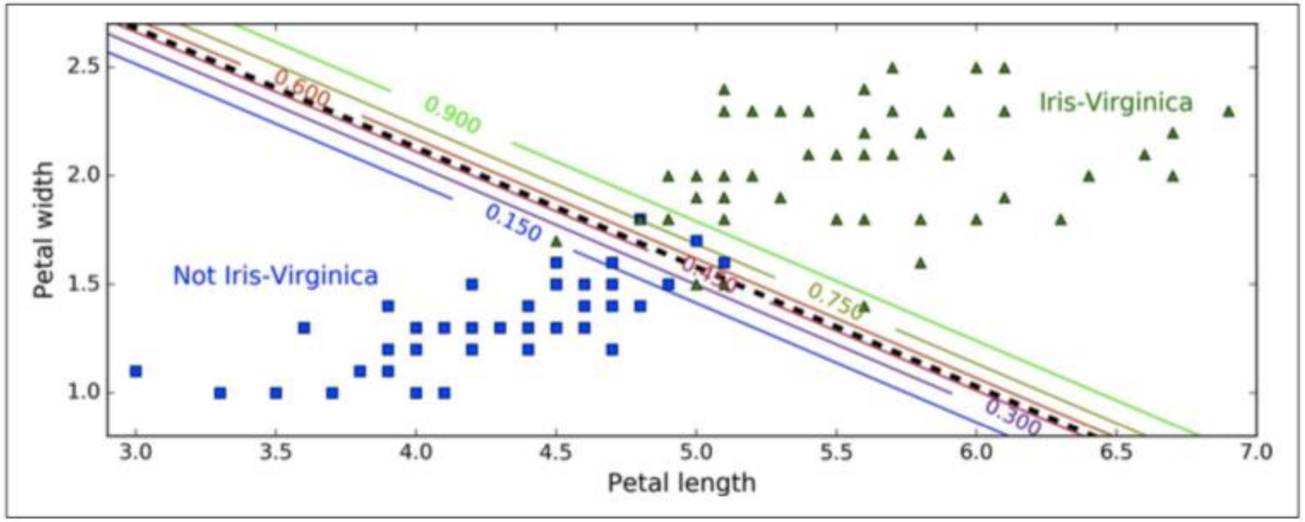


Logistic Regression Model

- โมเดล: $\hat{p}(y = 1|x; \theta) = h_\theta\ (x) = \sigma(\theta^T x)$
- กฎการตัดสินใจ

$$\hat{y} = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{p} < 0.5, \\ 1 & \text{if } \hat{p} \geq 0.5. \end{cases}$$

- โดยที่
  - Input: $\boldsymbol{x}$ คือ input features
  - Output: $\hat{y}$ เป็น binary (0/1)

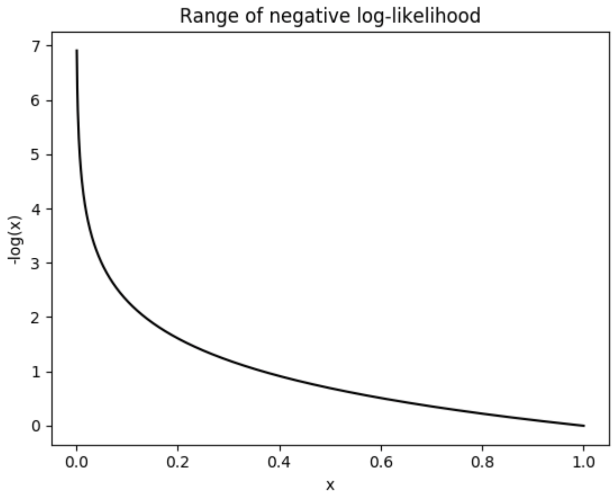


ตัวอย่าง decision boundary จากการใช้วิธี logistic regression

Cost Function

- cost function จะต้องเปลี่ยนไปด้วย
- cost สำหรับแต่ละ instance ข้อมูลคือ

$$c(\theta) = \begin{cases} -\log(\hat{p}) & \text{if } y = 1, \\ -\log(1-\hat{p}) & \text{if } y = 0. \end{cases}$$



ไอเดียคือ ถ้าเฉลยเป็นมะเร็ง (y=1)
แต่ $\hat{p}$ ทำนายว่าใกล้ 0 ค่า cost = -log(~0) จะใหญ่มาก
ถ้า $\hat{p}$ ทำนายว่าใกล้ 1 ค่า cost จะเป็น 0

- cost สำหรับทั้งชุดข้อมูลจึงเป็นดังสมการ

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[y^{(i)}log\left(\hat{p}^{(i)}\right) + \left(1-y^{(i)}\right)log\left(1-\hat{p}^{(i)}\right)\right]$$

How to train?

- จะ train โมเดลนี้อย่างไร? (minimize cost อย่างไร?)

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[y^{(i)}log\left(\hat{p}^{(i)}\right) + \left(1 - y^{(i)}\right)log\left(1 - \hat{p}^{(i)}\right)\right]$$

- ไม่มี closed-form solution แบบ Normal Eq ☹

How to train?

- จะ train โมเดลนี้อย่างไร? (minimize cost อย่างไร?)

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[y^{(i)}log\left(\hat{p}^{(i)}\right) + \left(1 - y^{(i)}\right)log\left(1 - \hat{p}^{(i)}\right)\right]$$

- ไม่มี closed-form solution แบบ Normal Eq ☹
- แต่สามารถหา gradient/partial derivative ได้ ☺

$$\frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\sigma\left(\theta^T \cdot \mathbf{x}^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)x_j^{(i)}$$

- ดังนั้น ใช้วิธี Stochastic Gradient Descent แบบเดิมได้

From Binary to Multi-class classification

- ข้อจำกัดของ Logistic Regression คือ สามารถใช้กับข้อมูลที่มี label เพียง 2 คลาสเท่านั้น
- หากต้องการ generalize ไปใช้กับ multi-class สามารถเปลี่ยนไปใช้ softmax function

$$\hat{p}_k = \sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k = \frac{\exp\left(s_k(\mathbf{x})\right)}{\sum_{j=1}^{K} \exp\left(s_j(\mathbf{x})\right)}$$

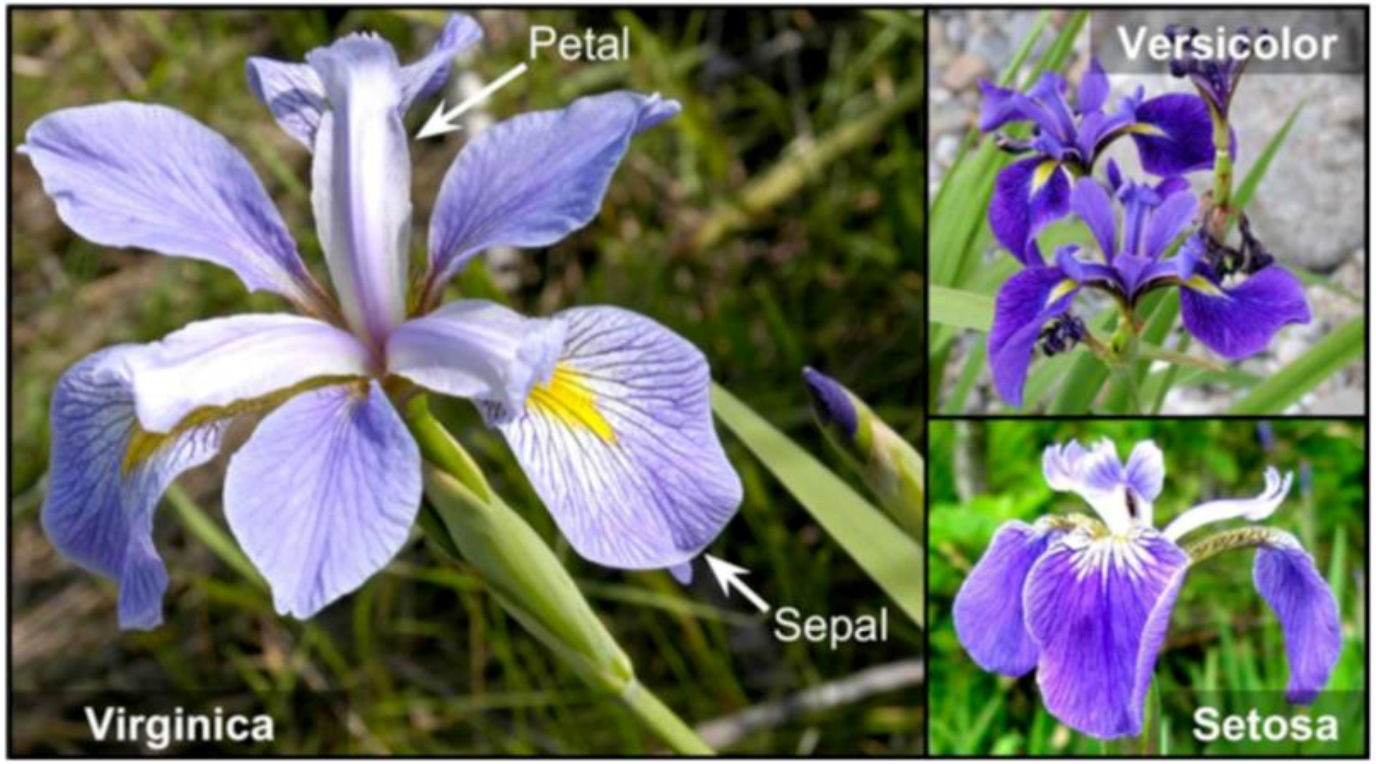
- K is the number of classes.
- $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ is a vector containing the scores of each class for the instance $\mathbf{x}$.
- $\sigma(\mathbf{s}(\mathbf{x}))_k$ is the estimated probability that the instance $\mathbf{x}$ belongs to class k given the scores of each class for that instance.

- และ cost function จะเปลี่ยนเป็น Cross-Entropy ซึ่งจะเหมือน LR cost หาก k=2

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{K} y_k^{(i)} \log\left(\hat{p}_k^{(i)}\right)$$

Lab: ใช้ Logistic Regression จำแนกพันธุ์ดอกกล้วยไม้

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
```



เป้าหมาย: จำแนก Iris-Virginica ออกจากชนิดอื่น โดยใช้ขนาดของกลีบ Sepal/Petal - width/length

Extra: Probabilistic Interpretation of Linear Regression & Logistic Regression (ไม่ออกสอบ)

Fundamental Question: Why MSE cost?

- ทำไม MSE จึงเป็น cost ที่ reasonable สำหรับงาน regression?

$$J(\theta) = MSE(\theta) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2$$

- เราสามารถอธิบายที่มาได้ด้วยมุมมองทางสถิติ (Probabilistic Interpretation)

สำคัญ

Probabilistic Interpretation of Linear Regression

- เริ่มจาก assume ว่า x, y มีความสัมพันธ์ดังสมการ

$$y^{(i)} = \theta^T x^{(i)} + \epsilon^{(i)}$$

- โดยที่ $\epsilon^{(i)}$ เป็น error ที่มาจาก random noise ในธรรมชาติที่เราไม่สามารถ model ได้
- ในทางสถิติ เรามักจะ assume ว่า $\epsilon^{(i)}$ มีการแจกแจงแบบ i.i.d. $Gaussian(0, \sigma^2)$
- เราจึงสามารถเขียน PDF ของ $\epsilon^{(i)}$ ได้ดังนี้

$$p\left(\epsilon^{(i)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(\epsilon^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Probabilistic Interpretation of Linear Regression

- จากหน้าก่อน $p\left(\epsilon^{(i)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp(-\frac{\left(\epsilon^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2})$
    - และเนื่องจาก $y^{(i)} = \theta^T x^{(i)} + \epsilon^{(i)} \quad \Rightarrow \quad \epsilon^{(i)} = y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}$
    - จึงได้ว่า $y^{(i)}|x^{(i)};\theta \sim Gaussian(\theta^T x^{(i)}, \sigma^2)$
- ดังนั้น

$$p\left(y^{(i)}|x^{(i)};\theta\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2})$$

- **เป้าหมาย**
    - หากให้ training data $\mathrm{X}, \bar{y}$ มา เราต้องการ estimate หาค่าของ θ ที่ "สอดคล้อง" กับ $\mathrm{X}, \bar{y}$ นั้นมากที่สุด
    - ในทางสถิติ เราสามารถทำได้ด้วยกระบวนการ <u>Maximum Likelihood Estimate (MLE)</u>

สำคัญ

Probabilistic Interpretation of Linear Regression

- ในสถิติ Likelihood คือ

  $\mathrm{L}(\theta) = p(\bar{y}|X;\theta)$ คือความน่าจะเป็นที่เราจะสังเกตเจอข้อมูล $\mathrm{X}, \bar{y}$ หากพารามิเตอร์มีค่าเป็น θ
- เนื่องจาก เรา assume ว่าข้อมูล $x^{(i)}, y^{(i)}$ แต่ละ instance เป็น<u>อิสระจากกัน </u>(i.i.d. เหมือน $\epsilon^{(i)}$)
- จึงได้ว่า

$$\mathrm{L}(\theta) = \prod_{i=1}^{m} p\left(y^{(i)}|x^{(i)};\theta\right)$$

$$= \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Probabilistic Interpretation of Linear Regression

- ด้วยหลักการ Maximum Likelihood Estimate (MLE)
  - เราควรจะเลือกค่า θ ที่ทำให้ $\mathrm{L}(\theta)$ สูงที่สุด
- เพื่อความง่ายในการคำนวณ เราจะ maximize log-likelihood แทน

$$
\begin{aligned}
\mathrm{l}(\theta) &= \log \mathrm{L}(\theta) \\
&= \log \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{m} \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right) \\
&= m \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2
\end{aligned}
$$

Probabilistic Interpretation of Linear Regression

- สุดท้าย การ maximize log-likelihood

$$\mathrm{l}(\theta) = m \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{1}{2\sigma^2} \boxed{\sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}$$

- มีค่าเท่ากับการ minimize พจน์ทางขวา คือ
- สรุป เราต้องการ minimize

$$\sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2$$

- ซึ่งก็คือ MSE cost function $J_{MSE}(\theta)$ ของ Linear Regression นั่นเอง
- ทั้งหมดนี้เพื่อแสดงให้เห็นว่า MSE cost ถือเป็นวิธีการที่สมเหตุในทางสถิติ

Probabilistic Interpretation of Logistic Regression

- จากที่ Linear Regression เราได้ assume ว่า $y^{(i)}|x^{(i)};\theta \sim Gaussian(\theta^T x^{(i)}, \sigma^2)$
- ใน Logistic Regression เราจะ assume ว่า $y^{(i)}|x^{(i)};\theta \sim Bernoulli(h_\theta(x))$
  - โดยที่ $h_\theta(x) = \hat{p}(y = 1|x;\theta) = \sigma(\theta^T x)$
- จากนั้นจะได้ว่า
  - $p\left(y^{(i)}|x^{(i)};\theta\right) = \left(h_\theta(x)\right)^y \left(1 - h_\theta(x)\right)^{(1-y)}$
  - $\mathrm{L}(\theta) = \prod_{i=1}^{m} p\left(y^{(i)}|x^{(i)};\theta\right) = \prod_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x)\right)^y \left(1 - h_\theta(x)\right)^{(1-y)}$
  - $\mathrm{l}(\theta) = \log \mathrm{L}(\theta) =$

- แล้วเราจะพยายาม maximize log-likelihood เหมือนเดิม
- ซึ่งจะมีค่าเท่ากับการ minimize cost function ของ logistic regression ตามที่เราได้เรียนไปแล้ว

Next week

- Support Vector Machine (SVM)

Midterm

- AI
  - Strong vs Weak
  - Turing Test
- Machine Learning
  - เป้าหมายของ Machine learning
  - กระบวนการ train, test/predict/inference
  - supervised vs unsupervised, classification vs regression
  - คำศัพท์: feature, class, label, model
- Model Selection
  - evaluation metrics: error, accuracy, FP/FN/TP/TN, precision, recall, F1, confusion matrix
  - bias-variance tradeoff, overfitting problem
  - cross-validation
- Supervised Learning Algorithms
  - kNN (ข้อเสียคืออะไร, เปลี่ยนค่า k ส่งผลกับ boundary อย่างไร)
  - Linear Regression (วิธี gradient descent ดีกว่า normal eq อย่างไร, regularize ทำเพื่ออะไร)
    - สมการ model, MSE cost function, normal equation, gradient descent, learning rate, regularization
  - Logistic Regression
    - sigmoid function