CSE: **Faculty of Computer Science and Engineering**
Thuyloi University

Hồi quy logistic
(Logistic regression)

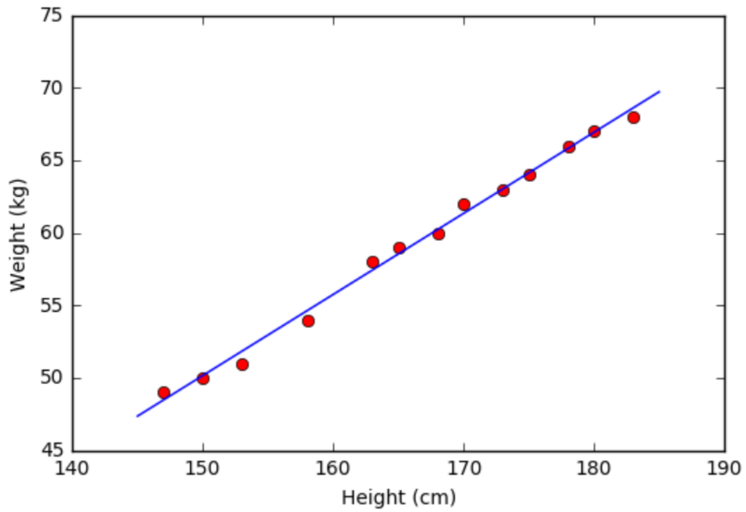
TS. Nguyễn Thị Kim Ngân

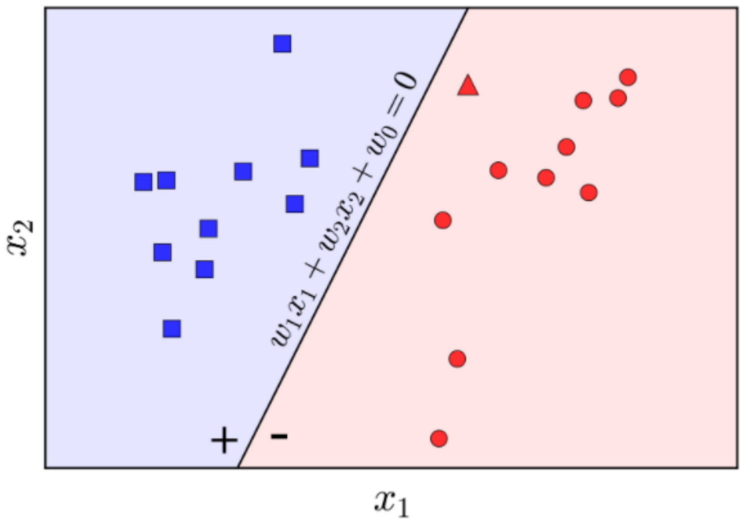
Giới thiệu

- Hai mô hình tuyến tính: Hồi quy tuyến tính (Linear Regression) và Thuật toán Perceptron (Perceptron Learning Algorithm, PLA) đều có chung một dạng:

$$y = f(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

- trong đó $f(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ là hàm kích hoạt (*activation function)*
- Với linear regression thì $f(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$, với PLA thì $f(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = sgn(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$





Giới thiệu

- Hồi quy tuyến tính sử dụng tích vô hướng $\mathbf{w}^T\mathbf{x}$ để dự đoán output y. Phương pháp này phù hợp với bài toán mà output y là một số thực không bị chặn trên và dưới
- PLA, đầu ra chỉ nhận một trong hai giá trị 1 hoặc −1, phù hợp với các bài toán *binary classification*.

Giới thiệu

- Trong phần này, ta sẽ giới thiệu mô hình có tên là *logistic regression*:
  - Đầu ra có thể được thể hiện dưới dạng xác suất (probability). Ví dụ: xác suất thi đỗ nếu biết thời gian ôn thi, xác suất ngày mai có mưa dựa trên những thông tin đo được trong ngày hôm nay,…
  - *Logistic regression*:
    - giống với linear regression ở khía cạnh đầu ra là số thực,
    - và giống với PLA ở việc đầu ra bị chặn (trong đoạn [0,1]).
  - Mặc dù trong tên có chứa từ *regression*, logistic regression thường được sử dụng nhiều hơn cho các bài toán classification.

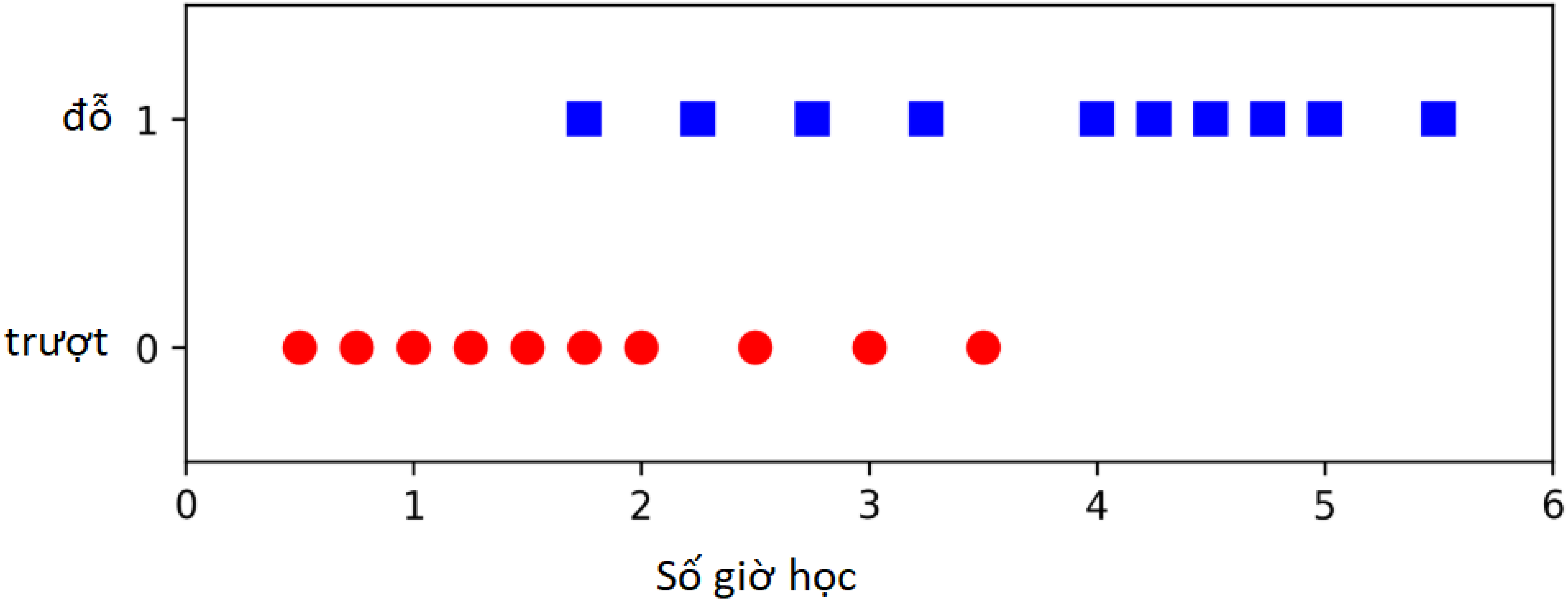
Giới thiệu

Ví dụ: Một nhóm 20 sinh viên dành thời gian trong khoảng từ 0 đến 6 giờ cho việc ôn thi và có kết quả như bảng. Hỏi rằng, em sinh viên ôn x giờ là đỗ hay trượt.

Tập huấn luyện

Hours	Pass	Hours	Pass
.5	0	2.75	1
.75	0	3	0
1	0	3.25	1
1.25	0	3.5	0
1.5	0	4	1
1.75	0	4.25	1
1.75	1	4.5	1
2	0	4.75	1
2.25	1	5	1
2.5	0	5.5	1

Giới thiệu



ta cần một mô hình *flexible* hơn.

Mô hình Logistic Regression

Đầu ra dự đoán của:

- Linear Regression:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$$

- PLA:

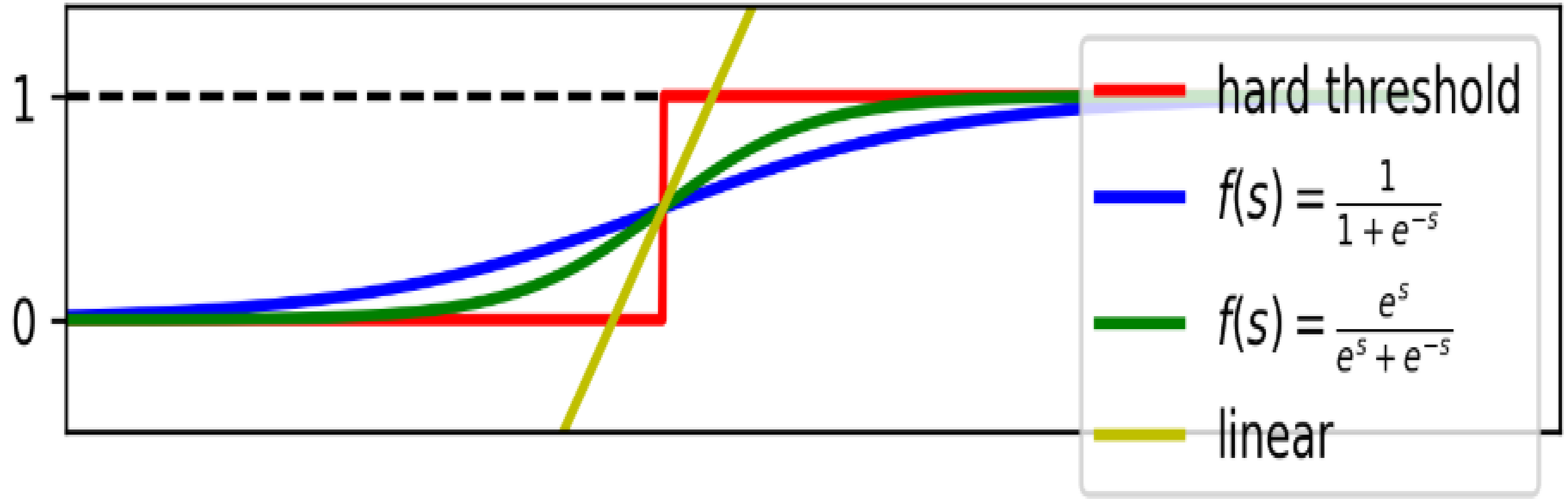
$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{sgn}(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

- Logistic regression

$$f(\mathbf{x}) = \theta(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

Mô hình Logistic Regression

- Một số hàm kích hoạt cho mô hình tuyến tính:



Mô hình Logistic Regression

- Các đường xanh biển và xanh lá phù hợp với bài toán của chúng ta hơn vì:
  - Là hàm số liên tục nhận giá trị thực, bị chặn trong khoảng $(0,1)$.
  - Nếu coi điểm có tung độ là $\frac{1}{2}$ làm điểm phân chia thì các điểm càng xa điểm này về phía bên trái có giá trị càng gần 0. Ngược lại, các điểm càng xa điểm này về phía phải có giá trị càng gần 1. Điều này *khớp* với nhận xét rằng học càng nhiều thì xác suất đỗ càng cao và ngược lại.
  - *Mượt* (smooth) nên có đạo hàm mọi nơi, có thể được lợi trong việc tối ưu.

Mô hình Logistic Regression

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

- Hàm này được sử dụng nhiều nhất vì:
  - nó bị chặn trong khoảng (0,1)
  - C $\lim_{s \to -\infty} \sigma(s) = 0; \quad \lim_{s \to +\infty} \sigma(s) = 1$
  - Có đạo hàm đơ $\sigma'(s) = \sigma(s)(1 - \sigma(s))$

Hàm mất mát

Xây dựng hàm mất mát

- Với mô hình (các activation màu xanh biển và lá), ta có thể giả sử rằng xác suất để một điểm dữ liệu $\mathbf{x}$ rơi vào class 1 là $f(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ và rơi vào class 0 là $1 - f(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$.
- Với mô hình được giả sử này, với một điểm dữ liệu training (đã biết đầu ra y), ta có thể viết như sau:

$$P(y_i = 1|\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) = f(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$$
$$P(y_i = 0|\mathbf{x}_i; \mathbf{w}) = 1 - f(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$$

- Mục đích là tìm cac nẹ so $\mathbf{w}$ sao cho $f(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$ càng gần với 1 càng tốt với các điểm dữ liệu thuộc class 1 và càng gần với 0 càng tốt với những điểm thuộc class 0.

Hàm mất mát

- Ký hiệu [redacted]ại hai biểu thức

ta có:

$$P(y_i|\mathbf{x}_i;\mathbf{w}) = z_i^{y_i}(1-z_i)^{1-y_i}$$

- Biểu thức ở trên vì:
    - khi $y_i = 1$, phần thứ hai của vế phải sẽ triệt tiêu,
    - khi $y_i = 0$, phần thứ nhất sẽ bị triệt tiêu!
- Chúng ta muốn mô hình gần với dữ liệu đã cho nhất, tức xác suất

đạt giá trị ca $P(y_i|\mathbf{x}_i;\mathbf{w})$

Hàm mất mát

- Xét toàn bộ training set với $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N] \in \mathbf{R}^{d\times N}$ và $y = [y_1, y_2, \dots, y_N]$,

$P(\mathbf{y}|\mathbf{X};\mathbf{w})$ a cần tìm **w** để $\mathbf{w} = \arg\max_{\mathbf{w}} P(\mathbf{y}|\mathbf{X};\mathbf{w})$

  - đạt giá trị lơn nnaı nay

- Bài toán tìm tham số để mô hình gần với dữ liệu nhất trên đây có tên gọi chung là bài toán *maximum likelihood estimation* với hàm số phía sau argmax được gọi là *likelihood function*.

Hàm mất mát

- GS các điểm dữ liệu được sinh ra một cách ngẫu nhiên độc lập với nhau (indepen

$$P(\mathbf{y}|\mathbf{X};\mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{N} P(y_i|\mathbf{x}_i;\mathbf{w})$$
$$= \prod_{i=1}^{N} z_i^{y_i}(1 - z_i)^{1-y_i}$$

- Trực tiếp tối ưu hàm số này theo **w** khó

Hàm mất mát

- Một phương pháp thường được sử dụng đó là lấy logarit tự nhiên (cơ số e) của *likelihood function* biến phép nhân thành phép cộng và để tránh việc số quá nhỏ.
- Sau đó lấy ngược dấu để được một hàm và coi nó là hàm mất mát. Lúc này bài toán tìm giá trị lớn nhất (maximum likelihood) trở thành bài toán tìm giá trị nhỏ nhất của à negative log likelihood):

$$
\begin{aligned}
J(\mathbf{w}) &= -\log P(\mathbf{y}|\mathbf{X}; \mathbf{w}) \\
&= -\sum_{i=1}^{N} (y_i \log z_i + (1 - y_i) \log(1 - z_i))
\end{aligned}
$$

Tối ưu hàm mất mát

- Chúng ta lại sử dụng phương pháp GD) để tìm **w**
- Công thức cập nhật (theo thuật toán GD) cho logistic regression là:

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} + \eta(y_i - z_i)\mathbf{x}_i$$

Dự đoán lớp của điểm x

- Sau khi có w, ta dự đoán nhãn

$$\hat{y} = sigmoid(w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_d x_d)$$

- Với bài toán phân lớp:

Nếu $\hat{y}$>0.5 thì **x** thuộc về lớp 1,

ngược lại , **x** thuộc về lớp 0

Ví dụ với Python

- Chạy chương trình với dữ liệu huấn luyện:

Hours	Pass	Hours	Pass
.5	0	2.75	1
.75	0	3	0
1	0	3.25	1
1.25	0	3.5	0
1.5	0	4	1
1.75	0	4.25	1
1.75	1	4.5	1
2	0	4.75	1
2.25	1	5	1
2.5	0	5.5	1