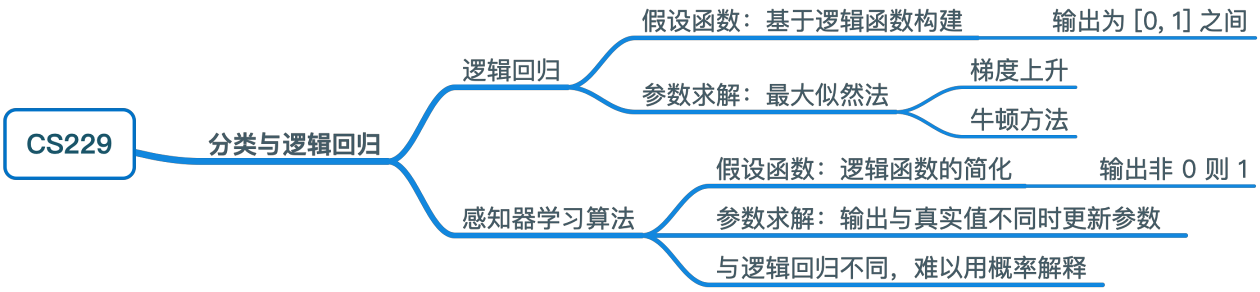
第二章 分类逻辑回归



- 之前我们讨论的是**回归问题**，即输出是连续值，现在我们来讨论输出是离散值的**分类问题**
- 本节我们专注于**二元分类**问题，即输出 y 只能取 0 和 1 两个值

逻辑回归

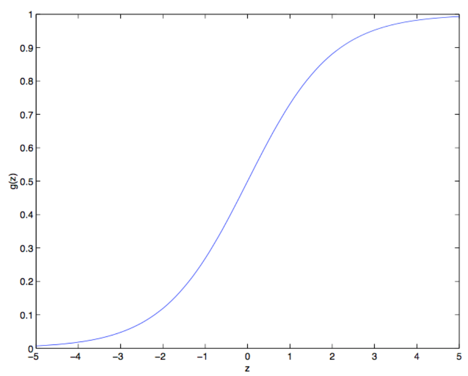
- 如果将线性回归模型直接应用于分类问题，会产生取值不在 0 和 1 之间的问题，所以我们引入**逻辑回归模型**：

$$h_\theta(x) = g(\theta^T x) = \frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}$$

  - 其中

$$g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

- $g(z)$ 被称为**逻辑函数**或 **S 型函数**，其图像如下：



  - 可以看到，当$z \to +\infty$时$g(z)$趋向于 1， 当$z \to -\infty$时$g(z)$趋向于 0，即$g(z)$的值域为$(0, 1)$，至于为什么要选择这个函数，在之后会作出解释。
- 首先给出一个关于 S 型函数求导的有用性质：

$$
\begin{aligned}
g\prime(z) &= \frac{d}{dz}\frac{1}{1+e^{-z}} \\
&= \frac{1}{(1+e^{-z})^2}(e^{-z}) \\
&= \frac{1}{1+e^{-z}} \cdot \left(1 - \frac{1}{1+e^{-z}}\right) \\
&= g(z)(1-g(z))
\end{aligned}
$$

- 确定了模型之后，我们需要找到合适的 θ 的值
  - 这里采用之前使用的**最大似然法**来选择参数（假设函数可以直接看作概率分布）
- 首先，二元分类符合**伯努利分布**，我们假设：

$$
\begin{aligned}
P(y=1 \mid x;\theta) &= h_\theta(x) \\
P(y=0 \mid x;\theta) &= 1 - h_\theta(x)
\end{aligned}
$$

  - 将上面的公式合二为一，得到：

$$
P(y \mid x;\theta) = (h_\theta(x))^y (1-h_\theta(x))^{1-y}
$$

- 假定 m 个样本之间相互独立，我们可以得到 θ 的似然函数如下：

$$
\begin{aligned}
L(\theta) &= p(\vec{y} \mid X;\theta) \\
&= \prod_{i=1}^{m} p(y^{(i)} \mid x^{(i)};\theta) \\
&= \prod_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)})\right)^{y^{(i)}} \left(1-h_\theta(x^{(i)})\right)^{1-y^{(i)}}
\end{aligned}
$$

  - 与之前类似，为了计算方便，我们使用对数似然函数来进行最大化分析：

$$
\begin{aligned}
\ell(\theta) &= \log L(\theta) \\
&= \sum_{i=1}^{m} y^{(i)} \log h(x^{(i)}) + (1-y^{(i)}) \log(1-h(x^{(i)}))
\end{aligned}
$$

- 下面要做的是找到 θ 使得 $\ell(\theta)$ 最大，由于这里是找最大值而非最小值，所以使用**梯度上升**（gradient ascent）
  - 参数的更新规则是 $\theta := \theta + \alpha\nabla_\theta\ell(\theta)$
  - 对于随机梯度上升（每次只考虑一个样本），求导过程如下：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\theta_j}\ell(\theta) &= \left(y\frac{1}{g(\theta^Tx)} - (1-y)\frac{1}{1-g(\theta^Tx)}\right)\frac{\partial}{\partial\theta_j}g(\theta^Tx) \\
&= \left(y\frac{1}{g(\theta^Tx)} - (1-y)\frac{1}{1-g(\theta^Tx)}\right) g(\theta^Tx)(1-g(\theta^Tx))\frac{\partial}{\partial\theta_j}\theta^Tx \\
&= \left(y(1-g(\theta^Tx)) - (1-y)g(\theta^Tx)\right)x_j \\
&= (y - h_\theta(x))\,x_j
\end{aligned}
$$

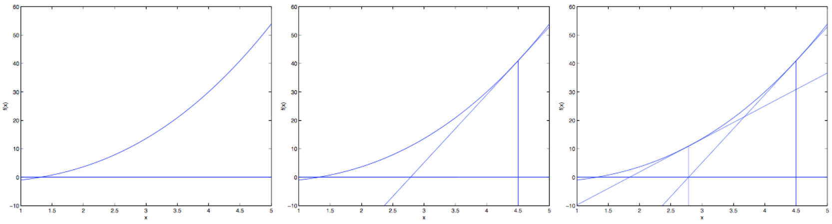
  - 在计算过程中使用到了 S 型函数的求导性质
- 综上所述，我们得到随机梯度上升的更新规则是：

$$
\theta_j := \theta_j + \alpha\left(y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)})\right)x_j^{(i)}
$$

- 这个公式和线性回归中梯度下降的公式表面上看是一样的，但实际上两者的 $h_\theta(x)$ 有所不同
- 关于更加深层次的讨论，请参看之后的 GLM 模型章节

牛顿方法

- 下面我们介绍另外一种算法来求解 $\ell(\theta)$ 的最大值，称为**牛顿方法**
- 我们通过如下的几张图来理解牛顿方法：



- 对于梯度下降，每次只是在梯度方向上下降一小步（取决于学习速率）
- 而牛顿方法是一直下降到导数（切线）和θ轴交界的那个θ。因此牛顿方法的更新规则是：

$$\theta := \theta - \frac{f(\theta)}{f'(\theta)}$$

- 下面我们将牛顿方法应用于逻辑回归，我们需要找到 $\ell(\theta)$ 的最大值，即 $\ell'(\theta) = 0$，因此令 $f(\theta) = \ell'(\theta)$，我们可以得到逻辑回归的牛顿方法更新公式：

$$\theta := \theta - \frac{\ell'(\theta)}{\ell''(\theta)}$$

- 而对于 θ为向量的情况，牛顿方法的多维形式如下（又被称为**牛顿-拉夫逊方法**）：

$$\theta := \theta - H^{-1}\nabla_\theta \ell(\theta)$$

  - 其中 $\nabla_\theta \ell(\theta)$ 是 $\ell(\theta)$ 对于每个θ_i的偏导数构成的向
  - H 是一个 $(n+1) \times (n+1)$ 的矩阵（包括截距项），称为 **海森矩阵**，其中的每一项定义为：

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 \ell(\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j}$$

- 和（批量）梯度下降相比，牛顿方法会带来更快的收敛速度和更少的迭代次数
  - 虽然每次迭代由于要计算H^{-1}，导致计算量较大，但对于参数数量不是特别大的情况，总的来说它还是更快的
  - 将牛顿方法用于求解逻辑回归的对数似然函数最大值，也被称为**费雪评分**

感知器学习算法

- 下面介绍另一种二分类方法：**感知器学习算法**
- 感知器学习算法的假设函数为：

$$h_\theta(x) = g(\theta^T x) = \begin{cases} 1 & \text{if } \theta^T x \geq 0 \\ 0 & \text{if } \theta^T x < 0 \end{cases}$$

  - 可以看到 $g(z)$ 是逻辑回归的 s 型函数的简化形式
  - 逻辑函数是连续的在 [0,1] 区间上，而感知器直接非0则1
- 感知器学习算法的参数更新规则如下：

$$\theta_j := \theta_j + \alpha \left(y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)}) \right) x_j^{(i)}$$

- 19世纪60年代，感知器被看作是大脑工作中独立神经元的粗糙的模型
- 虽然直观看上去，感知器和之前看到的逻辑回归或线性回归很像，但是其实是非常不一样的算法
  - 因为，对于感知器，很难赋予一种有意义的概率解释，或使用最大似然估计算法来进行推导