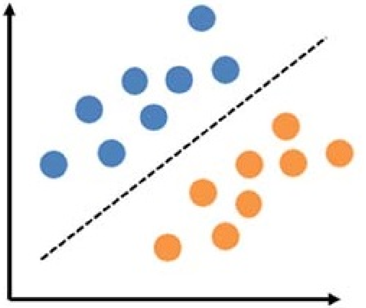
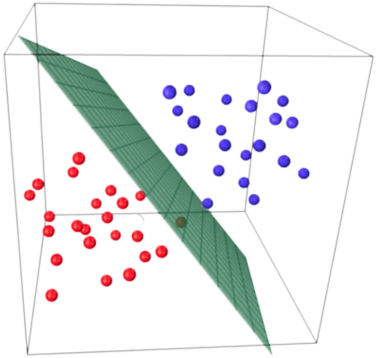
Regresión Logística

Alan Reyes-Figueroa
Introducción a la Ciencia de Datos (Aula 32) 16.mayo.2022

Clasificadores Lineales

Vimos algunos clasificadores: K-nn, bayesiano, análisis discriminante.
Queremos estudiar otra familia de clasificadores sencillos: aquellos que dependen de una ecuación lineal (2 clases).





Clasificadores lineales

En este caso, buscamos una frontera de clasificación en la forma de un hiperplano en $\mathbb{R}^d$, dada por

$$w_0 + \mathbf{w}^T\mathbf{x} = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_dx_d = 0, \tag{1}$$

donde $\mathbf{w} = (w_1, \ldots, w_d) \in \mathbb{R}^d$ y $w_0 \in \mathbb{R}$.

Por simplicidad, haremos una identificación del conjunto de datos $\mathbb{X}$ en $\mathbb{R}^{d+1}$ mediante el mapa biyectivo $i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d+1}$ dado por

$$i(\mathbf{x}) = (1, \mathbf{x}).$$

Similarmente, denotaremos al vector $(w_0, w_1, \ldots, w_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$ simplemente por $\mathbf{w}$. Así, la ecuación lineal (1) se escribe como $\mathbf{w}^T\mathbf{x} = 0$:

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x} = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_dx_d = 0. \tag{2}$$

En general, separar un conjunto de datos (consistente de dos clases) mediante un hiperplano no siempre es posible. Distinguimos dos casos de conjuntos:

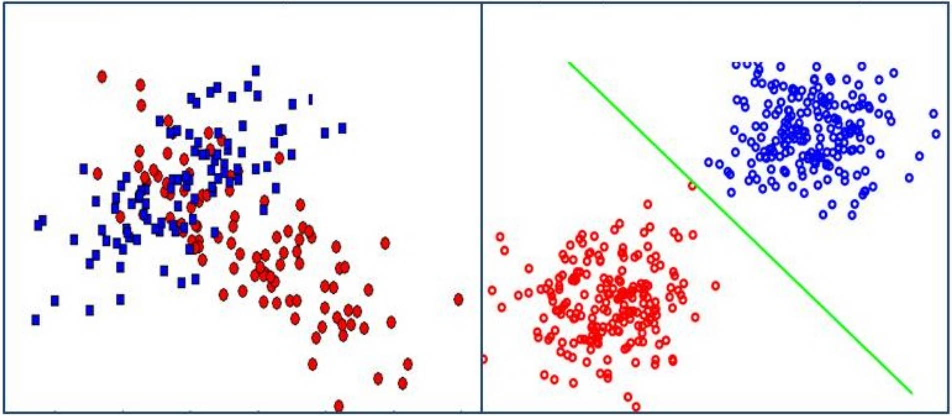
Definición

*Un conjunto de datos $\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n\times(d+1)}$ que consiste de dos clases $y_i \in \{0, 1\}$ se llama **linealmente separable**, si existe un vector $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$ tal que la ecuación lineal $\mathbf{w}^T\mathbf{x} = 0$ es una frontera de clasificación del conjunto $\mathbb{X}$. Esto es*

$$y_i = \mathbf{1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i > 0), \quad \textit{para todo } i = 1, 2, \ldots, n.$$

Caso contrario, diremos que $\mathbb{X}$ no es linealmente separable.

Clasificadores Lineales



Separabilidad lineal: (a) un conjunto no linealmente separable; (b) un conjunto linealmente separable.

Clasificadores Lineales

Típicamente los clasificadores lineales se trabajan de dos formas

- Etiquetas 0 y 1:
  En este caso, la clasificación de obtiene mediante el criterio
  $$y(\mathbf{x}) = \mathbf{1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} > 0).$$
- Etiquetas -1 y 1:
  En este caso, la clasificación de obtiene mediante el criterio
  $$y(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^T\mathbf{x}).$$

En ambos casos, si queremos hallar el hiperplano separante óptimo $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{d+1}$, ambos criterios usan una función no-diferenciable.

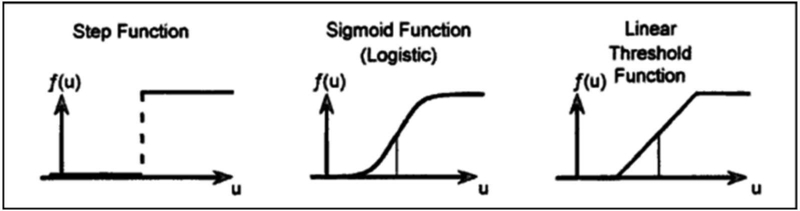
Regresión Logística

Consideramos el caso del clasificador logístico Aquí consideramos etiquetas $\{0, 1\}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$ y usamos el criterio de clasificación $\mathbf{1}(\mathbf{x} > 0)$.

El clasificador logístico utiliza la **función sigmoide estándar**

$$\sigma(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + e^{-\mathbf{x}}}$$

como una aproximación suave de la función $\mathbf{1}(\mathbf{x} > 0)$.



UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Regresión Logística

Observaciones:

- $\sigma : \mathbb{R} \to (0, 1)$ es una función de clase C^∞ que transforma números reales en valores que pueden interpretarse como probabilidades.

- En general, $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = \frac{1}{1+\exp(-\mathbf{w}^T\mathbf{x})}$ es una aproximación suave de $\mathbf{1}(\mathbf{w}^T\mathbf{x} > 0)$.

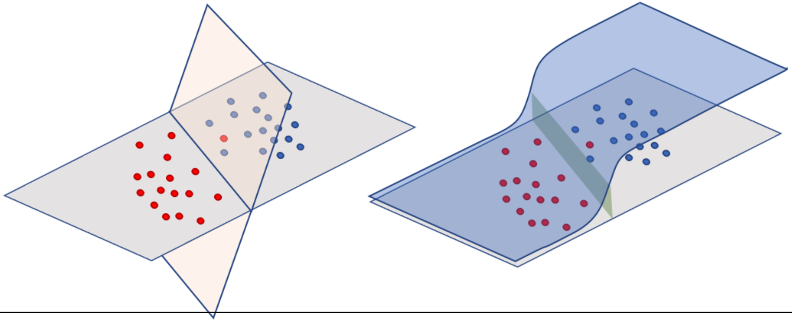
- σ tiene la siguiente propiedad: $\frac{d}{d\mathbf{x}}\sigma(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{x})\big(1 - \sigma(\mathbf{x})\big)$.
  Prueba:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\mathbf{x}}\sigma(\mathbf{x}) &= \frac{e^{-\mathbf{x}}}{(1+e^{-\mathbf{x}})^2} = \left(\frac{1}{1+e^{-\mathbf{x}}}\right)\left(\frac{e^{-\mathbf{x}}}{1+e^{-\mathbf{x}}}\right) \\ &= \sigma(\mathbf{x})\big(1 - \sigma(\mathbf{x})\big). \end{aligned}$$

Regresión Logística

Dado un conjunto de datos $\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n\times(d+1)}$ con etiquetas binarias, nuestro interés es hallar el vector óptimo de separación $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{d+1}$ tal que $y(\mathbf{x})$ sea lo más próximo al clasificador logístico

$$\widehat{y}(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) = \frac{1}{1+e^{-\mathbf{w}^T\mathbf{x}}}.$$



<u>Recordatorio</u>: Regresión lineal.
Recordemos la función de pérdida en el caso de regresión. Tenemos

$$L = \mathbb{E}\,L(y_i, \widehat{y}_i) = \frac{1}{n}||\mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{w}||^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^2.$$

En este caso podemos resolver de forma directa los coeficientes óptimos **w**. Para ello, basta diferenciar con respecto de **w**:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{w}} L &= \nabla_{\mathbf{w}}\frac{1}{n}||\mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{w}||^2 = \nabla_{\mathbf{w}}\frac{1}{n}\langle \mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{w}, \mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{w}\rangle \\ &= -\frac{2}{n}\langle \mathbb{X}, \mathbf{y} - \mathbb{X}\mathbf{w}\rangle = -\frac{2}{n}(\mathbb{X}^T\mathbf{y} - \mathbb{X}^T\mathbb{X}\mathbf{w}) = 0. \end{aligned}$$

$\Rightarrow \mathbb{X}^T\mathbb{X}\mathbf{w} = \mathbb{X}^T\mathbf{y}$, lo que conduce a la solución óptima $\mathbf{w}^* = (\mathbb{X}^T\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^T\mathbf{y}$.

Regresión Logística

En el caso de la clasificación logística, tenemos la función de pérdida

$$L = \mathbb{E}\, L(y_i, \widehat{y}_i) = \frac{1}{n}||\mathbf{y} - \sigma(\mathbb{X}\mathbf{w})||^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)^2.$$

Al replicar la estrategia anterior, resulta:

$$\nabla_{\mathbf{w}} L = \nabla_{\mathbf{w}}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)^2 = -\frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)\,\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)\,\mathbf{x}_i.$$

Esta ecuación ya no produce una solución directa para $\mathbf{w}$. Sin embargo, es posible utilizar métodos iterativos para hallar el óptimo. Por ejemplo, podemos usar métodos de *descenso gradiente*

$$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{w}^{(k)} - \alpha\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}^{(k)}).$$

Enfoque probabilístico

Sea Z una v.a. con distribución $Ber(p)$, $0 < p < 1$. Tenemos las probabilidades condicionales

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Z = 1;\ p) &= \mathbb{P}(Z = 1;\ \mu = p) = p, \\ \mathbb{P}(Z = 0;\ p) &= \mathbb{P}(Z = 0;\ \mu = p) = 1 - p. \end{aligned}$$

Dado un conjunto de datos $(\mathbf{x}_i, y_i)$ donde los $y_i \in \{0, 1\}$, podemos modelar el comportamiento de las y_i como una v.a. $Y \sim Ber(p)$, donde $\widehat{p} = \mathbb{E}(y_i = 1) = \frac{m}{n}$, con m el número de datos en la clase $y = 1$.

Tenemos

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(y_i = 1 \mid \mathbf{x}_i;\ p) &= p, \\ \mathbb{P}(y_i = 0 \mid \mathbf{x}_i;\ p) &= 1 - p. \end{aligned}$$

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Enfoque probabilístico

Sin embargo, queremos que nuestro modelo represente p en términos del parámetro lineal $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{d+1}$. Hacemos

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(y_i = 1 \mid \mathbf{x}_i;\, \mathbf{w}) &= \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i),\\ \mathbb{P}(y_i = 0 \mid \mathbf{x}_i;\, \mathbf{w}) &= 1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i).\end{aligned}$$

Como Y es Bernoulli, podemos escribir la distribución condicional por

$$\mathbb{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i;\, \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^{y_i}\big(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)^{1-y_i}.$$

Asumiendo independencia de las y_i, la verosimilitud de $\mathbf{w}$ dados los datos es

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}) = \mathbb{P}(\mathbf{y} \mid \mathbb{X};\, \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{n} \mathbb{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i;\, \mathbf{w}) = \prod_{i=1}^{n} \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^{y_i}\big(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)^{1-y_i}.$$

Para hallar el **w** óptimo, maximizamos la log-verosimilitud

$$\begin{aligned}
\ell(\mathbf{w}) &= \log \mathcal{L}(\mathbf{w}) = \log \prod_{i=1}^{n} \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)^{y_i} \big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)^{1-y_i} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \Big[y_i \log \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) + (1-y_i) \log \big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big) \Big].
\end{aligned}$$

Diferenciando en **w**, resulta

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{w}} \ell(\mathbf{w}) &= \nabla_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} \Big[y_i \log \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) + (1-y_i) \log \big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big) \Big] \\
&= \sum_{i=1}^{n} \Big[\frac{y_i}{\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)} \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)\,\mathbf{x}_i - \frac{1-y_i}{1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)} \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big)\,\mathbf{x}_i \Big] \\
&= \sum_{i=1}^{n} \Big(y_i\big(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)\big) - (1-y_i)\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i) \Big)\,\mathbf{x}_i.
\end{aligned}$$

Así,

$$\nabla_{\mathbf{w}} \ell(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)\right) \mathbf{x}_i. \tag{3}$$

Finalmente, usamos (3) en el método de descenso gradiente

$$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{w}^{(k)} + \alpha \nabla_{\mathbf{w}} \ell(\mathbf{w}^{(k)}).$$

Tenemos el siguiente
Algoritmo:

1.) Inicio: Elegir $\alpha > 0$, $\mathbf{w}^{(0)} \in \mathbb{R}^{d+1}$ arbitrario.
2.) Repetir para $k = 0, 1, 2, \ldots$ (hasta cierto criterio de paro):
  - Calcular $\nabla_{\mathbf{w}} \ell(\mathbf{w}^{(k)})$ como en (3).
  - Recalcular $\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{w}^{(k)} + \alpha \nabla_{\mathbf{w}} \ell(\mathbf{w}^{(k)})$.

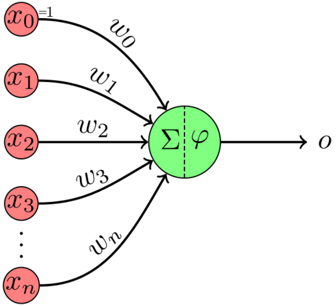
Enfoque probabilístico

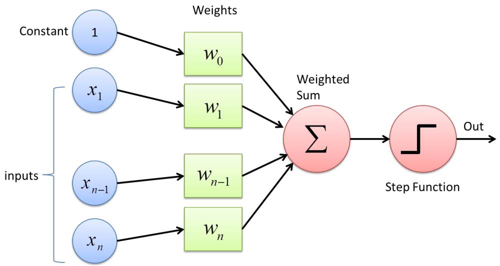
Observaciones:

- El método de descenso "mueve" $\mathbf{w}^{(k)}$ según la contribución de los datos mal clasificados (proporcional a la diferencia $y_i - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$).

- La convergencia de este método depende del conjunto de datos:
  - El método de descenso gradiente siempre converge (a un mínimo local) para el caso de un conjunto linealmente separable.
  - La convergencia puede verse afectada en el caso no separable. Esto peude resolverse modificando o usando un método de descenso más elaborado (curso de Optimización).

- Las ideas aquí descritas dan origen a modelos lineales de transferencia de información (modelos neuronales). Por ejemplo, **el perceptrón**.





El modelo perceptrón.

La salida esde la forma $y = \varphi(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$, donde $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ es una *función de transferencia* o *función de activación*.

El perceptrón