Clasificación

Mathieu Kessler

Departamento de Matemática Aplicada y Estadística
Universidad Politécnica de Cartagena

Cartagena

El problema de la clasificación

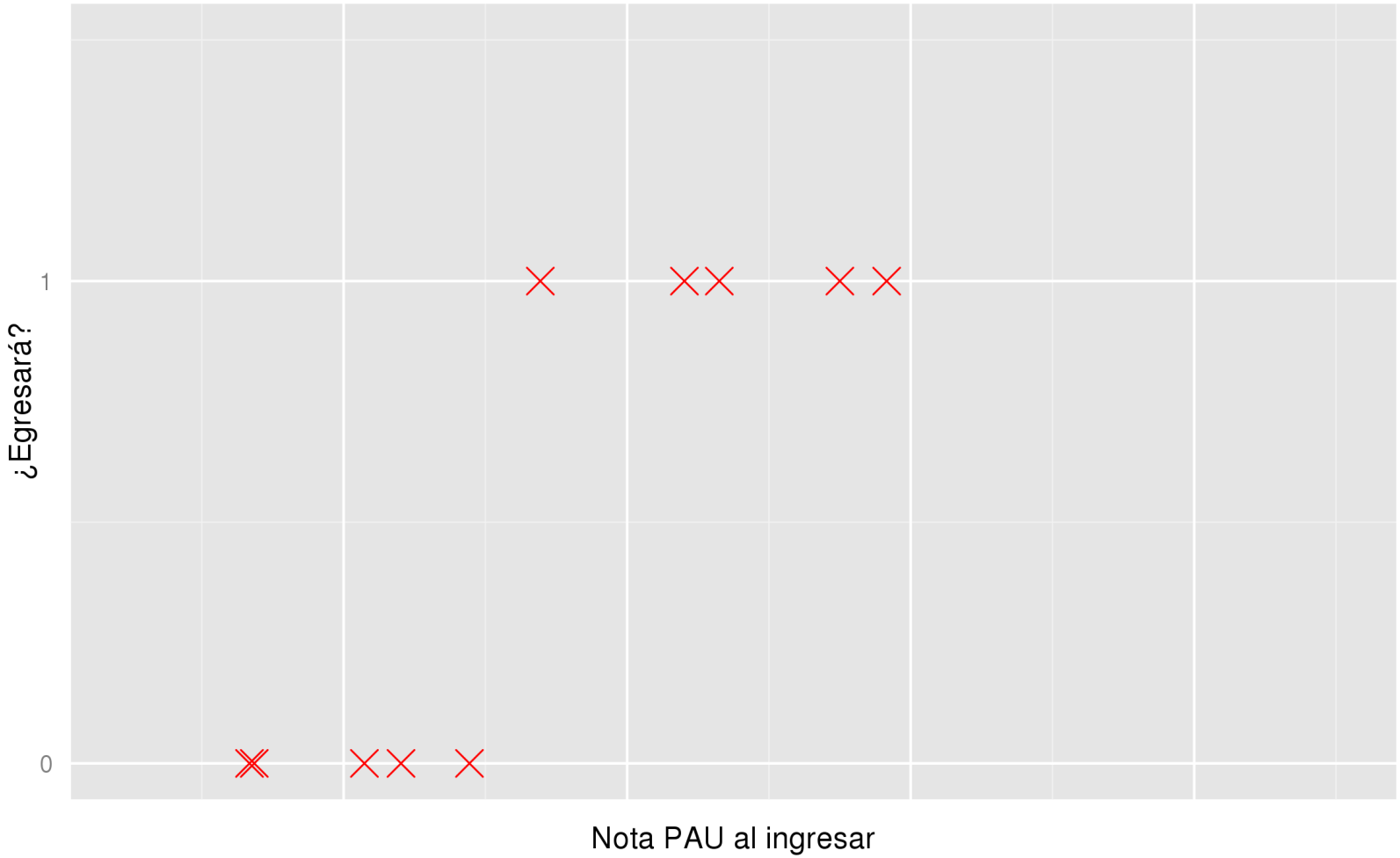
- Basándonose en el valor de características, queremos clasificar cada individuo en una determinada categoría.
- Empezaremos con la clasificación en dos categorías posibles.
- Las características: $x_0, x_1, \ldots, x_k$; consideraremos la variable "respuesta" y dicotómica: toma valores 0 ó 1.
- Ejemplos:
  1. Queremos clasificar los emails en SPAM o NO SPAM.
  2. Queremos clasificar operaciones de compra online en FRAUDULENTA o NO FRAUDULENTA.
  3. Queremos clasificar tumores en BENIGNO o MALIGNO.
  4. Queremos clasificar alumnos de nuevo ingreso en "EGRESARÁ" o "ABANDONARÁ".

Ejemplo: predicción del abandono

Queremos predecir el abandono de un alumno en función de su nota de PAU al ingresar.

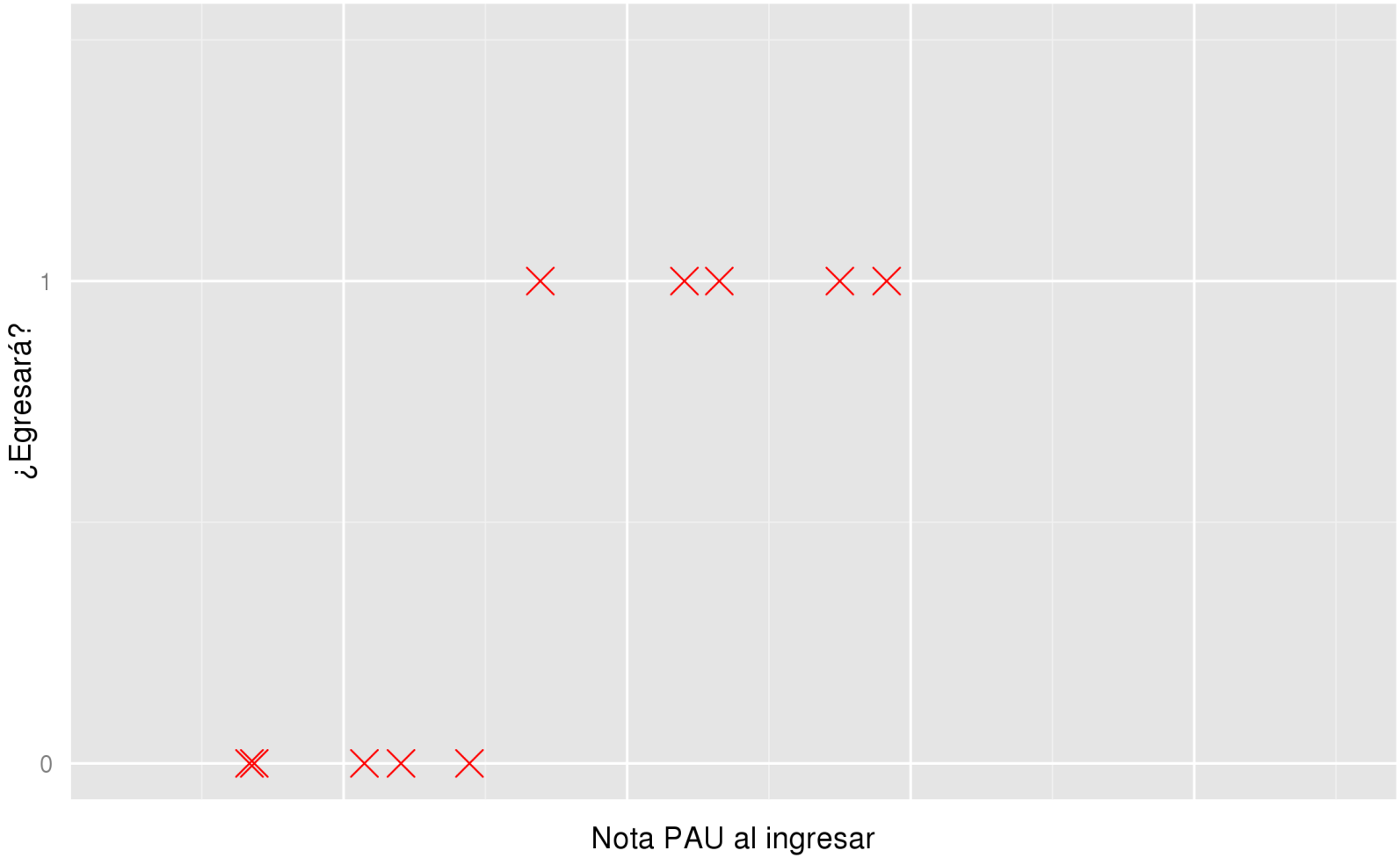
Ejemplo: predicción del abandono

Codificamos: $y = 1 \leftrightarrow$ "Egresará", $y = 0 \leftrightarrow$ "Abandonará".



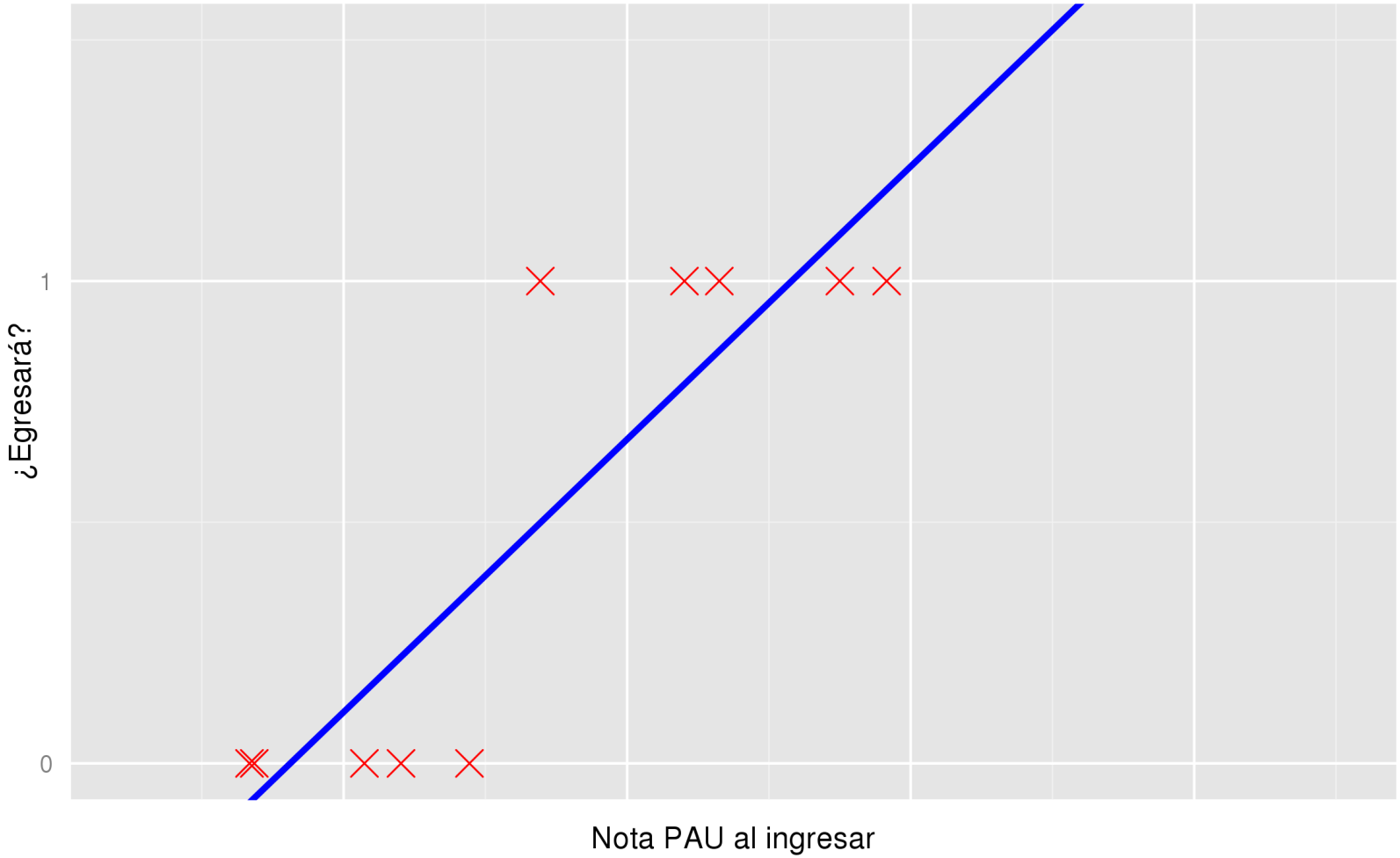
Ejemplo: predicción del abandono

Si usamos regresión lineal, la recta ajustada $y = h_\theta(x)$ es



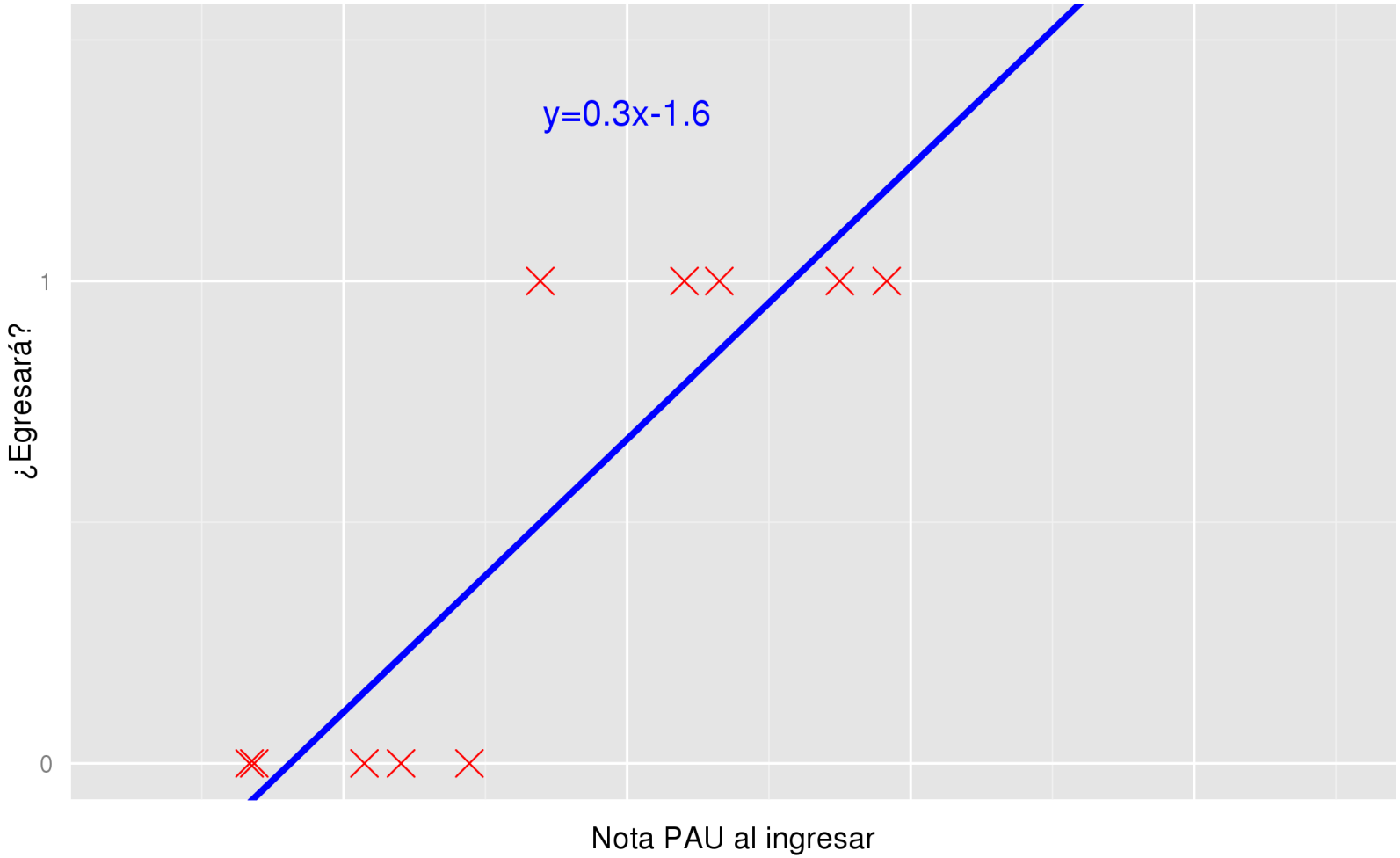
Ejemplo: predicción del abandono

Si usamos regresión lineal, la recta ajustada $y = h_\theta(x)$ es



Ejemplo: predicción del abandono

Si usamos regresión lineal, la recta ajustada $y = h_\theta(x)$ es



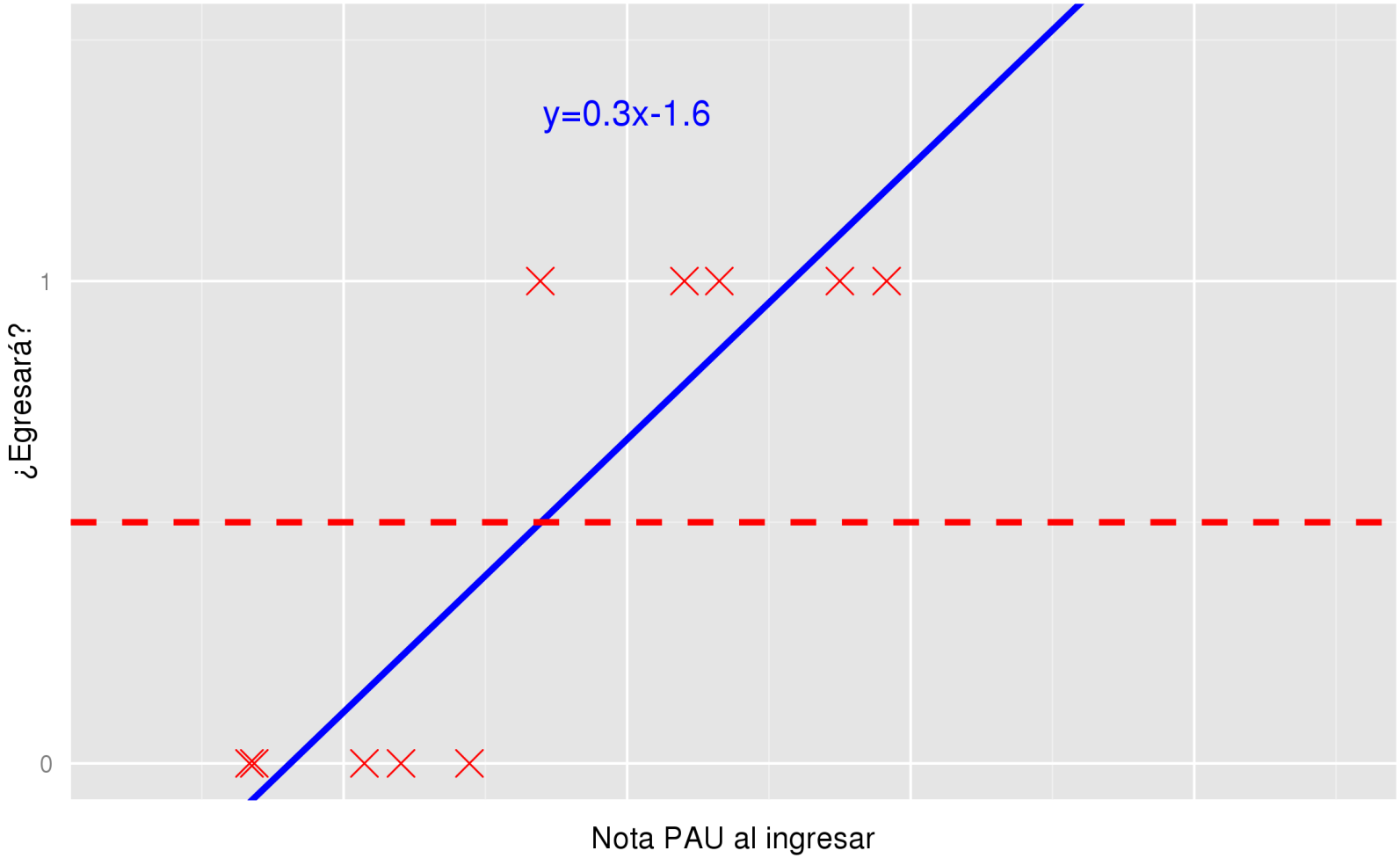
Ejemplo: predicción de abandono

¿ Podemos usar esta recta ajustada $y = 0.3x - 1.6$ para hacer predicción ante un nuevo alumno que ingresa?
¡Sí! Podemos aprovecharla para definir una regla de decisión:

1. Sustituimos la nota PAU de ingreso del nuevo alumno en la ecuación ajustada. Obtenemos $\Rightarrow \hat{y}$.
2. Si $\hat{y} > 0.5$, predecimos que egresará.
3. Si $\hat{y} < 0.5$, predecimos que abandonará.

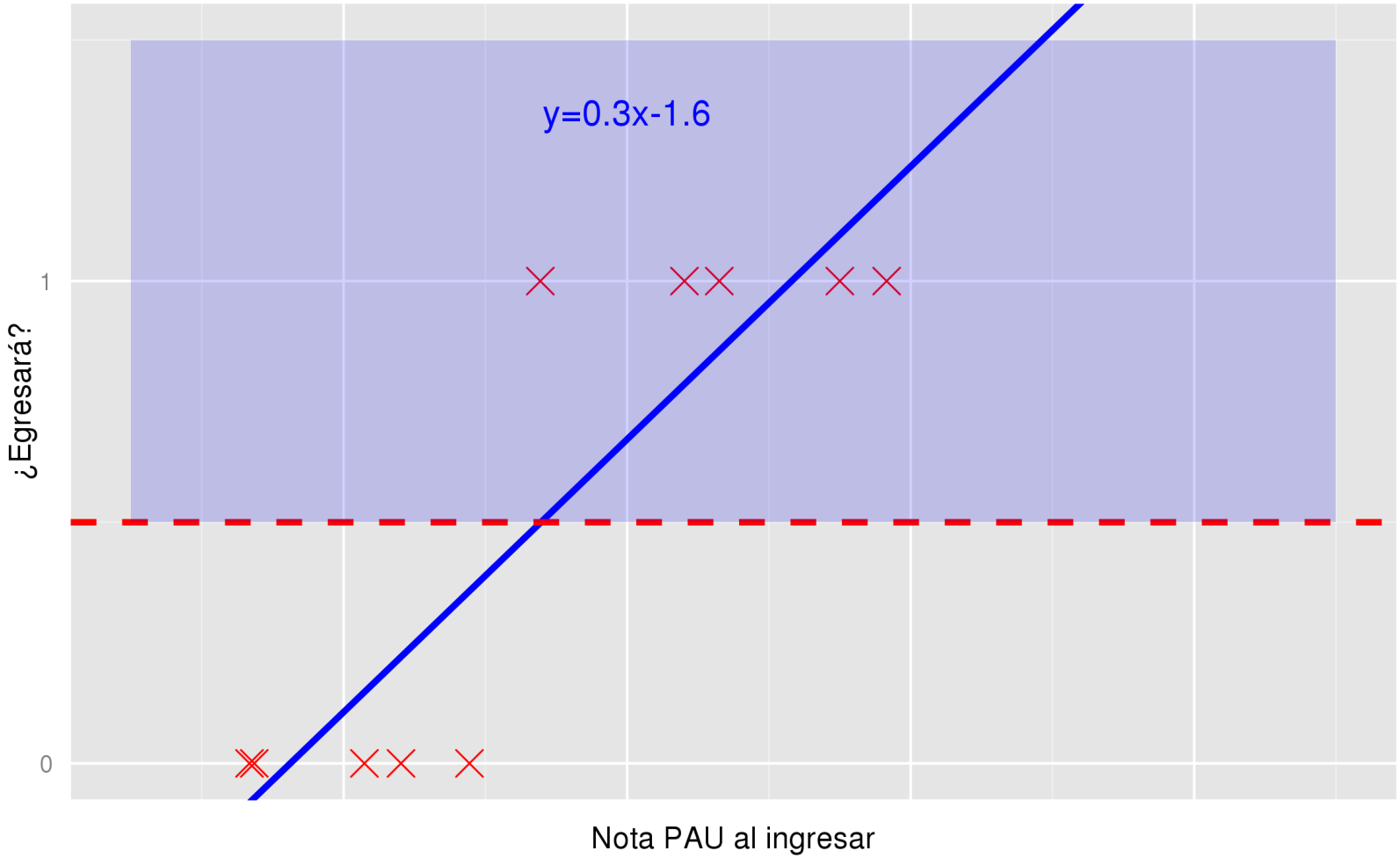
Ejemplo: predicción del abandono

Gráficamente, nuestro criterio de decisión sobre $\hat{y}$:



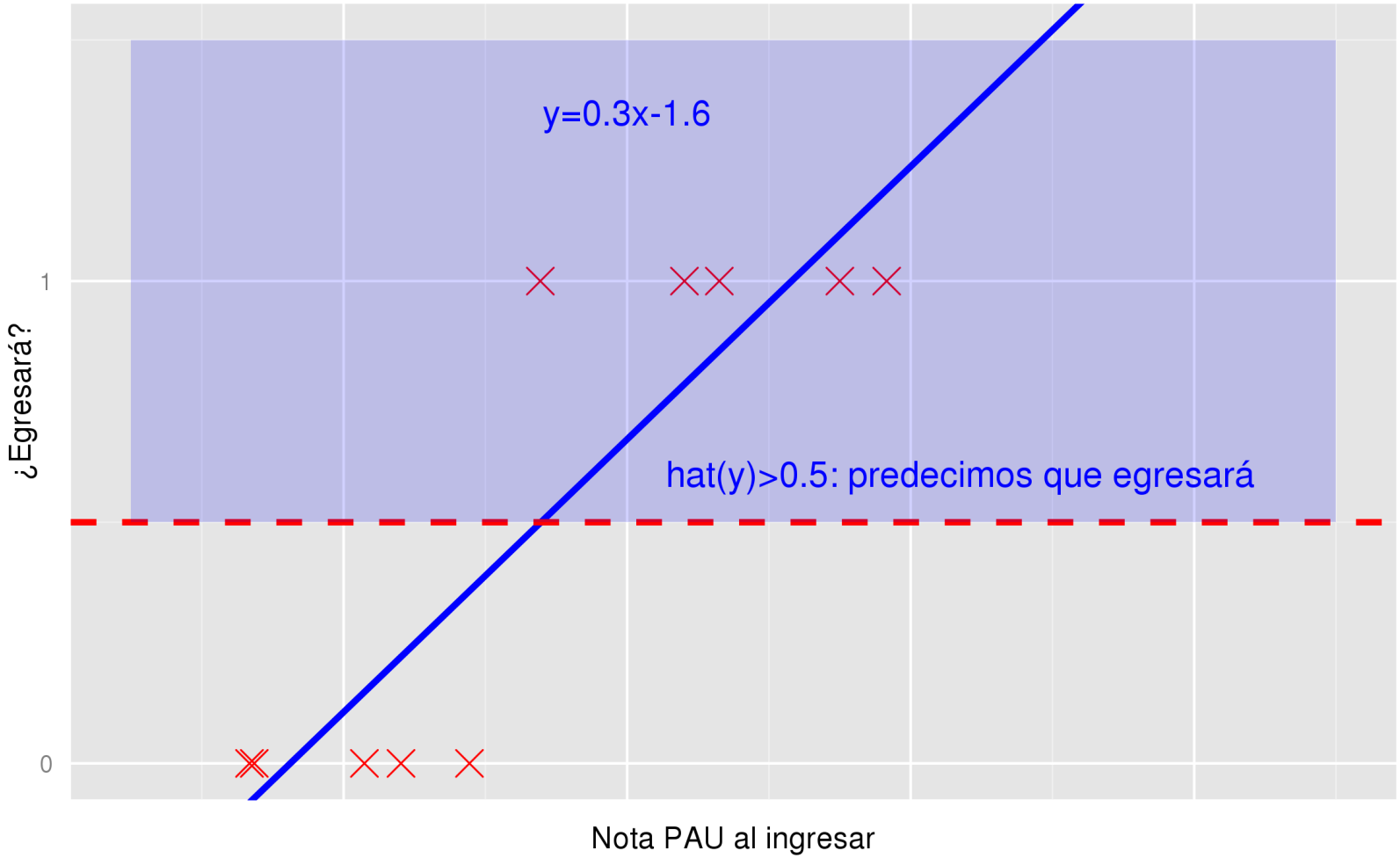
Ejemplo: predicción del abandono

Gráficamente, nuestro criterio de decisión sobre $\hat{y}$:



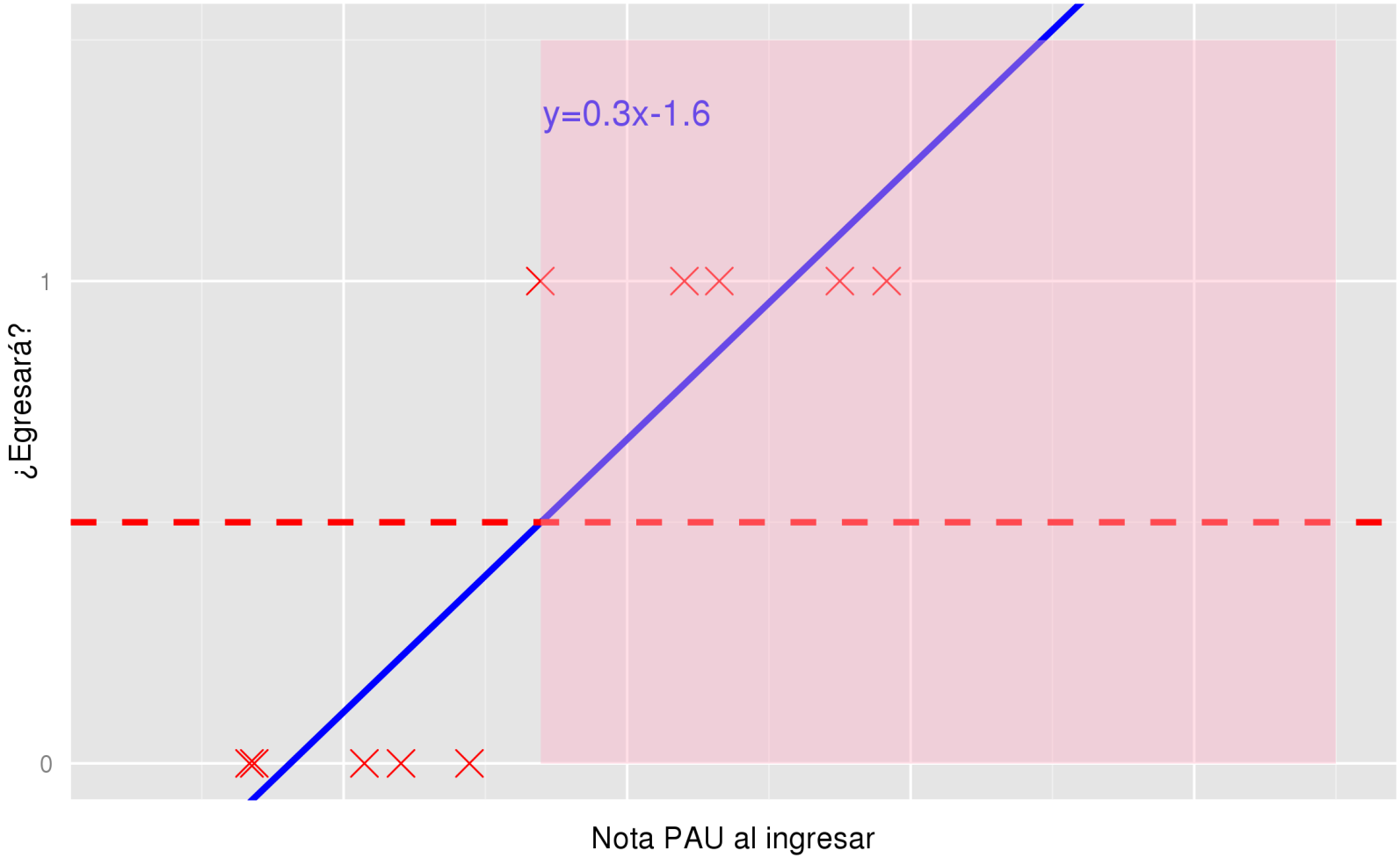
Ejemplo: predicción del abandono

Gráficamente, nuestro criterio de decisión sobre $\hat{y}$:



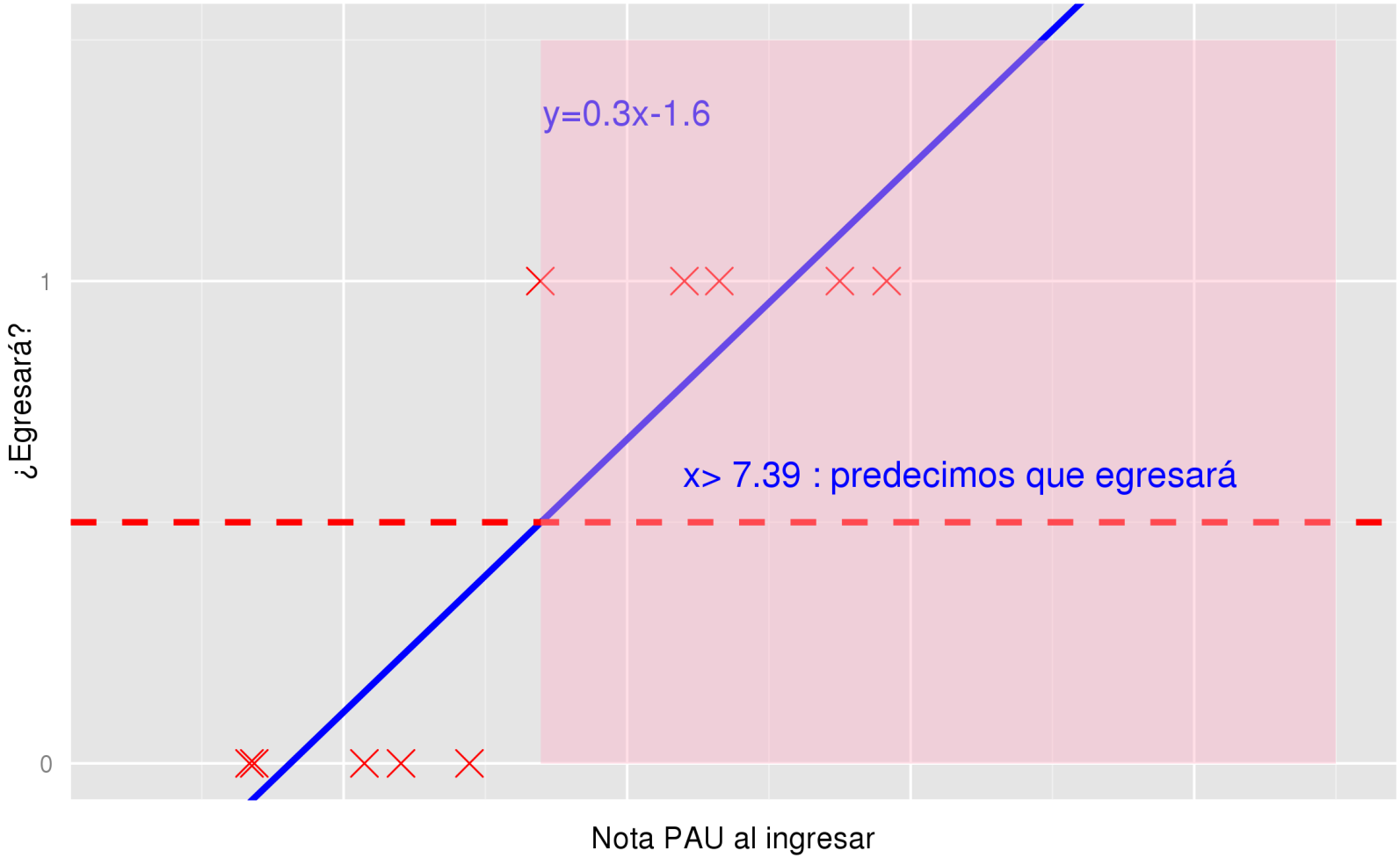
Ejemplo: predicción del abandono

Lo traducimos en términos de x, :



Ejemplo: predicción del abandono

Decir $\hat{y} = 0.3x - 1.6 > 0.5$ es equivalente a $x > 7.39$,

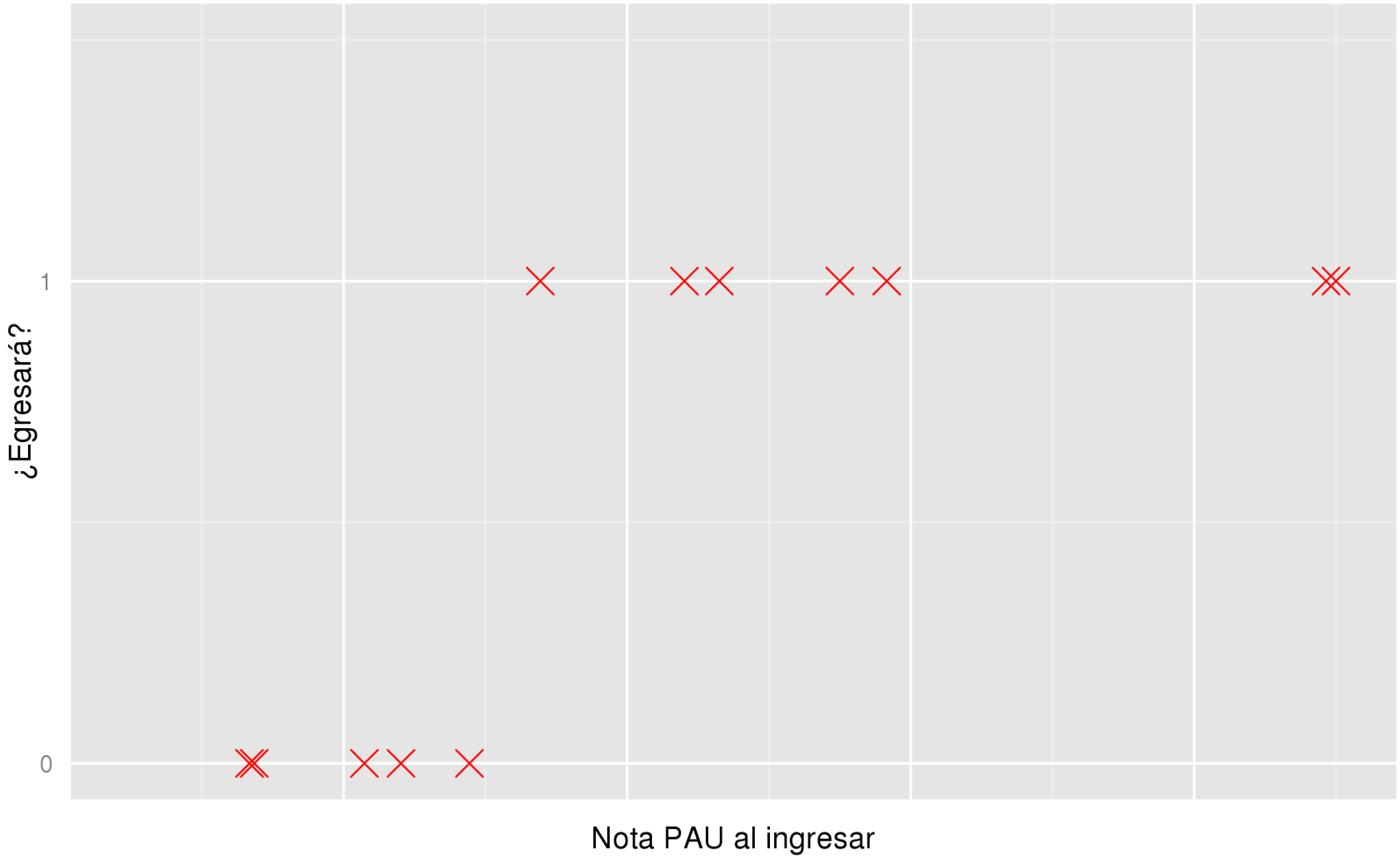


Ejemplo: predicción del abandono

Pero nuestro criterio de decisión es sensible a datos atípicos:

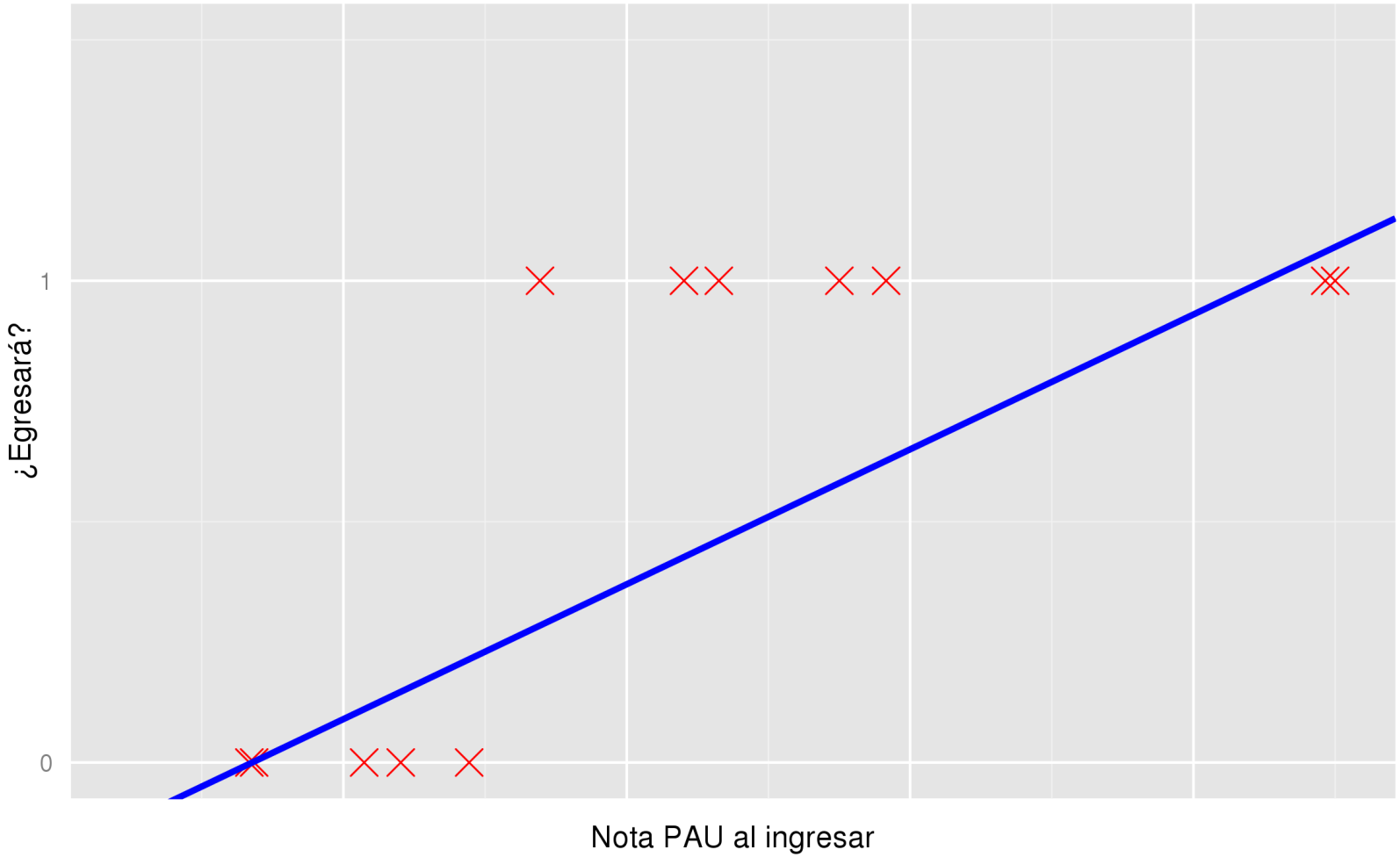
Ejemplo: predicción del abandono

Supongamos que tenemos estos puntos adicionales



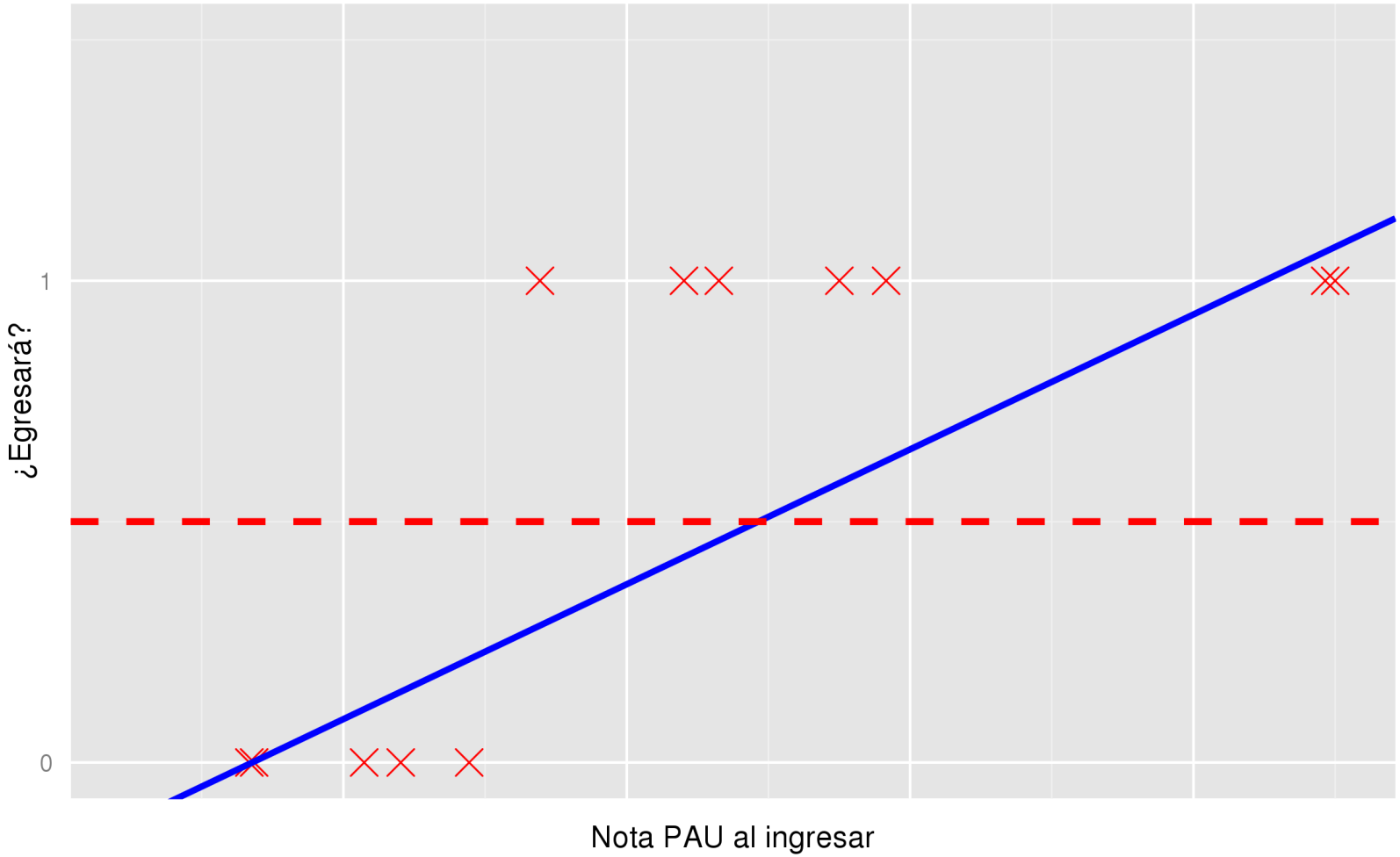
Ejemplo: predicción del abandono

El ajuste cambia bastante



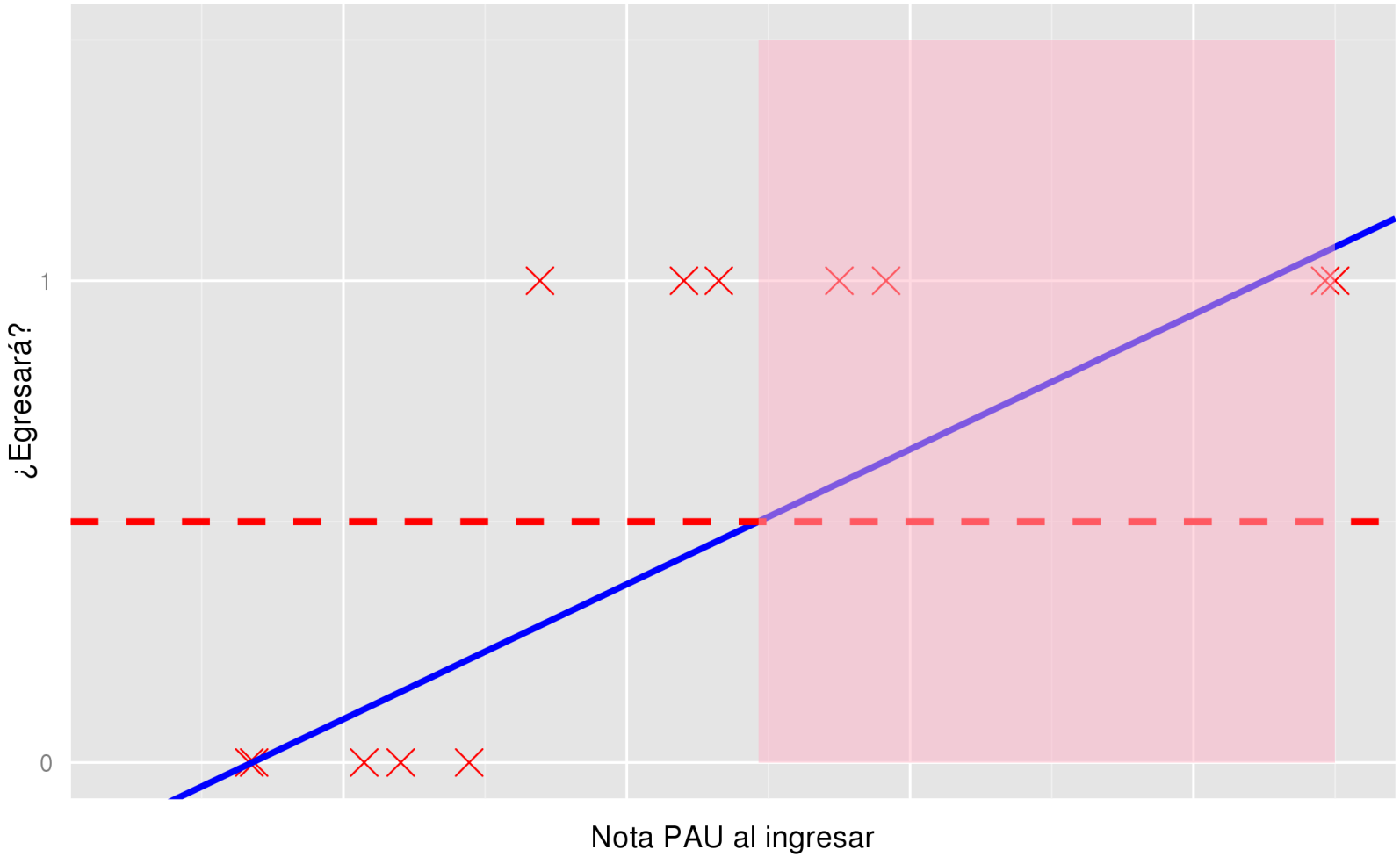
Ejemplo: predicción del abandono

Y nuestro criterio de decisión es inadecuado



Ejemplo: predicción del abandono

Y nuestro criterio de decisión es inadecuado



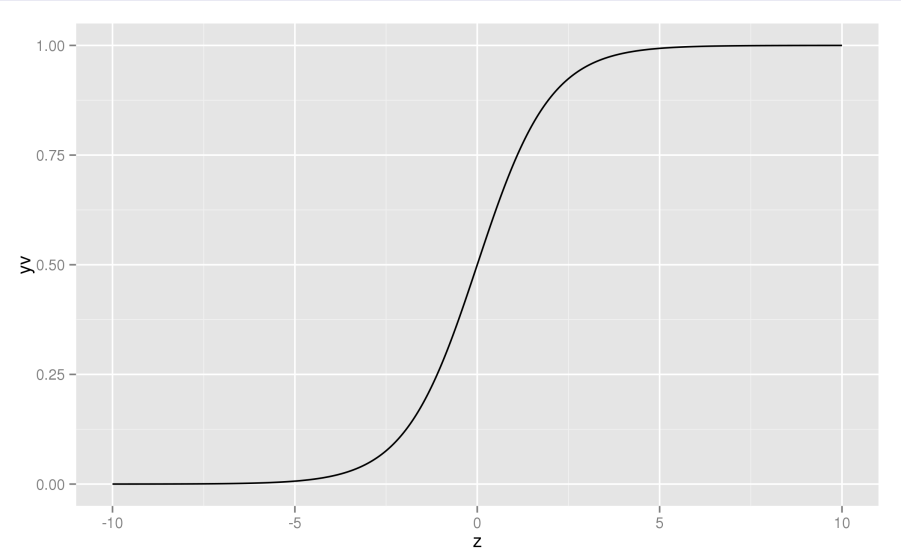
Regresión logística

Además al ajustar una recta a nuestros datos binarios, el modelo $h_\theta(x)$ puede tomar valores superiores a 1, o negativos...

Pasamos a una función no lineal para ajustar estos datos binarios:

Usaremos como base la función logística:

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



Ajustaremos a los datos binarios la hipótesis:

$$h_\theta(x) = g(x^T\theta)$$

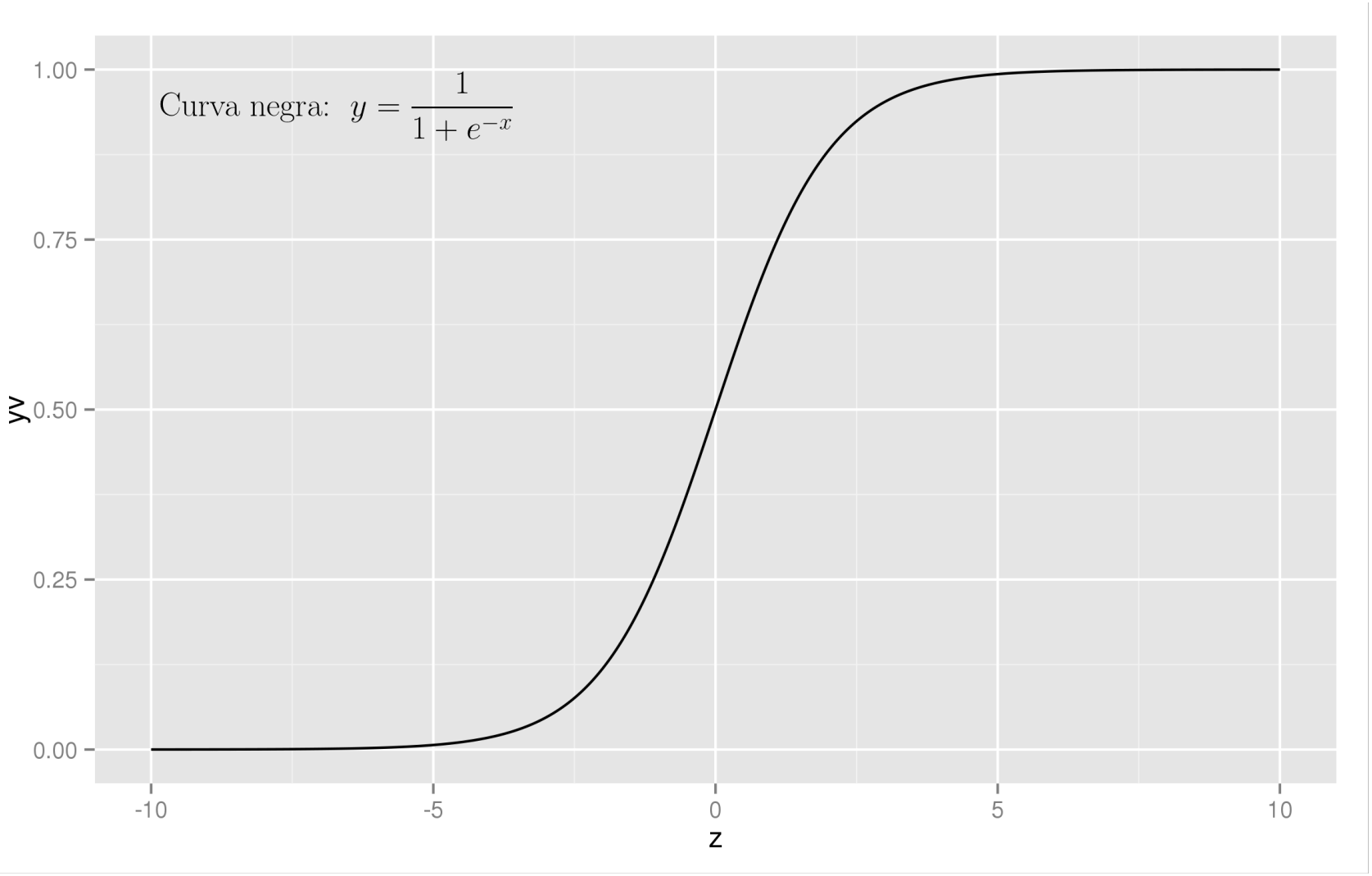
1. Si tenemos una única característica x_1:

$$h_\theta(x) = g(x^T\theta) = \frac{1}{1 + e^{-(\theta_0+\theta_1 x_1)}},$$

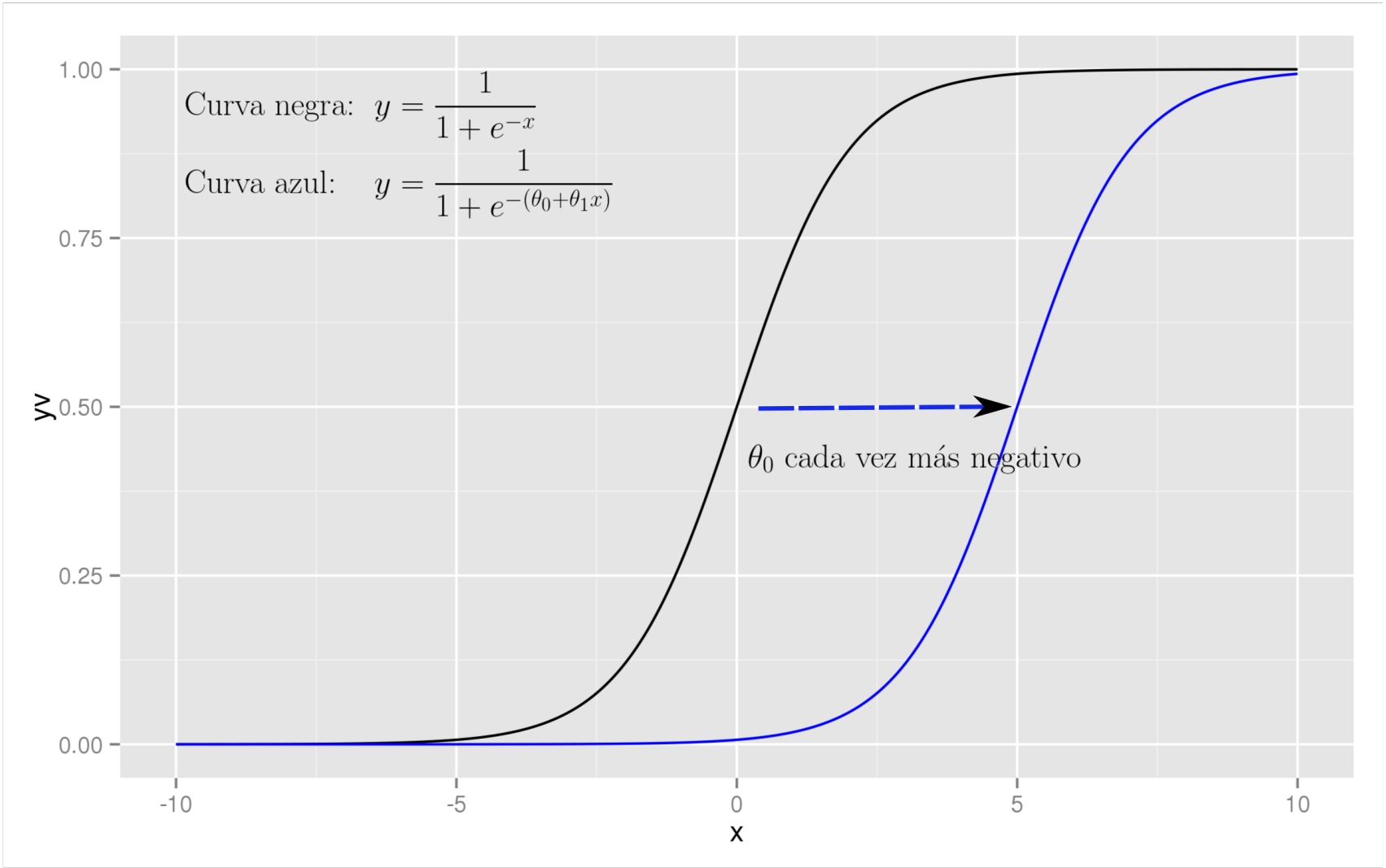
2. si tenemos k características $x_1, x_2, \ldots, x_k$.

$$h_\theta(x) = g(x^T\theta) = \frac{1}{1 + e^{-(\theta_0+\theta_1 x_1+\ldots+\theta_k x_k)}},$$

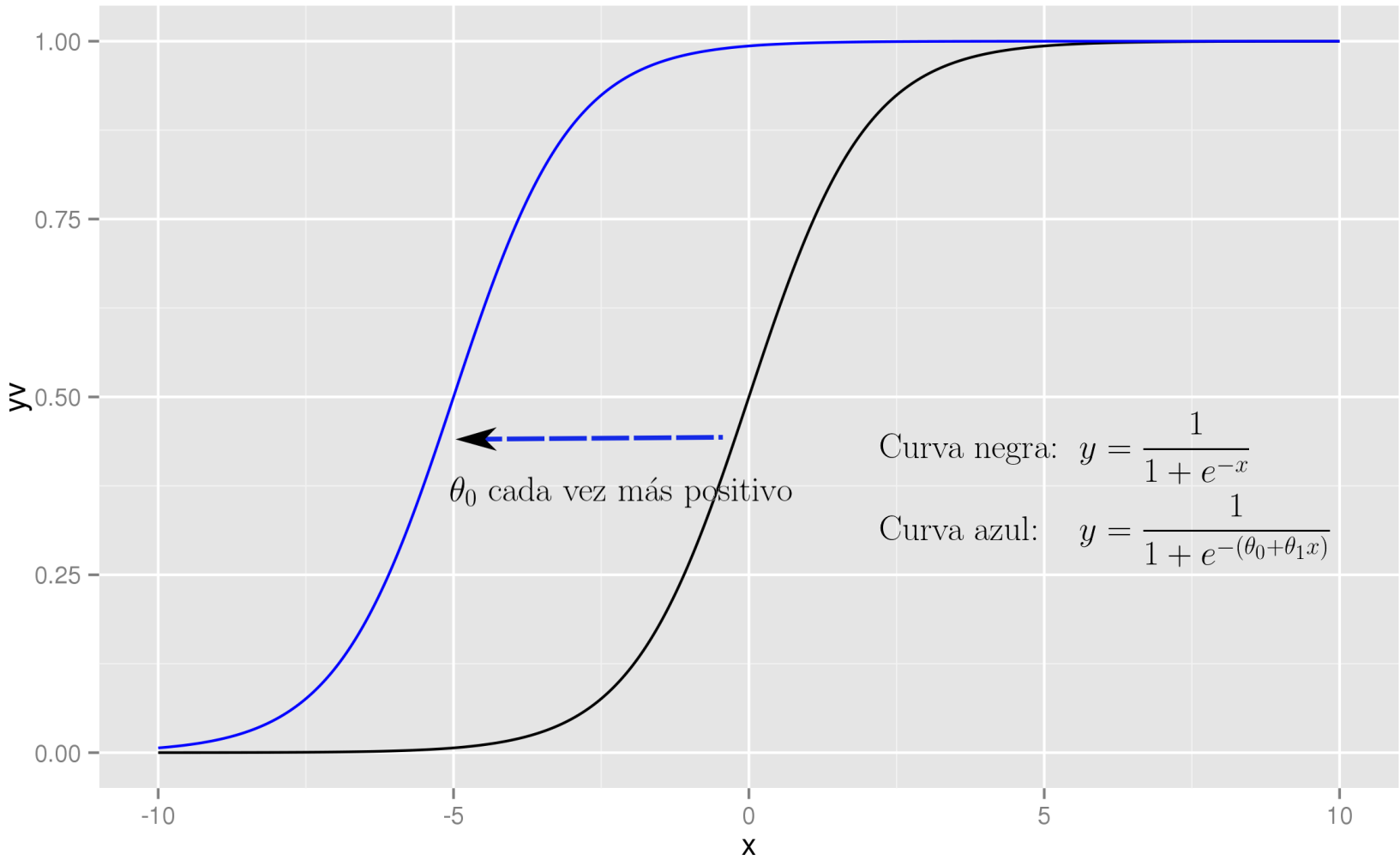
En el caso de una característica, efecto de variar θ



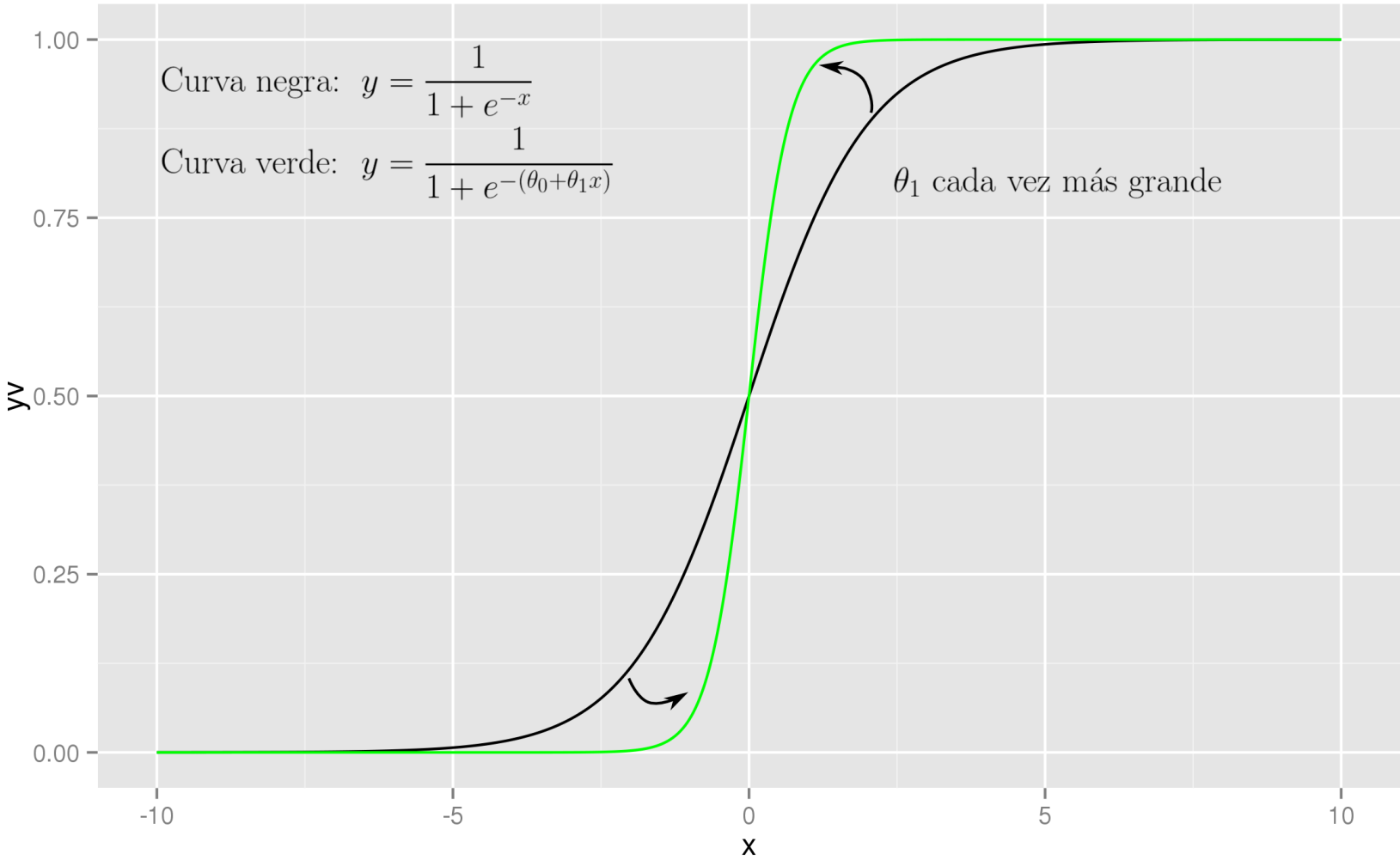
En el caso de una característica, efecto de variar θ



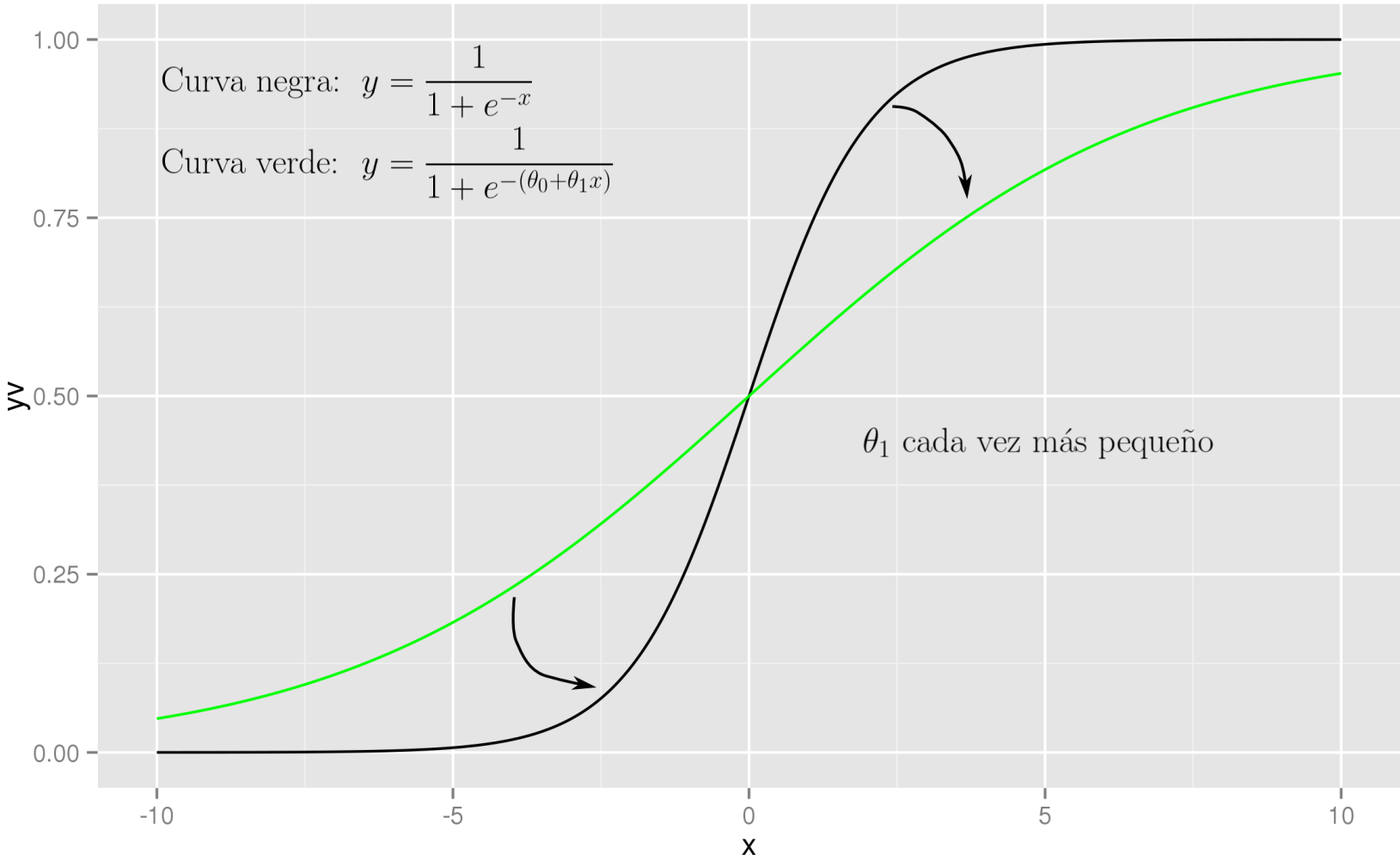
En el caso de una característica, efecto de variar θ



En el caso de una característica, efecto de variar θ



En el caso de una característica, efecto de variar θ



Interpretación de $h_\theta(x)$.

Interpretación

El valor de $h_\theta(x)$ es la probabilidad de que y tome el valor 1, para ese vector de características x, si los parámetros del ajuste son θ. Es

$$h_\theta(x) = \mathbb{P}(y = 1|x; \theta),$$

es decir la probabilidad de que $y = 1$ condicionado a x y θ.

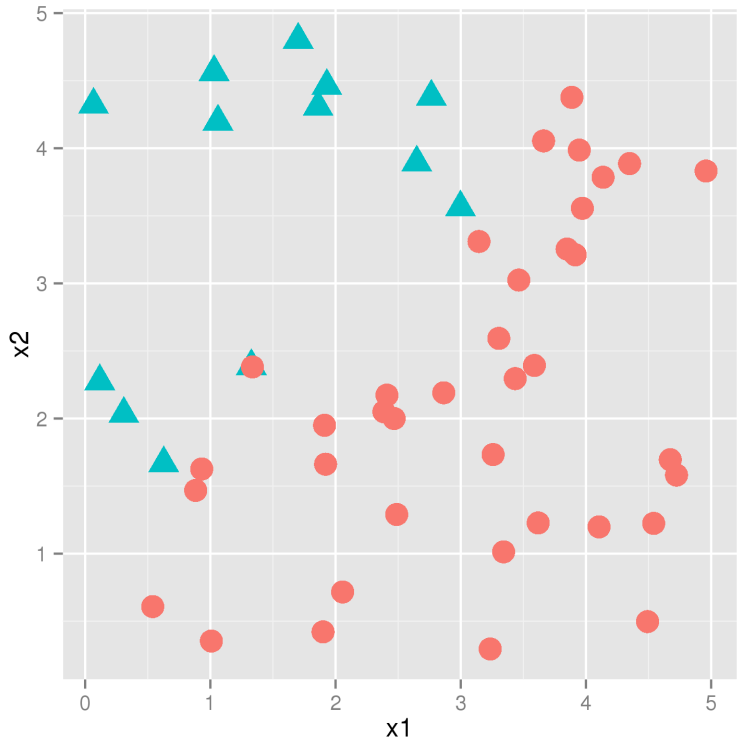
Si, dado una nota media PAU, encontramos $h_\theta(x) = 0.7$, le diremos al alumno que tiene 70% de probabilidad de acabar egresando...

Regla de decisión, fronteras

- Una vez entrenada nuestra regresión logística, tendremos el modelo ajustado $h_{\hat{\theta}}(x)$.
- Recordad que hemos decidido usar para clasificar la regla de decisión:
  - Si $h_\theta(x) \geq 0.5$, clasificamos $\hat{y}$ como 1.
  - Si $h_\theta(x) < 0.5$, clasificamos $\hat{y}$ como 0.
- Pero $h_\theta(x) = g(x^T\theta)$, por lo que
  - $h_\theta(x) \geq 0.5 \Leftrightarrow x^T\theta \geq 0$ y
  - $h_\theta(x) < 0.5 \Leftrightarrow x^T\theta < 0$.
- Así que, en realidad, hemos especificado así una región de decisión cuya frontera es

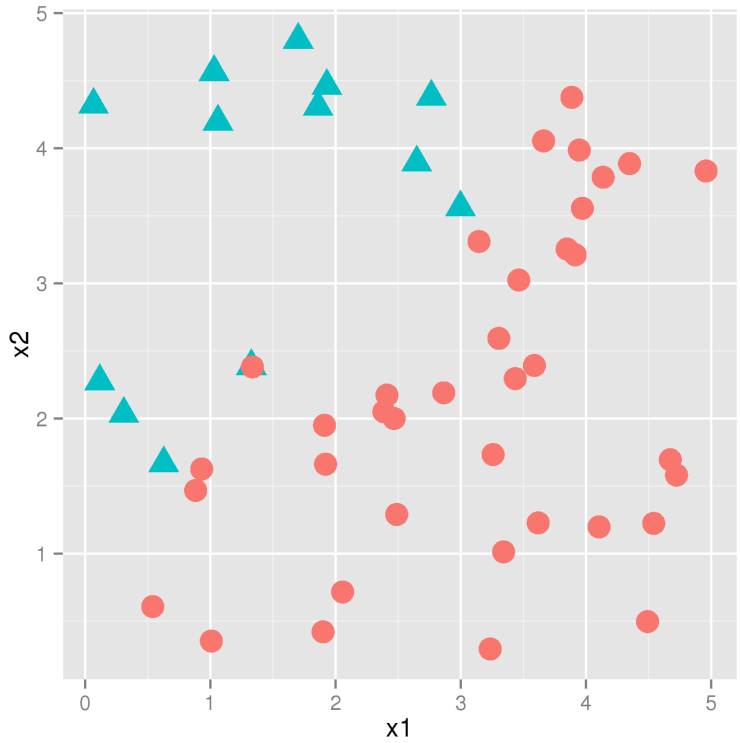
$$x^T\theta = 0.$$

Región de decisión ilustrada con dos características



Dos características, $x1$ y $x2$
azul $\leftrightarrow y = 1$; rojo $\leftrightarrow y = 0$

Región de decisión ilustrada con dos características



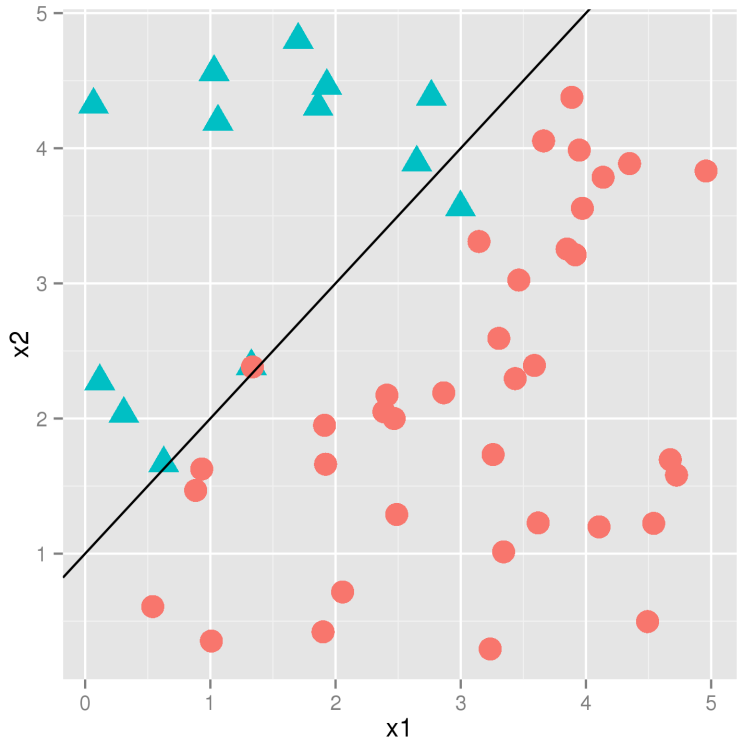
Dos características, $x1$ y $x2$
azul $\leftrightarrow y = 1$; rojo $\leftrightarrow y = 0$
Tenemos:

- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)$,
- $x = (1, x_1, x_2)$,

por lo que la frontera de la región es

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 = 0.$$

Región de decisión ilustrada con dos características



Dos características, $x1$ y $x2$
azul $\leftrightarrow y = 1$; rojo $\leftrightarrow y = 0$
Tenemos:

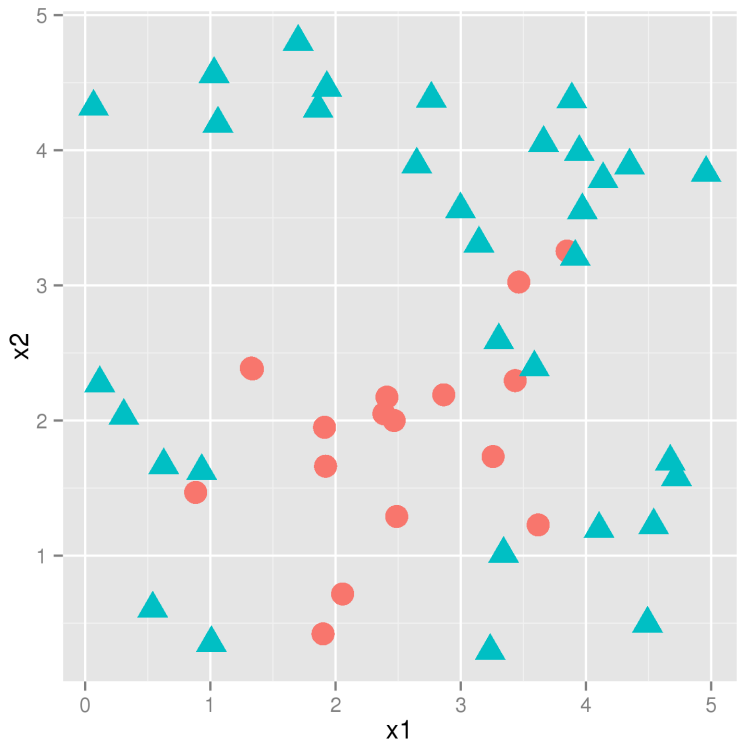
- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)$,
- $x = (1, x_1, x_2)$,

por lo que la frontera de la región es

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 = 0.$$

Es una recta.

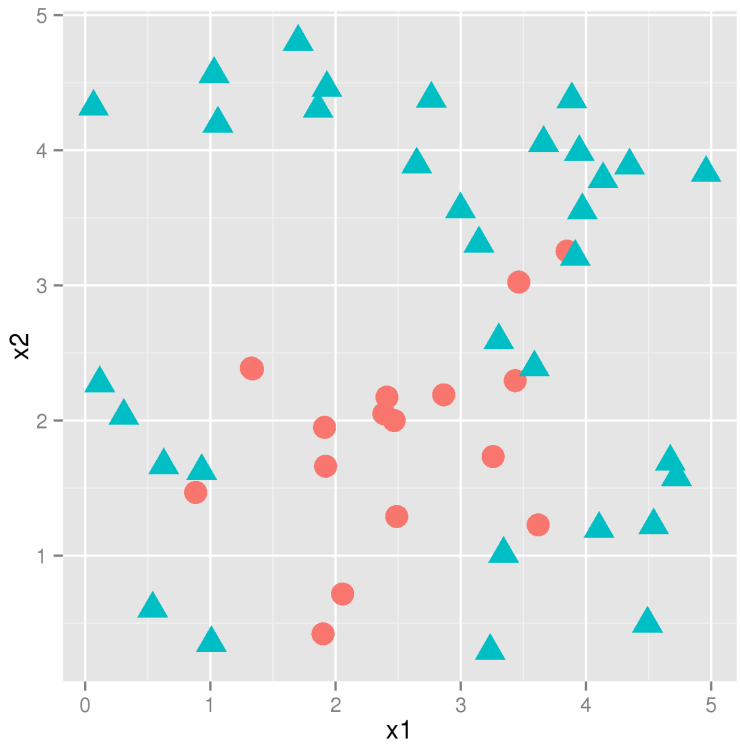
Región de decisión ilustrada con dos características



Si introducimos potencias de grado superior de x_1 y x_2, podemos obtener fronteras no lineales...

- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$,
- $x = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2)$,

Región de decisión ilustrada con dos características



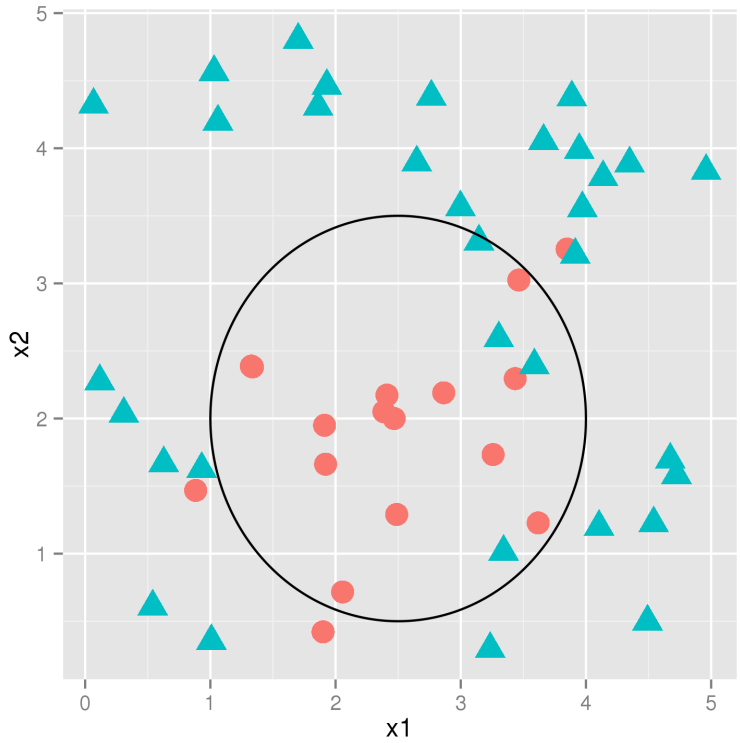
Si introducimos potencias de grado superior de x_1 y x_2, podemos obtener fronteras no lineales...

- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$,
- $x = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2)$,

por lo que la frontera de la región es

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_1^2 + \ldots = 0.$$

Región de decisión ilustrada con dos características



Si introducimos potencias de grado superior de x_1 y x_2, podemos obtener fronteras no lineales...

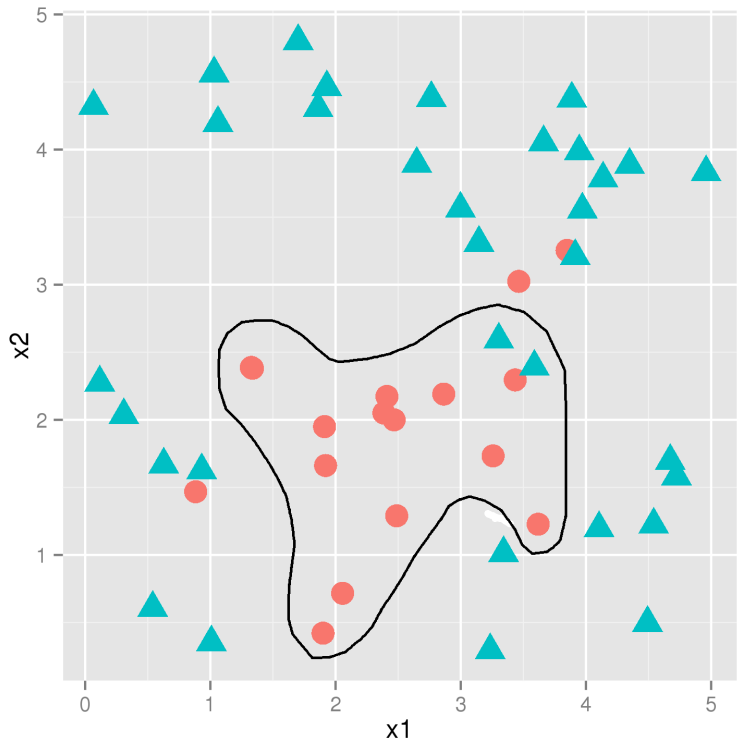
- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$,
- $x = (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2)$,

por lo que la frontera de la región es

$$\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_3 x_1^2 + \ldots = 0.$$

Por ejemplo un círculo...

Región de decisión ilustrada con dos características



Y si introducimos potencias de grado aun superior x_1^3 y $x_2^3 \ldots$, x_1^5 etc.. podemos obtener fronteras más complejas...

Conjunto de entrenamiento: los datos que tendremos se presentarán en la forma siguiente:

Y	X_1	X_2	$\cdots$	X_k
y_1	x_{11}	x_{12}	$\cdots$	x_{1k}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
y_n	x_{n1}	x_{n2}	$\cdots$	x_{nk}

Cada fila representa un individuo, cada columna una variable o característica para ese individuo.
Los valores y_1, y_2, etc... son valores binarios (0 ó 1).
Usaremos la notación

$$x_{i\bullet} = (x_{i0}, x_{i1}, \ldots, x_{ik})^T$$

para denotar el vector de características del individuo número i *(hemos incluido $x_{i0} = 1$.)*

La función de coste

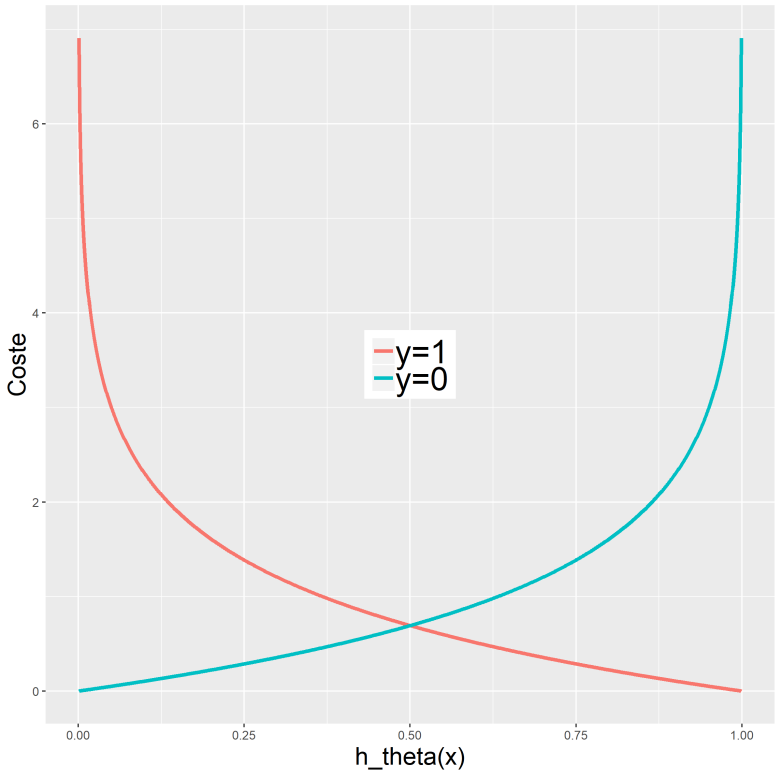
- Buscamos entrenar un algoritmo de regresión logística, es decir encontrar el "mejor" vector de parámetros θ, aprendiendo de nuestro conjunto de entrenamiento.
- Necesitamos una función de coste que mida la calidad del ajuste al conjunto de entrenamiento, pero que posea también buenas propiedades para la minimización (convexidad).
- Por ello, introducimos la función de coste siguiente

$$J(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} coste(h_\theta(x_{i\bullet}), y_i)$$

donde

$$coste(h_\theta(x), y) = \begin{cases} -\log(h_\theta(x)) & \text{si } y = 1, \\ -\log(1 - h_\theta(x)) & \text{si } y = 0, \end{cases}$$

La función de coste



Este es el perfil de la función de coste.
Por lo tanto:

- Si $y = 1$, cuando $h_\theta(x) \to 0$, $coste(h_\theta(x), y) \to \infty$.
- Si $y = 1$, cuando $h_\theta(x) = 1$, $coste(h_\theta(x), y) = 0$.
- Si $y = 0$, cuando $h_\theta(x) \to 1$, $coste(h_\theta(x), y) \to \infty$.
- Si $y = 0$, cuando $h_\theta(x) = 0$, $coste(h_\theta(x), y) = 0$.

La función de coste

Nuestra función de coste será por lo tanto:

$$J(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} coste(h_\theta(x_{i\bullet}), y_i)$$

donde

$$coste(h_\theta(x), y) = \begin{cases} -\log(h_\theta(x)) & \text{si } y = 1, \\ -\log(1 - h_\theta(x)) & \text{si } y = 0, \end{cases},$$

lo que podemos escribir de manera más rápida como

$$J(\theta) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \{y_i \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1 - y_i) \log(1 - h_\theta(x_{i\bullet}))\}$$

Calculo del gradiente

Deducimos

$$\begin{aligned}\nabla_\theta J(\theta) &= -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{y_i \nabla_\theta \log(h_\theta(x_{i\bullet})) + (1-y_i)\nabla_\theta \log(1-h_\theta(x_{i\bullet}))\} \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\{x_{i\bullet}\cdot(h_\theta(x_{i\bullet})-y_i)\}\,.\end{aligned}$$

Si usamos la matriz de diseño $\mathbf{X}$, obtenemos en forma compacta:

$$\boxed{\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T\cdot(\mathbf{H}_\theta - y)\,,}$$

donde $\mathbf{H}$ denota el vector columna:

$$\mathbf{H}_\theta = \begin{pmatrix} h_\theta(x_{1\bullet}) \\ h_\theta(x_{2\bullet}) \\ \vdots \\ h_\theta(x_{n\bullet}) \end{pmatrix}$$

Nota: comparación con la implementación para regresión múltiple

Recordad que, para la regresión múltiple, el gradiente era:

$$\boxed{\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T \cdot (\mathbf{X}\theta - y)\,.}$$

mientras que para la regresión logística, acabamos de establecer que el gradiente es:

$$\boxed{\nabla_\theta J(\theta) = \frac{1}{n}\mathbf{X}^T \cdot (\mathbf{H}_\theta - y)\,,}$$

Es muy similar, si queremos programar el algoritmo del gradiente, sólo requiere una pequeña modificación de nuestro código...

Regresión logística en `scikit-learn`

Podemos aprovechar la clase `LogisticRegression` del submódulo `linear_model` si no queremos usar algoritmo del gradiente.

- Las ventajas:
  - No es necesario especificar α
  - Puede ser más rápido.
- Sin embargo, en el caso en que haya muchas características, puede ser más eficiente usar algoritmo del gradiente (`scikit-learn` también dispone de procedimientos para ello.)

Si queremos clasificar en más de dos categorías...

Si queremos clasificar cada individuo en más de dos categorias, usaremos la técnica del "One versus all".

Ejemplo con tres categorías A, B y C.

Supongamos que queremos clasificar cada individuo en A, B o C.

- Entrenamos una regresión logística para clasificar en "A" o "no A". $\Rightarrow$ obtenemos modelo ajustado $h_{\hat{\theta}_A}(x)$.
- Entrenamos una regresión logística para clasificar en "B" o "no B". $\Rightarrow$ obtenemos modelo ajustado $h_{\hat{\theta}_B}(x)$.
- Entrenamos una regresión logística para clasificar en "C" o "no C". $\Rightarrow$ obtenemos modelo ajustado $h_{\hat{\theta}_C}(x)$.
- Dado un nuevo individuo, calculamos las tres probabilidades predichas $h_{\hat{\theta}_A}(x)$, $h_{\hat{\theta}_B}(x)$ y $h_{\hat{\theta}_C}(x)$.
- Clasificamos el individuo en la categoría que tiene la probabilidad predicha más alta...

Medir la calidad de la predicción para una clasificación binaria

El primer indicador que podemos usar es la tasa de acierto, es decir el porcentaje de individuos clasificados correctamente.

Ejemplo

Consideremos el problema de predecir si un tumor es benigno o maligno basándonos en unas imágenes medicales.
De un total de 100 tumores, de los cuáles 5 son malignos y 95 benignos, mi algoritmo se ha equivocado en 1 maligno y 5 benignos.

$$\text{Tasa de acierto} = \frac{94}{100} = 94\%.$$

Sin embargo, tiene sus limitaciones: si mi decisión hubiera sido sencillamente declarar todos como benignos, cuál habría sido mi tasa de acierto?

$$\text{Tasa de acierto} = \frac{95}{100} = 95\%.$$

Precisión y sensibilidad ("recall")

Por ello, introducimos dos indicadores que debemos considerar conjuntamente:

Precisión

Es la proporción de aciertos ($y = 1$) entre los que he clasificado como "positivos" ($\hat{y} = 1$).

Sensibilidad "Recall"

Es la proporción de aciertos ($\hat{y} = 1$) entre todos los que son positivos "positivos" ($y = 1$).

Para el problema anterior: De un total de 100 tumores, de los cuáles 5 son malignos y 95 benignos, mi algoritmo se ha equivocado en 1 maligno y 5 benignos.

$$precision = 4/9, \qquad recall = 4/5$$

Si los declaro todos como benignos:

$$precision = \text{no existe}, \qquad recall = 0/5 = 0$$

Matriz de confusión

Se suele presentar los resultados del algoritmo en forma de matriz, llamada matriz de confusión.
Para el problema anterior: De un total de 100 tumores, de los cuáles 5 son malignos y 95 benignos, mi algoritmo se ha equivocado en 1 maligno y 5 benignos.

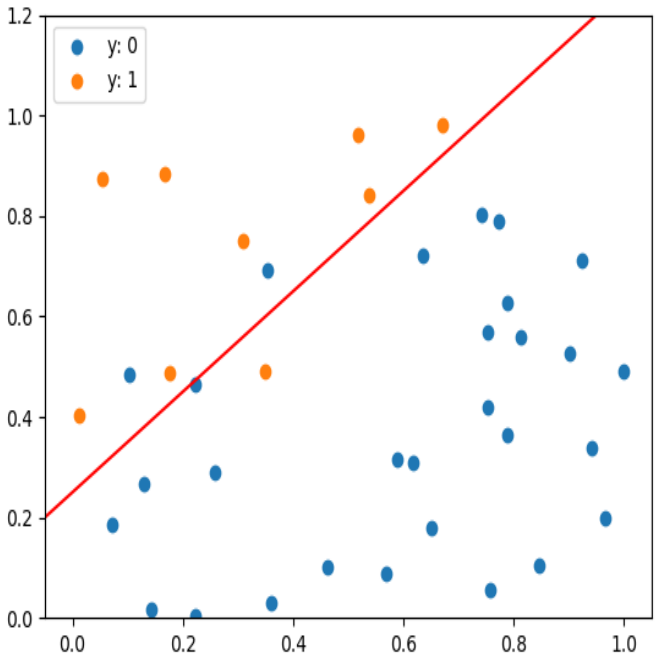
$y \backslash \hat{y}$	0	1
0	90	5
1	1	4

Matriz de confusión:

$$\begin{pmatrix} 90 & 5 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}$$

Precisión y sensibilidad

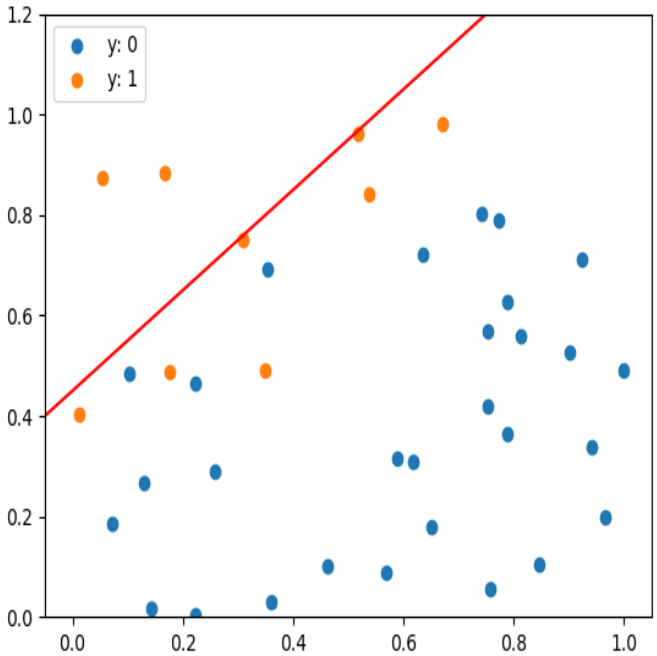
La precisión y la sensibilidad van en sentido contrario: si aumenta la precisión, baja la sensibilidad y al revés.
Se busca un equilibrio. Dos características y una frontera de decisión lineal:



Tenemos una precisión de 80% y una sensibilidad de 8/9, (89%).

Precisión y sensibilidad

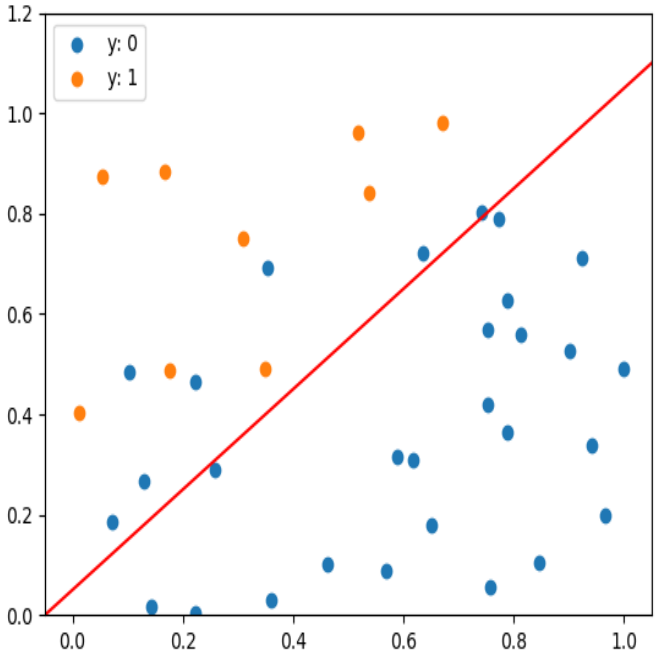
La precisión y la sensibilidad van en sentido contrario: si aumenta la precisión, baja la sensibilidad y al revés.
Se busca un equilibrio. Dos características y una frontera de decisión lineal. Si aumento la ordenada al origen de la frontera:



Tenemos una precisión de 100% y una sensibilidad de 2/9 (22%)

Precisión y sensibilidad

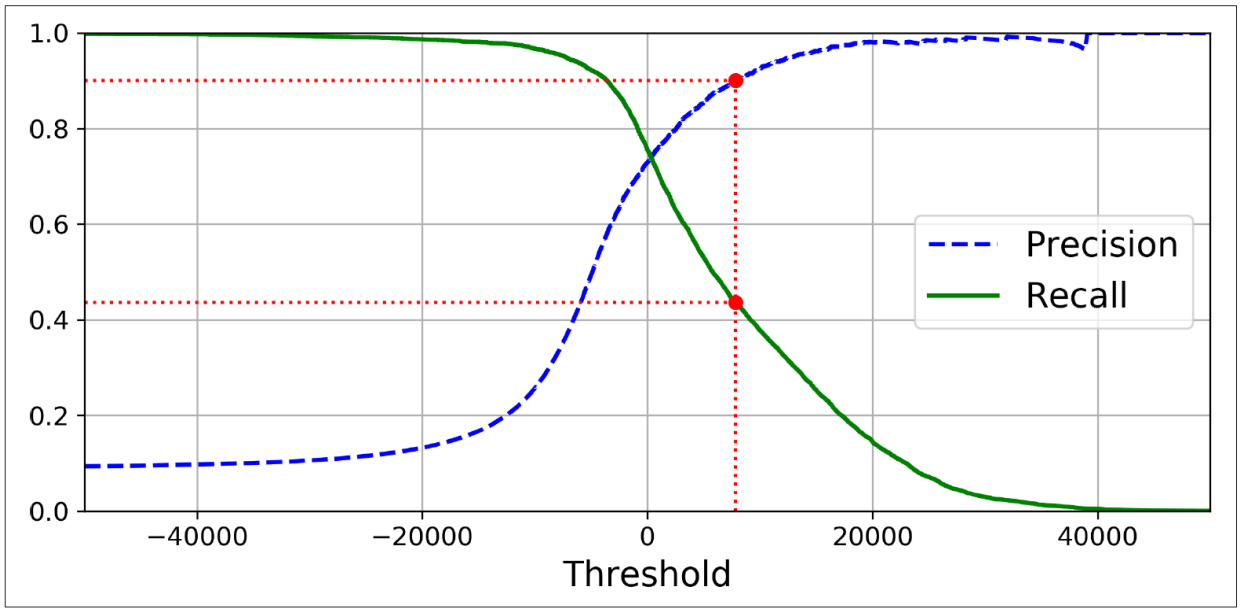
La precisión y la sensibilidad van en sentido contrario: si aumenta la precisión, baja la sensibilidad y al revés.
Se busca un equilibrio. Dos características y una frontera de decisión lineal. Si disminuyo la ordenada al origen de la frontera:



Tenemos una precisión de 64% y una sensibilidad de 100%

Precisión y sensibilidad

Una tipica situación:



Fuente: https://jaehyeongan.github.io/2020/02/29/LSTM-Autoencoder-for-Anomaly-Detection/