Regresión logística

Fernando Lozano

Universidad de los Andes

18 de agosto de 2017

Problema de Clasificación binaria

- Datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$:

Problema de Clasificación binaria

- Datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{n}$:
  - $\mathbf{x}_i$ objeto a clasificar.

Problema de Clasificación binaria

- Datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$:
    - $\mathbf{x}_i$ objeto a clasificar.
    - $y_i \in \{-1,\ 1\}$ etiqueta.

Problema de Clasificación binaria

- Datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$:
  - $\mathbf{x}_i$ objeto a clasificar.
  - $y_i \in \{-1,\ 1\}$ etiqueta.
- Queremos aprender regla de clasificación a partir de los datos.

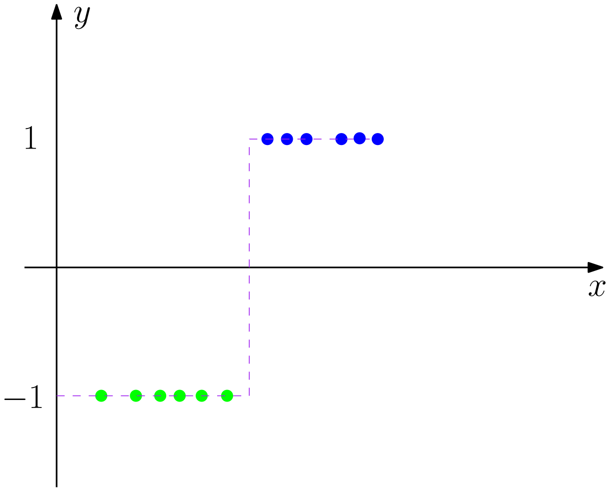
Problema de Clasificación binaria

- Datos $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$:
  - $\mathbf{x}_i$ objeto a clasificar.
  - $y_i \in \{-1,\ 1\}$ etiqueta.
- Queremos aprender regla de clasificación a partir de los datos.
- Separador lineal:

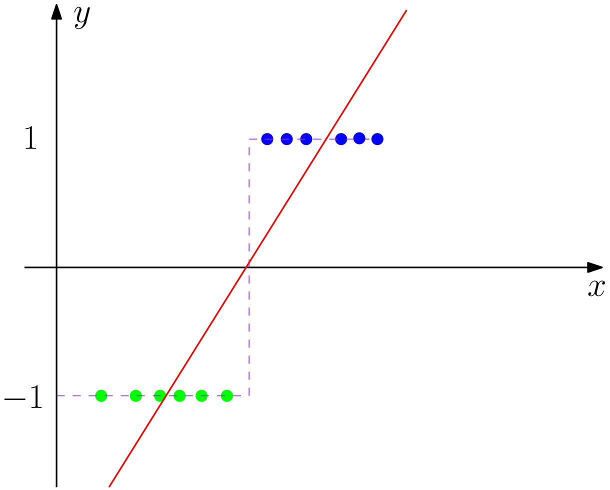
$$y = \text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$$

- Cómo encontrar un buen clasificador?

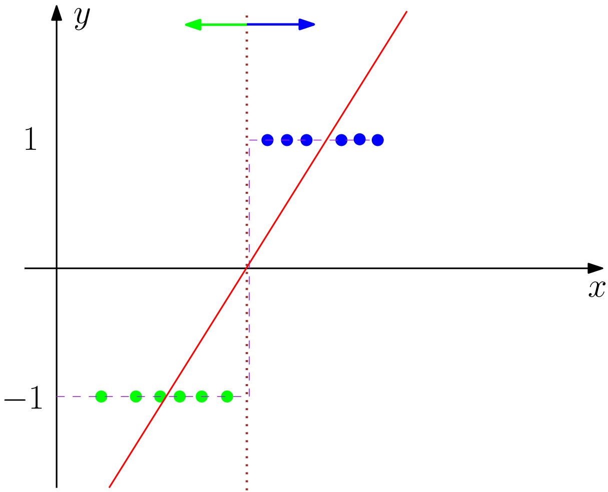
Regresión lineal + umbral



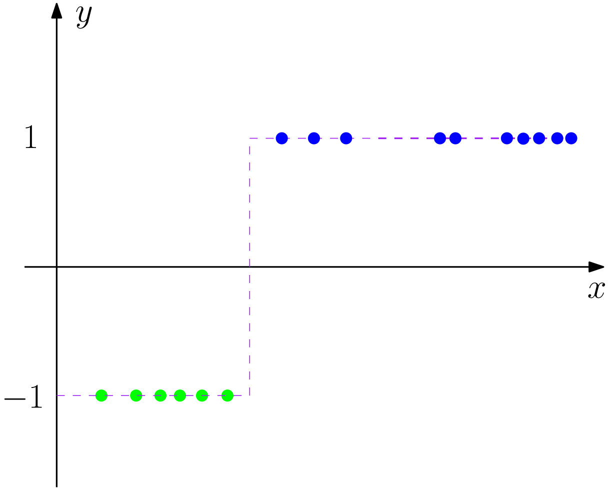
Regresión lineal + umbral



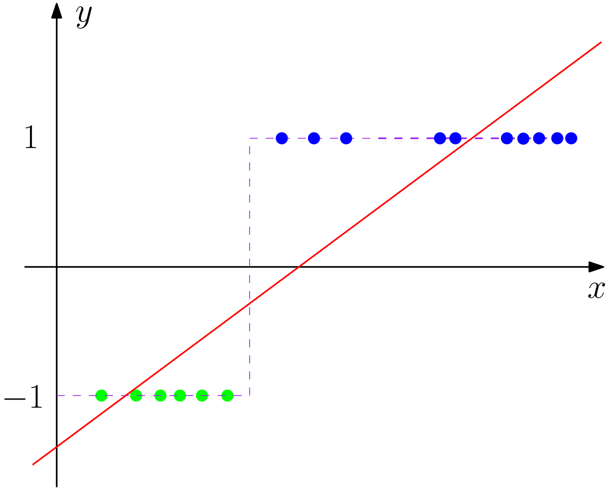
Regresión lineal + umbral



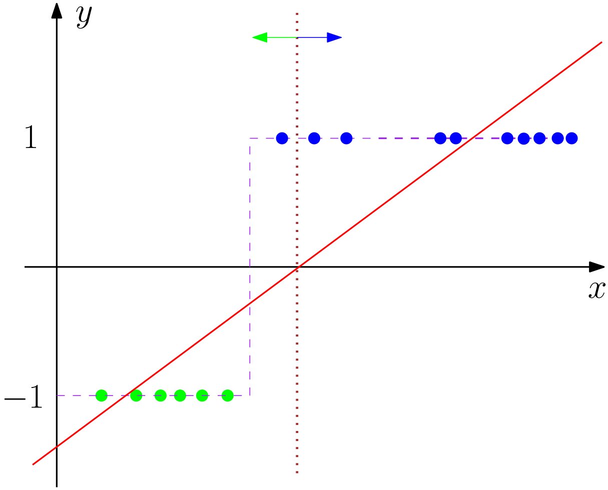
Regresión lineal + umbral



Regresión lineal + umbral



Regresión lineal + umbral



Modelo

Modelo

- Clasificación binaria: $y \in \{0, 1\}$.

Modelo

- Clasificación binaria: $y \in \{0, 1\}$.
- Queremos restringir $y \in [0\ ,\ 1]$

Modelo

- Clasificación binaria: $y \in \{0, 1\}$.
- Queremos restringir $y \in [0\ ,\ 1]$
- Modelo (hipótesis):

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

Modelo

- Clasificación binaria: $y \in \{0, 1\}$.
- Queremos restringir $y \in [0\ ,\ 1]$
- Modelo (hipótesis):

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

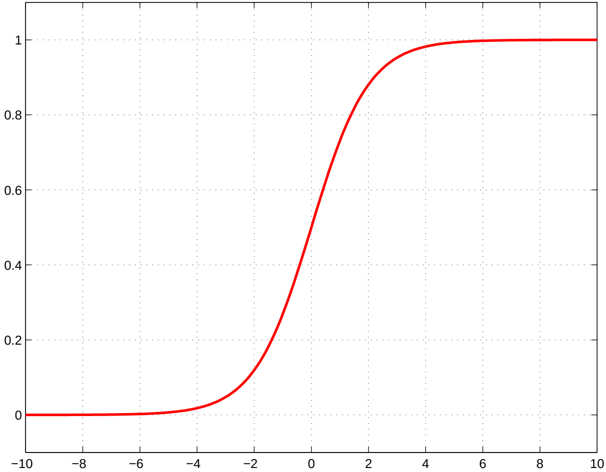
Modelo

- Clasificación binaria: $y \in \{0, 1\}$.
- Queremos restringir $y \in [0\ ,\ 1]$
- Modelo (hipótesis):

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

- $\sigma(.)$ es la función logística o sigmoide

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



Interpretación probabilística

- Interpretamos $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ como el estimativo dado por el modelo con parámetros $\mathbf{w}$ de la probabilidad de que $\mathbf{x}$ pertenezca a la clase 1:

Interpretación probabilística

- Interpretamos $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ como el estimativo dado por el modelo con parámetros **w** de la probabilidad de que $\mathbf{x}$ pertenezca a la clase 1:

$$\mathbf{P}(y = 1 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

Interpretación probabilística

- Interpretamos $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ como el estimativo dado por el modelo con parámetros $\mathbf{w}$ de la probabilidad de que $\mathbf{x}$ pertenezca a la clase 1:

$$\mathbf{P}(y = 1 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$
$$\mathbf{P}(y = 0 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = 1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

Interpretación probabilística

- Interpretamos $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ como el estimativo dado por el modelo con parámetros $\mathbf{w}$ de la probabilidad de que $\mathbf{x}$ pertenezca a la clase 1:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P}(y = 1 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) &= \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) \\
\mathbf{P}(y = 0 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) &= 1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})
\end{aligned}
$$

- Es decir, dado $\mathbf{x}$, y es una variable aleatoria de Bernoulli .

Interpretación probabilística

- Interpretamos $\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$ como el estimativo dado por el modelo con parámetros $\mathbf{w}$ de la probabilidad de que $\mathbf{x}$ pertenezca a la clase 1:

$$\mathbf{P}(y = 1 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$
$$\mathbf{P}(y = 0 \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = 1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

- Es decir, dado $\mathbf{x}$, y es una variable aleatoria de Bernoulli .
- Podemos escribir más compactamente

$$\mathbf{P}(y \mid \mathbf{x}; \mathbf{w}) = (\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}))^y(1 - \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}))^{1-y}$$

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$L(\mathbf{w}) = \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w})$$

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{w}) &= \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w}) \\ &= \prod_{i=1}^{n} \mathbf{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \end{aligned}$$

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} \mathbf{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} (\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{y_i} (1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{1-y_i}
\end{aligned}
$$

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} \mathbf{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} (\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{y_i} (1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{1-y_i}
\end{aligned}
$$

- Tomando logaritmo:

$$
l(\mathbf{w}) = \log(L(\mathbf{w})) = \sum_{i=1}^{n} y_i \log(\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))
$$

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} \mathbf{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} (\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{y_i} (1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{1-y_i}
\end{aligned}
$$

- Tomando logaritmo:

$$
l(\mathbf{w}) = \log(L(\mathbf{w})) = \sum_{i=1}^{n} y_i \log(\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))
$$

- Problema de optimización:

- Asumiendo datos i.i.d tenemos la función de verosimilitud:

$$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w}) &= \mathbf{P}(\mathbf{y} \mid \mathbf{X}; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} \mathbf{P}(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}) \\
&= \prod_{i=1}^{n} (\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{y_i} (1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))^{1-y_i}
\end{aligned}
$$

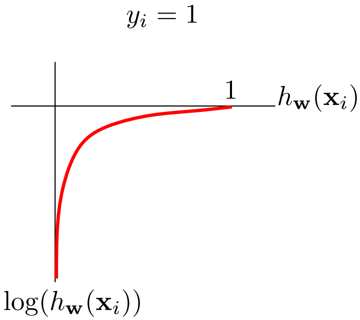
- Tomando logaritmo:

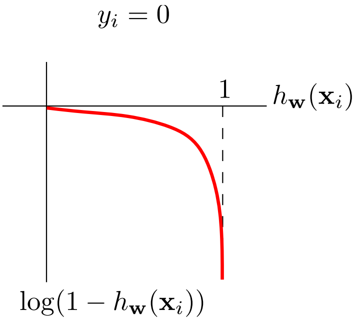
$$
l(\mathbf{w}) = \log(L(\mathbf{w})) = \sum_{i=1}^{n} y_i \log(\sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) + (1 - y_i) \log(1 - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i))
$$

- Problema de optimización:

$$
\mathbf{w}^* = \arg\max_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w})
$$

Negativo de la Función de error (acierto!)





Ascenso de Gradiente

Inicialice $\mathbf{w}_0$

Ascenso de Gradiente

Inicialice $\mathbf{w}_0$
repeat

Ascenso de Gradiente

Inicialice $\mathbf{w}_0$

repeat

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k + \eta_k \nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w}_k)$$

Ascenso de Gradiente

Inicialice $\mathbf{w}_0$

repeat

$\quad \mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k + \eta_k \nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w}_k)$

until Condición de terminación.

Gradiente

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)$

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)$
- Un término en la suma:

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)$
- Un término en la suma:

$$[\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w})]_i = y_i \frac{\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{\sigma_i} + (1 - y_i) \frac{-\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{1 - \sigma_i}$$

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1-\sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i)$
- Un término en la suma:

$$
\begin{aligned}
[\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w})]_i &= y_i \frac{\mathbf{x}_i\sigma_i(1-\sigma_i)}{\sigma_i} + (1-y_i)\frac{-\mathbf{x}_i\sigma_i(1-\sigma_i)}{1-\sigma_i} \\
&= y_i\mathbf{x}_i(1-\sigma_i) + (y_i - 1)\mathbf{x}_i\sigma_i
\end{aligned}
$$

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)$
- Un término en la suma:

$$\begin{aligned}
[\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w})]_i &= y_i \frac{\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{\sigma_i} + (1 - y_i) \frac{-\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{1 - \sigma_i} \\
&= y_i \mathbf{x}_i (1 - \sigma_i) + (y_i - 1) \mathbf{x}_i \sigma_i \\
&= (y_i - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i
\end{aligned}$$

Gradiente

- Note que $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$. Denote $\sigma_i = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)$
- Un término en la suma:

$$\begin{aligned}
[\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{w})]_i &= y_i \frac{\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{\sigma_i} + (1 - y_i) \frac{-\mathbf{x}_i \sigma_i (1 - \sigma_i)}{1 - \sigma_i} \\
&= y_i \mathbf{x}_i (1 - \sigma_i) + (y_i - 1) \mathbf{x}_i \sigma_i \\
&= (y_i - \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i \\
&= e_i \mathbf{x}_i
\end{aligned}$$

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.
repeat
  Escoja $(\mathbf{x}_i, y_i)$

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.

repeat

  Escoja $(\mathbf{x}_i, y_i)$

  $g = \sigma(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_i)$

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.
repeat
    Escoja $(\mathbf{x}_i, y_i)$
    $g = \sigma(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_i)$
    $e = y_i - g$

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.

repeat

  Escoja $(\mathbf{x}_i, y_i)$

  $g = \sigma(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_i)$

  $e = y_i - g$

  $\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k + \eta_k e \mathbf{x}_i$

Ascenso de Gradiente estocástico

Incialize $\mathbf{w}_0$ a valores pequeños.
repeat
    Escoja $(\mathbf{x}_i, y_i)$
    $g = \sigma(\mathbf{w}_k^T \mathbf{x}_i)$
    $e = y_i - g$
    $\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k + \eta_k e \mathbf{x}_i$
until Condición de terminación.

- Hessiana de $l(\mathbf{w})$:

$$\nabla^2 l(\mathbf{w}) = -\sum_{i=1}^{n} \sigma_i(1-\sigma_i)\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T$$

- $\nabla^2 l(\mathbf{w})$ es positiva definida

- Hessiana de $l(\mathbf{w})$:

$$\nabla^2 l(\mathbf{w}) = -\sum_{i=1}^{n} \sigma_i(1-\sigma_i)\mathbf{x}_i\mathbf{x}_i^T$$

- $\nabla^2 l(\mathbf{w})$ es positiva definida$\Rightarrow$ $l(\mathbf{w})$ es cóncava ($-l(\mathbf{w})$ es convexa).