Regresión Lineal, Logística, Redes Neuronales

Aprendizaje de Máquina Aplicado

Juan David Martínez Vargas, Ph.D.
jdmartinev@eafit.edu.co

Leandro Higuita, MSc
clhiguitap@eafit.edu.co

2022

UNIVERSIDAD EAFIT®

Agenda

Regresión lineal

Regresión logística

Preprocesamiento

Características polinómicas

Redes Neuronales

Regularización

Selección de hiperparámetros

Notación matemática

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population	households	median_income	median_house_value	ocean_proximity
0	-122.23	37.88	41.0	880.0	129.0	322.0	126.0	8.3252	452600.0	NEAR BAY
1	-122.22	37.86	21.0	7099.0	1106.0	2401.0	1138.0	8.3014	358500.0	NEAR BAY
2	-122.24	37.85	52.0	1467.0	190.0	496.0	177.0	7.2574	352100.0	NEAR BAY
3	-122.25	37.85	52.0	1274.0	235.0	558.0	219.0	5.6431	341300.0	NEAR BAY
4	-122.25	37.85	52.0	1627.0	280.0	565.0	259.0	3.8462	342200.0	NEAR BAY

Vector de características

$$\mathbf{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_1^{(i)} \\ x_2^{(i)} \\ \vdots \\ x_d^{(i)} \end{bmatrix} \in \Re^{d\times 1}$$

$$y^{(i)} \in \Re$$

$$y^{(i)} \in [0, 1, \cdots, C]$$

Matriz de características

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \cdots & \mathbf{x}^{(1)\top} & \cdots \\ \cdots & \mathbf{x}^{(2)\top} & \cdots \\ & \vdots & \\ \cdots & \mathbf{x}^{(n)\top} & \cdots \end{bmatrix} \in \Re^{n\times d} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{bmatrix}$$

Métodos de aprendizaje de máquina

Formas de aproximar la relación entre $\mathbf{x}^{(i)}$ y $\mathrm{y}^{(i)}$

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

Función de costo

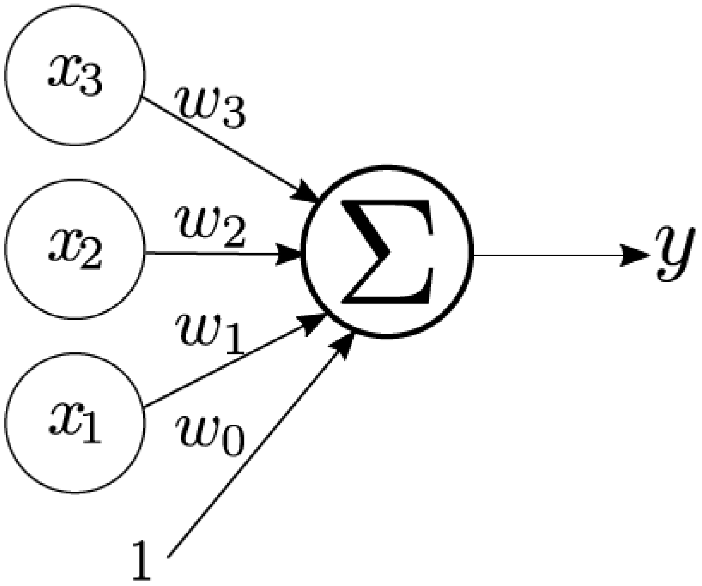
$$\mathcal{L}\left(f(\mathbf{x}^{(i)}), y^{(i)}\right)$$

Regresión Lineal

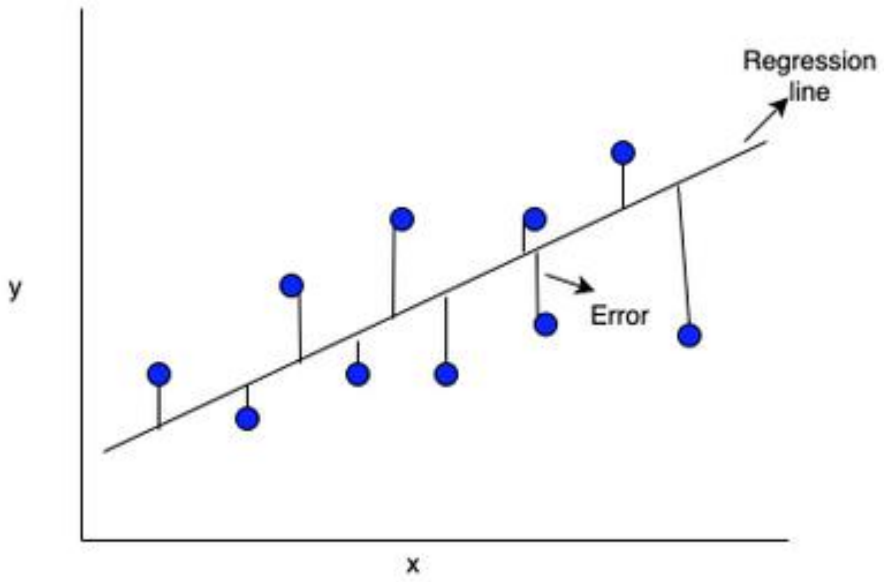
Regresión Lineal: Modelo

$$\hat{y} = \hat{f}(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j \times x_j$$

$$\hat{y} = \mathbf{w}^T \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ 1 \end{bmatrix}$$



Regresión Lineal: Error en Función Objetivo



Regresión Lineal: Función Objetivo

$$Cost_{\mathbf{w}} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \mathbf{w}^T\begin{bmatrix}\mathbf{x}_i \\ 1\end{bmatrix}\right)^2$$

Regresión Lineal: Entrenamiento

Descenso por el gradiente:

$$\mathbf{w} := \mathbf{w} - \alpha \times \nabla Cost_{\mathbf{w}}$$

$$\nabla Cost_{\mathbf{w}} = \frac{1}{m} X^T (\hat{y} - y)$$

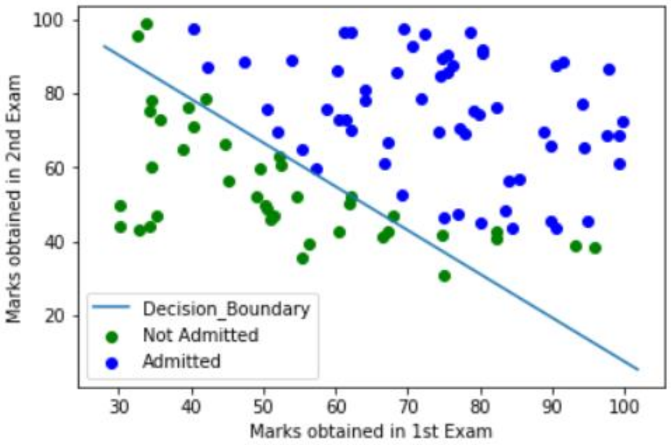
Ecuación normal:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T Y)$$

Regresión Logística

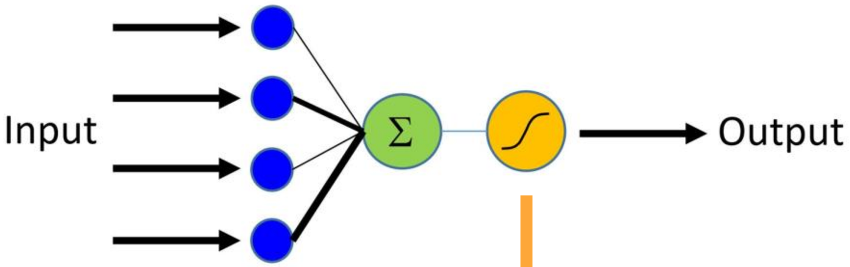
Regresión Logística: Nombre

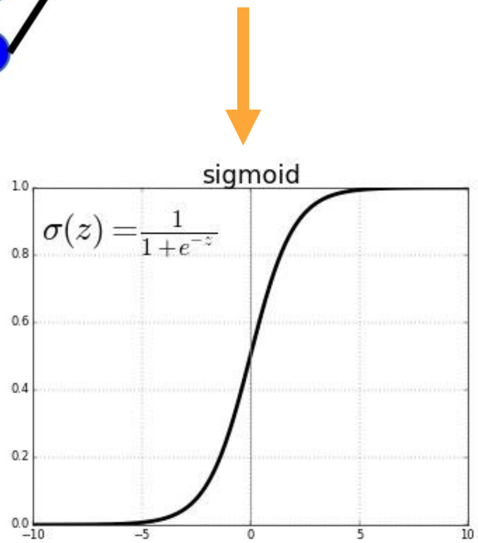
La regresión logística es un tipo de modelo lineal de **clasificación** a pesar de llevar históricamente la palabra regresión en su nombre.



Regresión Logística: Modelo

$$\hat{y} = h(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\mathbf{w}^T \begin{bmatrix}\mathbf{x} \\ 1\end{bmatrix}\right)}$$



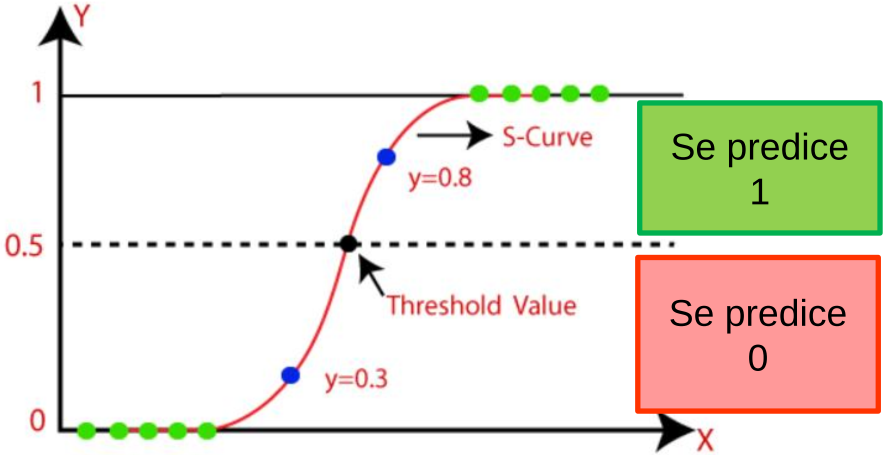


Regresión Logística: Etiqueta

La **etiqueta** con la que se entrena una regresión logística debe ser **binaria**, tomando únicamente los valores 0 o 1. La clase 0 se suele denominar **clase negativa**, mientras que la clase 1 se suele llamar **clase positiva**.

Regresión Logística: Predicción

La salida que retorna una regresión logística es un número entre 0 y 1 que se interpreta como la probabilidad de que un ejemplo pertenezca a la clase positiva. La predicción final se decide según un umbral (por lo general 0.5)



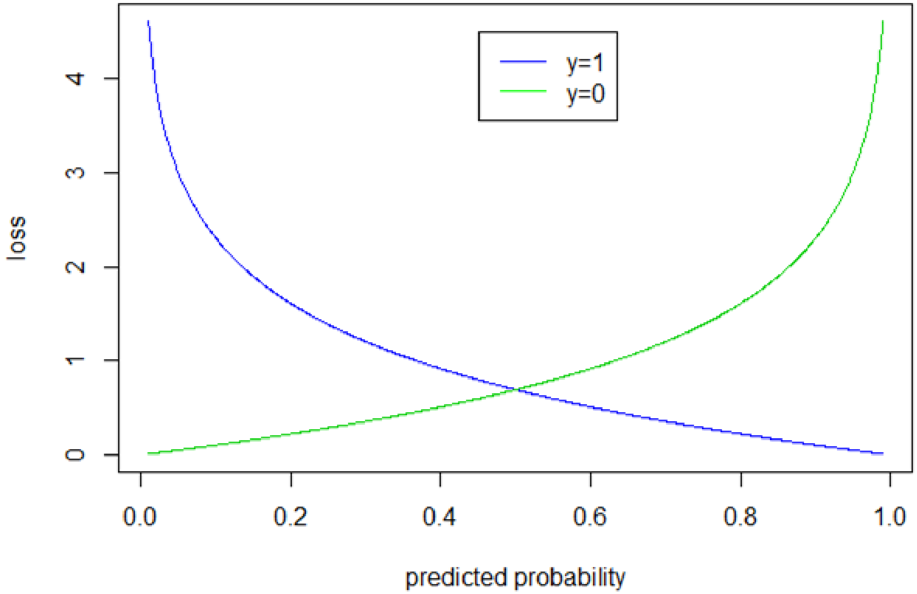
Regresión Logística: Función Objetivo

$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[-y^{(i)}log(h_\theta(x^{(i)})) - (1-y^{(i)})log(1-h_\theta(x^{(i)}))]$$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})x_j^{(i)}$$

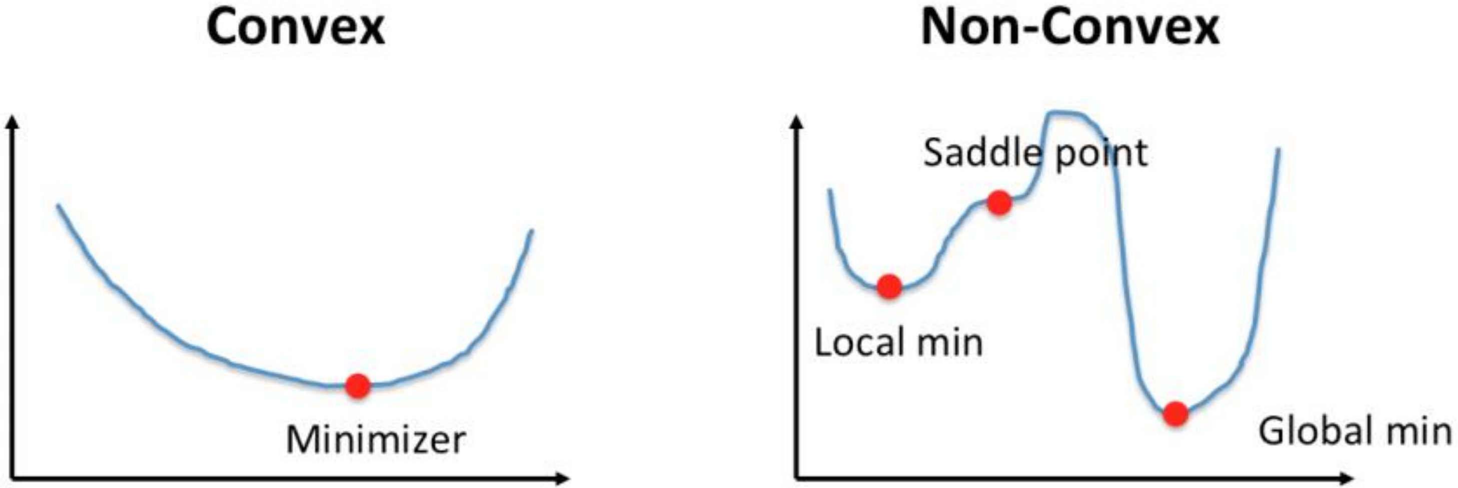
Regresión Logística: Función Objetivo

Esta función objetivo se denomina **pérdida de entropía cruzada (cross-entropy loss)**.



Regresión Logística: Función Objetivo

La pérdida de entropía cruzada se utiliza porque permite que el problema de optimización para entrenar la regresión logística se vuelva **convexo**.



Regresión Logística: Entrenamiento

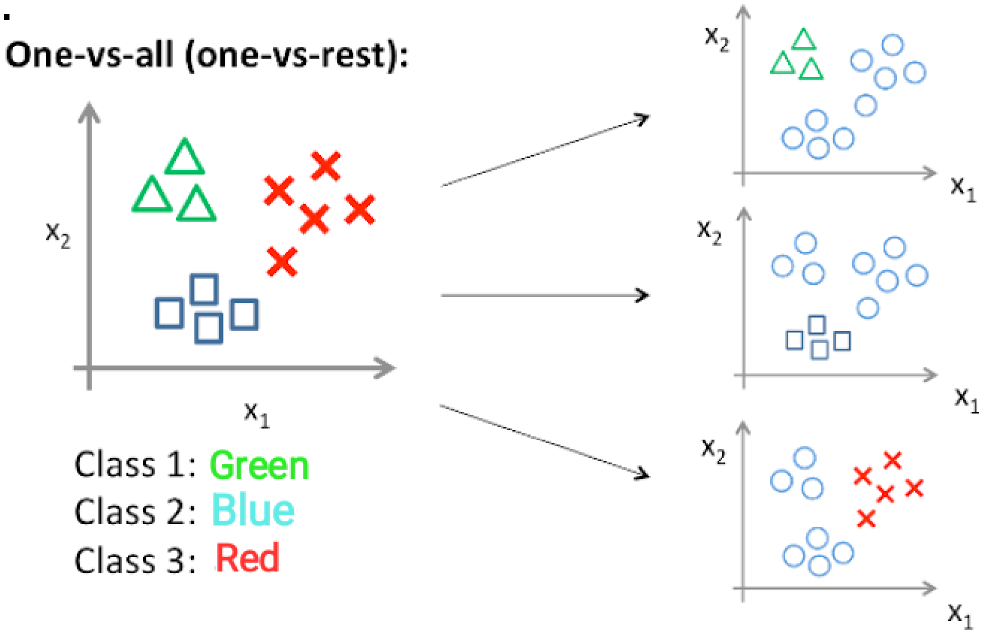
La regresión logística sólo se puede entrenar mediante métodos iterativos. Por lo general, se utiliza el descenso por el gradiente.

$$\mathbf{w} := \mathbf{w} - \alpha \times \nabla Cost_{\mathbf{w}}$$

$$\nabla Cost_{\mathbf{w}} = \frac{1}{m} X^T (\hat{y} - y)$$

Regresión Logística: Multiclase

Para lograr una clasificación multiclase mediante regresión logística se puede aplicar la estrategia **uno contra todos (one-vs-all o one-vs-rest)**.



Regresión Logística: Multiclase

Otra opción para lograr una clasificación multiclase es aplicar una **regresión logística multinomial**, también conocida como **regresión softmax**.

$$h_\theta(x) = \begin{bmatrix} P(y=1|x;\theta) \\ P(y=2|x;\theta) \\ \vdots \\ P(y=K|x;\theta) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{K} \exp(\theta^{(j)\top} x)} \begin{bmatrix} \exp(\theta^{(1)\top} x) \\ \exp(\theta^{(2)\top} x) \\ \vdots \\ \exp(\theta^{(K)\top} x) \end{bmatrix}$$

Preprocesamiento

Preprocesamiento

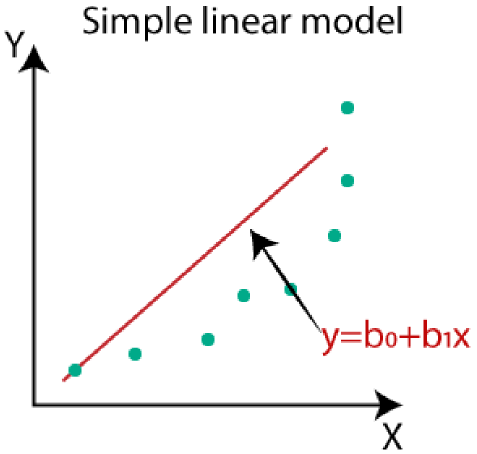
Tanto la regresión lineal como la logística funcionan mejor si las entradas varían en el mismo rango de valores. Debido a esto, se recomienda transformar las características para que varíen entre 0 y 1 o entre -1 y 1 o para que tengan media 0 y varianza 1 (estandarización). En Scikit-Learn esto se puede lograr con las siguientes transformaciones:

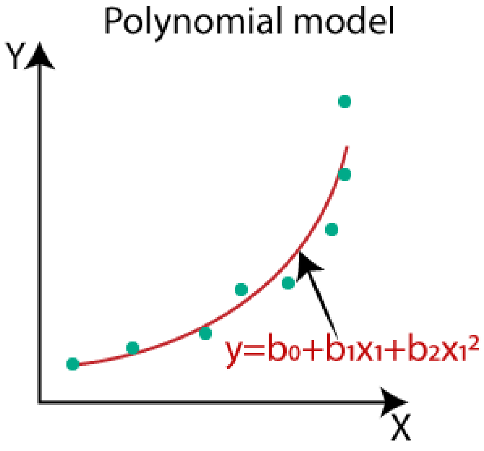
- sklearn.preprocessing.MinMaxScaler
- sklearn.preprocessing.StandardScaler

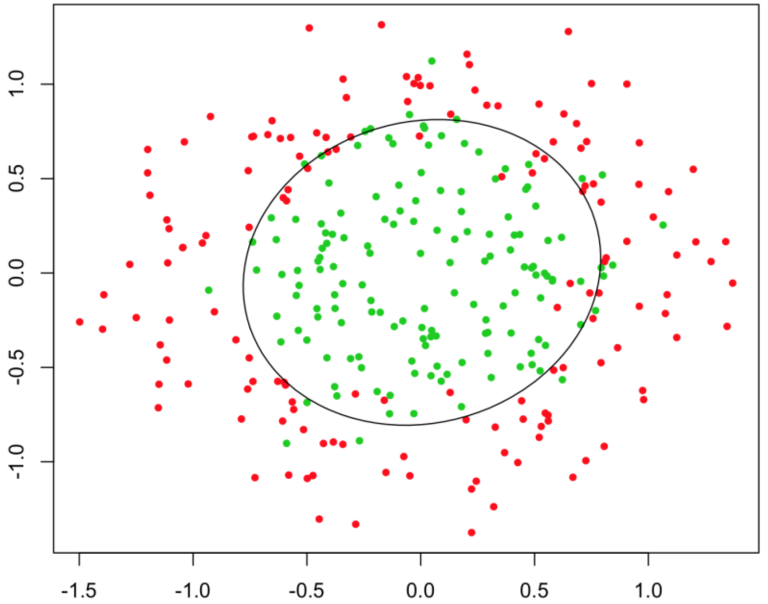
Características Polinómicas

Características Polinómicas

Mediante **características polinómicas** es posible obtener modelos y fronteras de decisión no lineales con regresión lineal o logística.

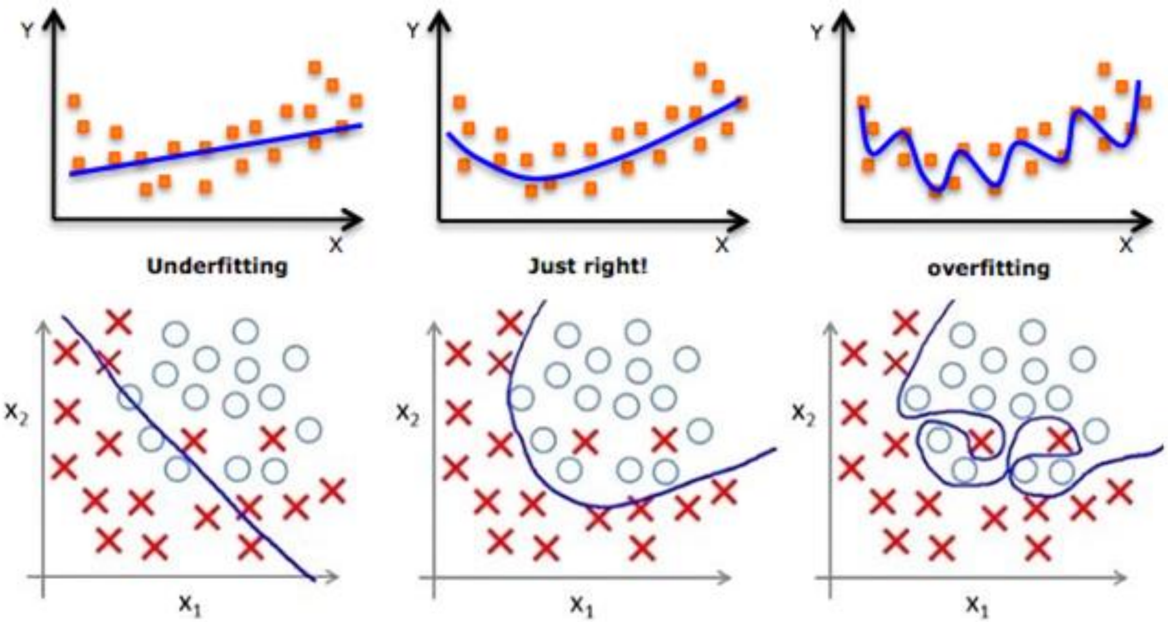




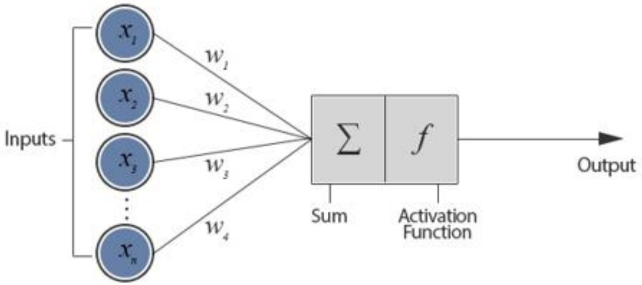


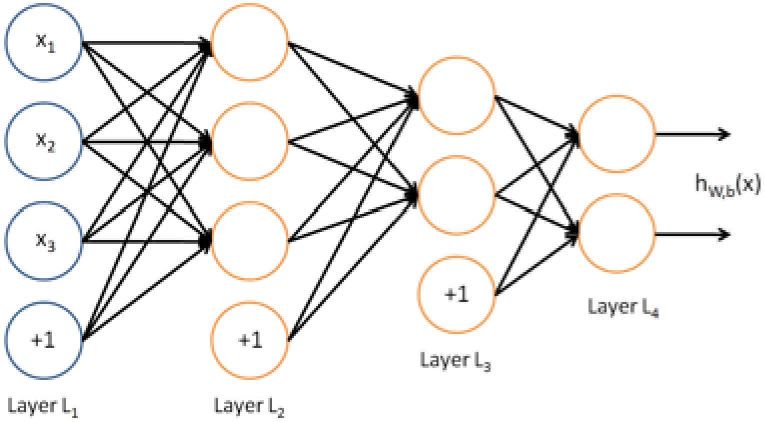
Características Polinómicas: Sobreajuste

Sin embargo, las características polinómicas aumentan la varianza del modelo y pueden causar sobreajuste.



Redes neuronales





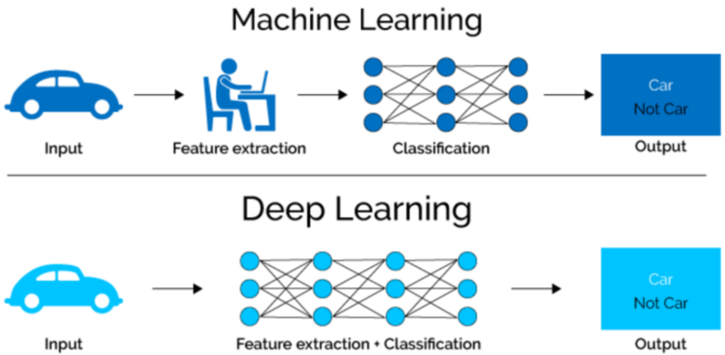


Figure 1: Machine Learning VS Deep Learning

Regularización

Regularización

Si se desea usar características polinómicas sin provocar un aumento exagerado en la varianza, se debe procurar que los valores de los pesos no sean muy grandes. Esto se logra mediante **regularización**, tanto en regresión lineal como en regresión logística.

Regularización: Función Objetivo

$L1$:

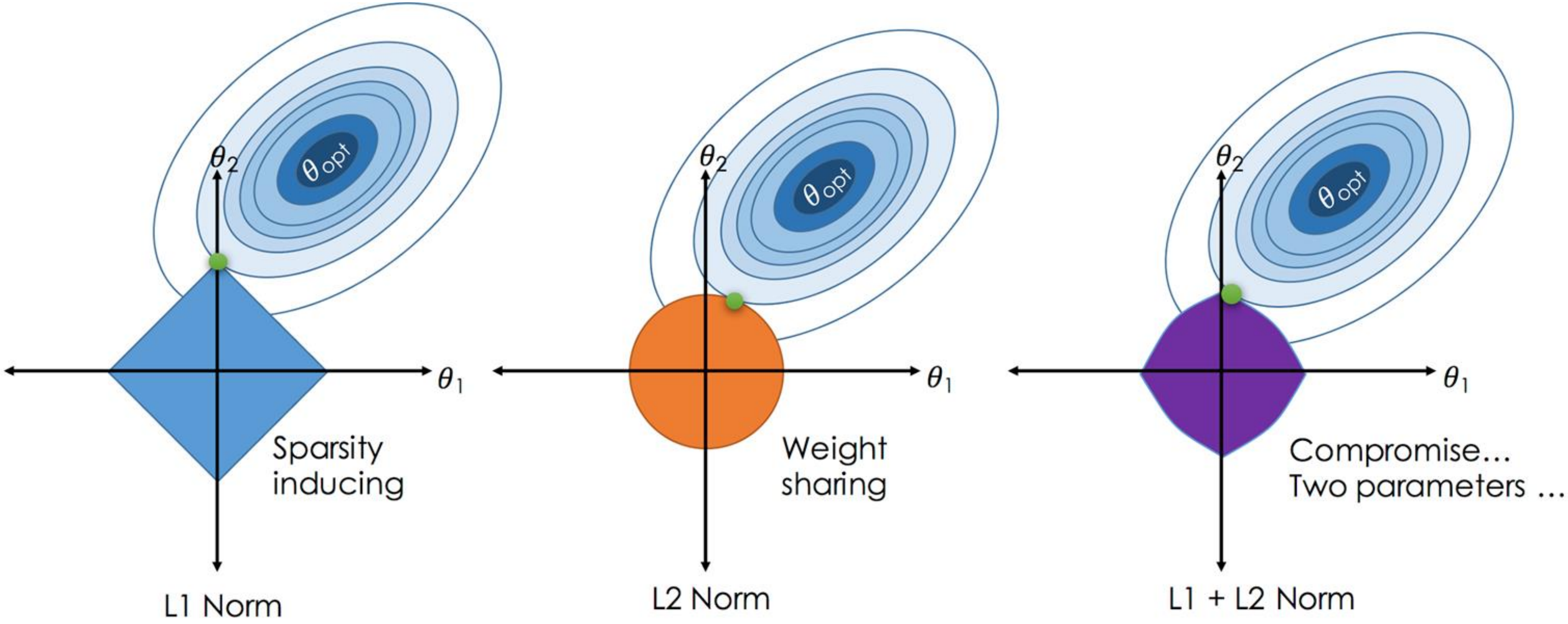
$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} Cost(h_\theta(x^{(i)}), y^{(i)}) + \frac{\lambda}{m}\sum_{j=1}^{n} |\theta_j|$$

$L2$:

$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} Cost(h_\theta(x^{(i)}), y^{(i)}) + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n} \theta_j^2$$

$$m = number\ of\ samples, \quad n = number\ of\ features$$

Regularización: Efecto



Regularización: Scikit-Learn

En Scikit-Learn se usa el argumento *alpha* en lugar de λ para la regularización de la regresión lineal. Sin embargo, estos hiperparámetros son equivalentes.

Es decir que menores valores de *alpha* implican menos regularización (un modelo más complejo) y mayores valores producen modelos más fuertemente regularizados (menos complejos).

Regularización: Scikit-Learn

En Scikit-Learn se usa el argumento *C* en lugar de λ para la regularización de la regresión logística. Estos hiperparámetros guardan la siguiente relación:

$$C \sim \frac{1}{\lambda}$$

Es decir que mayores valores de *C* implican menos regularización (un modelo más complejo) y menores valores producen modelos más fuertemente regularizados (menos complejos).

Regresión Lineal Regularizada

La regresión lineal regularizada recibe diferentes nombres según el tipo de regularización empleada:

- L2: regresión de cresta (ridge regression)
- L1: regresión LASSO
- L1 y L2: red elástica

Selección de Hiperparámetros

Selección de Hiperparámetros

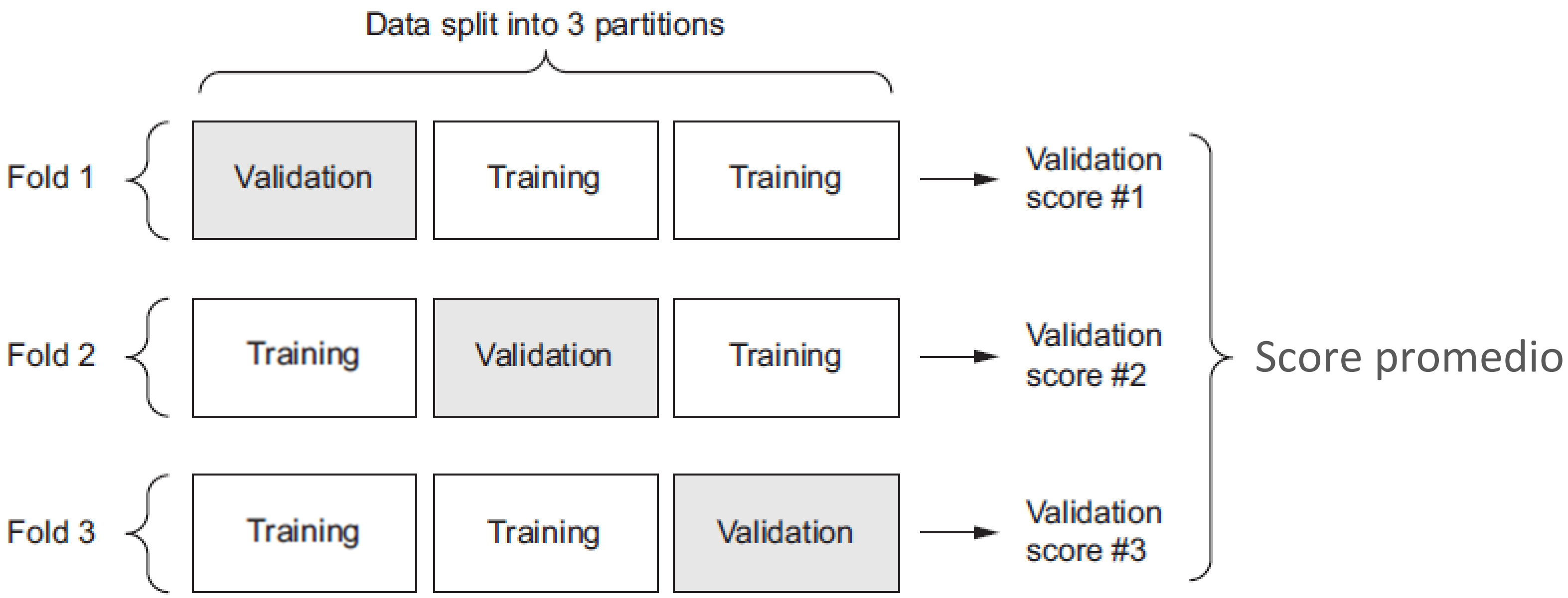
Para decidir los valores apropiados de hiperparámetros como *C* o el grado de las características polinómicas, usamos **validación** o **validación cruzada**.

Selección de Hiperparámetros: Regresión Lineal y Logísitca

Como las regresiones lineal y logística son, por lo general, rápidas de entrenar, se suele usar validación cruzada para seleccionar los hiperparámetros. Esto se puede hacer en Scikit-Learn con las siguientes clases:

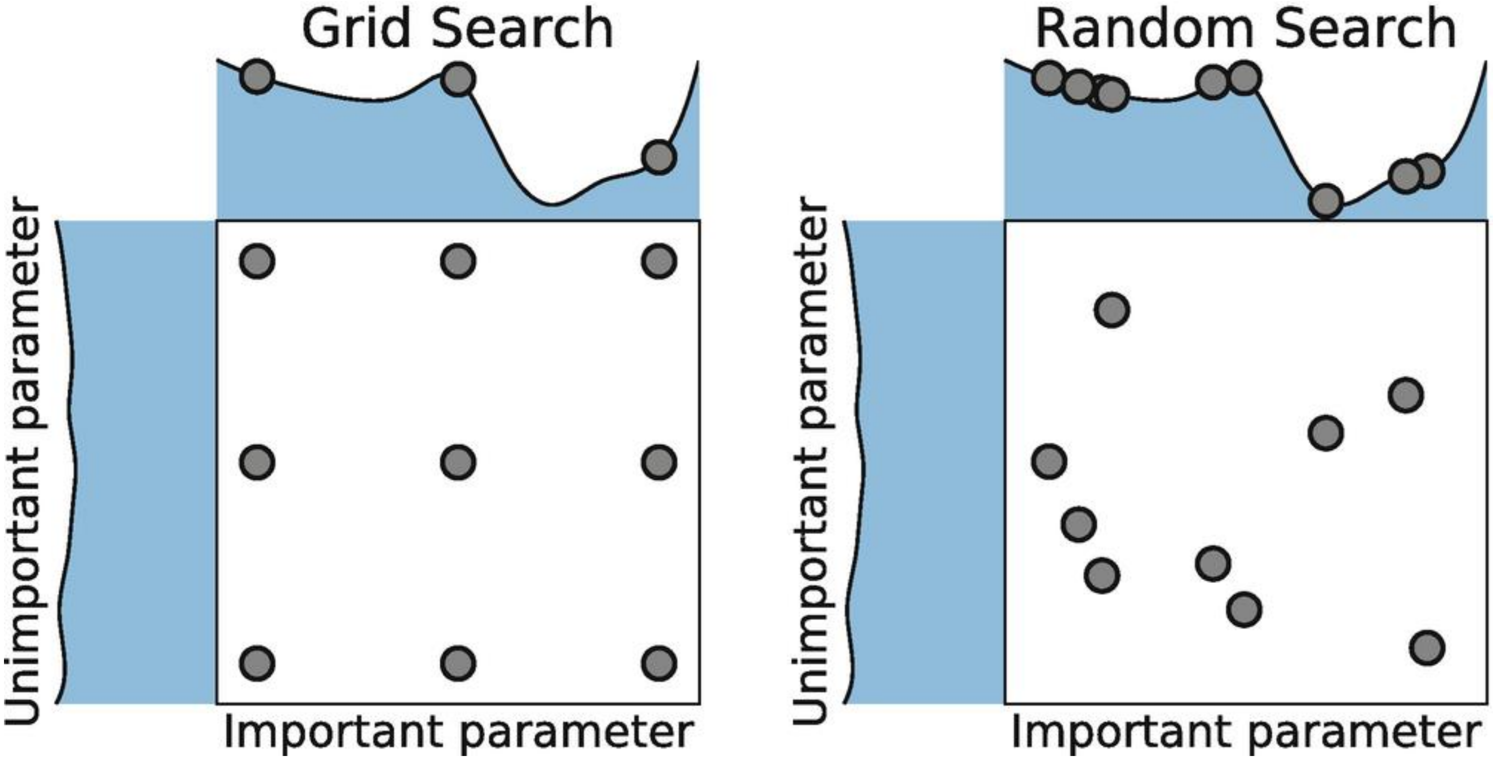
- sklearn.model_selection.GridSearchCV
- sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV

Validación Cruzada



K-fold cross-validation

Selección de Hiperparámetros: Tipos de Búsqueda



Ejemplo de regresión lineal y logística

GRACIAS