TICS-411 Minería de Datos

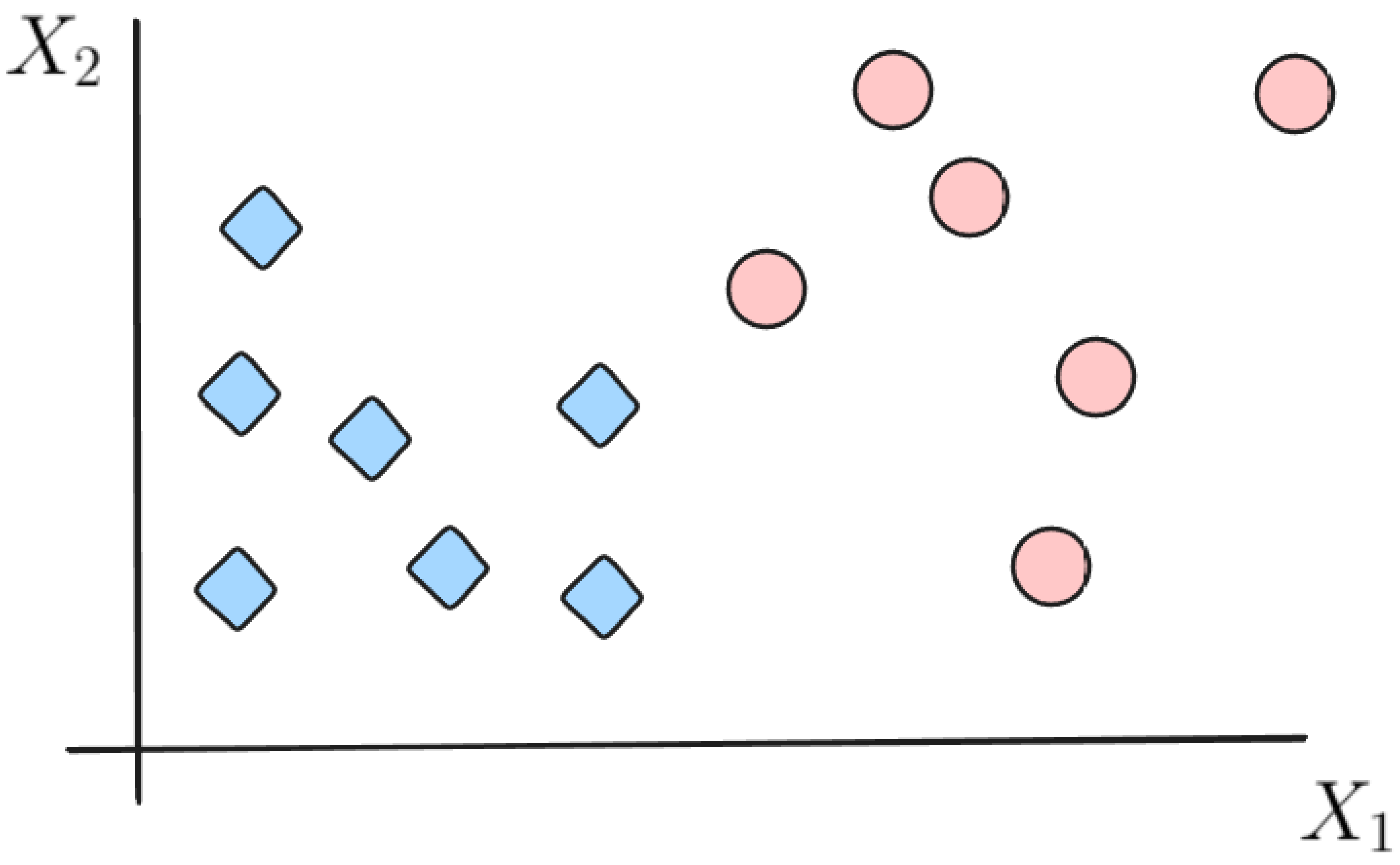
Clase 12: Regresión Logística

Alfonso Tobar-Arancibia
alfonso.tobar.a@edu.uai.cl

UNIVERSIDAD ADOLFO IBÁÑEZ

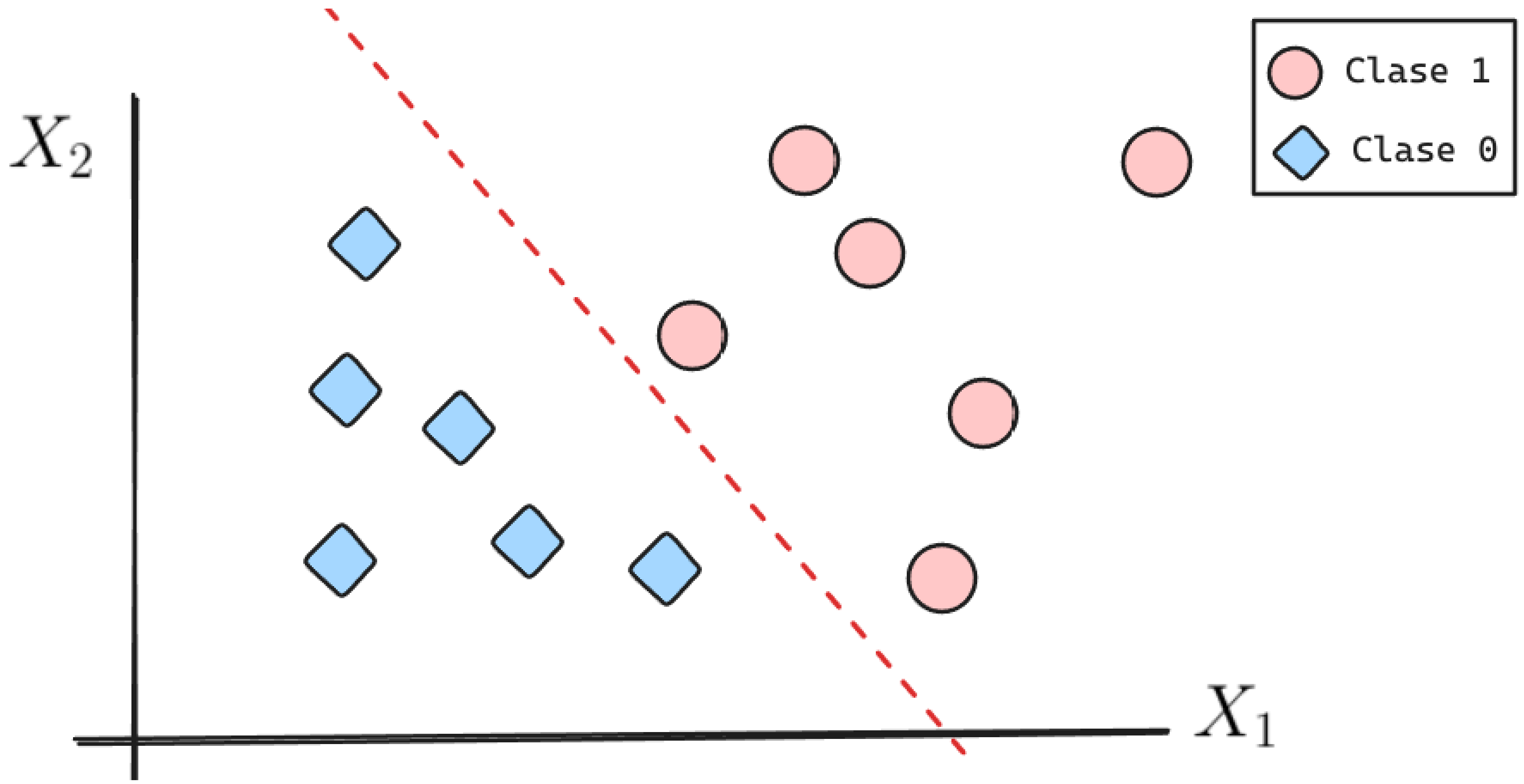
Intuición

Supongamos el siguiente dataset:

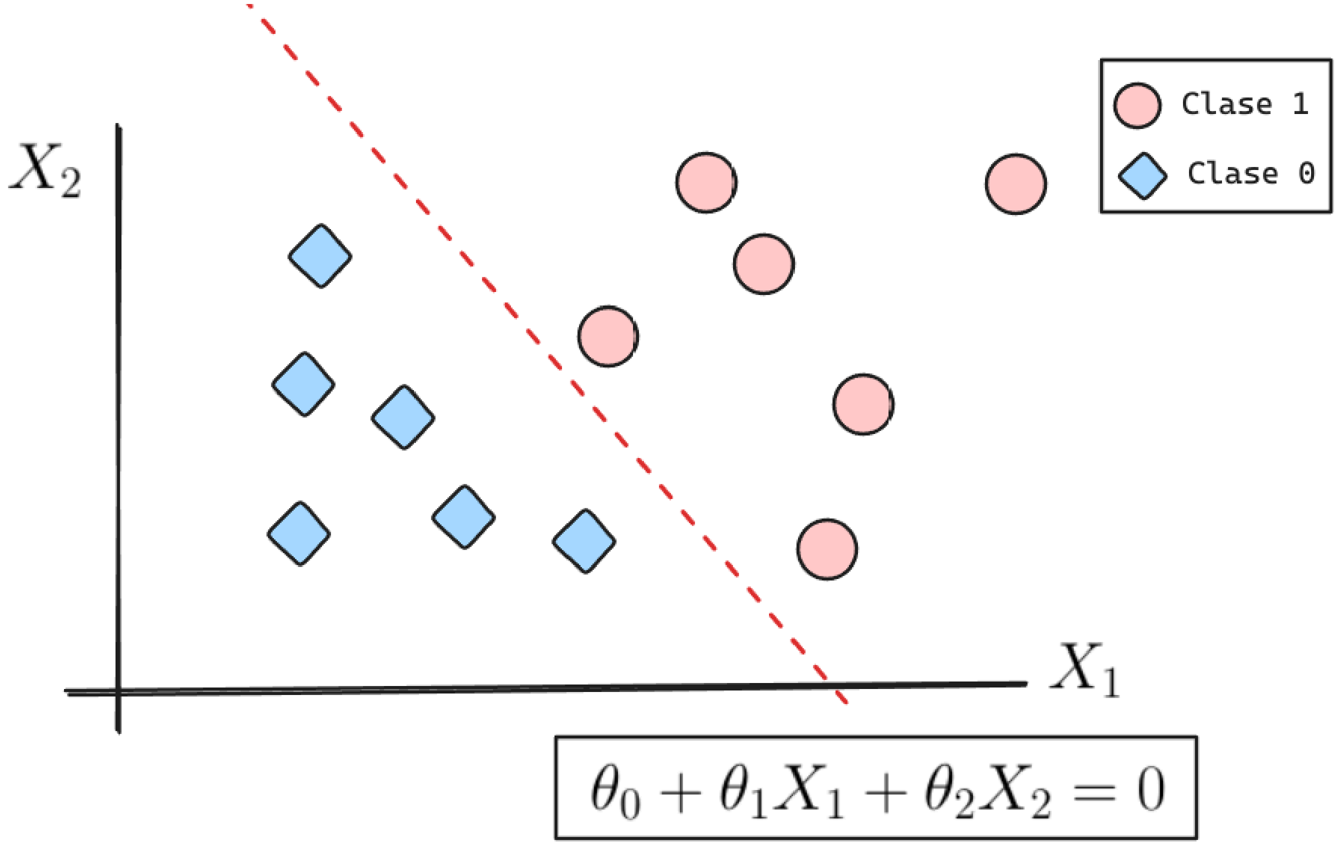


⚠ ¿Cómo puedo separar ambas clases?

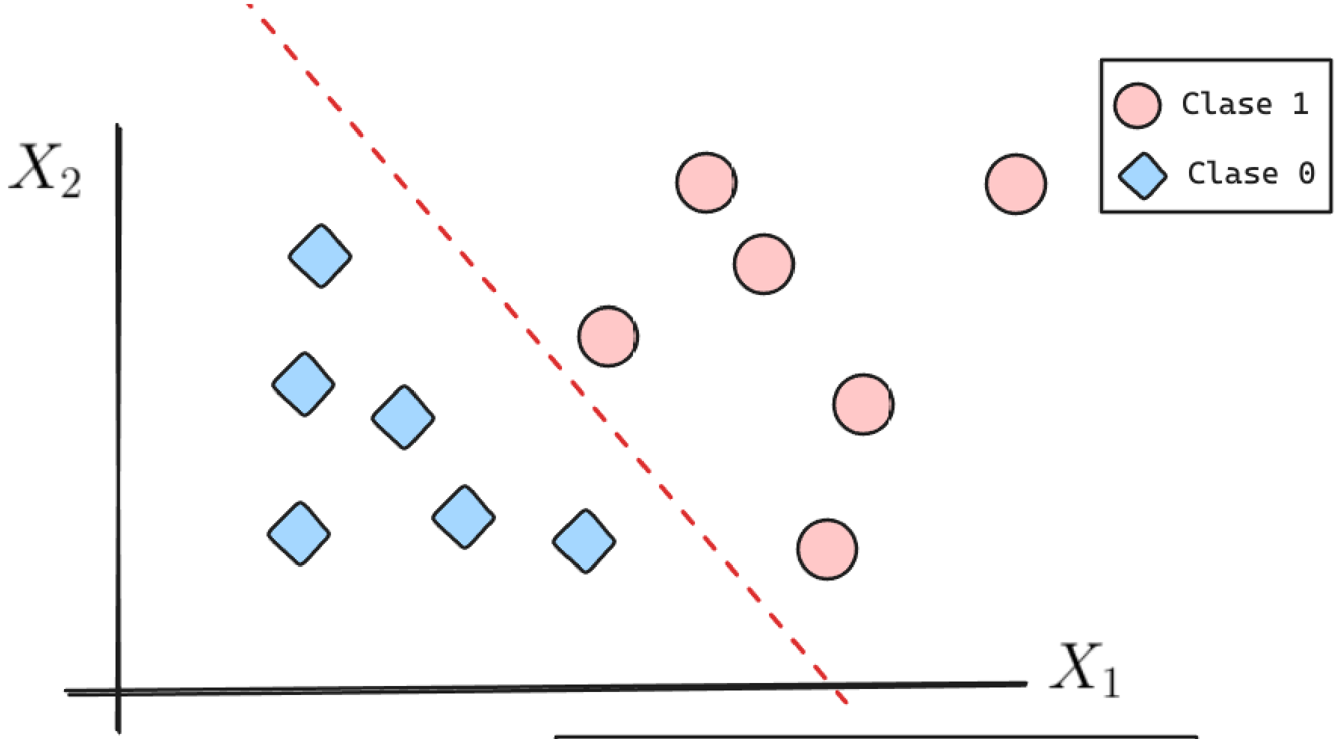
Intuición



Intuición



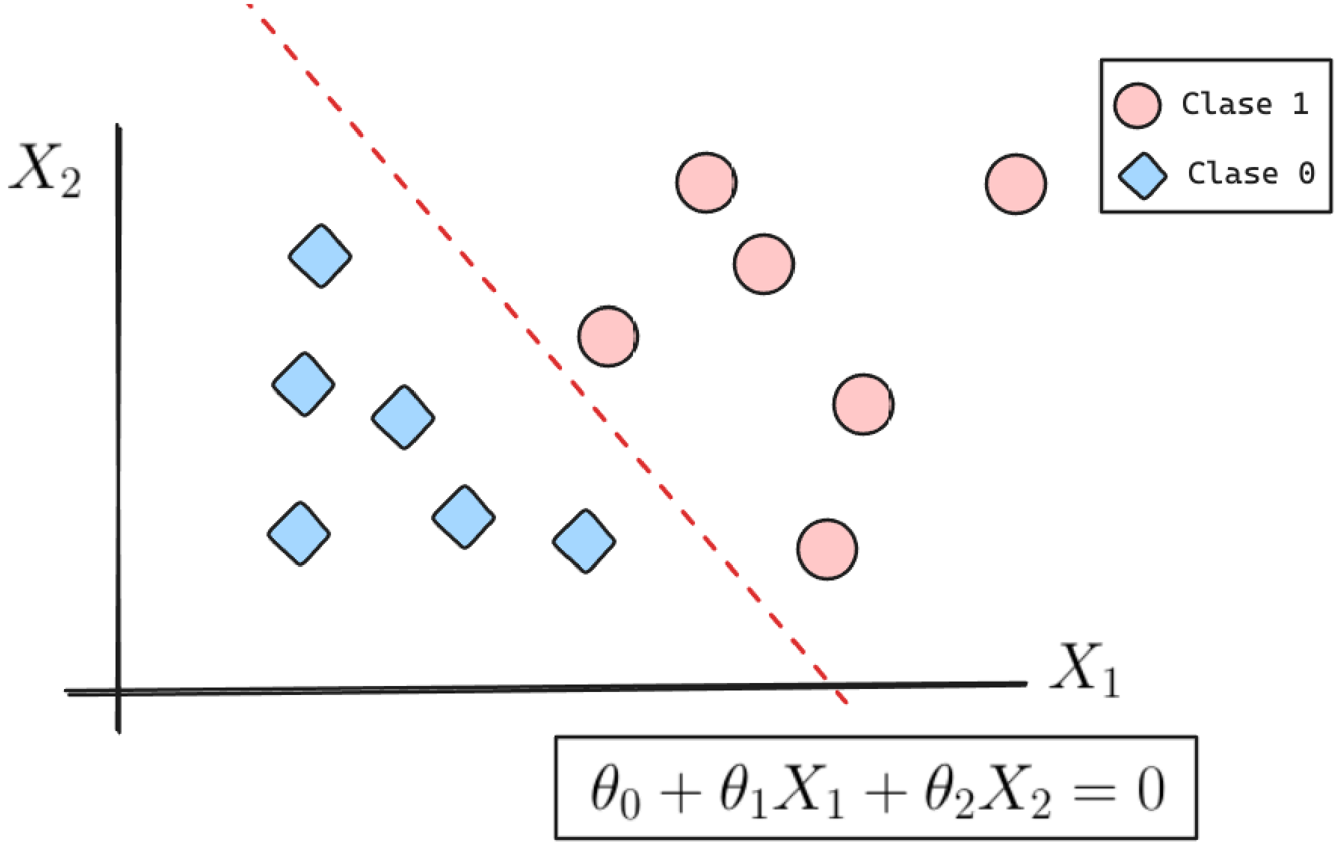
Intuición



$$\boxed{\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2 = 0}$$

ⓘ La `frontera de decisión` se puede caracterizar como la ***ecuación de una recta*** (en forma general).

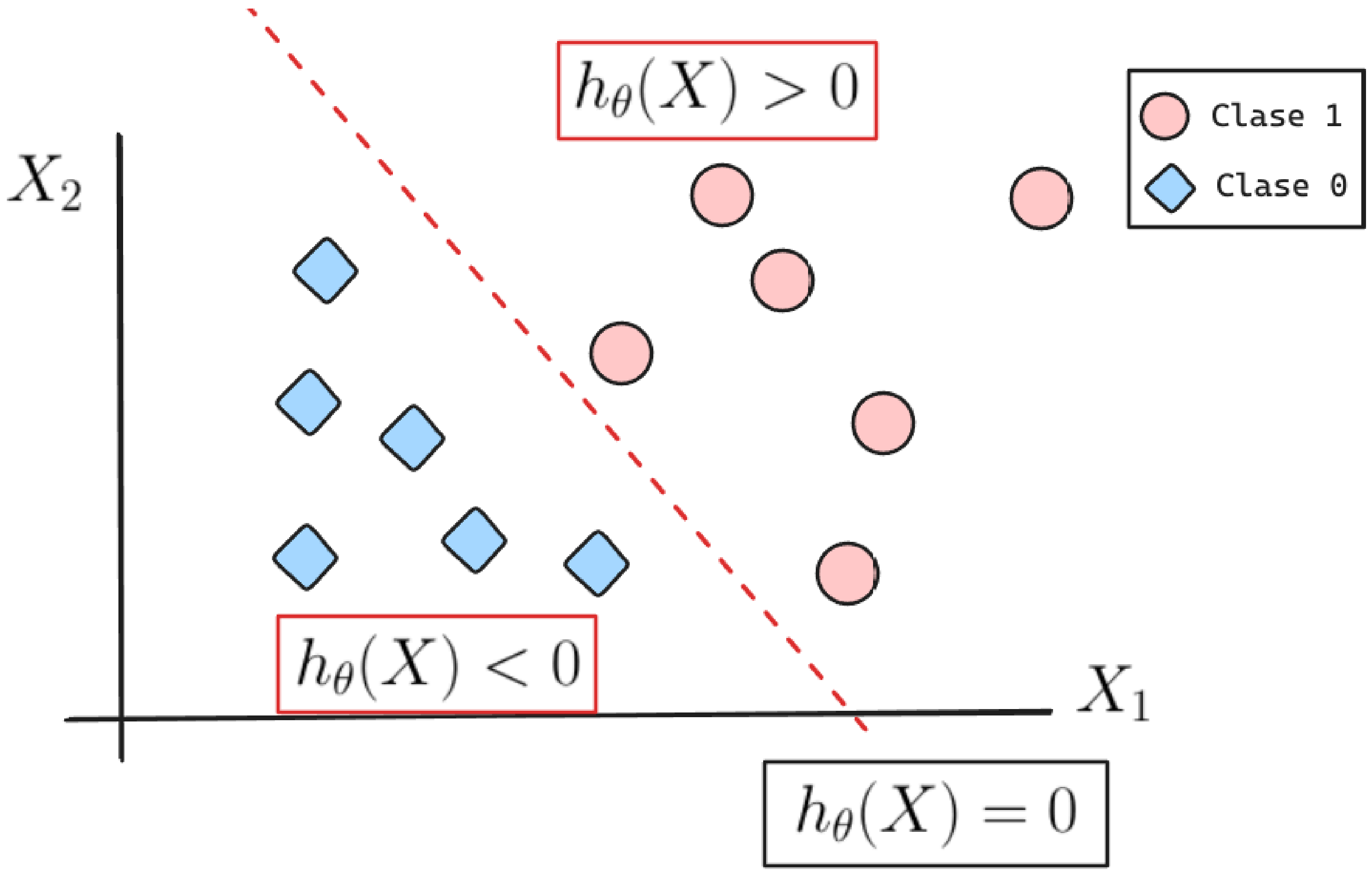
Intuición



La `frontera de decisión` se puede caracterizar como la ***ecuación de una recta*** (en forma general).

Además definiremos $h_\theta(X) = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2$.

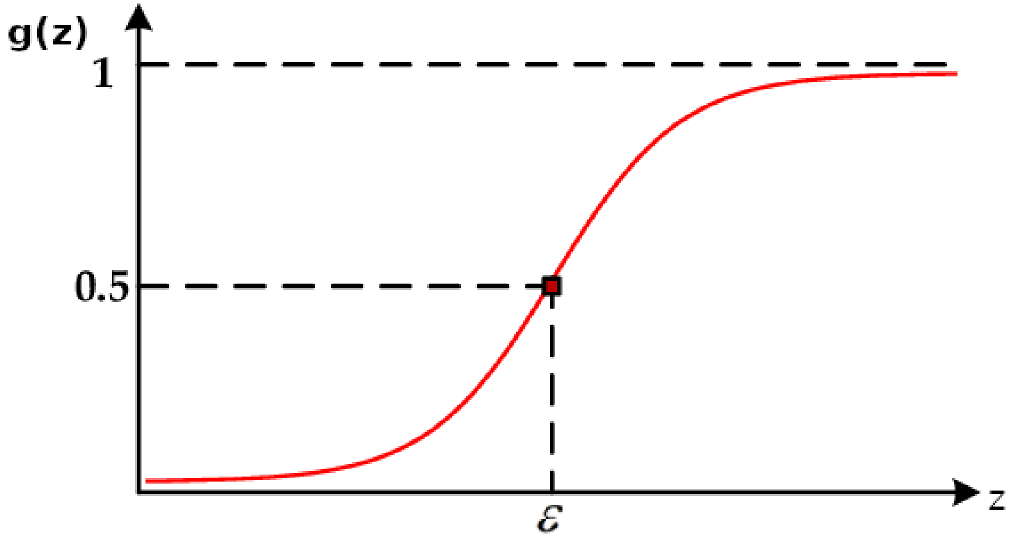
Intuición



Podríamos pensar que si $h_\theta(X)$ es positivo entonces pertenece a la clase 1 y si $h_\theta(X)$ es negativo pertenece a la clase 0.

La Función Sigmoide o Logística

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

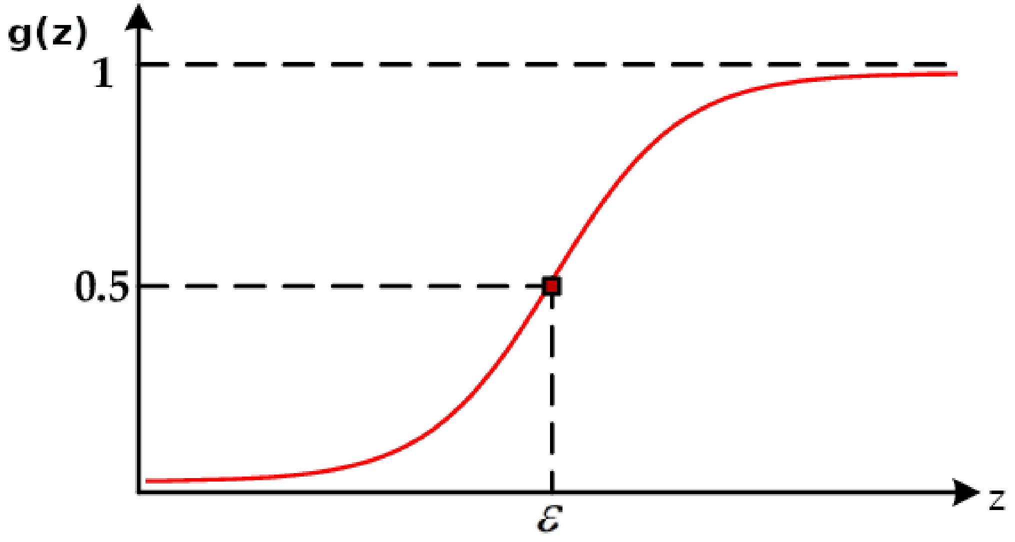


- Función no lineal.
- Función acotada entre 0 y 1.
- $g(\varepsilon) = 0.5, \varepsilon = 0$

¿Qué pasaría si ahora decimos que $z = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2$?

La Función Sigmoide o Logística

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



- Función no lineal.
- Función acotada entre 0 y 1.
- $g(\varepsilon) = 0.5, \varepsilon = 0$

De acá sale la noción del umbral 0.5 que hemos visto en clases anteriores.

¿Qué pasaría si ahora decimos que $z = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2$?

La Regresión Logística

$$P[y = 1|X, \theta] = g(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2) = \frac{1}{1 + e^{-(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2)}}$$

La Regresión Logística

$$P[y = 1|X, \theta] = g(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2) = \frac{1}{1 + e^{-(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2)}}$$

Regla de Decisión:

- Si $g(z) \geq 0.5 \implies Clase\,1.$
- Si $g(z) < 0.5 \implies Clase\,0.$

La Regresión Logística

$$P[y=1|X,\theta] = g(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2) = \frac{1}{1+e^{-(\theta_0+\theta_1 X_1+\theta_2 X_2)}}$$

Regla de Decisión:

- Si $g(z) \geq 0.5 \implies Clase\,1.$
- Si $g(z) < 0.5 \implies Clase\,0.$

$g(z)$ se puede interpretar como una ***probabilidad de pertenecer a la Clase 1***.

La Regresión Logística

$$P[y=1|X,\theta] = g(\theta_0 + \theta_1 X_1 + \theta_2 X_2) = \frac{1}{1+e^{-(\theta_0+\theta_1 X_1+\theta_2 X_2)}}$$

Regla de Decisión:

- Si $g(z) \geq 0.5 \implies Clase\,1.$
- Si $g(z) < 0.5 \implies Clase\,0.$

$g(z)$ se puede interpretar como una ***probabilidad de pertenecer a la Clase 1***.

$1 - g(z)$ se puede interpretar como una ***probabilidad de NO pertenecer a la Clase 1***, es decir, ***pertenecer a la Clase 0***.

Aprendizaje del Modelo

Supongamos lo siguiente:

$$P(y = 1|X, \theta) = g(z) \qquad\qquad P(y = 0|X, \theta) = 1 - g(z)$$

Ambas ecuaciones pueden comprimirse en una sola de la siguiente manera:

$$P(y|X, \theta) = g(z)^y (1 - g(z))^{1-y}$$

> ⓘ Para encontrar los parámetros θ podemos utilizar una técnica llamada **Maximum Likelihood Estimation**.

Maximum Likelihood Estimation

$$\mathcal{L}(\theta) = \prod_{i=1}^{n} P(y^{(i)} | x^{(i)}, \theta)$$

$$\underset{\theta}{argmin} \; -l(\theta)$$

$$l(\theta) = log(\mathcal{L}(\theta)) = \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \cdot log(g(z)) + (1 - y^{(i)}) \cdot log(1 - g(z))$$

Esta ecuación se conoce como **Entropía Cruzada** o como **Negative Log Loss (NLL)** y tiene la gracia de que es una curva convexa lo que ***garantiza un valor único de los parámetros*** θ.

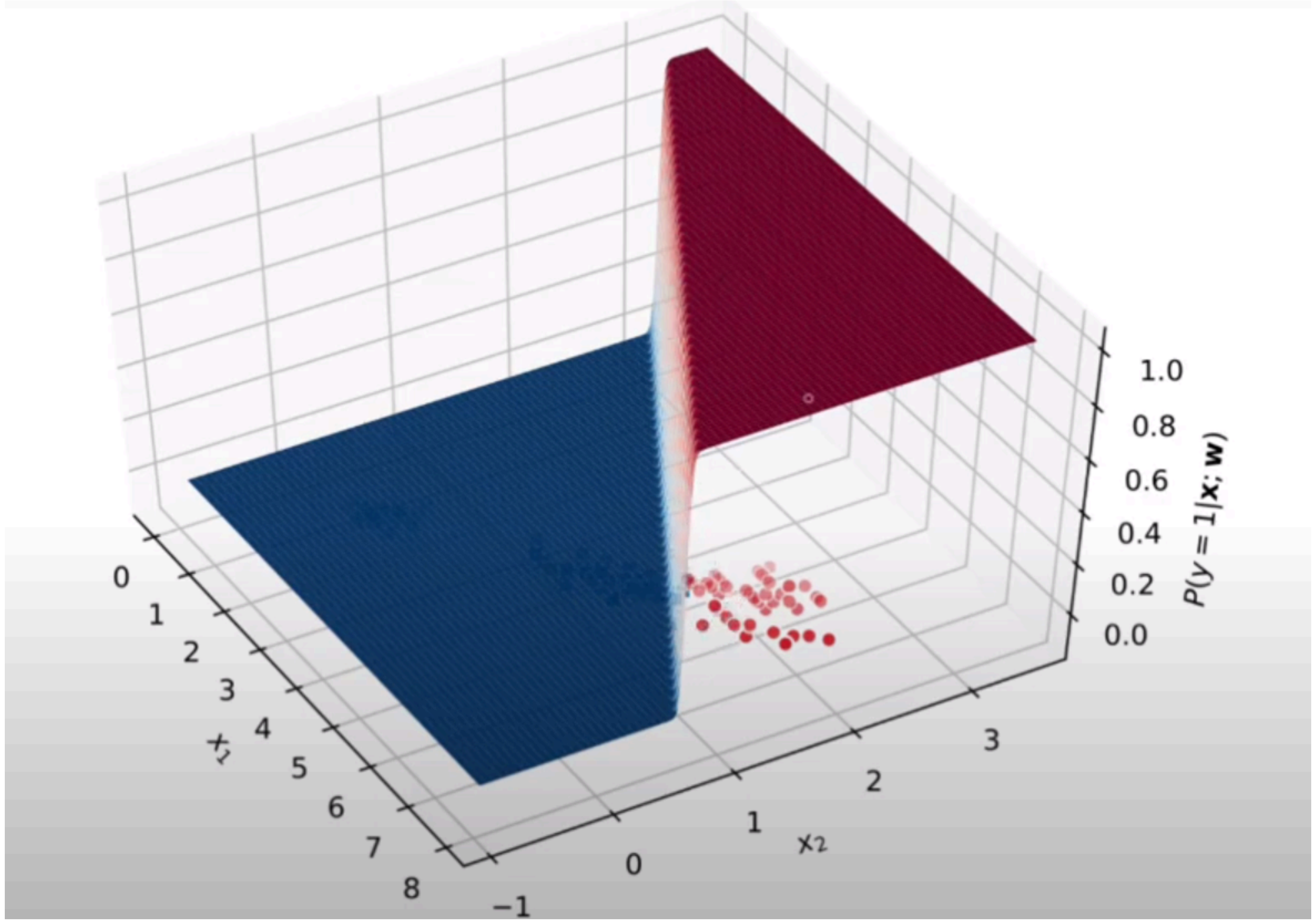
Cálculo de Coeficientes

> ⓘ La técnica más famosa para minimizar este tipo de problemas se conoce como `Stochastic Gradient Descent`. Lo que genera la siguiente solución:

$$\theta_j \leftarrow \theta_j - \alpha \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(g(z) - y^{(i)} \right) x_j^{(i)}$$

> ⚠ A pesar de lo complicado que se ve la ecuación, implementarla en código es bastante sencillo.

Frontera de Decisión

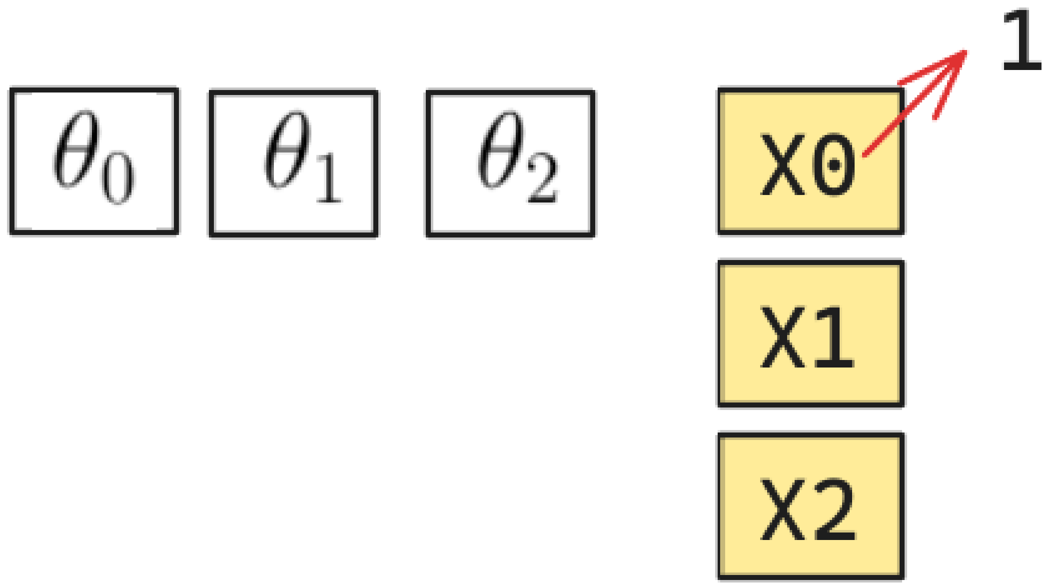


Inference Time

En este caso se calcula:

$$g_\theta(x^{(i)}) = sigmoid(\theta^t x^{(i)})$$

- θ: Corresponde a un vector con todos los parámetros calculados.
- $x^{(i)}$: Corresponde a una instancia de m variables la cual generará una probabilidad.
  - $\theta^t x^{(i)}$ corresponde al producto punto de dos vectores, que es equivalente a una ***"suma producto"***.
- $g_\theta(x^{(i)})$: Generará un valor entre 0 y 1 al cuál se le aplica la Regla de Decisión.


θ_0
θ_1
θ_2
X0
X1
X2
1

Implementación en Python

```python
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
  - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
  - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
  - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
  - ***None:*** No hay regularización.

Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Implementación en Python

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
  - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
  - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
  - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
  - ***None:*** No hay regularización.

Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Implementación en Python

```python
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
  - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
  - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
  - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
  - ***None:*** No hay regularización.

Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Implementación en Python

```python
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
  - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
  - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
  - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
  - ***None:*** No hay regularización.

> ! Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Implementación en Python

```python
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
  - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
  - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
  - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
  - ***None:*** No hay regularización.

> ⓘ Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Implementación en Python

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

lr = LogisticRegression(C=1, penalty="l2", random_state = 42)
lr.fit(X_train, y_train)

y_pred = lr.predict(X_test)
y_proba = lr.predict_proba(X_test)

## Visualizacion de los Parámetros
lr.coef_
lr.intercept_
```

- **C**: Corresponde a un parámetro de Regularización. Valores más pequeños implica mayor regularización. Por defecto 1.
- penalty: Corresponde al tipo de regularización. Por defecto *"l2"*.
    - ***"l1":*** Corresponde a la regularización Lasso. Genera que hayan parámetros cero, ayudando en la selección de variables.
    - ***"l2":*** Corresponde a la regularización Ridge. Genera que todos los parámetros sean pequeños, entregando estabilidad y buena interpretabilidad.
    - ***"elasticnet":*** Corresponde a la combinación de *"l1"* y *"l2"*.
    - ***None:*** No hay regularización.

Para cambiar la regularización, consultar la documentación de Scikit-Learn.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_{\theta}(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.
  - Tiene menos potencia.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.
  - Tiene menos potencia.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.
  - Tiene menos potencia.

- Si el vehículo es más pesado (**W** aumenta), entonces es menos económico.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.
  - Tiene menos potencia.

- Si el vehículo es más pesado (**W** aumenta), entonces es menos económico.
  - Requiere probablemente más combustible para mover dicho peso.

Interpretabilidad

> Una de las grandes ventajas que tiene la Regresión Logística es que sus predicciones son interpretables.

- Tenemos un dataset de 2 variables:
  - W: Corresponde al peso del Vehículo.
  - qsec: Corresponde al tiempo en Segundos que lo toma en recorrer un cuarto de milla.
- Queremos predecir si el vehículo es Ecónomico o no (en términos de consumo de Bencina).

$$g_\theta(x) = 0.5 - 3.5 \cdot W + 1.5 \cdot qsec$$

- Si el vehículo se demora más en el cuarto de milla (**qsec** aumenta) entonces el vehículo es más económico.
  - Tiene menos potencia.

- Si el vehículo es más pesado (**W** aumenta), entonces es menos económico.
  - Requiere probablemente más combustible para mover dicho peso.

El valor del parámetro representa también la magnitud de la contribución.

Sugerencias

- **Estandarización/Normalización de datos**: Permite que la escala de los datos no afecte en la interpretabilidad.
- **One Hot Encoder**: En general tiende a dar mejores resultados que el Ordinal.
- **Interacciones**: Combinación de variables.
- **Variables no Lineales:** Permite que la frontera de Decisión no sea necesariamente lineal (Regresión Polinómica).

мы сделали