UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

LogIA

Aprendizagem de Máquina

César Lincoln Cavalcante Mattos

2025

Agenda

1. Classificação binária
2. Regressão logística binária
3. Regressão logística multiclasse
4. Tópicos adicionais
5. Referências

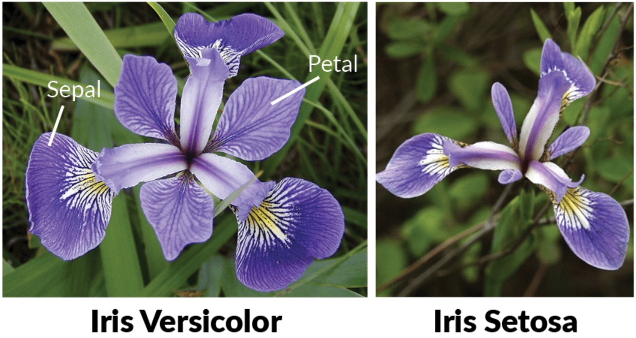
Classificação

Tarefa de classificação

Relaciona vetores de entrada a um número finito de rótulos/categorias/classes de saída.

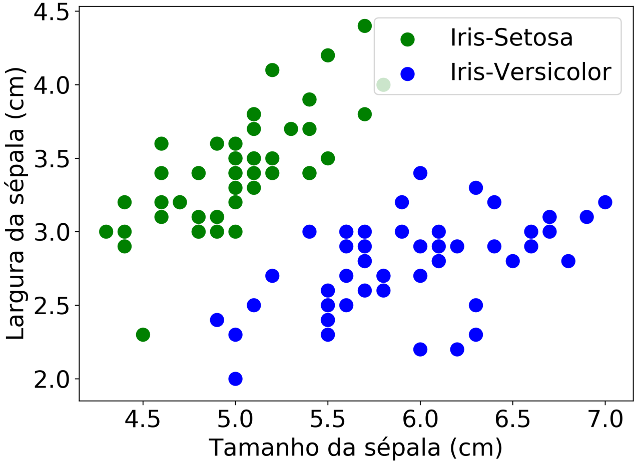
- **Classificação binária**: Somente duas classes (sim/não, positivo/negativo, gato/cachorro, etc.)
- **Classificação multiclasse**: Mais de duas classes (dígitos, letras, raças de cachorro, marcas de carro, etc.)

Classificação binária



- **Problema**: Como classificar automaticamente flores da espécie íris entre Setosa e Versicolor a partir de medidas de suas sépalas?

Classificação binária



- **Ideia**: Podemos utilizar um modelo de regressão linear nessa tarefa de classificação?

Classificação binária

- Convertemos as saídas categóricas (“setosa” ou “versicolor”) em números: -1 ou 1.

Classificação binária

- Convertemos as saídas categóricas ("setosa" ou "versicolor") em números: -1 ou 1.
- **Problema**: O modelo $\hat{y}_i = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i$ retorna valores reais.

Classificação binária

- Convertemos as saídas categóricas (“setosa” ou “versicolor”) em números: -1 ou 1.
- **Problema**: O modelo $\hat{y}_i = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i$ retorna valores reais.
- **Ideia**: Modificar a saída para $\hat{y}_i = \text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)$, em que:

$$\text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} -1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i < 0 \\ 1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \geq 0 \end{cases}.$$

Classificação binária

- Convertemos as saídas categóricas ("setosa" ou "versicolor") em números: -1 ou 1.
- **Problema**: O modelo $\hat{y}_i = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i$ retorna valores reais.
- **Ideia**: Modificar a saída para $\hat{y}_i = \text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)$, em que:

$$\text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} -1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i < 0 \\ 1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \geq 0 \end{cases}.$$

- **Problema**: Como modificar a regra de atualização dos parâmetros, dado que a função $\text{sign}(\cdot)$ não é diferenciável?

Classificação binária

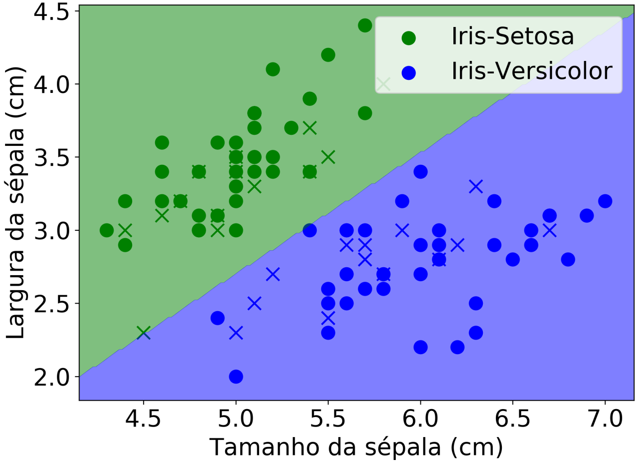
- Convertemos as saídas categóricas ("setosa" ou "versicolor") em números: -1 ou 1.
- **Problema**: O modelo $\hat{y}_i = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i$ retorna valores reais.
- **Ideia**: Modificar a saída para $\hat{y}_i = \text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)$, em que:

$$\text{sign}(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} -1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i < 0 \\ 1 & \text{, se } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i \geq 0 \end{cases}.$$

- **Problema**: Como modificar a regra de atualização dos parâmetros, dado que a função $\text{sign}(\cdot)$ não é diferenciável?
- **Ideia**: Vamos usar a função $\text{sign}(\cdot)$ somente na predição do modelo.

Classificação binária

- Solução via OLS: $\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y}$
- Classificação binária (70% para treinamento e 30% para teste):



Agenda

1. Classificação binária
2. Regressão logística binária
3. Regressão logística multiclasse
4. Tópicos adicionais
5. Referências

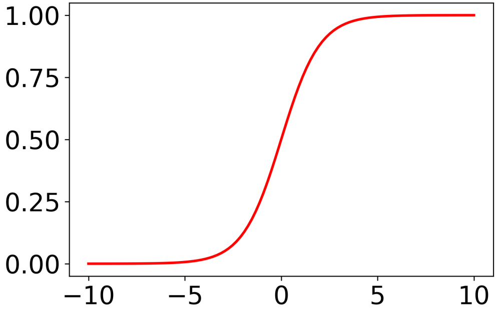
Classificação binária

- **Ideia**: Trocar a função $\mathrm{sign}(\cdot)$ por uma função diferenciável entre 0 e 1.

Classificação binária

- **Ideia**: Trocar a função $\text{sign}(\cdot)$ por uma função diferenciável entre 0 e 1.
- **Função logística (sigmóide)**:

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}.$$



Classificação binária

Regressão logística

- Apesar do nome, é um método de **classificação**.
- Usa uma **função logística** na saída do modelo linear:

$$\hat{y}_i = \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i), \quad \sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}.$$

- A função logística é definida no intervalo $[0, 1]$, possuindo interpretação probabilística.
- $\sigma(z)$ é facilmente **diferenciável**:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(z)}{\mathrm{d}z} = \sigma(z)(1 - \sigma(z)).$$

Regressão logística binária

- **Problema**: Como modelar probabilisticamente os dados a partir da função logística?

Regressão logística binária

- **Problema**: Como modelar probabilisticamente os dados a partir da função logística?

Distribuição de Bernoulli

- Seja uma moeda potencialmente injusta (cara (1) e coroa (0)):

$$P(y = 1|q) = q,$$
$$P(y = 0|q) = 1 - q.$$

- A Distribuição de Bernoulli é então definida por:

$$p(y|q) = q^y (1 - q)^{1-y}.$$

Regressão logística binária

- **Problema**: Como modelar probabilisticamente os dados a partir da função logística?

Verossimilhança de Bernoulli

- Considerando duas classes, 0 e 1, temos:

$$P(y=1|\boldsymbol{x},\boldsymbol{w}) = \sigma(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x}),$$
$$P(y=0|\boldsymbol{x},\boldsymbol{w}) = 1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x}).$$

- A verossimilhança de Bernoulli é então definida por:

$$p(y|\boldsymbol{x},\boldsymbol{w}) = \sigma(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x})^y(1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x}))^{1-y}.$$

Regressão logística binária

- **Problema**: Qual será a nova função custo?

Regressão logística binária

- **Problema**: Qual será a nova função custo?
- **Ideia**: Escolher o negativo da **log-verossimilhança**:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) &= -\log p(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X}, \boldsymbol{w}) \\
\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) &= -\log \prod_{i=1}^{N} p(y_i|\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{w}) \\
\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) &= -\log \prod_{i=1}^{N} \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)^{y_i}(1 - \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))^{1-y_i} \\
\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) &= -\sum_{i=1}^{N} \left[y_i \log \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)) \right].
\end{aligned}
$$

Regressão logística binária

Cross entropy loss

- Definida por:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i \log \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) + (1 - y_i)\log(1 - \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))\right].$$

- Precisamos calcular o gradiente da função custo para atualizar os parâmetros do modelo:

$$\boldsymbol{w} \leftarrow \boldsymbol{w} - \alpha \frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}.$$

Regressão logística binária

- Derivando em relação a $\boldsymbol{w}$, temos:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}(\boldsymbol{w}) &= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i \log \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i) + (1-y_i)\log(1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))\right], \\
\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}} &= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i \frac{1}{\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}\frac{\partial \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}{\partial \boldsymbol{w}} - (1-y_i)\frac{1}{1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}\frac{\partial \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}{\partial \boldsymbol{w}}\right] \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i \frac{\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)(1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))}{\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}\boldsymbol{x}_i - (1-y_i)\frac{\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)(1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))}{1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)}\boldsymbol{x}_i\right] \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i(1-\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))\boldsymbol{x}_i - (1-y_i)\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{x}_i\right] \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i\boldsymbol{x}_i - y_i\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{x}_i - \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{x}_i + y_i\sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{x}_i\right] \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i))\boldsymbol{x}_i \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} e_i \boldsymbol{x}_i.
\end{aligned}
$$

Regressão logística binária

- Com o gradiente $\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}$, atualizamos o modelo via GD ou SGD.

Gradiente Descendente (GD)

- Regra de atualização:

$$\boldsymbol{w}(t) = \boldsymbol{w}(t-1) + \alpha \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e_i(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

Gradiente Descendente Estocástico (SGD)

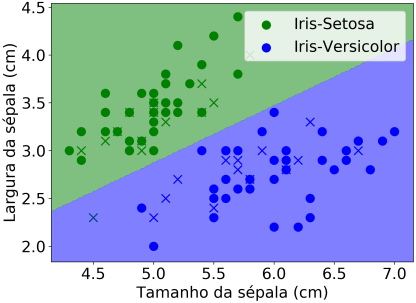
- Regra de atualização:

$$\boldsymbol{w}(t) = \boldsymbol{w}(t-1) + \alpha \, e_i(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

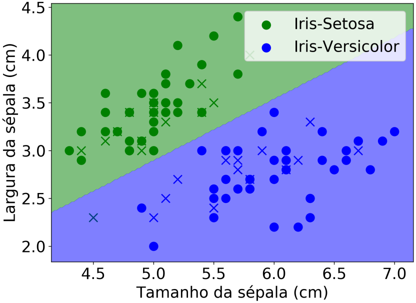
- Lembrando que na regressão logística temos:

$$e_i(t) = y_i - \sigma(\boldsymbol{w}(t)^\top \boldsymbol{x}_i)$$

Exemplo de classificação (dados separáveis linearmente)



Regressão logística via GD



Regressão logística via SGD

Regressão logística binária

- Como surge a fronteira de decisão linear?

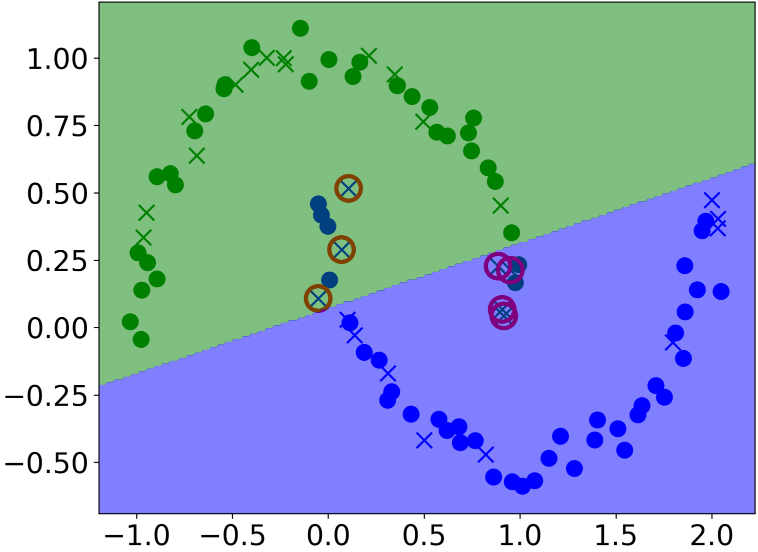
Regressão logística binária

- Como surge a fronteira de decisão linear?
- A classe predita k_* para uma entrada $\boldsymbol{x}_*$ é dada por:

$$
\begin{aligned}
k_* &= \begin{cases} 0, & p(y_*|\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{w}) < 0.5 \\ 1, & p(y_*|\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{w}) \geq 0.5 \end{cases}, \\
&= \begin{cases} 0, & \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*) < 0.5 \\ 1, & \sigma(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*) \geq 0.5 \end{cases}, \\
&= \begin{cases} 0, & \frac{1}{1+\exp(-\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*)} < 0.5 \\ 1, & \frac{1}{1+\exp(-\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*)} \geq 0.5 \end{cases}, \\
&= \begin{cases} 0, & 1 + \exp(-\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*) > 2 \\ 1, & 1 + \exp(-\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*) \leq 2 \end{cases}, \\
&= \begin{cases} 0, & \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_* < 0 \\ 1, & \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_* \geq 0 \end{cases}.
\end{aligned}
$$

- Como $\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_*$ define um hiperplano, a fronteira é linear.

Exemplo de classificação (dados não separáveis linearmente)



Regressão logística binária

Extensões da regressão logística

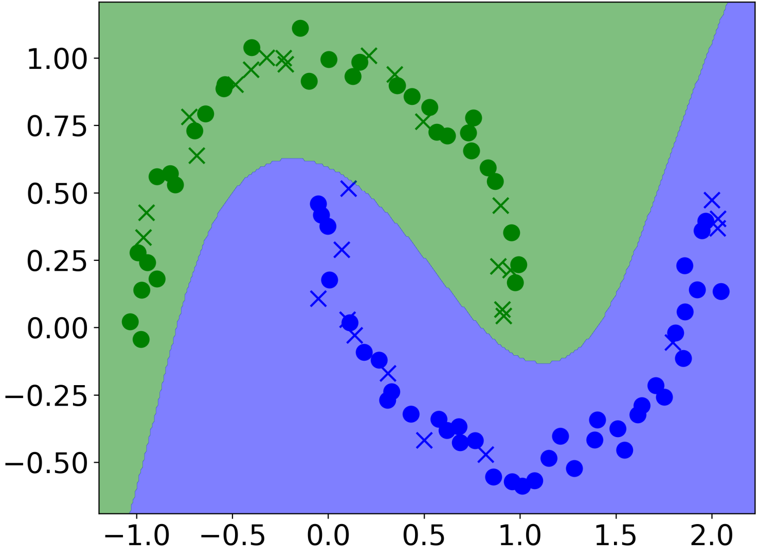
- Novos **atributos não-lineares** $(x_i^2, x_i^3, \cdots)$ podem ser incluídos para obter um **classificador não-linear**.

Regressão logística binária

Extensões da regressão logística

- Novos **atributos não-lineares** $(x_i^2, x_i^3, \cdots)$ podem ser incluídos para obter um **classificador não-linear**.
- Modelos de regressão logística também podem ser **regularizados**.
  - Inclui na função custo o termo: $+\lambda\|\boldsymbol{w}\|^2$.
  - Inclui na regra de atualização o termo: $-\lambda\boldsymbol{w}(t-1)$.

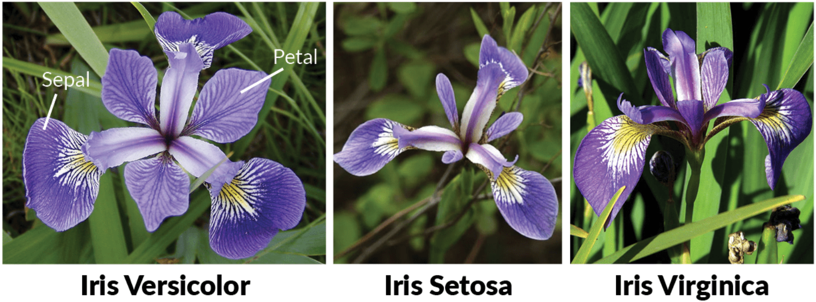
Exemplo de classificação com atributos polinomiais



Agenda

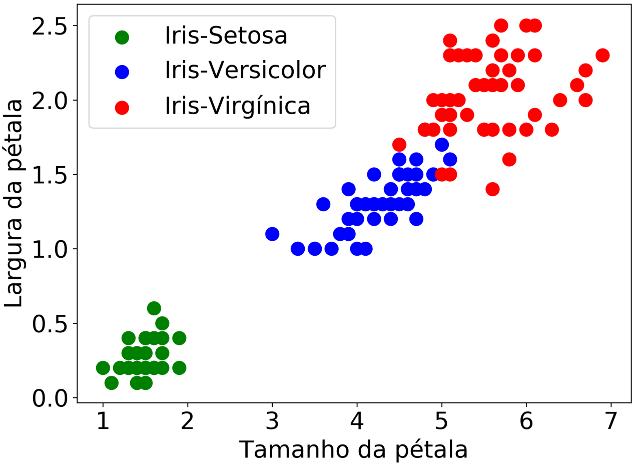
1. Classificação binária
2. Regressão logística binária
3. Regressão logística multiclasse
4. Tópicos adicionais
5. Referências

Classificação multiclasse



- **Problema**: Como classificar automaticamente flores da espécie íris entre Setosa, Versicolor e Virgínica a partir de medidas de suas pétalas?

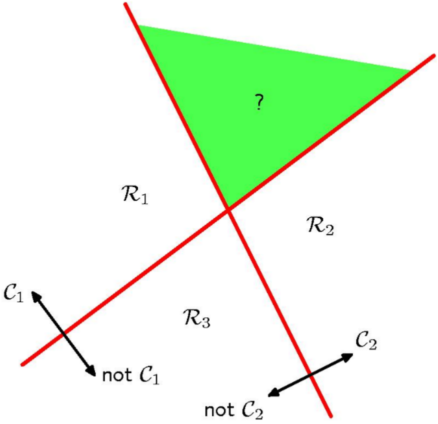
Classificação multiclasse



- **Problema**: Como representamos as classes na saída do modelo?

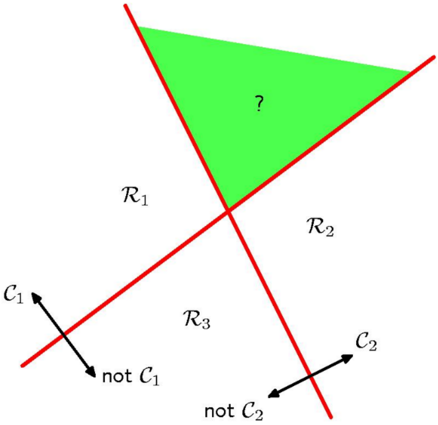
Classificação multiclasse

- **Ideia**: $K - 1$ classificações binárias **one vs all**:



Classificação multiclasse

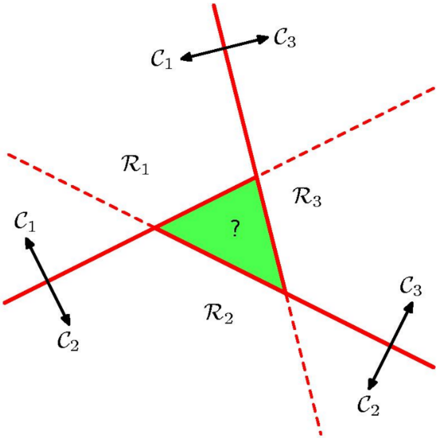
- **Ideia**: $K-1$ classificações binárias **one vs all**:



- **Problema**: Regiões não associadas a uma única classe.

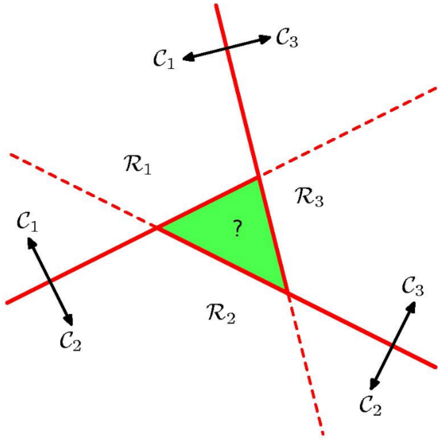
Classificação multiclasse

- **Ideia**: $K(K-1)/2$ classificações binárias **one vs one**:



Classificação multiclasse

- **Ideia**: $K(K-1)/2$ classificações binárias **one vs one**:



- **Problema**: Regiões não associadas a uma única classe.

Classificação multiclasse

One hot encoding (1-of-K encoding)

- A saída do modelo é um vetor de K elementos ($K =$ número de classes).
- O vetor de saída desejado $\boldsymbol{y}_i$ consiste em um vetor de $K - 1$ zeros e um valor 1 na k-ésima posição associada à k-ésima classe.
- **Exemplo**: $\boldsymbol{y}_i = [1\ 0\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{y}_i = [0\ 1\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{y}_i = [0\ 0\ 1]^\top$.

Classificação multiclasse

One hot encoding (1-of-K encoding)

- A saída do modelo é um vetor de K elementos ($K =$ número de classes).
- O vetor de saída desejado $\boldsymbol{y}_i$ consiste em um vetor de $K-1$ zeros e um valor 1 na k-ésima posição associada à k-ésima classe.
- **Exemplo**: $\boldsymbol{y}_i = [1\ 0\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{y}_i = [0\ 1\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{y}_i = [0\ 0\ 1]^\top$.

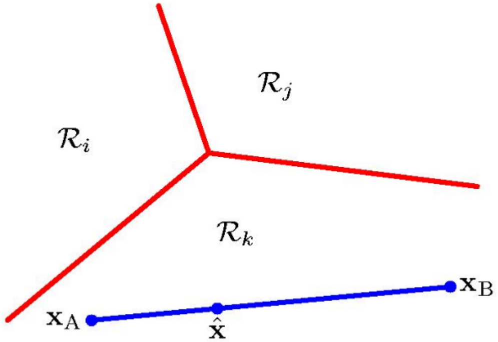
Discriminante linear

- Dado um total de K classes, a classe k_* predita para o padrão $\boldsymbol{x}_*$ é dada por:

$$k_* = \arg \max_{1 \leq k \leq K} \hat{y}_k.$$

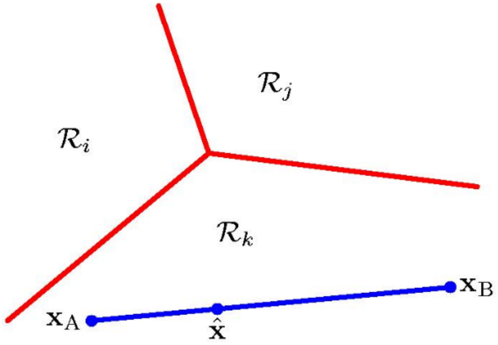
Classificação multiclasse

- As regiões definidas por um discriminante linear são **convexas**:



Classificação multiclasse

- As regiões definidas por um discriminante linear são **convexas**:



- **Problema**: Notação do modelo com múltiplas saídas?

Regressão multivariada

- Nova notação matricial:

$$\hat{\boldsymbol{y}}_i = \boldsymbol{W}^\top \boldsymbol{x}_i,$$
$$\hat{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{W},$$

→ $\boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^{D \times K}$ é a matriz de parâmetros do modelo.
→ $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{N \times D}$ é a coleção de entradas do modelo.
→ $\hat{\boldsymbol{Y}} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ é a coleção de saídas do modelo.

Regressão multivariada

OLS para regressão multivariada (múltiplas saídas)

- **Função custo**:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{W}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{Y} - \hat{\boldsymbol{Y}}\|_F^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\|\boldsymbol{y}_i - \hat{\boldsymbol{y}}_i\|^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}|y_{ik} - \hat{y}_{ik}|^2,$$

  em que $\|\cdot\|_F$ é a **Norma de Frobenius**.

- **Solução analítica**:

$$\boldsymbol{W} = (\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{Y}.$$

Regressão multivariada

Gradiente Descendente para múltiplas saídas

- Regra de atualização:

$$\boldsymbol{w}_k(t) = \boldsymbol{w}_k(t-1) + \alpha \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e_{ik}(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

Gradiente Descendente Estocástico para múltiplas saídas

- Regra de atualização:

$$\boldsymbol{w}_k(t) = \boldsymbol{w}_k(t-1) + \alpha\, e_{ik}(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

- Note que:

→ $e_{ik} = y_{ik} - \hat{y}_{ik}$

→ $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1 \cdots \boldsymbol{w}_k \cdots \boldsymbol{w}_K], \boldsymbol{w}_k \in \mathbb{R}^D$

Classificação multiclasse

Regressão logística multiclasse

- A coluna $\boldsymbol{w}_k$ da matriz $\boldsymbol{W}$ está associada à classe k.

Classificação multiclasse

Regressão logística multiclasse

- A coluna $\boldsymbol{w}_k$ da matriz $\boldsymbol{W}$ está associada à classe k.
- Para a saída do modelo, usamos a função **softmax**:

$$\hat{y}_{ik} = \frac{\exp(\boldsymbol{w}_k^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(\boldsymbol{w}_j^\top \boldsymbol{x}_i)}, \quad 1 \leq k \leq K.$$

Classificação multiclasse

Regressão logística multiclasse

- A coluna $\boldsymbol{w}_k$ da matriz $\boldsymbol{W}$ está associada à classe k.
- Para a saída do modelo, usamos a função **softmax**:

$$\hat{y}_{ik} = \frac{\exp(\boldsymbol{w}_k^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(\boldsymbol{w}_j^\top \boldsymbol{x}_i)}, \quad 1 \leq k \leq K.$$

- Interpretação probabilística: $\hat{y}_{ik} = p(y_{ik}|\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{W}) \in [0, 1]$.
- Também chamada de **regressão softmax** ou **regressão logística multinomial**.

Classificação multiclasse

Regressão logística multiclasse

- A coluna $\boldsymbol{w}_k$ da matriz $\boldsymbol{W}$ está associada à classe k.
- Para a saída do modelo, usamos a função **softmax**:

$$\hat{y}_{ik} = \frac{\exp(\boldsymbol{w}_k^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(\boldsymbol{w}_j^\top \boldsymbol{x}_i)}, \quad 1 \leq k \leq K.$$

- Interpretação probabilística: $\hat{y}_{ik} = p(y_{ik}|\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{W}) \in [0, 1]$.
- Também chamada de **regressão softmax** ou **regressão logística multinomial**.

- **Problema**: Qual será a nova função custo?

Regressão logística multiclasse

Multiclass cross-entropy

- Função custo para regressão logística multiclasse:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{W}) = -\frac{1}{N}\log p(\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}, \boldsymbol{W})$$

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{W}) = -\frac{1}{N}\log \prod_{i=1}^{N}\prod_{k=1}^{K} p(y_{ik}|\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{W})^{y_{ik}}$$

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} y_{ik}\log \hat{y}_{ik}.$$

- Precisamos calcular o gradiente da função custo para atualizar os parâmetros do modelo:

$$\boldsymbol{W} \leftarrow \boldsymbol{W} - \alpha\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}}, \text{ ou } \boldsymbol{w}_k \leftarrow \boldsymbol{w}_k - \alpha\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{w}_k}, \forall k.$$

Regressão logística multiclasse

- As derivadas em relação aos parâmetros são dadas por:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{W}) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} y_{ij}\log \hat{y}_{ij},$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} \frac{y_{ij}}{\hat{y}_{ij}}\frac{\partial \hat{y}_{ij}}{\partial \boldsymbol{w}_k}, \text{ em que:}$$

$$\frac{\partial \hat{y}_{ik}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}_k}\left[\frac{\exp(\boldsymbol{w}_k^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{c=1}^{K}\exp(\boldsymbol{w}_c^\top \boldsymbol{x}_i)}\right] = (\hat{y}_{ik} - \hat{y}_{ik}^2)\boldsymbol{x}_i, \qquad \text{se } j = k,$$

$$\frac{\partial \hat{y}_{ij}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}_k}\left[\frac{\exp(\boldsymbol{w}_j^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{c=1}^{K}\exp(\boldsymbol{w}_c^\top \boldsymbol{x}_i)}\right] = -\hat{y}_{ij}\hat{y}_{ik}\boldsymbol{x}_i, \qquad \text{se } j \neq k,$$

ou seja: $$\frac{\partial \hat{y}_{ij}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = [\delta(j,k)\hat{y}_{ik} - \hat{y}_{ij}\hat{y}_{ik}]\boldsymbol{x}_i, \quad \delta(j,k) = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k \end{cases}.$$

Regressão logística multiclasse

- Substituindo na derivada original:

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K}\frac{y_{ij}}{\hat{y}_{ij}}[\delta(j,k)\hat{y}_{ij} - \hat{y}_{ij}\hat{y}_{ik}]\boldsymbol{x}_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{K} y_{ij}[\delta(j,k) - \hat{y}_{ik}]\boldsymbol{x}_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\sum_{j=1}^{K} y_{ij}\delta(j,k) - \hat{y}_{ik}\underbrace{\sum_{j=1}^{K} y_{ij}}_{=1}\right]\boldsymbol{x}_i$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \boldsymbol{w}_k} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[y_{ik} - \hat{y}_{ik}]\,\boldsymbol{x}_i = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} e_{ik}\boldsymbol{x}_i.$$

- Note que a soma dos elementos do vetor $\boldsymbol{y}_i$ é igual a 1.

Regressão logística multiclasse

- Com os gradientes $\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{w}_k}$, atualizamos o modelo via GD/SGD.

Gradiente Descendente para múltiplas saídas

- Regra de atualização:

$$\boldsymbol{w}_k(t) = \boldsymbol{w}_k(t-1) + \alpha \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e_{ik}(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

Gradiente Descendente Estocástico para múltiplas saídas

- Regra de atualização:

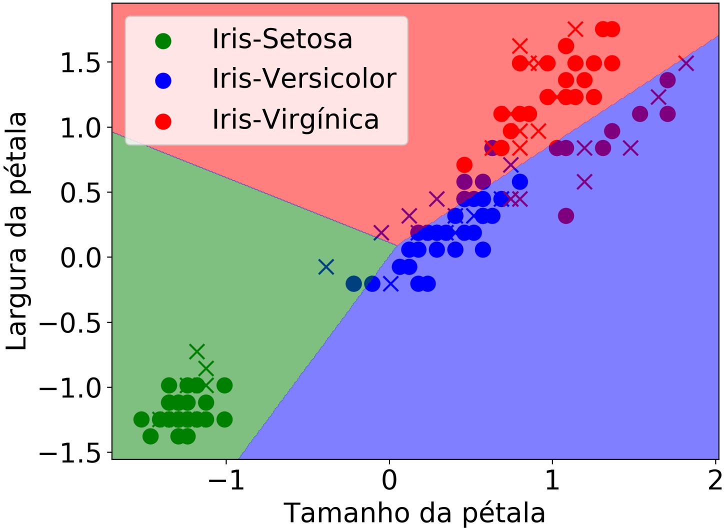
$$\boldsymbol{w}_k(t) = \boldsymbol{w}_k(t-1) + \alpha \, e_{ik}(t-1)\boldsymbol{x}_i$$

- Lembrando que na regressão logística multiclasse temos:

$$e_{ik}(t) = y_{ik} - \frac{\exp(\boldsymbol{w}_k(t)^\top \boldsymbol{x}_i)}{\sum_{j=1}^{K} \exp(\boldsymbol{w}_j(t)^\top \boldsymbol{x}_i)}.$$

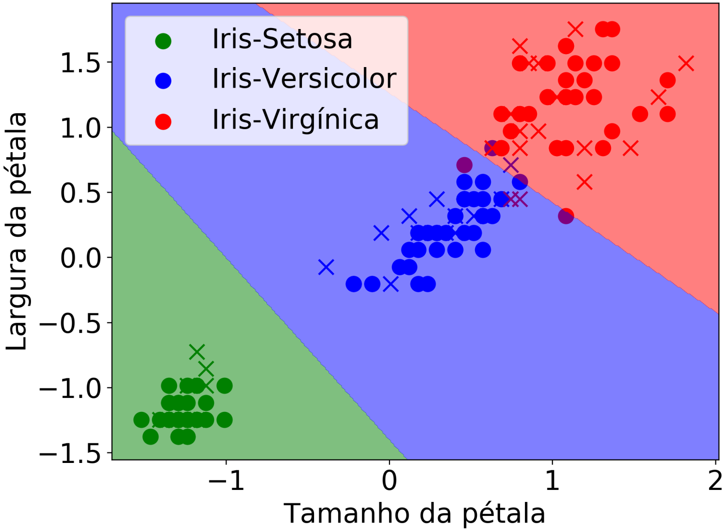
Classificação multiclasse

Regressão linear “ingênua” (OLS) - 72.73% de acurácia no teste



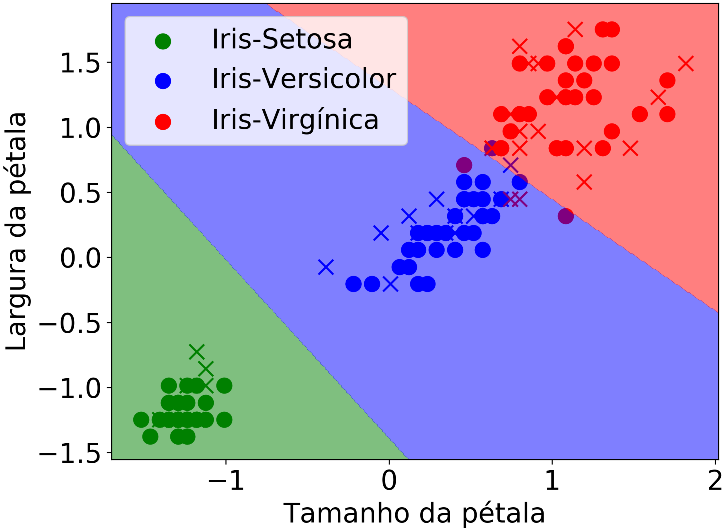
Classificação multiclasse

Regressão logística (GD) - 93.18% de acurácia no teste



Classificação multiclasse

Regressão logística (SGD) - 93.18% de acurácia no teste



Entropia cruzada - visão alternativa

- Buscamos minimizar a discrepância entre a distribuição empírica dos dados $p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$ e a distribuição do modelo $p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$.

Entropia cruzada - visão alternativa

- Buscamos minimizar a discrepância entre a distribuição empírica dos dados $p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$ e a distribuição do modelo $p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$.
- **Divergência de Kullback-Leibler (KL)**: quantifica estatisticamente a diferença entre duas distribuições:

$$
\begin{aligned}
\mathrm{KL}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})||p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})) &= \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \log \frac{p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)}{p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)} \\
&= \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \log p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) - \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \log p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \\
&= -\mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y})) + \mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}), p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})).
\end{aligned}
$$

Entropia cruzada - visão alternativa

- Buscamos minimizar a discrepância entre a distribuição empírica dos dados $p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$ e a distribuição do modelo $p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})$.
- **Divergência de Kullback-Leibler (KL)**: quantifica estatisticamente a diferença entre duas distribuições:

$$\begin{aligned}\mathrm{KL}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})||p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})) &= \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)\log\frac{p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)}{p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)}\\ &= \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)\log p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) - \sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)\log p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i)\\ &= -\mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y})) + \mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}), p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})).\end{aligned}$$

- Como a entropia $\mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}))$ não depende dos parâmetros $\boldsymbol{w}$, minimizar o KL em relação a $\boldsymbol{w}$ equivale a minimizar a entropia cruzada $\mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}), p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}))$.

Entropia cruzada - visão alternativa

- Portanto, busca-se minimizar a seguinte função custo em relação aos parâmetros $\boldsymbol{w}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x}), p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})) &= -\sum_i p_{\mathcal{D}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \log p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}_i|\boldsymbol{x}_i) \\ &= -\mathbb{E}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\sim p_{\mathcal{D}}}[\log p_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{x})].\end{aligned}$$

- Nota-se que a entropia cruzada é o negativo da log-verossimilhança calculada sobre os dados observados.
- Isso é verdadeiro para qualquer cenário de estimação por máxima verossimilhança (MLE), não somente classificação!

Agenda

1. Classificação binária
2. Regressão logística binária
3. Regressão logística multiclasse
4. Tópicos adicionais
5. Referências

Tópicos adicionais

- Representação de atributos categóricos via one hot encoding.
  - $\rightarrow$ **Exemplo**: Atributo "gênero de filme" (ação, drama ou comédia): $\boldsymbol{x}_i = [1\ 0\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{x}_i = [0\ 1\ 0]^\top$, ou $\boldsymbol{x}_i = [0\ 0\ 1]^\top$.
- Métodos de segunda ordem para regressão logística, como o iteratively reweighted least squares (IRLS) ou o BFGS.
- Generalized linear models (GLMs).
- Regressão ordinal.

Agenda

1. Classificação binária
2. Regressão logística binária
3. Regressão logística multiclasse
4. Tópicos adicionais
5. Referências

Referências bibliográficas

- **Cap. 8** - MURPHY, Kevin P. **Machine learning: a probabilistic perspective**, 2012.
- **Caps. 2, 4 e 10** - MURPHY, Kevin P. **Probabilistic Machine Learning: An Introduction**, 2021.
- **Cap. 4*** - BISHOP, Christopher M. **Pattern recognition and machine learning**, 2006.