Classification Problems & Logistic Regression

Junghanss, Juan Cruz

21/06/2021

1 Jupyter Notebook

A continuación se presenta la Jupyter Notebook del código de Python correspondiente a la clase 17/6 y agregados realizados para la clase 24/6.

[1]:
```
import numpy as np
from numpy import linalg as LA


import scipy
from scipy import linalg
from scipy import stats

%matplotlib inline
import matplotlib as mpl
import matplotlib.pyplot as plt
```

[2]:
```
bd1_train = []  # vamos a transformar el archivo .csv en un np.array
with open("15 - Clasificacion 1-1.csv", "r") as f:
    for line in f:      # Phyton entiende que line es una fila
        currow = []
        entries = line.split(",") # entries es una list donde cada elemento es␣
 ↪lo que esta entre ",". Pero sus elementos son
                                  # formato string. Hay que pasarlo a float
        for entry in entries:
            currow.append(float(entry))  # transforma la string en float
        bd1_train.append(currow)  # bd1_train no es aun un numpy array, es una␣
 ↪lista, es mas eficiente hacer esto y al final
                                # transformarlo en un numpy array.
bd1_train = np.array(bd1_train)  # transforma la lista matrix en un numpy array
print(bd1_train.shape)
```

```
(6, 3)
```

[3]:
```
bd1_train
```

[3]:
```
array([[0., 0., 0.],
       [1., 0., 0.],
       [0., 1., 0.],
       [2., 0., 1.],
       [1., 1., 1.],
       [0., 2., 1.]])
```

[5]:
```
select01 = np.array([[1,0],[0,1],[0,0]])
select2 = np.array([[0],[0],[1]])
```

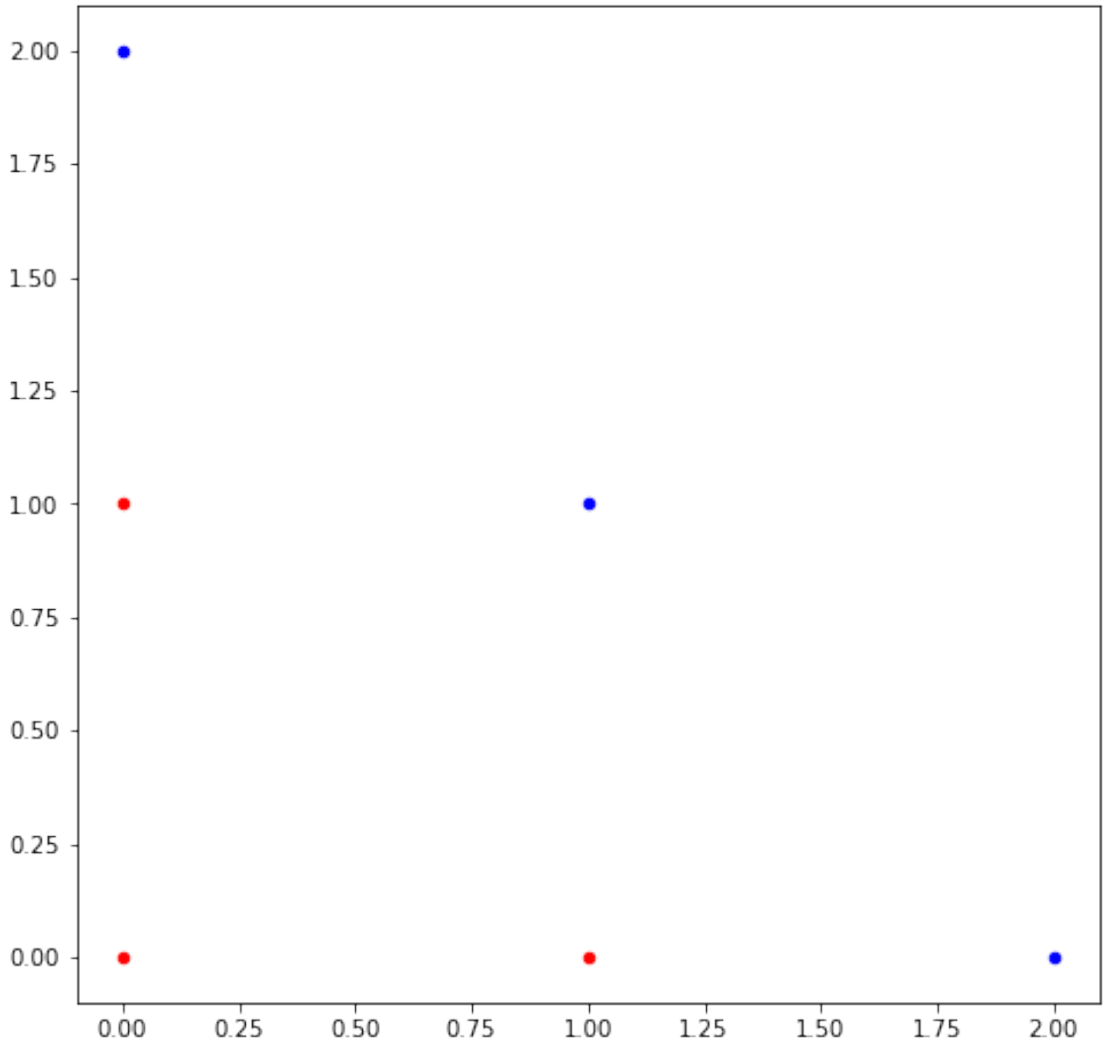
[6]:
```
X_tr = bd1_train.dot(select01)
print(X_tr.shape)
print(X_tr)
y_tr = bd1_train.dot(select2)
print(y_tr.shape)
print(y_tr)
```

```
(6, 2)
[[0. 0.]
 [1. 0.]
 [0. 1.]
 [2. 0.]
 [1. 1.]
 [0. 2.]]
(6, 1)
[[0.]
 [0.]
 [0.]
 [1.]
 [1.]
 [1.]]
```

[7]:
```
x1_min = np.min(X_tr[:,0])
x1_max = np.max(X_tr[:,0])
x2_min = np.min(X_tr[:,1])
x2_max = np.max(X_tr[:,1])

print("x1_min = ", x1_min)
print("x1_max = ", x1_max)
print("x2_min = ", x2_min)
print("x2_max = ", x2_max)
```

```
x1_min =  0.0
x1_max =  2.0
x2_min =  0.0
x2_max =  2.0
```

[8]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))

plt.xlim(x1_min-0.1, x1_max+0.1)
plt.ylim(x2_min-0.1, x2_max+0.1)

ax.scatter(X_tr[:,0], X_tr[:,1], s=1)

for i in range(len(y_tr)):
    if y_tr[i] < 0.1:
        ax.scatter(X_tr[i,0], X_tr[i,1], s=20, c="red")
    else:
        ax.scatter(X_tr[i,0], X_tr[i,1], s=20, c="blue")

plt.show()
```



[9]:
```
n = X_tr.shape[0]
d = X_tr.shape[1]
y = y_tr
one = np.ones((n,1))

X = np.concatenate((one, X_tr), axis=1)
X
```

[9]:
```
array([[1., 0., 0.],
       [1., 1., 0.],
       [1., 0., 1.],
       [1., 2., 0.],
       [1., 1., 1.],
       [1., 0., 2.]])
```

[10]:
```
def sigmoid(z):
    return 1/(1 + np.exp(-z))
```

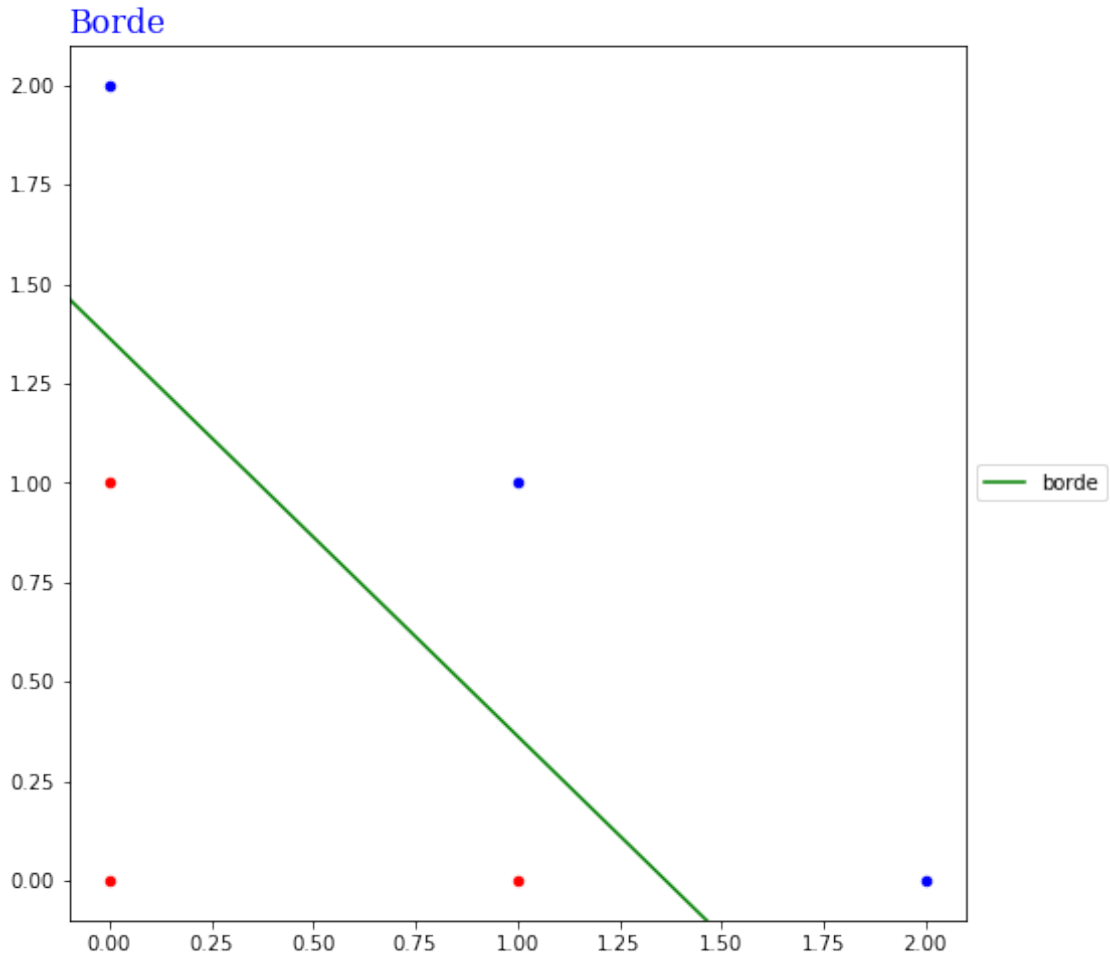
[11]:
```
# Funcion Objetivo J
def J(theta, X, y):                          # theta:(d+1,1), X: (n,d+1), y:(n,1)
 ↪donde 'n' son training samples
    h = sigmoid(X.dot(theta))         # X:(n,d+1), theta:(d+1,1) => h :(n,1)
    f_obj = -((y.T).dot(np.log(h))+(1 - y.T).dot(np.log(1 - h)))/n    # funcion
 ↪de costos
    return f_obj[0,0]

# gradiente de la Funcion Objetivo J
def gradient(theta, X, y):               # theta:(d+1,1), X: (n,d+1), y:(n,1)
    return (X.T).dot(sigmoid(X.dot(theta))-y)/n # dxn(nxd dx1 - nx1)
```

[12]:
```
def gradient_descent(step, iter, X, y):
    d = X.shape[1]
    theta = np.zeros((d,1))
    costs = np.zeros(iter + 1)
    costs[0] = J(theta, X, y)
    for i in range(iter):
        theta = theta - step * gradient(theta, X, y)
        costs[i+1] = J(theta, X, y)
    return theta, costs
```

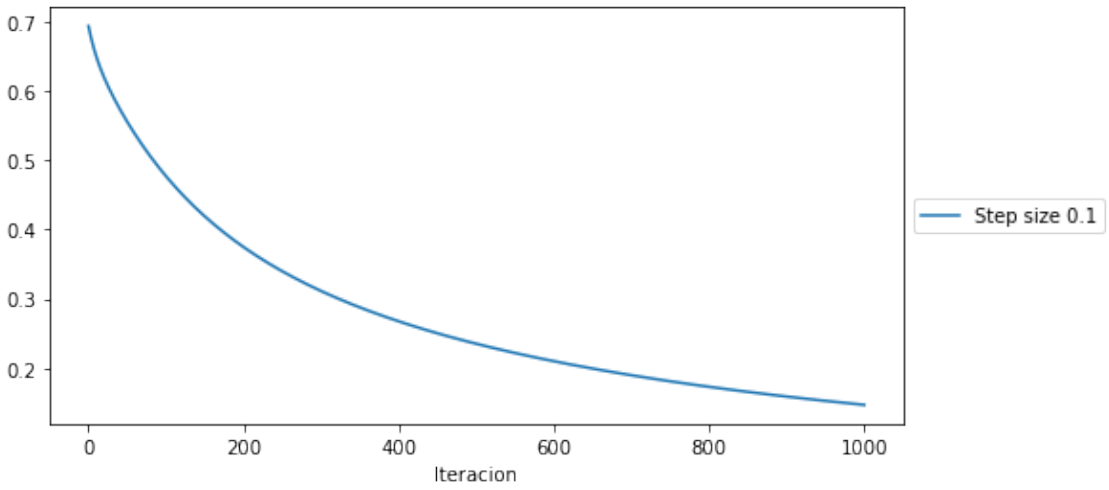
[13]:
```
step = 0.1
iter = 1000
theta, costs = gradient_descent(step, iter, X, y)
print(theta)
print(costs[iter])
print(theta[1,0])
```

```
[[-4.49876865]
 [ 3.29910145]
 [ 3.29910145]]
0.1474206813000016
3.299101445766743
```

[14]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))

plt.xlim(x1_min-0.1, x1_max+0.1)
plt.ylim(x2_min-0.1, x2_max+0.1)

x = np.linspace(x1_min-0.1, x1_max+0.1, 10)
y_x = -theta[0,0]/theta[2,0] - (theta[1,0]/theta[2,0])*x

ax.scatter(X_tr[:,0], X_tr[:,1], s=1)

for i in range(len(y_tr)):
    if y_tr[i] < 0.1:
        ax.scatter(X_tr[i,0], X_tr[i,1], s=20, c="red")
    else:
        ax.scatter(X_tr[i,0], X_tr[i,1], s=20, c="blue")

ax.set_title("Borde", loc='left', fontsize=16, fontname='serif', color="blue")

ax.plot(x, y_x, color="green", label="borde")

ax.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, 0.5))
plt.show()
```



[15]:
```
plt.figure(figsize=(8,4))
x_gd = np.linspace(0, iter, iter + 1)

plt.plot(x_gd, costs, label = "Step size 0.1")

plt.xlabel("Iteracion")
plt.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, 0.5))
plt.show()
```



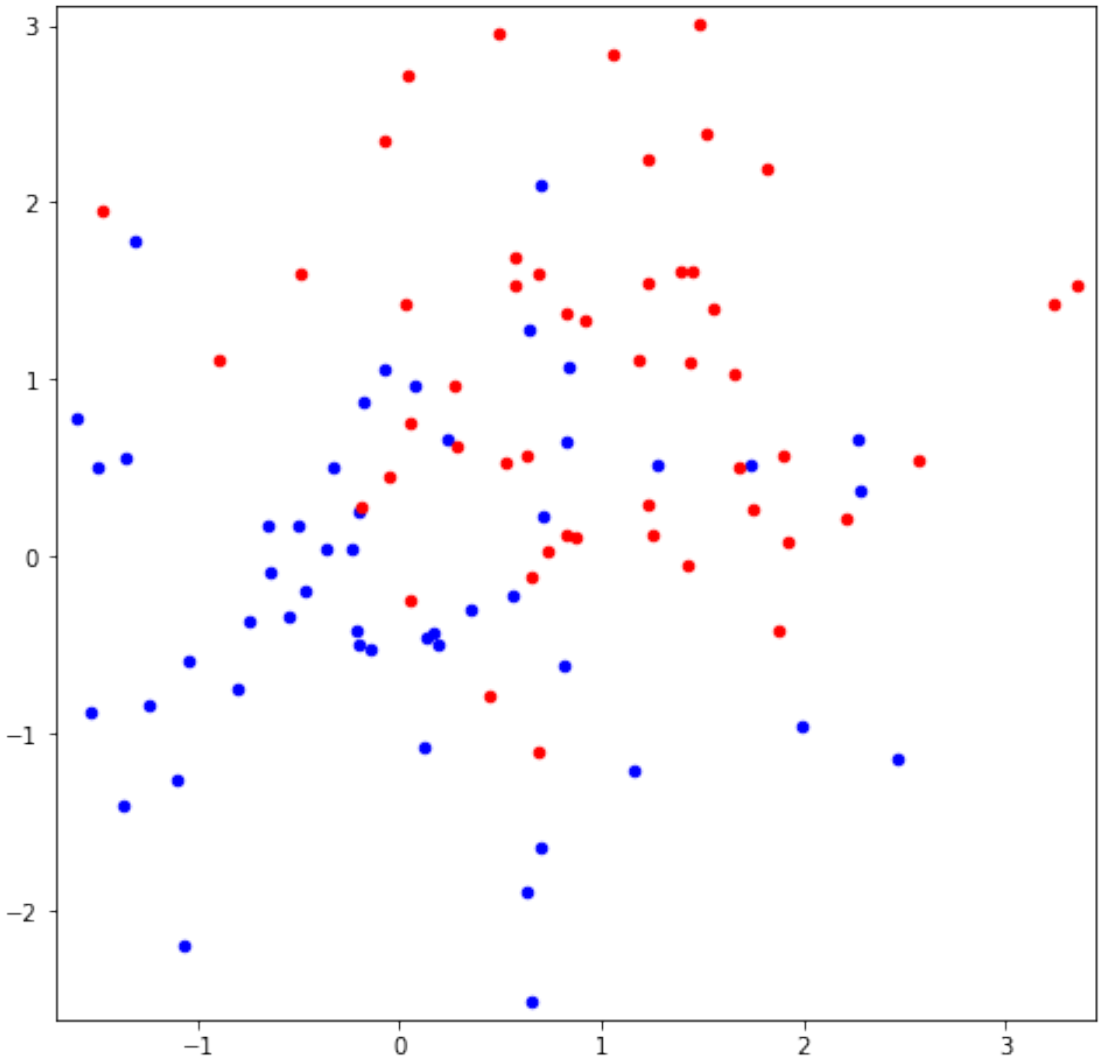
[16]:
```
# Otro ejemplo

num = 50
x1 = np.random.normal(0,1, size=(num,2))
y1 = np.ones((num,1))
x0 = np.random.normal(1,1, size=(num,2))
y0 = np.zeros((num,1))
X = np.concatenate((x1,x0), axis = 0)
y = np.concatenate((y1,y0), axis = 0)


num = y.shape[0]
one = np.ones((num,1))

X = np.concatenate((one, X), axis=1)
XT = X.T
```

[17]:
```
x1_min = np.min(X[:,1])
x1_max = np.max(X[:,1])
x2_min = np.min(X[:,2])
x2_max = np.max(X[:,2])

print("x1_min = ", x1_min)
print("x1_max = ", x1_max)
print("x2_min = ", x2_min)
print("x2_max = ", x2_max)
```

```
x1_min =  -1.6029399970750133
x1_max =  3.350693508347695
x2_min =  -2.5125049325370865
```

```
x2_max =  3.013493233027585
```

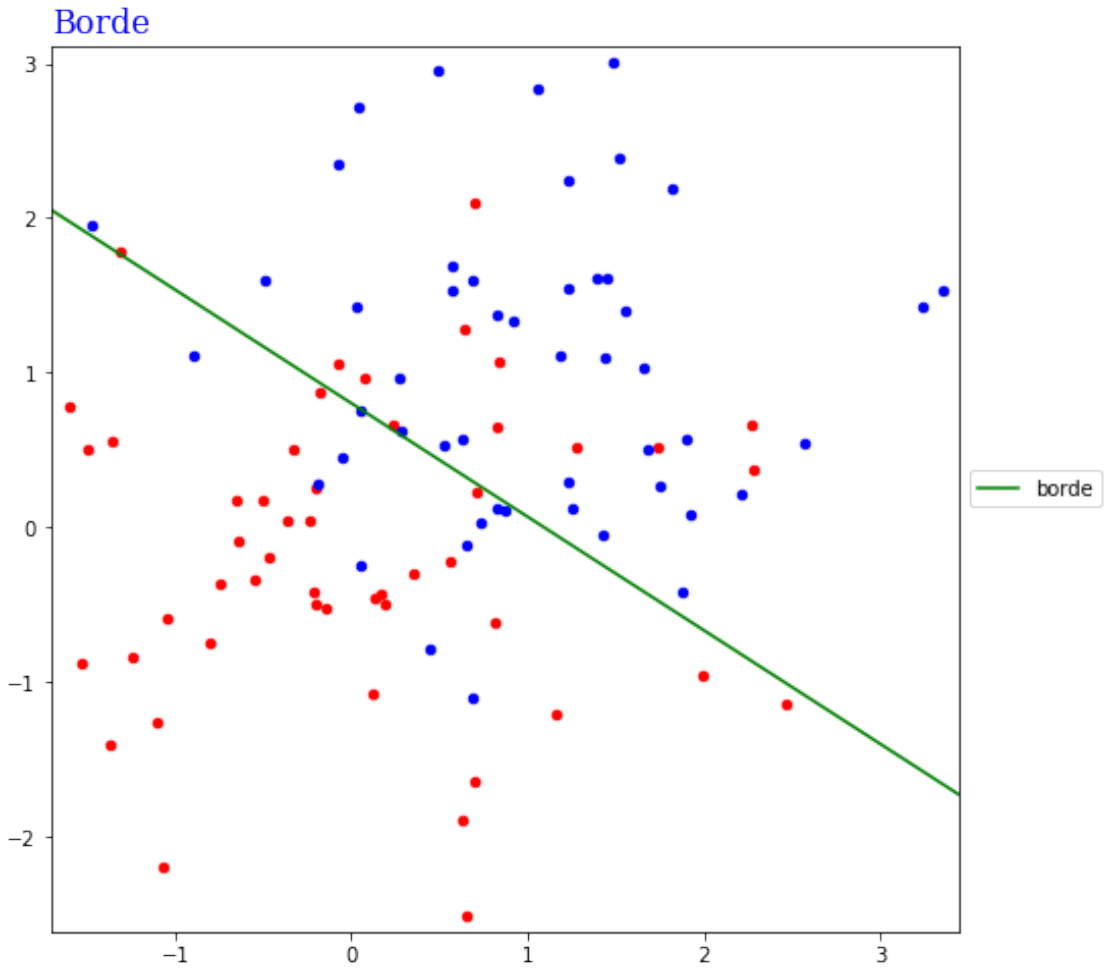
[18]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))

plt.xlim(x1_min-0.1, x1_max+0.1)
plt.ylim(x2_min-0.1, x2_max+0.1)

ax.scatter(X[:,1], X[:,2], s=1)

for i in range(num):
    if y[i] < 0.1:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="red")
    else:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="blue")

plt.show()
```



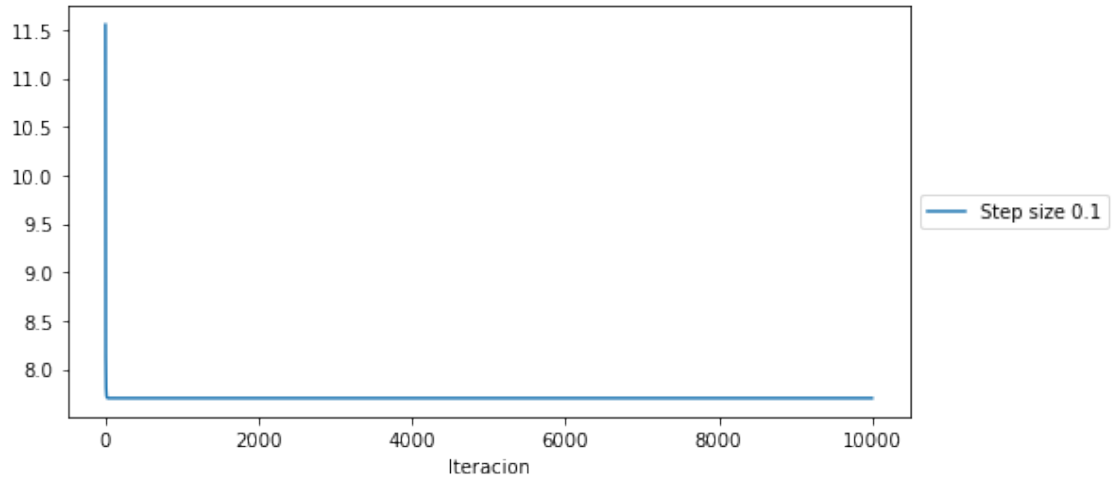
[19]:
```
step = 0.1
iter = 10000
theta, costs = gradient_descent(step, iter, X, y)
print(theta)
print(costs[iter])
```

```
[[ 1.0302041 ]
 [-0.94142486]
 [-1.28209252]]
7.701726063783092
```

[20]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))


plt.xlim(x1_min-0.1, x1_max+0.1)
plt.ylim(x2_min-0.1, x2_max+0.1)

x = np.linspace(x1_min-0.1, x1_max+0.1, num)
y_x = -theta[0,0]/theta[2,0] - (theta[1,0]/theta[2,0])*x

ax.scatter(X[:,1], X[:,2], s=1)

for i in range(num):
    if y[i] > 0.1:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="red")
    else:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="blue")

ax.set_title("Borde", loc='left', fontsize=16, fontname='serif', color="blue")

ax.plot(x, y_x, color="green", label="borde")

ax.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, 0.5))
plt.show()
```

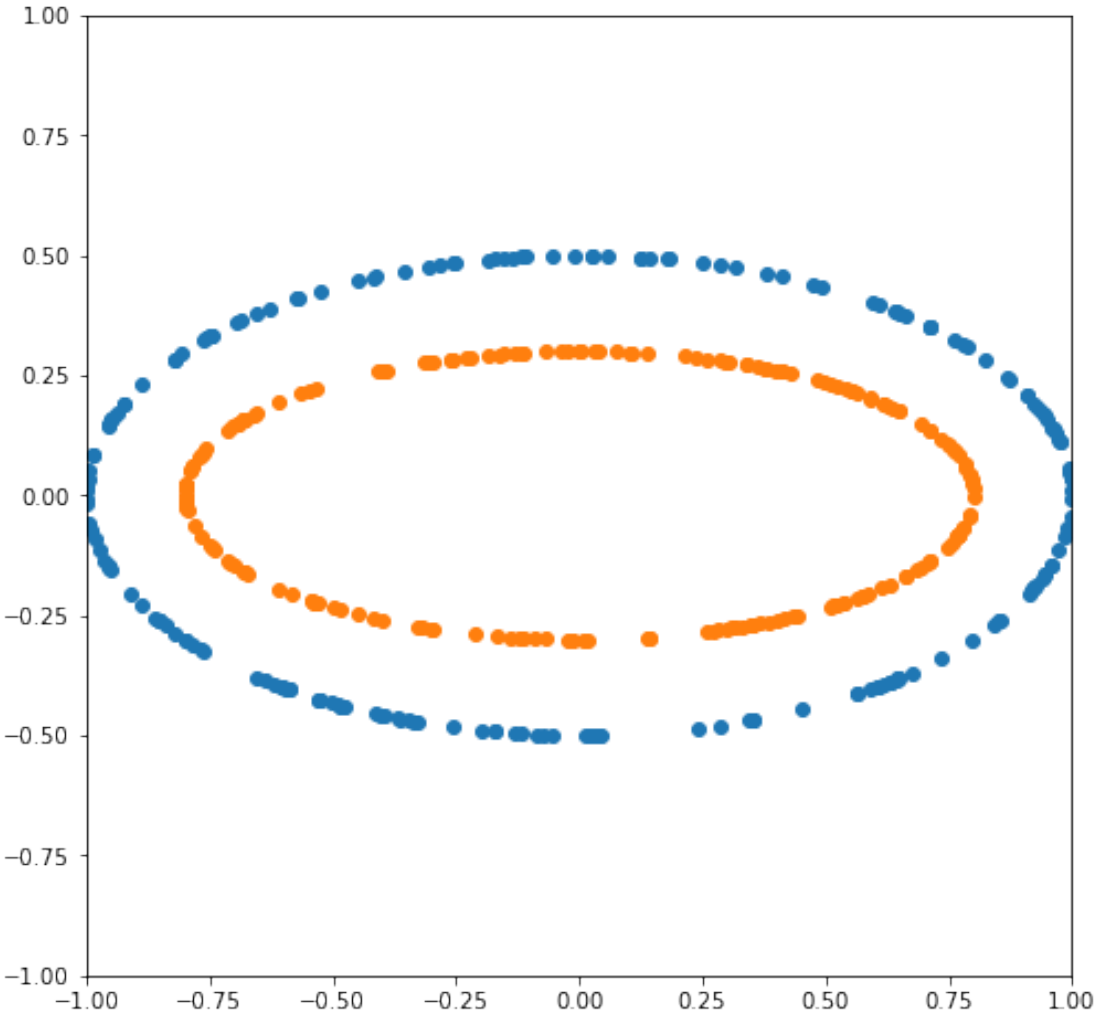


[21]:
```
plt.figure(figsize=(8,4))
x_gd = np.linspace(0, iter, iter + 1)

plt.plot(x_gd, costs, label = "Step size 0.1")

plt.xlabel("Iteracion")
plt.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, 0.5))
plt.show()
```



[22]:
```
n=200
sigma_x1 = 1
sigma_x2 = 1

r5 = 1
r6 = 0.5
r7 = 0.8
r8 = 0.3



x1 = sigma_x1*np.random.randn(n)
x2 = sigma_x2*np.random.randn(n) # categoria 0 (naranja)

x3 = sigma_x1*np.random.randn(n)
x4 = sigma_x2*np.random.randn(n) # cateogria 1 (azules)

# normalizamos los grupos de puntos

x5 = r5*x1/np.sqrt(x1**2 + x2**2)
x6 = r6*x2/np.sqrt(x1**2 + x2**2)

x7 = r7*x3/np.sqrt(x3**2 + x4**2)
x8 = r8*x4/np.sqrt(x3**2 + x4**2)


fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))

plt.xlim(-1, 1)
plt.ylim(-1, 1)
```

```
ax.scatter(x5, x6)
ax.scatter(x7, x8)


plt.show()
```



[23]:
```
x5 = x5.reshape(n,1) # Coordenadas X de los puntos naranjas
x5_2 = x5**2  # término x^2
x6 = x6.reshape(n,1) # Coordenadas Y de los puntos naranjas
x6_2 = x6**2  # término y^2
x56 = x5*x6   # término x·y
x7 = x7.reshape(n,1)  # Coordenadas X de los puntos azules
x7_2 = x7**2
x8 = x8.reshape(n,1) # Coordenadas Y de los puntos azules
```

```
x8_2 = x8**2
x78 = x7*x8


X56 = np.concatenate((x5,x6,x5_2,x6_2,x56), axis = 1)  # Concatenamos unos␣
 ↪arriba y otros abajo, quedan el doble de puntos
X78 = np.concatenate((x7,x8,x7_2,x8_2,x78), axis = 1)
X5678 = np.concatenate((X56, X78), axis = 0)
y1 = np.ones((n,1))  # les asignamos las labels (1)
y0 = np.zeros((n,1)) # labels cero (0)
y = np.concatenate((y1,y0), axis = 0)

n_tot = y.shape[0]

one = np.ones((n_tot, 1))

X = np.concatenate((one, X5678), axis = 1)
y.shape
```

[23]:
```
(400, 1)
```

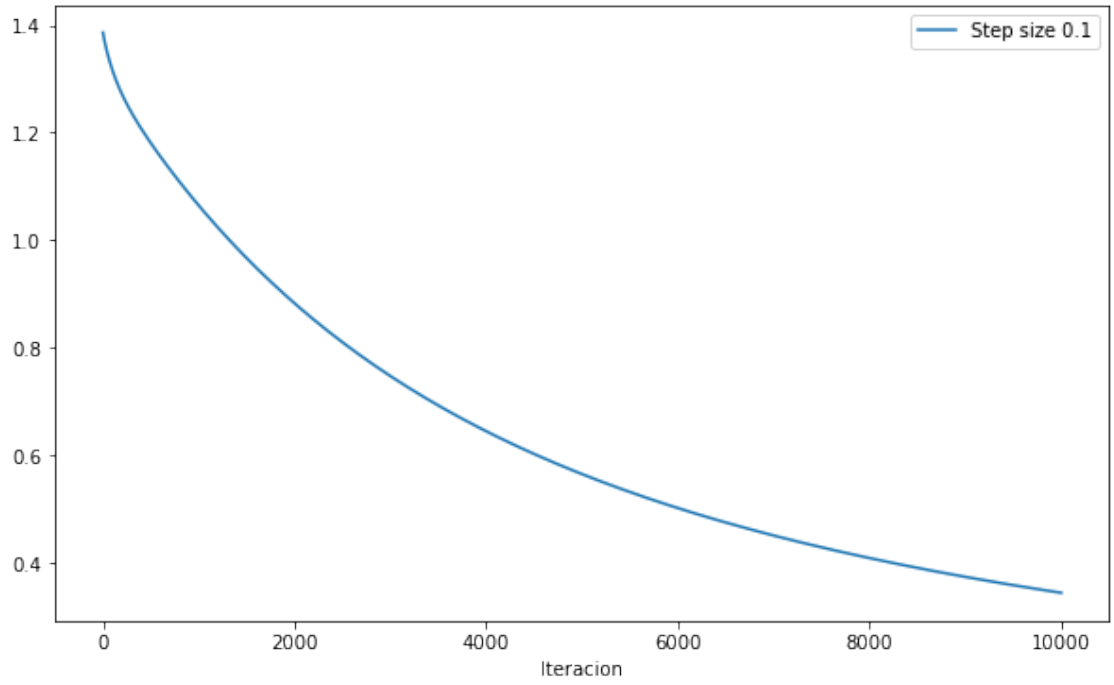
[30]:
```
step = 0.1
iter = 10000
theta, costs = gradient_descent(step, iter, X, y)
print(theta)
print(costs[iter])
```

```
[[-5.41253091]
 [-0.06534594]
 [-0.21032819]
 [ 7.21671848]
 [28.0234223 ]
 [ 0.51267865]]
0.3443662911962462
```

[31]:
```
costs.shape
```

[31]:
```
(10001,)
```

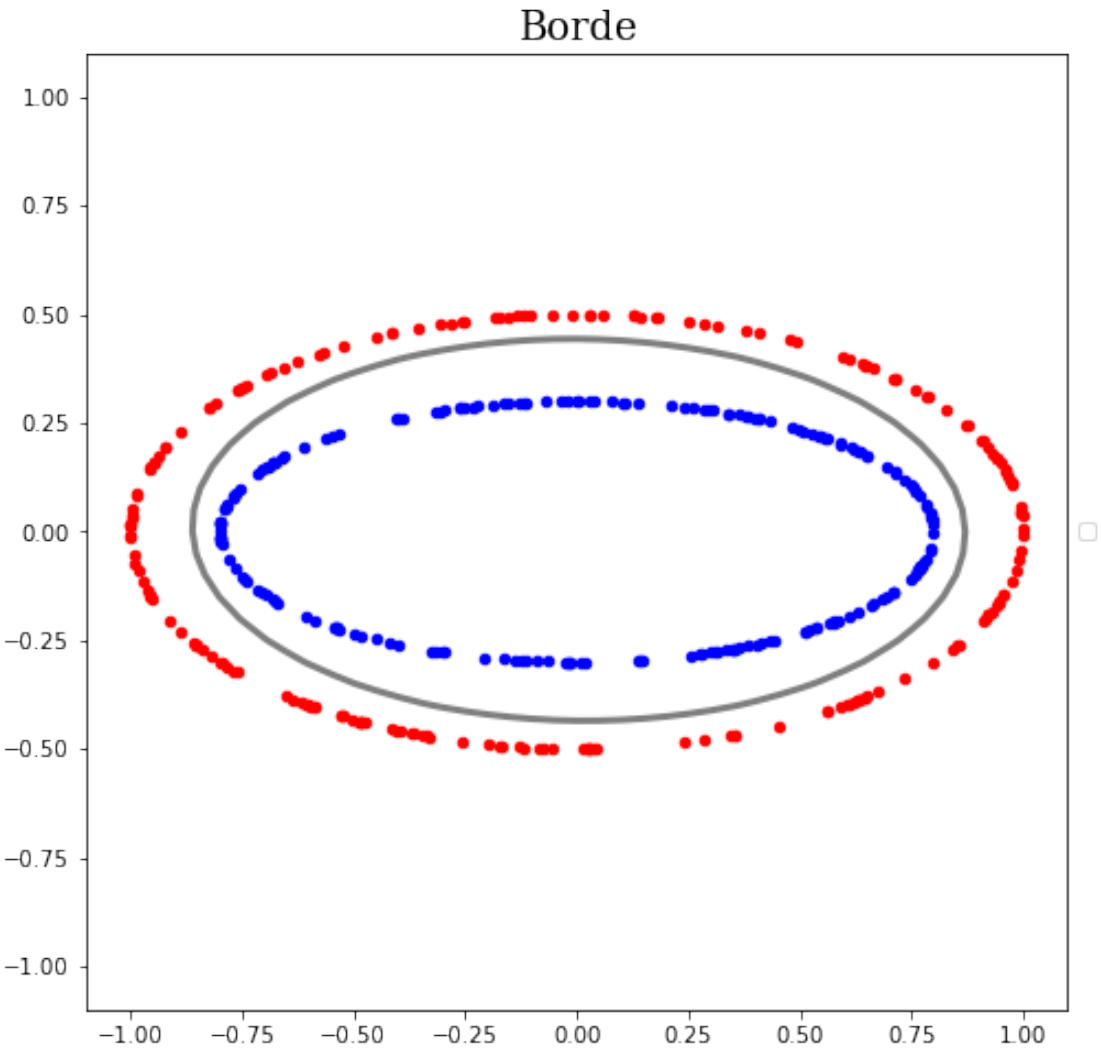
[35]:
```
plt.figure(figsize=(10,6))
x_gd = np.linspace(0, iter, iter + 1)

plt.plot(x_gd, costs, label='Step size 0.1')

plt.xlabel('Iteracion')
plt.legend()
plt.show()
```



[45]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8,8))


plt.xlim(-1-0.1, 1+0.1)
plt.ylim(-1-0.1, 1+0.1)



ax.scatter(X[:,1], X[:,2], s=1)

for i in range(n_tot):
    if y[i] > 0.1:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="red")
    else:
        ax.scatter(X[i,1], X[i,2], s=20, c="blue")

ax.set_title("Borde", loc='center', fontsize=18, fontname='serif', color="black")


X1 = np.arange(-1.0, 1.0, 0.05)
X2 = np.arange(-1.0, 1.0, 0.05)

x1, x2 = np.meshgrid(X1,X2)
equation = theta[0,0] + theta[1,0]*x1 + theta[2,0]*x2 + theta[3,0]*x1**2 +␣
 ↪theta[4,0] *x2**2 + theta[5,0]*x1*x2
```

```
CS = ax.contour(x1,x2,equation,[0], alpha=0.5, linewidths=3, linestyles =␣
 ↪'solid', colors='black')



ax.legend(loc='center left', bbox_to_anchor=(1, 0.5))
plt.show()
```

```
No handles with labels found to put in legend.
```



Cómo se puede observar, la distribución de los puntos fue clasificada correctamente con nuestro modelo que incluye términos no lineales, como pueden ser los parámetros al cuadrado y el producto de estos. Más especificamente teniamos $X^2; Y^2; X \cdot Y$.

Dentro de las alternativas disponibles para abordar este problema, se podría usar también de la

libreria Scikit learn el modelo LogisticRegression.

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
```

del cual el objeto LogisticRegression cuenta con diversos algoritmos de optimización disponibles y parámetros que permiten calibrar el modelo para que ajuste bien al dataset en cuestión.

2 Derivación del Gradiente Descendiente

Primeramente, dado que la función hipótesis para la Regresión Logística es la sigmoide, como paso preliminar corresponde buscar el gradiente de la función sigmoide. A continuación realizamos la derivación paso a paso.

2.1 Función Costo

Dado que no podemos emplear una función costo igual que en el caso de Regresion Lineal, ya que no sería convexa, por lo que debemos usar una función que nos permita mantener la convexidad y así poder aplicar Stochastic Gradient Descent. Con el fin de preservar la naturaleza convexa de la función de pérdida (loss function), se diseñó una función logarítmica de pérdida para el caso de la Regresión Logística. La función de costo se divide para dos casos $y = 1$ e $y = 0$.

Para el caso en el que tenemos $y = 1$ podemos observar que cuando la función de hipótesis tiende a 1 el error se minimiza a cero y al revés, cuando la función de hipótesis tiende a 0 el error es máximo. Este criterio sigue exactamente el que necesitamos.

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

En otras palabras, si $h_\theta(x) = 1$ entonces el costo $= 0$, es decir, $prob(y = 1|x; \theta) = 1$.

Y si $h_\theta(x) \to 0 \implies$ costo $\to \infty$, o sea, $prob(y = 1|x; \theta) = 0$.

Para el caso de $y = 0$, si $h_\theta(x) = 0$ entonces el costo $= 0$, es decir, $prob(y = 0|x; \theta) = 1$.

Y si $h_\theta(x) \to 1 \implies$ costo $\to \infty$, o sea, $prob(y = 0|x; \theta) = 0$.

Podemos ver que interpretando las probabilidades de que la etiqueta sea un valor, dados los parámetros, es cero o uno y según corresponda, el costo será cero o tenderá a infinito.

Combinando ambas ecuaciones del costo presentado, podemos obtener una función de pérdida **convexa**, que es justo lo que necesitamos para aplicar gradiente descendiente.

$$\text{cost}(h_\theta(x), y) = J(\theta) = -y \log(h_\theta(x)) - (1 - y) \log(1 - h_\theta(x)) \tag{1}$$

Se puede notar que si $y = 1$: el costo termina siendo $-\log(h_\theta(x))$. Por otro lado, si $y = 0$: el costo termina siendo $-\log(1 - h_\theta(x))$.

2.2 Derivación de la Función Sigmoide

Como ya sabemos, la función sigmoide es:

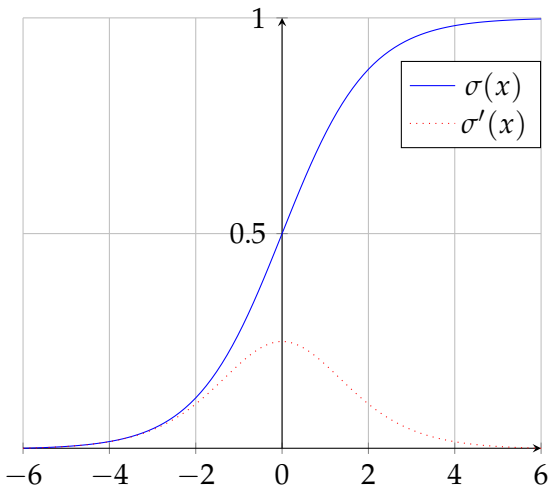
$$h_\theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}} \tag{2}$$

donde $0 \leq h_\theta(x) \leq 1$.

En otras palabras, la regresión logística se puede representar como $h_\theta(x) = g(\theta^T x)$:

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

y tendrá la forma de:



El gradiente en cuestión se puede derivar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\sigma(x) &= \frac{1}{1 + e^{x}} \\
\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} &= \frac{0 \cdot (1 + e^{-x}) - (1) \cdot (e^{-x} \cdot (-1))}{(1 + e^{-x})^2} \\
\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} &= \frac{(e^{-x})}{(1 + e^{-x})^2} = \frac{1 - 1 + (e^{-x})}{(1 + e^{-x})^2} - \frac{1}{(1 + e^{-x})^2} \\
\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} &= \frac{1}{1 + e^{-x}} \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-x}}\right) = \sigma(x)\left(1 - \sigma(x)\right)
\end{aligned} \tag{3}$$

2.3 Derivación de la Función Costo

Primero, podemos aplicar Regla de la Cadena y escribir la expresión en términos de derivadas parciales.

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i \cdot \frac{1}{h_\theta(x^i)} \cdot \frac{\partial h_\theta(x^i)}{\partial \theta_j} \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[(1-y^i) \cdot \frac{1}{(1-h_\theta(x^i))} \cdot \frac{\partial (1-h_\theta(x^i))}{\partial \theta_j} \right] \right] \tag{4}$$

Reemplazando nuestra derivada de la función sigmoide donde corresponde:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i \cdot \frac{1}{h_\theta(x^i)} \cdot \sigma(x)\,(1-\sigma(x)) \cdot \frac{\partial \theta^T x}{\partial \theta_j} \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[(1-y^i) \cdot \frac{1}{(1-h_\theta(x^i))} \cdot \sigma(x)\,(1-\sigma(x))\, \frac{\partial \theta^T x}{\partial \theta_j} \right] \right] \tag{5}$$

Dado que la derivada de $d(\theta^T x)/dx = x$ y que podemos reemplazar la notación $\sigma(x) = h_\theta(x)$:

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i \cdot \frac{1}{h_\theta(x^i)} \cdot h_\theta(x^i) \left(1-h_\theta(x^i)\right) \cdot x_j^i \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[(1-y^i) \cdot \frac{1}{(1-h_\theta(x^i))} \cdot h_\theta(x^i) \left(1-h_\theta(x^i)\right) x_j^i \right] \right] \tag{6}$$

Multiplicando podemos simplificar términos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} &= -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i \cdot \frac{h_\theta(x^i)}{h_\theta(x^i)} \cdot \left(1-h_\theta(x^i)\right) \cdot x_j^i \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[(1-y^i) \cdot \frac{1-h_\theta(x^i)}{(1-h_\theta(x^i))} \cdot \left(h_\theta(x^i)\right) x_j^i \right] \right] \\
\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} &= -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i \cdot (1) \cdot \left(1-h_\theta(x^i)\right) \cdot x_j^i \right] + \sum_{i=1}^{n} \left[(1-y^i) \cdot (1) \cdot \left(h_\theta(x^i)\right) x_j^i \right] \right] \\
\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} &= -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i - \left(y^i h_\theta(x^i)\right) - h_\theta(x^i) + (h_\theta(x^i) y^i) \right] x_j^i \right] \\
\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} &= -\frac{1}{n} \cdot \left[\sum_{i=1}^{n} \left[y^i - h_\theta(x^i) \right] x_j^i \right]
\end{aligned} \tag{7}$$

Así, en otras palabras, hemos probado que:

$$\begin{aligned}
\nabla J(\theta) &= -\frac{1}{n} \cdot X^T \left(\mathbf{y} - h_\theta(\mathbf{x}) \right) \\
\nabla J(\theta) &= \frac{1}{n} \cdot X^T \left(h_\theta(\mathbf{x}) - \mathbf{y} \right)
\end{aligned} \tag{8}$$

donde la ecuación (8) es la representación vectorizada del gradiente descendiente.

Una conclusión interesante de esta derivación es que podemos apreciar que tanto para Regresión Lineal como Logística, ambas concluyen a la misma regla de actualización (update) para aproximar la función de pérdida.