Strojno učenje

9. Logistička regresija

prof. dr. sc. Bojana Dalbelo Bašić doc. dr. sc. Jan Šnajder

Sveučilište u Zagrebu Fakultet elektrotehnike i računarstva

Ak. god. 2012/13.

Danas...

Model logističke regresije

Probabilistička interpretacija

3 Učenje modela

4 Usporedba linearnih modela

Danas...

Model logističke regresije

2 Probabilistička interpretacija

Učenje modela

4 Usporedba linearnih modela

Podsjetnik: poopćeni linearni modeli

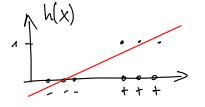
$$h(\mathbf{x}) = f(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})$$

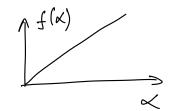
$$f: \mathbb{R} \to [0,1]$$
 ili $f: \mathbb{R} \to [-1,+1]$ je aktivacijska funkcija

- Linearna granica u ulaznom prostoru (premda je f nelinearna)
- ullet Model je nelinearan u parametrima (jer je f nelinearna)

Podsjetnik: klasifikacija regresijom

$$h(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}} \phi(\mathbf{x}) \qquad (f(\alpha) = \alpha)$$





- (+) uvijek dobivamo rješenje
- (−) nerobusnost: ispravno klasificirani primjeri utječu na granicu
 ⇒ pogrešna klasifikacija čak i kod linearno odvojivih problema

Podsjetnik: perceptron

$$h(\mathbf{x}) = f\big(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}} \phi(\mathbf{x})\big) \qquad f(\alpha) = \begin{cases} +1 & \text{ako } \alpha \geqslant 0 \\ -1 & \text{inače} \end{cases}$$

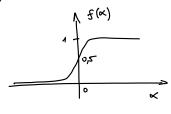
- (+) ispravno klasificirani primjeri ne utječu na granicu
 ⇒ ispravna klasifikacija linearno odvojivih problema
- (-) aktivacijska funkcija nije derivabilna
 - \Rightarrow funkcija gubitka nije derivabilna
 - ⇒ gradijent funkcije pogreške nije nula u točki minimuma
 - \Rightarrow postupak ne konvergira ako primjeri nisu linearno odvojivi

Logistička regresija

Aktivacijska funkcija s izlazima $\left[0,1\right]$ i koja je derivabilna!

Logistička (sigmoidalna) funkcija:

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



Model logističke regresije:

$$h(\mathbf{x}|\tilde{\mathbf{w}}) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})) = \frac{1}{1 + \exp(-\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}))}$$

NB: Logistička regresija je klasifikacijski model (unatoč nazivu)!

Danas...

Model logističke regresije

Probabilistička interpretacija

Učenje modela

4 Usporedba linearnih modela

Probabilistički izlaz

 $h(\mathbf{x}) \in [0,1]$, pa $h(\mathbf{x})$ možemo tumačiti kao vjerojatnost da primjer pripada klasi \mathcal{C}_1 :

$$h(\mathbf{x}) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})) = P(\mathcal{C}_1 | \mathbf{x})$$

Koje je zapravo opravdanje za to?! Moramo imati neku pretpostavku o distribuciji primjera i klasa!

(Odsada nadalje: $\phi(\mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{x}}$)

Aposteriorna vjerojatnost klase modelirana poopćenim linearnim modelom?

$$p(\mathcal{C}_j|\mathbf{x}) = f(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})$$

$$P(C_1|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|C_1)P(C_1)}{p(\mathbf{x}|C_1)P(C_1) + p(\mathbf{x}|C_2)P(C_2)} = \frac{1}{1 + \frac{p(\mathbf{x}|C_2)P(C_2)}{p(\mathbf{x}|C_1)P(C_1)}}$$

$$= \frac{1}{1 + \exp\left(\ln\frac{p(\mathbf{x}|C_2)P(C_2)}{p(\mathbf{x}|C_1)P(C_1)}\right)} = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha)} = \sigma(\alpha)$$

$$\alpha = \ln\frac{p(\mathbf{x}|C_1)P(C_1)}{p(\mathbf{x}|C_2)P(C_2)} = \ln\frac{P(C_1|\mathbf{x})}{P(C_2|\mathbf{x})} = \ln\frac{P(C_1|\mathbf{x})}{1 - P(C_1|\mathbf{x})}$$

Digresija: logit-funkcija

Općenito, inverz logističke funkcije

$$\sigma(\alpha) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha)} = p$$

naziva se logit-funkcija ili logaritam omjera šansi (engl. log-odds):

$$logit(p) = \sigma^{-1}(\alpha) = ln \frac{p}{1-p} = \alpha$$

Za poopćeni linearni model

$$P(C_1|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha)} = \sigma(\alpha) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}})$$

mora vrijediti

$$\alpha = \ln \frac{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)P(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_2)P(\mathcal{C}_2)} = \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)P(\mathcal{C}_1) - \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_2)P(\mathcal{C}_2) = \tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}$$

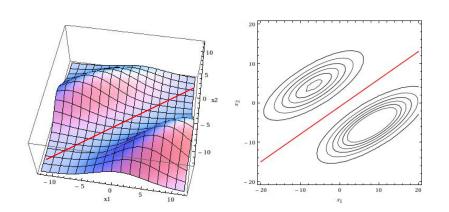
Prisjetite se Bayesovog klasifikatora za kontinuirane ulaze:

$$h_j(\mathbf{x}) = \ln p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_j)P(\mathcal{C}_j)$$

Q: Uz koje pretpostavke ovaj model degenerira u linearan model?

Dijeljena kovarijacijska matrica Σ :

$$h_j(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_j^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_j + \ln P(\mathcal{C}_j) \qquad \text{(3.29) u skripti}$$



Diskriminacijska funkcija za K=2:

Model je linearan:

$$\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_{1} - \boldsymbol{\mu}_{2}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_{1}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{1} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}_{2}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{2} + \ln \frac{P(\mathcal{C}_{1})}{P(\mathcal{C}_{2})} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x} + \boldsymbol{w}_{0}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$$

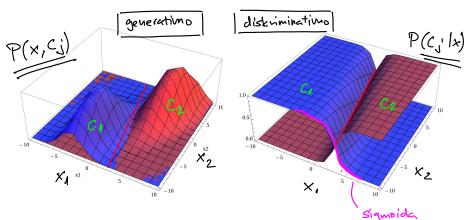
$$\mathbf{w}_0 = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{P(\mathcal{C}_1)}{P(\mathcal{C}_2)}$$

Prema tome:

$$P(C_1|\mathbf{x}) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})$$

Probabilistička interpretacija

Ako pretpostavimo da su primjeri \mathbf{x} generirani iz klasa \mathcal{C}_1 i \mathcal{C}_2 s normalno distribuiranim izglednostima $p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)$ odnosno $p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_2)$ i s dijeljenom kovarijacijskom matricom Σ , izlaz modela logističke regresije $h(\mathbf{x}|\tilde{\mathbf{w}}) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^T\tilde{\mathbf{x}})$ odgovara aposteriornoj vjerojatnosti klase $P(\mathcal{C}_1|\mathbf{x})$.



Diskriminativni vs. generativni model

Logistička regresija – diskriminativan model:

$$P(\mathcal{C}_1|\mathbf{x}) = \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}})$$
 (conditional model)

⇒ modeliramo izravno aposteriornu vjerojatnost!

Bayesov klasifikator – generativan model:

$$P(\mathcal{C}_1|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)P(\mathcal{C}_1)}{p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)P(\mathcal{C}_1) + p(\mathbf{x}|\mathcal{C}_1)P(\mathcal{C}_2)} \qquad \text{(joint wodel)}$$

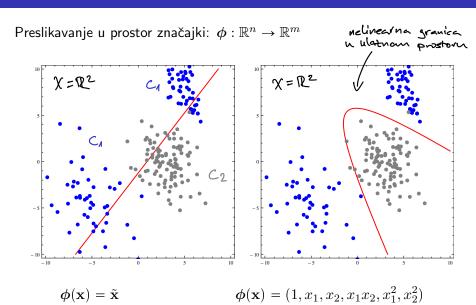
 \Rightarrow modeliramo izglednosti i apriorne vjerojatnosti klasa

Q: Koliko parametara imaju ovi modeli za *n*-dimenzijski ulazni prostor?

Logisticka regrestja:
$$n+1 => O(n)$$

Boryesov klasifikator: $\binom{n}{2}(n+1) + 2n+1 => O(n^2)$

Nelinearan model?



Danas...

Model logističke regresije

Probabilistička interpretacija

3 Učenje modela

Usporedba linearnih modela

Plan za dalje...

Definirali smo (1) model logističke regresije. $\longrightarrow k(x)z \cup (\hat{w}^T \phi(x))$

Trebamo još definirati (2) funkciju gubitka i (3) optimizacijski postupak.

Funkcija pogreške je negativna log-izglednost skupa primjera \mathcal{D} \Rightarrow $\tilde{\mathbf{w}}$ koji minimizira pogrešku je onaj koji primjere čine najvjerojatnijima.



Funkcija pogreške

Log-izglednost skupa primjera \mathcal{D} jednaka je log-izglednosti skupa $\{y^{(i)}\}_{i=1}^N$

(jer su
$$\mathbf{x}^{(i)}$$
 fiksirani): vjenojatost oznake
$$\ln \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}|\mathcal{D}) = \ln \prod_{i=1}^{N} P(y^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}) = \ln \prod_{i=1}^{N} h(\mathbf{x}^{(i)})^{y^{(i)}} \left(1 - h(\mathbf{x}^{(i)})\right)^{1-y^{(i)}}$$

$$= \ln P(D|\tilde{\mathbf{w}})$$
 Bernoulljen distr. Ne modelirano $P(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{y}$ diskuminativan model!

Funkcija pogreške:

$$E(\tilde{\mathbf{w}}|\mathcal{D}) = -\ln \mathcal{L}(\tilde{\mathbf{w}}|\mathcal{D}) = -\sum_{i=1}^{N} \left\{ y^{(i)} \ln h(\mathbf{x}^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) \ln \left(1 - h(\mathbf{x}^{(i)})\right) \right\}$$

⇒ pogreška unakrsne entropije (engl. cross-entropy error)

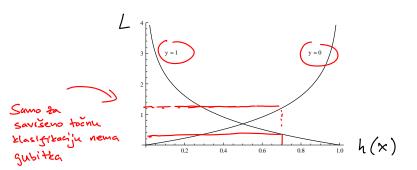
Funkcija gubitka

Alternativno:

$$E(\tilde{\mathbf{w}}|\mathcal{D}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} -\left\{ y^{(i)} \ln h(\mathbf{x}^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) \ln \left(1 - h(\mathbf{x}^{(i)})\right) \right\}$$

Funkcija gubitka:

$$L(h(\mathbf{x}), y) = -y \ln h(\mathbf{x}) - (1 - y) \ln (1 - h(\mathbf{x}))$$



Minimizacija pogreške

$$L(h(\mathbf{x}), y) = -y \ln h(\mathbf{x}) - (1 - y) \ln \left(1 - h(\mathbf{x})\right)$$

$$E(\tilde{\mathbf{w}}) = \sum_{i=1}^{N} L\left(h(\mathbf{x}^{(i)}|\tilde{\mathbf{w}}), y^{(i)}\right)$$

$$\leq \text{Lonveksne}$$

$$\text{funkely'e!}$$

⇒ Nema rješenje u z.f. Minimiziramo gradijentnim spustom:

$$\nabla E(\tilde{\mathbf{w}}) = \sum_{i=1}^{N} \nabla L(h(\mathbf{x}^{(i)}|\tilde{\mathbf{w}}), y^{(i)})$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \langle (\mathbf{x}) = \nabla (\mathbf{x}) (\mathbf{1} - \nabla (\mathbf{x}))$$

$$\nabla L(h(\mathbf{x}), y) = \left(-\frac{y}{h(\mathbf{x})} + \frac{1 - y}{1 - h(\mathbf{x})} \right) h(\mathbf{x}) (1 - h(\mathbf{x})) \tilde{\mathbf{x}} = (h(\mathbf{x}) - y) \tilde{\mathbf{x}}$$

$$\nabla E(\tilde{\mathbf{w}}) = \sum_{i=1}^{N} (h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}) \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$$

Gradijentni spust

Logistička regresija (gradijentni spust)

1: $\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow (0,0,\dots,0)$ 2: **ponavljaj** do konvergencije 3: $\Delta \tilde{\mathbf{w}} \leftarrow (0,0,\dots,0)$ 4: $\mathbf{za} \ i = 1,\dots,N$ 5: $h \leftarrow \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}^{(i)})$ 6: $\Delta \tilde{\mathbf{w}} \leftarrow \Delta \tilde{\mathbf{w}} + (h-y^{(i)})\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$ 7: $\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow \tilde{\mathbf{w}} - \eta \Delta \tilde{\mathbf{w}}$

> faktor učenja (npr. n=0,001)

Gradijentni spust

Logistička regresija (stohastički gradijentni spust)

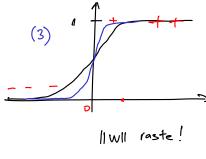
1: $\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow (0, 0, \dots, 0)$ 2: **ponavljaj** do konvergencije 3: (slučajno permutiraj primjere u \mathcal{D}) 4: $\mathbf{za} \ i = 1, \dots, N$ 5: $h \leftarrow \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}}^{(i)})$ 6: $\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow \tilde{\mathbf{w}} - \eta(h - y^{(i)})\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}$

Regularizacija

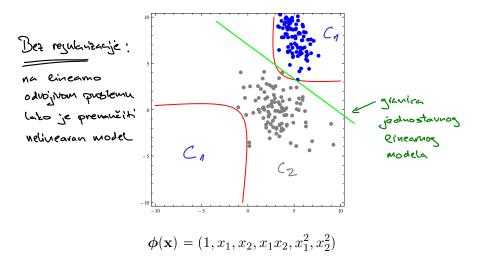
Regularizacija sprečava (smanjuje mogućnost) prenaučenosti.

- (1) Ako je model nelinearan, regularizacijom sprečavamo prenaučenost
- (2) Ako imamo puno značajki, regularizacijom efektivno smanjujemo broj značajki jer težine potiskujemo prema nuli
- Ako je problem linearno odvojiv, sprječavamo "otvrdnjivanje" sigmoide

 $\phi(x) = (1, x_1, x_2, x_1 \times 2, x_1^2, x_2^2)$



Regularizacija



L2-regularizacija

$$E(\tilde{\mathbf{w}}|\mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{N} -\left\{y^{(i)}\ln h(\mathbf{x}^{(i)}) + (1 - y^{(i)})\ln\left(1 - h(\mathbf{x}^{(i)})\right)\right\} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}$$

Korekcija težina:

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \Big(\sum_{i=1}^{N} \left(h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)} + \lambda \mathbf{w} \Big)$$

Ekvivalentno:

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w}(1 - \eta \lambda) - \eta \sum_{i=1}^{N} (h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}) \mathbf{x}^{(i)}$$

L2-regularizacija

L2-regularizirana logistička regresija (gradijentni spust)

```
\tilde{\mathbf{w}} \leftarrow (0, 0, \dots, 0)
  2:
           ponavljaj do konvergencije
  3:
         \Delta w_0 \leftarrow 0
  4: \Delta \mathbf{w} \leftarrow (0, 0, \dots, 0)
  5:
       za i = 1, ..., N
                     h \leftarrow \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}^{(i)})
  6:
  7:
                     \Delta w_0 \leftarrow \Delta \mathbf{w}_0 + h - y^{(i)}
                     \Delta \mathbf{w} \leftarrow \Delta \mathbf{w} + (h - y^{(i)}) \mathbf{x}^{(i)}
 8:
  9:
               w_0 \leftarrow w_0 - \eta \Delta w_0
10:
                \mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w}(1 - \eta \lambda) - \eta \Delta \mathbf{w}
```

L2-regularizacija

L2-regularizirana logistička regresija (stohastički gradijentni spust)

```
1: \tilde{\mathbf{w}} \leftarrow (0,0,\dots,0)

2: ponavljaj do konvergencije:

3: (slučajno permutiraj primjere u \mathcal{D})

4: za i=1,\dots,N

5: h \leftarrow \sigma(\tilde{\mathbf{w}}^T\tilde{\mathbf{x}}^{(i)})

6: w_0 \leftarrow w_0 - \eta(h-y^{(i)})

7: \mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w}(1-\eta\lambda) - \eta(h-y^{(i)})\mathbf{x}^{(i)}
```

Danas...

Model logističke regresije

Probabilistička interpretacija

Učenje modela

4 Usporedba linearnih modela

Funkcija gubitka logističke regresije

Elegantnija formulacija funkcije gubitka:

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})} \boxed{1 - h(\mathbf{x})} = \frac{1}{1 + \exp(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})}$$

$$L(h(\mathbf{x}), y) = -y \ln h(\mathbf{x}) - (1 - y) \ln(1 - h(\mathbf{x}))$$

$$= y \ln \left(1 + \exp(-\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})\right) + (1 - y) \ln \left(1 + \exp(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})\right)$$

Uz $y \in \{-1, +1\}$, dobivamo:

$$L(h(\mathbf{x}), y) = \ln \left(1 + \exp(-y\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})\right)$$

⇒ logistička funkcija gubitka (engl. logistic loss)

32 / 36

Usporedba funkcija gubitka

$$y \in \{-1, +1\}$$
. Za pogrešnu klasifikaciju vrijedi $y ilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}} \mathbf{x} < 0$

• Gubitak 0-1 (engl. 0-1 loss, misclassification loss):

$$L(h(\mathbf{x}), y) = \mathbf{1}\{\operatorname{sgn}(\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}) \neq y^{(i)}\} = \mathbf{1}\{y\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}} < 0\}$$

Kvadratni gubitak (engl. quadratic loss):

$$L(h(\mathbf{x}), y) = (1 - y\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})^{2}$$



• Gubitak perceptrona (engl. perceptron loss):

$$L(h(\mathbf{x}), y) = \max \left(0, -y\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}}\right)$$

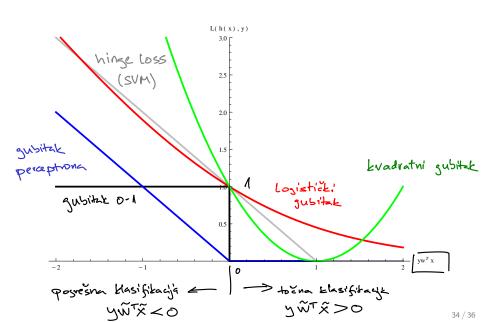


• Logistički gubitak (engl. logistic loss):

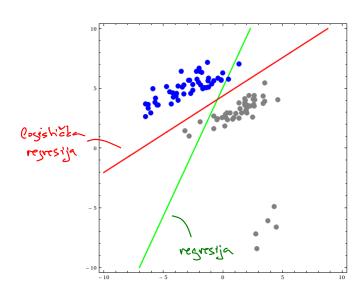
$$L(h(\mathbf{x}), y) = \ln \left(1 + \exp(-y\tilde{\mathbf{w}}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{x}})\right)$$



Usporedba funkcija gubitka



Usporedba hipoteza



Sažetak

- Logistička regresija je diskriminativan klasifikacijski model s probabilističkim izlazom
- Model odgovara generativnom modelu s normalno distribuiranim izglednostima i dijeljenom kovarijacijskom matricom, ali je broj parametara logističke regresije manji
- Koristi se logistička funkcija gubitka odnosno pogreška unakrsne entropije
- Optimizacija se provodi gradijentnim spustom, a prenaučenost se može spriječiti regularizacijom
- Logistička regresija je vrlo dobar algoritam koji nema nedostatke koje imaju klasifikacija regresijom i perceptron



Sljedeća tema: Neparametarski modeli