Metody systemowe i decyzyjne w informatyce

Laboratorium – Python – Zadanie nr 3

Regresja logistyczna

autorzy: A. Gonczarek, J.M. Tomczak, S. Zaręba, M. Zięba, J. Kaczmar

Cel zadania

Celem zadania jest zaimplementowanie modelu regresji logistycznej wraz z algorytmami uczącymi do zadania detekcji twarzy na zdjęciu.

Detekcja twarzy jako problem klasyfikacji

Problem detekcji twarzy na obrazie \mathcal{I} polega na zaklasyfikowaniu wybranych fragmentów obrazu jako twarzy człowieka. Korzystając z techniki okna przesuwnego (ang. shifting window) obraz dzielony jest na prostokąty, na których dokonywana jest klasyfikacja. Każdy wyszczególniony fragment obrazu opisany jest za pomocą wektora cech $\mathbf{x} = (1, \phi^1(\mathcal{I}) \dots \phi^{D-1}(\mathcal{I}))^T$ otrzymanych za pomocą deskrytporów HOG (ang. Histogram of Oriented Gradients). Dla każdego fragmentu obrazu należy rozwiązać problem klasyfikacji z dwoma klasami $y \in \{0, 1\}$, polegający na przypisaniu fragmentowi obrazu etykiety twarzy, y = 1, lub braku twarzy, y = 0.

Zdefiniujmy prawdopodobieństwo wystąpienia twarzy na zadanym fragmencie obrazu reprezentowanym przez cechy \mathbf{x} za pomocą funkcji sigmoidalnej:

$$p(y = 1 | \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}), \tag{1}$$

gdzie \mathbf{w} oznacza D-wymiarowy wektor parametrów, funkcja sigmoidalna:

$$\sigma(a) = \frac{1}{1 + \exp(-a)}. (2)$$

Klasyfikacja zadanego fragmentu odbywa się poprzez sprawdzenie, czy prawdopodobieństwo wystąpienia twarzy jest większe niż zadana wartość progowa $\theta \in [0, 1]$:

$$y^* = \begin{cases} 1, & \text{jeśli } p(y=1|\mathbf{x}, \mathbf{w}) \ge \theta, \\ 0, & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases}$$
 (3)

Klasyfikator w tak podanej postaci nazywa się **regresją logistyczną**.

¹Sposób otrzymania deksryptorów nie jest istotny dla zadania i jest pominięty w opracowaniu. Zainteresowanych odsyłamy do Wikipedii, gdzie można znaleźć odnośniki do prac źródłowych http://en.wikipedia.org/wiki/Histogram_of_oriented_gradients.

Uczenie modelu jako problem optymalizacji

Dla tak określonego problemu detekcji twarzy kluczowym aspektem jest wyznaczenie parametrów \mathbf{w} , czyli uczenie modelu. Zakładamy, że dysponujemy zbiorem treningowym $\mathcal{D} = \{\mathbf{x}_n, y_n\}_{n=1}^N$, gdzie \mathbf{x}_n jest zestawem fragmentów obrazów reprezentowanym przez cechy HOG oraz wartością stałą równą 1, y_n jest etykietą obrazu określającą, czy na fragmencie widnieje twarz, czy nie.

W celu uczenia modelu wykorzystamy metodę **maksymalnej wiarygodności** (ang. *maximum likelihood*).

Dla zadanego \mathbf{x} , zmienna losowa y jest zmienną losową binarną o następującym rozkładzie:

$$p(y|\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \sigma(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})^{y} (1 - \sigma(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}))^{1-y}.$$
 (4)

Wprowadźmy następujące oznaczenie:

$$\sigma_n \equiv \sigma(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_n). \tag{5}$$

Dla rozkładu (4) i oznaczenia (5), funkcja wiarygodności przyjmuje następującą postać:

$$p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) = \prod_{n=1}^{N} \sigma_n^{y_n} (1 - \sigma_n)^{1 - y_n}.$$
 (6)

Biorac negatywny logarytm otrzymujemy:

$$-\ln p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^{N} \left(y_n \ln \sigma_n + (1 - y_n) \ln(1 - \sigma_n) \right). \tag{7}$$

Funkcję celu uczenia definiujemy w oparciu o negatywny logarytm funkcji wiarygodności, którą dalej oznaczamy w następujący sposób:²

$$L(\mathbf{w}) = -\frac{1}{N} \ln p(\mathcal{D}|\mathbf{w}). \tag{8}$$

Zadanie wyznaczenia wartości parametrów minimalizujących funkcję celu jest zadaniem optymalizacji bez ograniczeń:

minimalizuj (po
$$\mathbf{w}$$
) $L(\mathbf{w})$

Zauważmy, że postać σ_n zależy od parametrów **w**, co uniemożliwia wyznaczenia analitycznego rozwiązania (7). Dlatego należy posłużyć się rozwiązaniem numerycznym. W tym celu zastosujemy algorytm gradientu prostego i algorytm stochastycznego gradientu prostego.

²Przemnożenie funkcji celu przez stałą nie zmienia rozwiązania, natomiast przeskalowanie negatywnego logarytmu funkcji wiarygodności przez odwrotność liczby danych pozwoli na uniezależnienie się od liczności zbioru danych i w konsekwencji na prostsze porównanie rozwiązań.

Algorytm gradientu prostego

Algorytm gradientu prostego przedstawiono poniżej. Aby móc zastosować algorytm gradientu prostego należy wyznaczyć gradient $\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w})$.

Algorithm 1: Metoda gradientu prostego

Wejście: Funkcja L, punkt startowy $\mathbf{w}_0 \in \mathbf{dom} L$, liczba epok K, krok uczenia η

 \mathbf{W} yjście: Punkt optymalny \mathbf{w} dla funkcji celu L

- $_{\mathbf{1}}\ \mathbf{w}\longleftarrow\mathbf{w}_{0};$
- **2** for k = 1, ..., K do
- $\mathbf{3} \quad \Delta \mathbf{w} \longleftarrow -\nabla L(\mathbf{w});$
- 4 | $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta \Delta \mathbf{w};$
- 5 end

UWAGA! W Pythonie funkcję celu przekazujemy do algorytmu optymalizacji jako argument, a następnie wewnątrz algorytmu bezpośrednio ją wywołujemy, aby wyliczyć jej wartość i gradient.

Algorytm stochastycznego gradientu prostego

Algorytm gradientu prostego wymaga policzenia gradientu dla całego zbioru danych, co w przypadku dużej liczności danych wiąże się z długim czasem działania. Dodatkowo, liczenie gradientu dla całego zbioru danych zazwyczaj prowadzi do dużej liczby kroków potrzebnych do zbiegnięcia metody. W celu zaradzenia tym problemom stosuje się **stochastyczny gradient prosty**, który operuje na podzbiorach danych.

Zauważmy, że funkcję celu możemy zapisać za pomocą sumy ze względu na obserwacje:

$$-\ln p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) = -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln p(y_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{w}).$$

W ogólniejszej postaci możemy podzielić zbiór danych na M "paczek" danych o rozmiarze N_b (ang. mini-batch) $\mathcal{D} = \{\mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m\}_{m=1}^M$ i wówczas:

$$L(\mathbf{w}) = -\frac{1}{N} \ln p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$$

$$= -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \ln p(y_n|\mathbf{x}_n, \mathbf{w})$$

$$= -\frac{1}{MN_b} \sum_{m=1}^{M} \sum_{n_b=1}^{N_b} \ln p(y_{n_b}|\mathbf{x}_{n_b}, \mathbf{w})$$

$$= -\frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \frac{1}{N_b} \ln p(\mathcal{Y}_m|\mathcal{X}_m, \mathbf{w})$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} L(\mathbf{w}; \mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m),$$

gdzie w ostatnim kroku zdefiniowaliśmy wartość funkcji celu policzoną na pojedynczym minibatchu:

$$L(\mathbf{w}; \mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m) = -\frac{1}{N_b} \sum_{n_b=1}^{N_b} \ln p(y_{n_b} | \mathbf{x}_{n_b}, \mathbf{w}).$$
(9)

Zauważmy, że dla $N_b = N$ otrzymujemy funkcję celu (8). W szczególnym przypadku można stosować mini-batche o rozmiarze $N_b = 1$, ale w praktyce wartość tę przyjmuje się większą, np. $N_b = 50$. Okazuje się, że dla $N_b > 1$ algorytm stochastycznego gradientu prostego zdecydowanie szybciej zbiega niż algorytm gradientu prostego.

Algorytm stochastycznego gradientu prostego przedstawiono poniżej. Aby móc zastosować algorytm stochastycznego gradientu prostego należy wyznaczyć gradient $\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}; \mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m)$.

Algorithm 2: Metoda stochastycznego gradientu prostego

Wejście: Funkcja L, punkt startowy $\mathbf{w}_0 \in \mathbf{dom}L$, rozmiar mini-batcha N_b , liczba epok K, krok uczenia η

Wyjście: Punkt optymalny \mathbf{w} dla funkcji L

- $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{w}_0;$
- **2** Podziel zbiór danych \mathcal{D} na mini-batche $\{\mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m\}_{m=1}^M$;
- 3 for k = 1, ..., K do 4 | for m = 1, ..., M do 5 | $\Delta \mathbf{w} \longleftarrow -\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w}; \mathcal{X}_m, \mathcal{Y}_m);$ 6 | $\mathbf{w} \longleftarrow \mathbf{w} + \eta \Delta \mathbf{w};$ 7 | end 8 end

W implementacji mini-batche należy stworzyć z zachowaniem kolejności przykładów, tj. przykładowo dla zbioru złożonego z 400 przykładów i mini-batcha o wielkości 100, pierwszy mini-batch powinien zawierać pierwsze 100 przykładów, drugi kolejne 100 itd.

Regularyzacja

Zazwyczaj w procesie uczenia stosuje się zmodyfikowaną funkcję celu poprzez wprowadzenie regularyzacji. W rozważanym problemie wprowadzamy regularyzację ℓ_2 na parametry (oprócz wyrazu wolnego, czyli bez wagi dla cechy x_0 , która jest stale równa 1):

$$L_{\lambda}(\mathbf{w}) = L(\mathbf{w}) + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}_{-0}\|_{2}^{2}, \tag{10}$$

gdzie $\mathbf{w}_{-0} = (w_1, \dots, w_{D-1})^{\mathrm{T}}$ jest wektorem wag bez pierwszego parametru, tzw. wyrazu wolnego (ang. bias) w_0 , $\lambda > 0$ oznacza współczynnik regularyzacji.

Selekcja modelu

W rozważanym problemie mamy do czynienia z dwoma wielkościami, których nie wyuczamy w oparciu o dane, tj. wartość progowa klasyfikacji θ oraz wartość współczynnika regularyzacji λ . W przypadku, gdy dysponujemy zbiorem walidacyjnym \mathcal{D}_{val} , możemy przeprowadzić selekcję tych wartości. W celu oceny modelu w oparciu o wybrane wielkości obu parametrów, stosować będziemy miarę **F-measure**:

$$F(\mathcal{D}_{val}; \theta, \lambda, \mathbf{w}) = \frac{2TP}{2TP + FP + FN},\tag{11}$$

gdzie TP (ang. $true\ positives$) oznacza liczbę przykładów z \mathcal{D}_{val} o etykiecie 1, które model o parametrach \mathbf{w} zaklasyfikował jako 1, FP (ang. $false\ positives$) to liczba przykładów o etykiecie 0, które model zaklasyfikował jako 1, FN (ang. $false\ negatives$) to liczba przykładów o etykiecie 1, które model zaklasyfikował jako 0.

Wybór miary F-measure w rozważanym zadaniu nie jest przypadkowy, ponieważ pozwala ona na ocenę zbiorów, które nie są zbalansowane, tj. liczności klas w zbiorze uczącym są znacząco różne. Zauważmy, że w problemie detekcji twarzy do czynienia mamy z sytuacją, gdy zdecydowana większość obrazu nie zawiera twarzy. W konsekwencji otrzymujemy problem danych niezbalansowanych.

Procedura selekcji modelu jest następująca:³

```
Algorithm 3: Procedura selekcji modelu
```

Wejście: Zbiór walidacyjny \mathcal{D}_{val} , zbiór wartości progowych Θ , zbiór wartości

współczynnika regularyzacji Λ

Wyjście: Wartości optymalnych θ i λ

1 for $\lambda \in \Lambda$ do

```
Znajdź rozwiązanie \mathbf{w} dla funkcji celu L_{\lambda}(\mathbf{w});

for \theta \in \Theta do

Policz wartość F(\mathcal{D}_{val}; \theta, \lambda, \mathbf{w});

end
```

6 end

7 Zwróć wartości λ i $\theta,$ dla których wartość F-measure była największa.

W implementacji do szukania wartości parametrów w zastosować algorytm stochastycznego gradientu prostego. Funkcję celu z regularyzacją ℓ_2 przekazywać algorytmowi poprzez odpowiednio definiowany wskaźnik na funkcję.

³Zwróćmy uwage, że wybór wartości progowej klasyfikacji nie wymaga ponownego wyuczenia modelu.

Testowanie poprawności działania

Do sprawdzania poprawności działania zaproponowanych rozwiązań służy funkcja main w pliku main.py.

W pliku main.py nie wolno czegokolwiek zmieniać ani dopisywać.

Dodatkowo, aby program zadziałał, należy zainstalować pakiet pillow. W Windowsie można zrobić to w następujący sposób:

 Uruchomić linię poleceń Start -> cmd i wpisać: pip install pillow

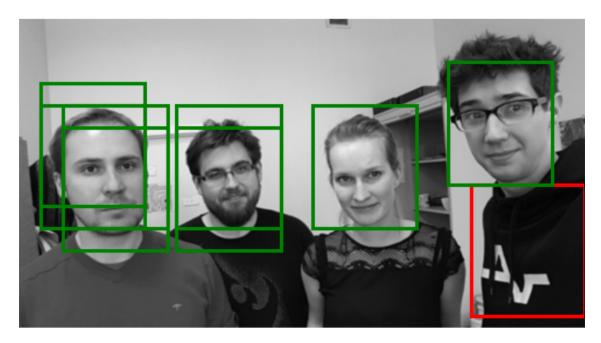
Instrukcja wykonania zadania

Należy zaimplementować wszystkie funkcje w pliku content.py

- 1. Zaimplementować funkcję sigmoid realizującą funkcję sigmoidalną (2).
- 2. Wyznaczyć gradient funkcji celu (8), następnie zaimplementować jej wartość oraz wartość gradientu w funkcji logistic_cost_function.
- 3. Zaimplementować funkcję gradient_descent wyznaczającą wartości parametrów w za pomocą algorytmu gradientu prostego. Funkcja dodatkowo ma zwracać wartości funkcji celu dla każdej iteracji algorytmu.
- 4. Zaimplementować funkcję stochastic_gradient_descent wyznaczającą wartości parametrów w za pomocą stochastycznego algorytmu gradientu prostego. Funkcja dodatkowo ma zwracać wartości funkcji celu wywołanej dla całego zbioru treningowego dla każdej iteracji algorytmu.
- 5. Wyznaczyć gradient funkcji celu (10), następnie zaimplementować jej wartość oraz wartość gradientu w funkcji regularized_logistic_cost_function.
- 6. Zaimplementować funkcję prediction dokonującej predykcji (3) na podstawie nauczonego modelu w pliku.
- 7. Zaimplementować wyliczenie miary F-measure (11) w funkcji f_measure.
- 8. Zaimplementować procedurę selekcji modelu w funkcji model_selection. Dodatkowo funkcja ma zwrócić parametry dla najlepszego modelu oraz macierz z wartościami miary F-measure dla każdej pary hiperparametrów (λ, θ) .

Efekt końcowy działania programu powinien być taki, jak na Rysunku 1.

 $\mathbf{UWAGA!}$ Wszelkie nazwy funkcji i zmiennych w pliku $\mathtt{content.py}$ muszą pozostać zachowane.



Rysunek 1: Wynik poprawnie działającego zadania.

Pytania kontrolne

- 1. Wyznaczyć pochodną sigmoidalnej funkcji logistycznej. Zapisać ją jedynie przy pomocy wartości funkcji sigmoidalnej $\sigma(a)$.
- 2. Wyznaczyć gradient funkcji celu (8) lub gradient funkcji celu z regularyzacją (10).
- 3. Co to jest model regresji logistycznej? W jaki sposób modeluje warunkowe prawdopodobieństwo?
- 4. Za co odpowiada wartość progowa θ ? W jaki sposób systematycznie podejść do ustalenia jej wartości?
- 5. Co to jest miara F-measure? Do czego jest wykorzystywana w powyższym zadaniu? Dlaczego zamiast niej nie stosuje się tutaj zwykłej poprawności klasyfikacji na ciągu walidacyjnym?
- 6. Za co odpowiada η w algorytmie gradientu prostego i stochastycznego gradientu prostego? Jak algorytmy będą zachowywać się dla różnych wielkości tego parametru?
- 7. Na czym polega detekcja obiektu na zdjęciu? Dlaczego jest to problem klasyfikacji?
- 8. Dlaczego algorytm stochastycznego gradientu prostego zbiega znacznie szybciej? Jakie jest znaczenie wielkości mini-batcha dla zbieżności algorytmu? Jak będzie zachowywał się dla małych mini-batchy, a jak dla dużych?
- 9. W jaki sposób można dodać regularyzację ℓ_2 na parametry modelu regresji logistycznej? Jaki efekt wówczas osiągniemy? Kiedy konieczne jest stosowanie regularyzacji, a kiedy nie?
- 10. Na czym polega procedura selekcji modelu w tym zadaniu? Jakie hiperparametry wyznaczamy? Które z nich wymagają każdorazowego nauczenia modelu, a które nie i dlaczego?