Inteligência Artificial

Raoni F. S. Teixeira

Aula 7 - Regressão Logística

1 Introdução

Nesta etapa do curso, estudaremos o problema de classificação. A classificação é semelhante à regressão, mas, em vez de prever valores contínuos, o objetivo é prever valores discretos para y. Vamos começar com um problema de classificação binária, em que y assume apenas dois valores: 0 e 1.

Por exemplo, se estivermos desenvolvendo um classificador de *spam* para e-mails, x representa características do e-mail e y é 1 se o e-mail for e 0 se não for. O valor 0 é chamado de classe negativa, e 1, de classe positiva, também podendo ser denotados por "-" e "+". Dado x, o valor correspondente de y é chamado de rótulo do exemplo de treinamento.

2 Regressão Logística

Poderíamos tentar resolver o problema de classificação ignorando que y é um valor discreto e usar a regressão linear para prevê-lo.Porém, essa abordagem falha, pois não faz sentido que o modelo $h_\theta(x)$ produza valores maiores que 1 ou menores que 0, já que y só pode ser 0 ou 1.

Para contornar esse problema, definimos a hipótese $h_\theta(x)$ usando a função sigmoide $g(z)$:

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

em que $\theta \in \mathbb{R}^{n+1}$ é o vetor de parâmetros do modelo, e $x \in \mathbb{R}^{n+1}$ é a entrada aumentada com o termo de viés $x_0 = 1$.

A função

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

é uma curva em forma de "S" definida para todos os valores reais de z, como mostra a Figura 1.

A partir do gráfico, podemos observar que $g(z)$ tende a 1 quando $z \to \infty$ e a 0 quando $z \to -\infty$. Além disso, $g(z)$ — e, consequentemente, $h_\theta(x)$ — está sempre entre 0 e 1.

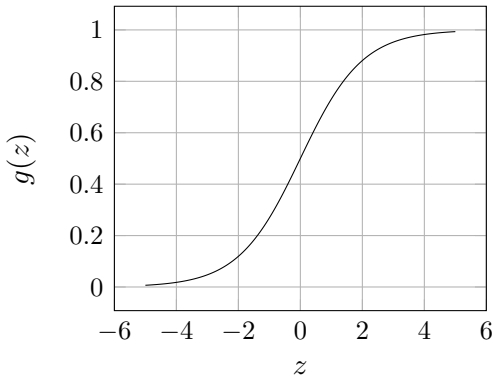


Figura 1: Gráfico da função sigmoide $g(z)$.

Essas propriedades nos permitem interpretar $h_\theta(x)$ como a probabilidade de $y = 1$ para uma entrada x:

$$P(y = 1|x; \theta) = h_\theta(x),$$
$$P(y = 0|x; \theta) = 1 - h_\theta(x).$$

De forma mais compacta, essa probabilidade pode ser expressa em única equação:

$$P(y|x; \theta) = (h_\theta(x))^y (1 - h_\theta(x))^{1-y}. \tag{2}$$

3 Estimativa dos parâmetros

Considerando um conjunto de treinamento $T = \{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(M)}, y^{(M)})\}$, com M amostras independentes, os parâmetros do modelo $h_\theta(x)$ podem ser estimados maximizando a função de verossimilhança $L(\theta)$:

$$\begin{aligned} L(\theta) &= P(T|\theta) \\ &= \prod_{i=1}^{M} P(y^{(i)}|x^{(i)}; \theta) \\ &= \prod_{i=1}^{M} (h_\theta(x^{(i)}))^{y^{(i)}} (1 - h_\theta(x^{(i)}))^{1-y^{(i)}}. \end{aligned}$$

O objetivo é encontrar os parâmetros θ que maximizem a probabilidade de observar os dados de treinamento T.

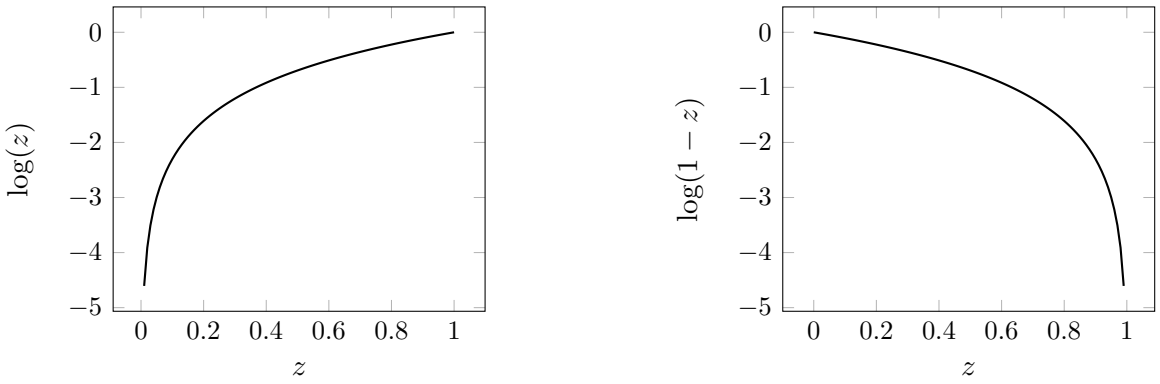
Para simplificar o cálculo, aplicamos o logaritmo à função de verossimilhança, transformando o produto em soma:

$$\begin{aligned}\ell(\theta) &= \log L(\theta) \\ &= \sum_{i=1}^{M} \left(y^{(i)} \log(h_\theta(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h_\theta(x^{(i)}))\right).\end{aligned} \tag{3}$$

De forma mais detalhada, a log-verossimilhança pode ser separada em dois termos associados a $y = 1$ e $y = 0$:

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{M} \left(y^{(i)} \underbrace{\log(h_\theta(x^{(i)}))}_{y=1} + (1 - y^{(i)}) \underbrace{\log(1 - h_\theta(x^{(i)}))}_{y=0} \right).$$

A Figura 2 apresenta os gráficos das funções $\log(h_\theta(x))$ e $\log(1-h_\theta(x))$, que correspondem aos dois termos. Observe que $\log(h_\theta(x))$, associado a $y = 1$, cresce à medida que $h_\theta(x)$ se aproxima de 1, enquanto $\log(1 - h_\theta(x))$ cresce à medida que $h_\theta(x)$ se aproxima de 0. Esse comportamento mostra que quanto maior o valor de $\ell(\theta)$ mais preciso será o modelo — $h_\theta(x)$ será o mais próximo de y.



(a) Termo associado a $y = 1$ (b) Termo associado a $y = 0$

Figura 2: Gráficos das funções $\log(z)$ e $\log(1-z)$ associadas a $y = 1$ e $y = 0$, respectivamente.

Para maximizar $\ell(\theta)$, usamos o método de subida de gradiente. Assim como na regressão linear, as atualizações dos parâmetros são realizadas iterativamente. Em notação vetorial, as atualizações são dadas por:

$$\theta \leftarrow \theta + \alpha \nabla_\theta \ell(\theta),$$

em que α é a taxa de aprendizado, e o sinal positivo indica que estamos maximizando $\ell(\theta)$, em vez de minimizá-la.

A derivada de $\ell(\theta)$ para um único exemplo de treinamento (x, y) é:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\theta_j}\ell(\theta) &= \left(y\frac{1}{g(\theta^T x)} - (1-y)\frac{1}{1-g(\theta^T x)}\right)\frac{\partial}{\partial\theta_j}g(\theta^T x)\\ &= \left(y\frac{1}{g(\theta^T x)} - (1-y)\frac{1}{1-g(\theta^T x)}\right)g(\theta^T x)(1-g(\theta^T x))\frac{\partial}{\partial\theta_j}\theta^T x\\ &= (y(1-g(\theta^T x)) - (1-y)g(\theta^T x))x_j\\ &= (y - h_\theta(x))x_j.\end{aligned}$$

Assim, a regra de atualização de θ pela subida do gradiente é:

$$\theta_j \leftarrow \theta_j + \alpha\sum_{i=1}^{M}\left(y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)})\right)x_j^{(i)}. \tag{4}$$

A primeira vista, essa regra de atualização pode parecer idêntica à da regressão linear, mas não é, pois $h_\theta(x^{(i)})$ agora é igual a $g(\theta^T x^{(i)})$.

4 Classificação

Como $h_\theta(x)$ prevê a probabilidade de $y = 1$, definimos um classificador binário como uma função $\gamma : \mathbb{R} \to \{0, 1\}$ que determina a classe de uma amostra verificando se essa probabilidade excede 0.5:

$$\gamma(x) = \begin{cases}1, & \text{se } h_\theta(x) \geq 0.5,\\ 0, & \text{caso contrário.}\end{cases} \tag{5}$$

Essa regra define uma superfície de decisão, que separa o espaço de entrada em duas regiões correspondentes às classes $y = 1$ e $y = 0$. A superfície de decisão é descrita pela equação:

$$h_\theta(x) = 0.5, \tag{6}$$

que, substituindo a definição de $h_\theta(x)$ (Equação 1), resulta em:

$$\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}} = 0.5.$$

E simplificando obtemos:

$$\theta^T x = 0.$$

Assim, a superfície de decisão é o conjunto de pontos x que satisfazem $\theta^T x = 0$. Essa equação é:

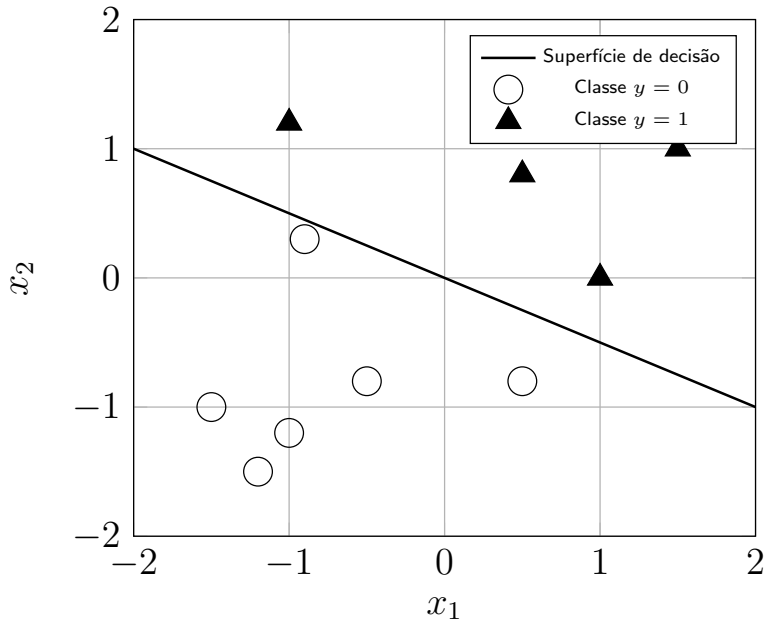


Figura 3: Exemplo de uma superfície de decisão em duas dimensões.

- um ponto (*threshold*) em uma dimensão.
- uma reta em duas dimensões,
- um plano em três dimensões e
- um hiperplano em dimensões superiores.

A Figura 3 apresenta um exemplo de superfície de decisão em duas dimensões. Os círculos correspondem à classe $y = 0$, e os triângulos, à classe $y = 1$. A reta é a superfície de decisão ($\theta^T x = 0$). A posição e a orientação da superfície de decisão dependem dos parâmetros θ. A reta da Figura 3 é dada por $\frac{x_1}{2} - x_2 = 0$. Se $\theta^T x \geq 0$, o ponto x é classificado como $y = 1$ — triangulos da Figura 3. Caso contrário ($\theta^T x < 0$), é classificado como $y = 0$ — círculos da Figura 3.

5 Classificação Não Linear

Tal como na aula anterior, podemos utilizar um mapeamento não linear ϕ para definir superfícies mais complexas. Por exemplo, o mapeamento

$$\phi(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1^2 \\ x_2^2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3. \tag{7}$$

gera a superfície de decisão circular da Figura 4. A superfície de decisão é definida pela equação $x_1^2 + x_2^2 - 1.5 = 0$. Em outras palavras, o círculo da Figura 4 é um hiperplano (linear) no espaço $\mathbb{R}^3$ criado por ϕ. .

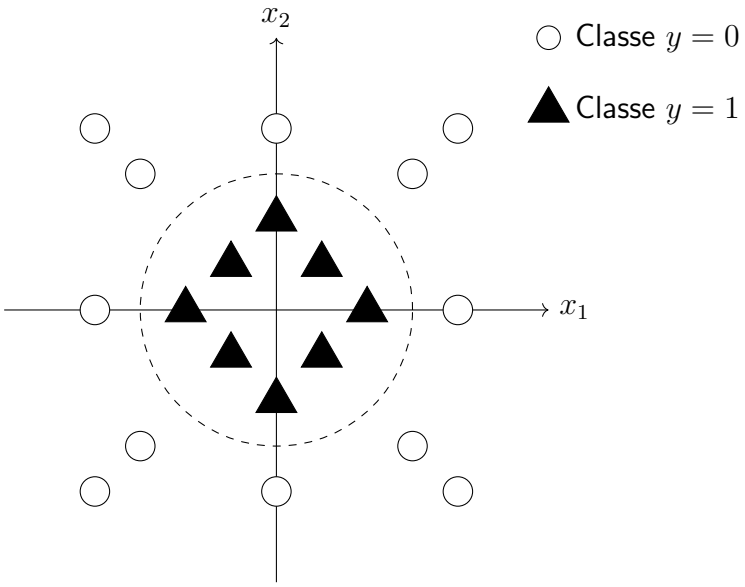


Figura 4: Exemplo de classificação não linear com fronteira circular.

É necessário tomar o mesmo cuidado da aula anterior com a dimensionalidade, com a escala dos dados mapeados e empregar regularização.

Para regularizar, transformamos o problema de maximização da Equação 3 em um de minimização multipliando-o por -1 e adicionamos o termo de regularização:

$$J(\theta) = \underbrace{-\sum_{i=1}^{M} y^{(i)} \log(h_\theta(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h_\theta(x^{(i)}))}_{\text{negativo do log-verossimilhança}} + \underbrace{\lambda \sum_{j=1}^{n} |\theta_j|}_{\text{regularização}}. \tag{8}$$

6 Exercícios

1. Qual a diferença entre a regressão linear e a regressão logística e como a função sigmoide ajuda a resolver o problema de classificação binária?

2. Como a superfície de decisão é definida na regressão logística e qual a importância de mapeamentos não lineares para a classificação não linear?