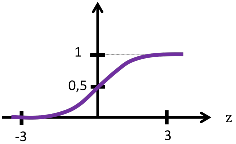
Fronteira de Decisão e Função Custo para Regressão Logística

Onde estamos e para onde vamos

Na aula anterior, revisamos o que são problemas de classificação e fizemos uma introdução ao método de Regressão Logística

Nesta aula continuaremos nossos estudos falando sobre **Fronteira de Decisão**, um conceito importante de ser bem compreendido no âmbito dos algoritmos de classificação.

Também vamos definir a **Função Custo** que utilizaremos para fins de Regressão Logística



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

Passo 1:

Definimos z como um modelo linear do tipo

$$z = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$$

Passo 2:

Passamos este z pela função sigmoide

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

Resultado

O resultado desse passo-a-passo é o modelo de Regressão Logística

$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = g(\vec{w} \cdot \vec{x} + b) = \frac{1}{1 + e^{-(\vec{w} \cdot \vec{x} + b)}} \qquad \text{onde } 0 < f_{\vec{w},b}(\vec{x}) < 1$$

Gerando as previsões $\hat{y} = 0$ e $\hat{y} = 1$

Como $0 < f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) < 1$, podemos considerar que $f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x})$ é a probabilidade de que y seja 1.

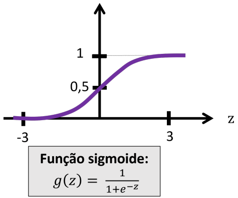
Ou seja, $f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) = P(y = 1 | \overrightarrow{x}; \overrightarrow{w}, b)$

Sendo assim, podemos considerar que

$$\hat{y} = \begin{cases} 1 & \text{se } f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) \geq 0.5 \\ 0 & \text{se } f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) < 0.5 \end{cases}$$

Pergunta:

Mas quais valores de $\overrightarrow{w}$, b, $\overrightarrow{x}$ fazem com que $f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) \geq 0.5$? (continua no próximo slide...)



Resposta:

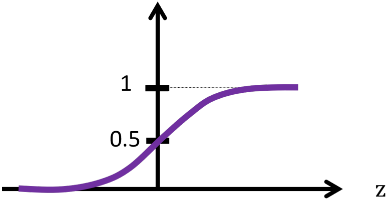
Lembre-se que $f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = g(z)$, sendo $z = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$.

Pelo gráfico acima, note que $z \geq 0$ resulta em $g(z) = f_{\vec{w},b}(\vec{x}) \geq 0.5$

Ou seja, teremos $f_{\vec{w},b}(\vec{x}) \geq 0.5$ sempre que $z = \vec{w} \cdot \vec{x} + b \geq 0$

Conclusão:

Nosso modelo fará a previsão $\hat{y} = 1$ quando $\vec{w} \cdot \vec{x} + b \geq 0$

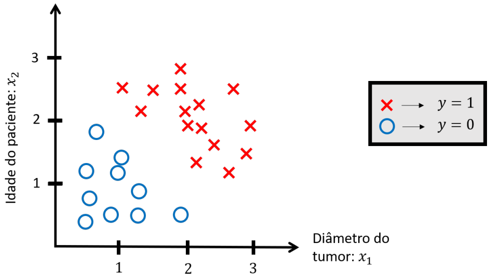


Analogamente, nosso modelo fará a previsão $\hat{y} = 0$ quando $\overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x} + b < 0$

Definição:

Com isso, podemos definir a chamada **fronteira de decisão**, que consiste no valor de $\overrightarrow{x}$ que faz com que $z = \overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x} + b = 0$, ou seja, que faz com que $f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) = 0.5$

Seja o problema de classificação abaixo, que contém 2 variáveis.



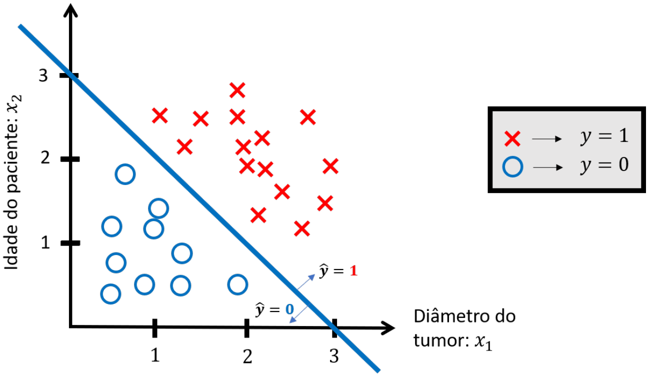
Como são 2 variáveis, o modelo para esse caso é

$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = g(w_1x_1 + w_2x_2 + b)$$

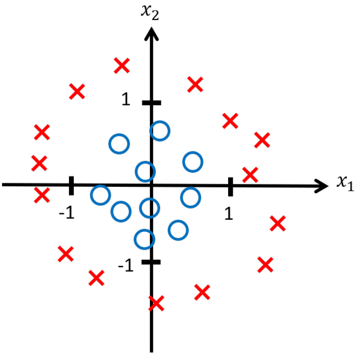
Supondo $w_1 = w_2 = 1$ e $b = -3$, temos a seguinte fronteira de decisão:

$$z = \vec{w} \cdot \vec{x} + b = 0 \quad \rightarrow \quad x_1 + x_2 - 3 = 0 \quad \rightarrow \quad x_1 + x_2 = 3$$

Ilustrando a fronteira de decisão $x_1 + x_2 = 3$ na figura, temos



Podemos ter também Fronteiras de Decisão mais complexas (não lineares):



Usando **Engenharia de Características**, podemos estabelecer o seguinte modelo para esse caso:

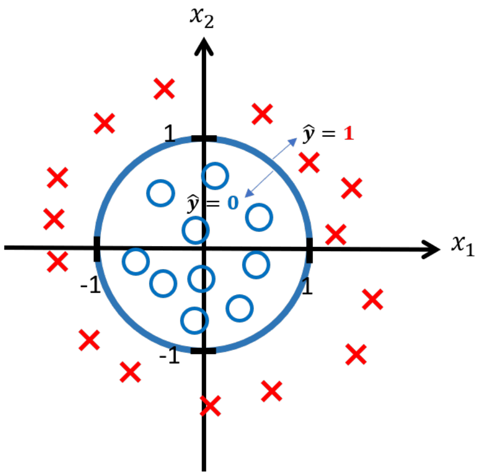
$$f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) = g(w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 + b)$$

Supondo $w_1 = w_2 = 1$ e $b = -1$, temos a seguinte fronteira de decisão:

$$z = \overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x} + b = 0 \quad \rightarrow \quad x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \quad \rightarrow \quad x_1^2 + x_2^2 = 1$$

Podemos ter também Fronteiras de Decisão mais complexas (não lineares):

Ilustrando a fronteira de decisão $x_1^2 + x_2^2 = 1$ na figura, temos



Podemos ter também Fronteiras de Decisão mais complexas (não lineares):

Observação

- Usando polinômios de maior ordem, podemos ter fronteiras de decisão com formas ainda mais complexas.
- Ou seja, assim como na Regressão Linear nós não estávamos limitados a estimar retas para os dados, aqui na Regressão Logística também não estamos limitados a estimar Fronteiras de Decisão lineares.
- Apesar disso, continua valendo a relação linear

$$z = \overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x} + b$$

Pergunta:

Suponha que você está criando um algoritmo para classificação de tumor. Seu algoritmo será usado para sinalizar potenciais tumores que deverão ser investigados em mais detalhes por um especialista. Qual valor de limiar você utilizaria?

A) Um valor elevado, de 0.9

B) Um valor baixo, de 0.2

Função Custo para Regressão Logística

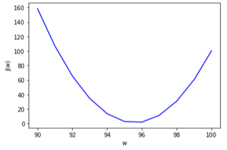
Na **Regressão linear**, tínhamos a seguinte função custo:

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)} \right)^2$$

onde

$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$$

Vimos que, com essas definições, a função quadrática J é **convexa**, ou seja, ela não possui outros mínimos locais além do próprio mínimo global:

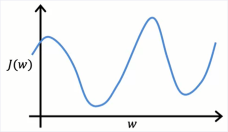


Agora, na **Regressão Logística**, temos:

$$f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = \frac{1}{1 + e^{-(\vec{w} \cdot \vec{x} + b)}}$$

Pergunta: Agora para esse novo $f_{\vec{w},b}(\vec{x})$, é uma boa ideia usarmos a mesma definição para $J(\vec{w}, b)$?

Resposta: Não, afinal, é possível provar que, se fizermos isso, $J(\overrightarrow{w}, b)$ **não será convexa**, e terá diversos mínimos locais, aos quais podemos ficar presos.



Conclusão:

Precisaremos modificar um pouco nossa função custo $J(\overrightarrow{w}, b)$ para que ela se torne convexa agora com

$$f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) = \frac{1}{1 + e^{-(\overrightarrow{w} \cdot \overrightarrow{x} + b)}}$$

A função custo quadrática da **Regressão Linear** pode ser reescrita conforme segue:

$$J(\overrightarrow{w}, b) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right)$$

onde $L(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)})$ é chamada de "**função de perda**" e é dada por

$$L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \frac{1}{2}\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2$$

Função Custo para Regressão Logística

A função custo quadrática da Regressão Linear pode ser reescrita conforme segue:

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right)$$

onde $L(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)})$ é chamada de "**função de perda**" e é dada por

$$L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \frac{1}{2}\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2$$

Na Regressão Logística, também usamos a função custo:

$$J(\vec{w}, b) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right)$$

Porém, na Regressão Logística, a "**função de perda**" é dada por

$$L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \begin{cases} -\log\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 1 \\ -\log\left(1 - f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 0 \end{cases}$$

OBS: Tal função é também chamada de "**função de entropia cruzada binária**".

Observação adicional: Estamos usando a notação $\log = \ln$ (logaritmo neperiano)

Na Regressão Logística, a **função de perda** é dada por

$$L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \begin{cases} -\log\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 1 \\ -\log\left(1 - f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 0 \end{cases}$$

Observações:

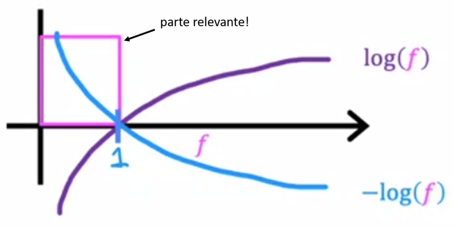
- a função de perda $L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right)$ opera com base em uma única amostra i
- Para obter a função custo, é necessário somar a perda para todas as amostras e depois dividir por m

Na Regressão Logística, a **função de perda** é dada por

$$L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \begin{cases} -\log\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 1 \\ -\log\left(1 - f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 0 \end{cases}$$

Analisando o caso $y^{(i)} = 1$

Como $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)$ estará sempre entre 0 e 1, então a única parte relevante da função $-\log\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right)$ para nós é:



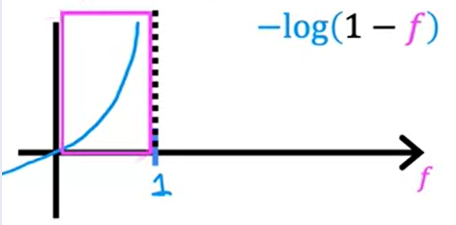
- Ou seja, a **perda** $\to 0$ conforme $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) \to 1 = y^{(i)}$. Ou seja, à medida com que a previsão torna-se correta! Por outro lado, **perda** $\to \infty$ conforme $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) \to 0$.

Na Regressão Logística, a **função de perda** é dada por

$$L\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \begin{cases} -\log\left(f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 1 \\ -\log\left(1 - f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 0 \end{cases}$$

Analisando agora o caso $y^{(i)} = 0$

Como nossa $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)$ estará sempre entre 0 e 1, então a única parte relevante da função $-\log\left(1 - f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right)\right)$ para nós é:



- Ou seja, a **perda** $\to 0$ conforme $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) \to 0 = y^{(i)}$. Ou seja, à medida com que a previsão torna-se correta! Por outro lado, **perda** $\to \infty$ conforme $f_{\vec{w},b}\left(\vec{x}^{(i)}\right) \to 1$.

Na Regressão Logística, a **função de perda** é dada por

$$L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right) = \begin{cases} -\log\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 1 \\ -\log\left(1 - f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)\right) & \text{, se } y^{(i)} = 0 \end{cases}$$

- Definindo a função perda dessa forma, o modelo sofre uma penalidade zero (nula) quando sua previsão $f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)$ para uma determinada amostra $y^{(i)}$ está correta.
- A penalidade sofrida pelo modelo aumenta conforme sua previsão $f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)$ se afasta do valor alvo $y^{(i)}$
- Ao errar completamente a previsão, por exemplo, $y^{(i)} = 1$ e $f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right) = 0$, o modelo é drasticamente penalizado (perda $\to \infty$)
- A função custo é a soma das perdas para todas as m amostras, divididos por m:

$$J(\overrightarrow{w}, b) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L\left(f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right), y^{(i)}\right)$$

- O objetivo é encontrar os valores de $\overrightarrow{w}, b$ que minimizam essa perda média, $J(\overrightarrow{w}, b)$.
- É possível provar que essa função $J(\overrightarrow{w}, b)$ será convexa para

$$f_{\overrightarrow{w},b}(\overrightarrow{x}) = \frac{1}{1 + e^{-(\overrightarrow{w}\cdot\overrightarrow{x}+b)}}$$

- Ou seja, ela possui apenas um mínimo, sendo este, portanto, seu mínimo global.

De olho no código!

De olho no código!

Vamos agora explorar o conceito de Fronteira de Decisão e Função Custo para Regressão Logística.

Acesse o Python Notebook usando o QR code ou o link abaixo:

https://colab.research.google.com/github/xaximpvp2/master/blob/main/codigo_aula10_fronteira_de_decisao.ipynb

Atividade de aula

Parte 1

Rode todo o código. Certifique-se de que você o compreendeu.

Parte 2

1. Explique, com as suas próprias palavras, o conceito de Fronteira de Decisão no contexto da Regressão Logística.
2. Considerando $w_0 = w_1 = 1$ e $b = -3$, calcule o valor do modelo $f_{\overrightarrow{w},b}\left(\overrightarrow{x}^{(i)}\right)$ para cada amostra de dados $\overrightarrow{x}^{(i)}$ presente no código. O que esses valores representam? Os resultados estão coerentes com aquilo que é observado graficamente no código?
3. Calcule o valor da função perda para cada amostra i.
4. Calcule o custo $J(\overrightarrow{w}, b)$.