APRENDIZADO DE MÁQUINA

PROF. RONALDO CRISTIANO PRATI

RONALDO.PRATI@UFABC.EDU.BR

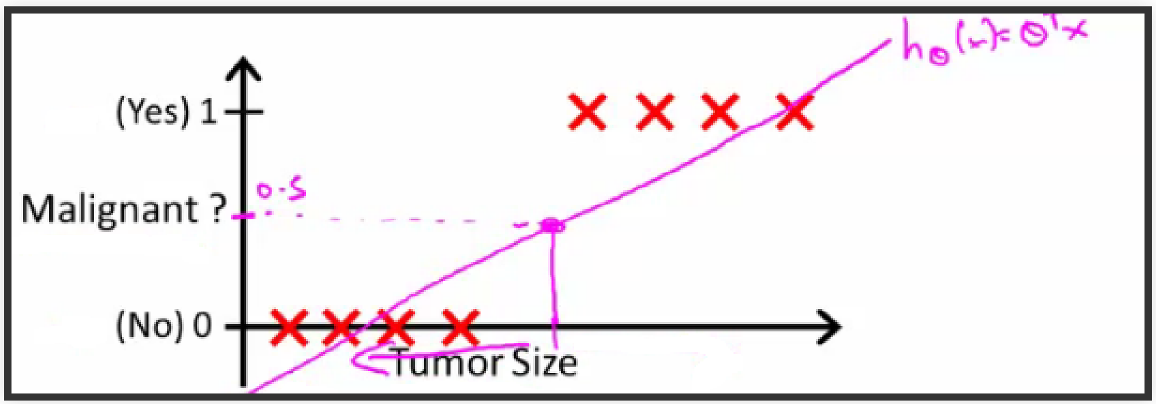
BLOCO A, SALA 513-2

CLASSIFICAÇÃO

- Um outro problema dentro de aprendizado supervisionado é a **classificação**
  - y é discreto:
    - e-mail: SPAM/não SPAM?
    - transções online: fraudulenta/normal?
    - tumor: maligno/benigno?
- vamos começar com um problema de **classificação binária** (veremos multiclasse depois)

CLASSIFICAÇÃO

- Podemos usar regressão linear?
- y pode ser representado como 0 ou 1:
  - 0: classe negativa
  - 1: classe positiva
  - Um ponto de corte no valor predito (p.ex. acima de 0.5), é classificado como classe positiva



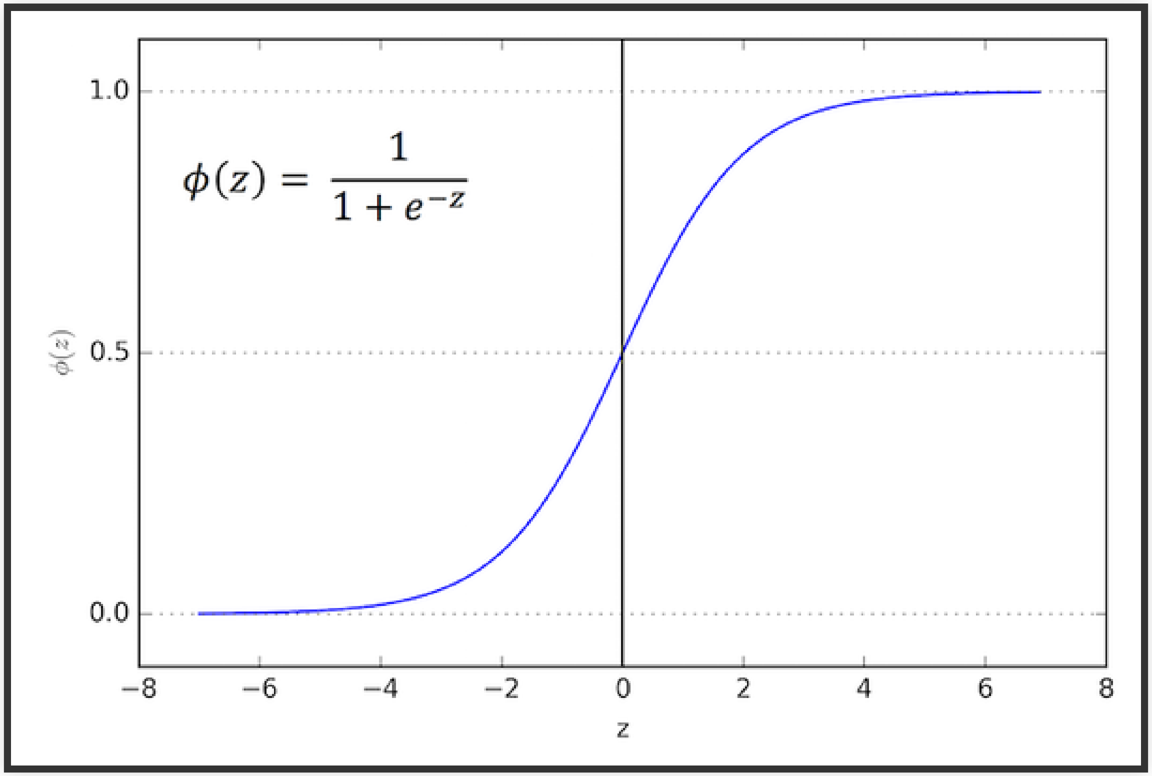
CLASSIFICAÇÃO

- E se tivermos poucos exemplos da classe 1? Provavelmente a inclinação da reta seria menor, e classificaríamos tudo com classe 0.
- Nossa hipótese também prediz valores abaixo de 0 e acima de 1, apesar da classe só poder assumir os valores 0 e 1.
- **Regressão logística** pode contornar esses problemas

REGRESSÃO LOGÍSTICA

- Apesar de se chamar regressão, é um algoritmo de classificação
- A hipótese tem a forma de $h_theta(x) = g((\theta^\intercal x))$, em que:
$$g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$
- Essa é a **função sigmoid** ou **função logística**
- Podemos reescrever $h_theta(x)$ como
$$h_\theta(z) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^\intercal x}}$$

REGRESSÃO LOGÍSTICA



INTERPRETANDO A SAÍDA

- A hipótese $h_\theta(x)$ dá como saída um número entre 0 e 1 que pode ser interpretada como a probabilidade que $y = 1$ para a entrada x
  - Por exemplo, se $h_\theta(x) = 0.7$ para um certo x^i, o modelo dá 70% de chance de um tumor malígno
- Em outras palavras, $h_\theta(x) = P(y = 1|x, \theta)$
- Como o problema é binário, temos que:

$$P(y = 1|x, \theta) + P(y = 0|x, \theta) = 1$$

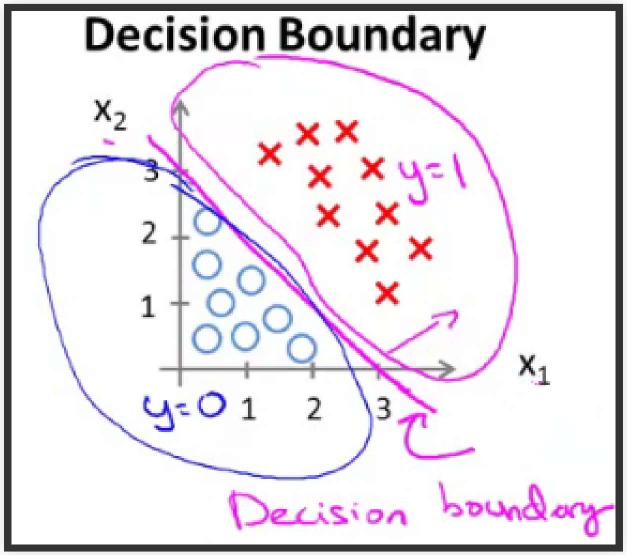
$$P(y = 0|x, \theta) = 1 - P(y = 1|x, \theta)$$

FRONTEIRA DE DECISÃO

- Para predizer a classe, utilizamos aquela com maior probabilidade, segundo o modelo
  - Isso é equivalente a predizer a classe 1 se $h_\theta(x) > 0.5$, e a classe 0 caso contrário
- Observando a função logística, temos que $h_\theta(x) = 0.5$ quando $z = 0$.
- Como $z = \theta^\intercal x$, a linha $\theta^\intercal x = 0$ é a fronteira de decisão entre as duas classes
  $\theta^\intercal x > 0$: predizer classe 1
  $\theta^\intercal x leq 0$: predizer classe 0

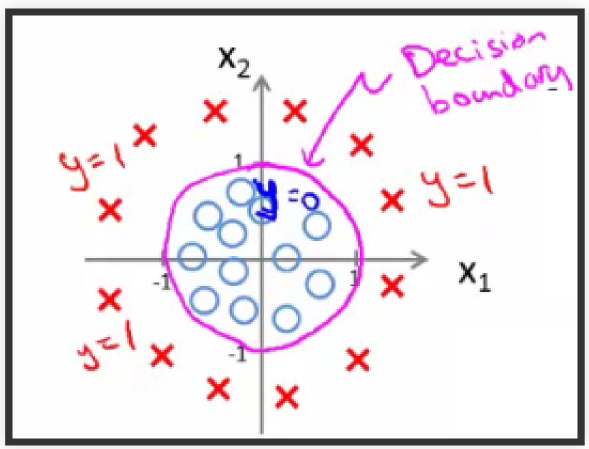
FRONTEIRA DE DECISÃO

- A linha em que $h_\theta(x) = 0.5$ (ou que $\theta^\intercal x = 0$) é a fronteira de decisão.



FRONTEIRA DE DECISÃO NÃO LINEAR

- Se adicionarmos novos atributos que fazem uma transformação não linear nos dados (como na aula passada, em que fizemos regressão polinomial adicionando atributos do tipo x^k)
- Por exemplo, se adicionarmos atributos quadráticos, podemos ter fronteiras de decisão do tipo



FUNÇÃO DE CUSTO PARA REGRESSÃO LOGÍSTICA

- Nossa hipótese é
$$h_\theta(z) = \frac{1}{1+e^{-\theta^\intercal x}}$$
- Na regressão linear temos que
$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i}^{m} Cost(h_\theta(x), y)$$

Em que o custo é definido como:
$$Cost(h_\theta(x), y) = \frac{1}{2}(h_\theta(x) - y)^2$$

FUNÇÃO DE CUSTO PARA REGRESSÃO LOGÍSTICA

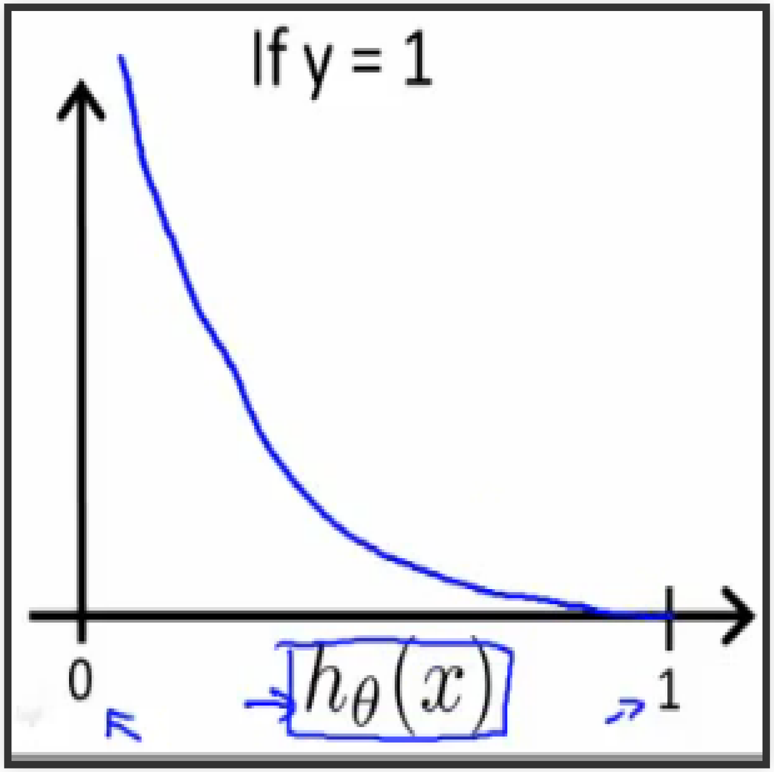
- Podemos usar a mesma função de custo para regressão logistica?
  - Essa função de custo é não convexa (a função da nosso hipótese (sigmoid) é não linear)
  - Ao tentar miniminar, podemos ter muitos mínimos locais
  - O algoritmo da descida do gradiente pode não encontrar os melhores valores para θ
  - Temos uma função convexa para por no lugar?

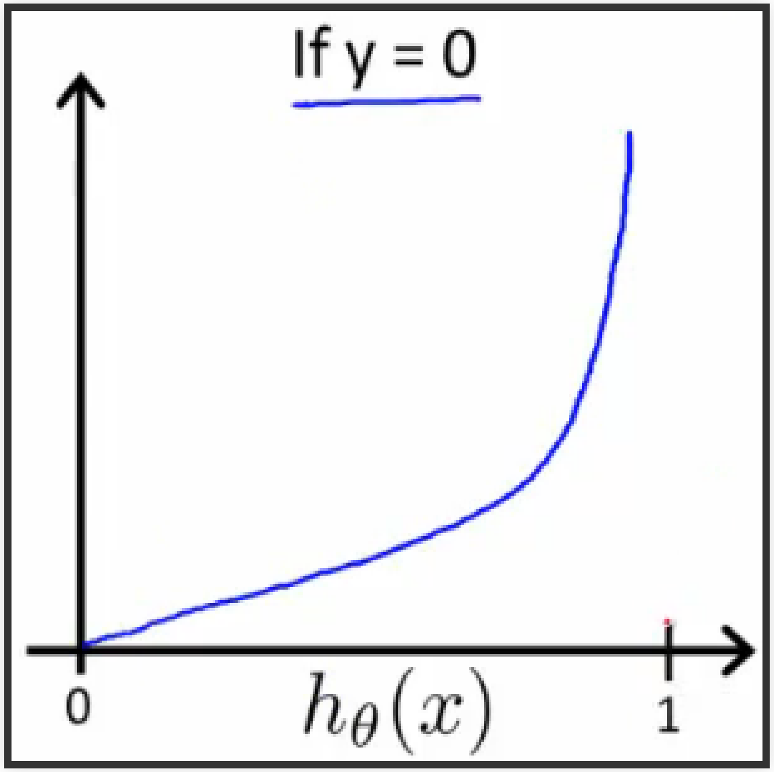
FUNÇÃO DE CUSTO PARA REGRESSÃO LOGÍSTICA

- Uma função de custo convexa:

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

FUNÇÃO DE CUSTO PARA REGRESSÃO LOGÍSTICA





FUNÇÃO DE CUSTO PARA REGRESSÃO LOGÍSTICA

- Como só temos duas classes, podemos escrever a função de custo de uma maneira mais compacta:

$$Cost(h_\theta(x), y) = -ylog(h_\theta(x)) - (1-y)log(1-h_\theta(x))$$

- Essa função pode ser derivada da estatística, usando o princípio da estimação da máxima verossimilhança
- Assume que existe uma distribuição Gaussiana dos atributos
- É convexa

GRADIENTE DESCENDENTE PARA REGRESSÃO LOGISTICA

- Podemos usar o gradiente descendente para encontrar θ na regressão logística

$$\theta := \theta - \alpha \sum_{i}^{m} (h_\theta(x^i) - y^i) x^i$$

- Essa equação é a mesma da regressão linear
  - A única diferença é que agora usamos uma hipótese diferente
- Colocar os atributos na mesma escala também pode ser necessário

ALÉM DO GRADIENTE DESCENDENTE

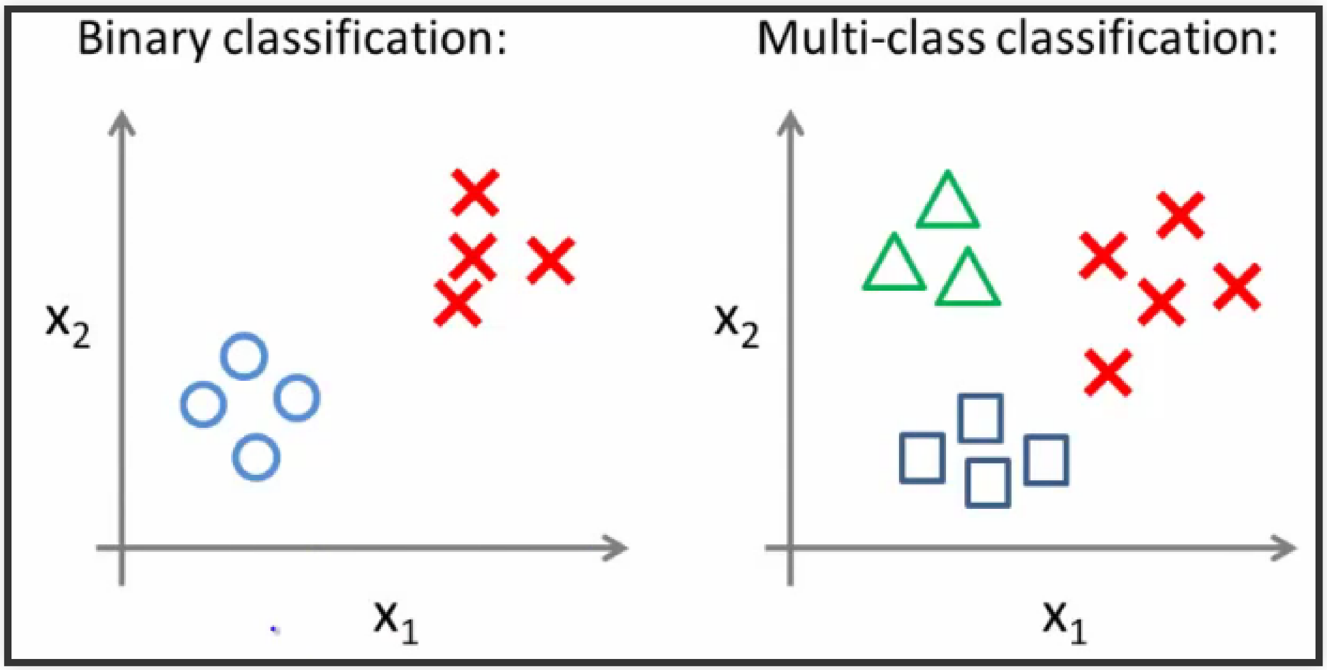
- Existem outras possíveis maneiras de minizar a função de custo
  - Gradiente conjugado
  - BFGS
  - L-BFGS
  - ...
- São algoritmos mais complexos e otimizados, que podem ser aplicados à mesma entrada e função de custo

ALÉM DO GRADIENTE DESCENDENTE

- Vantagens:
  - Não precisamos ajustar α (taxa de aprendizado) manualmente
  - Testam vários α internamente para escolher o mais adequado (além de outras melhorias)
  - Em geral, mais rápidos que o gradiente descendente
- Desvantagens
  - Difícil "acompanhamento"
  - Difícil implementação
  - Diferentes bibliotecas usam diferentes otimizações (desempenho diferente)

REGRESSÃO LOGÍSTICA MULTICLASSE

- Poblemas multiclasse: mais de duas classes



REGRESSÃO LOGÍSTICA MULTICLASSE

- Estratégia "um contra todos" (*one-versus-all* ou *one-versus-rest*)
  - Dividir o conjunto de dados em diversos problemas de classificação (igual ao número de classes)
  - Em cada problema, uma das classes é a positiva, e as demais são agrupadas na negativa
  - Escolher a classe que maximiza $P(y = 1|x_k; \theta)$, em que k é a classe positiva no problema de classificação k

REGRESSÃO LOGÍSTICA MULTICLASSE