Основы машинного обучения

Лекция 8

Линейная классификация

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2023

Модель линейной классификации

Классификация

- $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$
- -1 — отрицательный класс
- $+1$ — положительный класс
- $a(x)$ должен возвращать одно из двух чисел

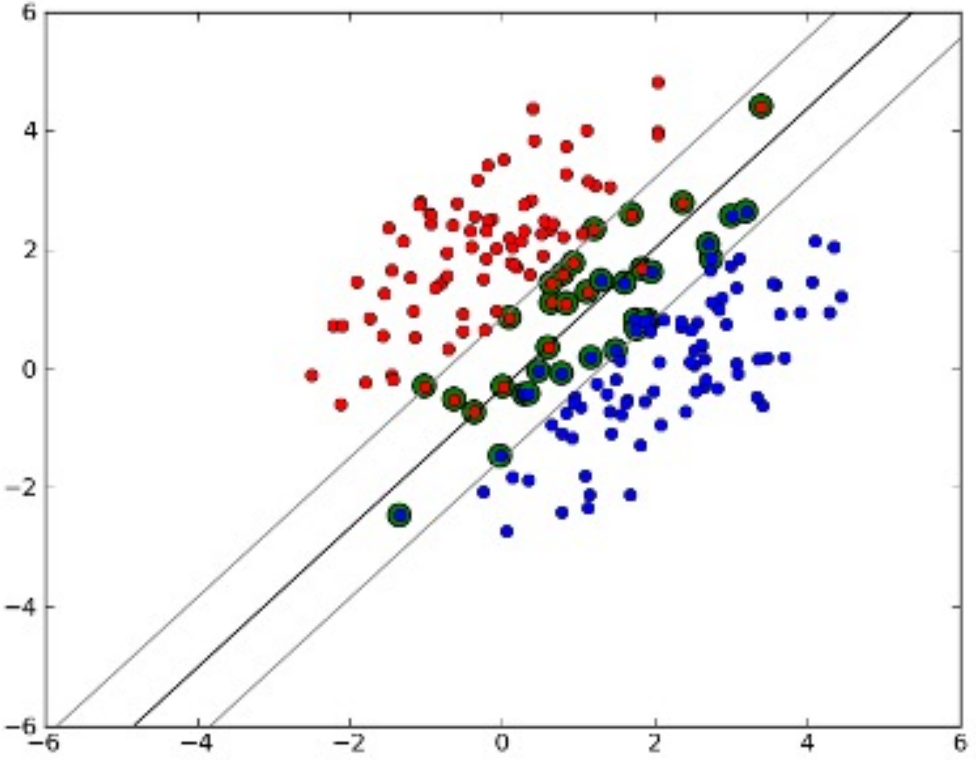
Линейный классификатор

- Будем считать, что есть единичный признак

$$a(x) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{d} w_j x_j = \operatorname{sign} \langle w, x \rangle$$

Отступ

- $M_i = y_i \langle w, x_i \rangle$
- $M_i > 0$ — классификатор дает верный ответ
- $M_i < 0$ — классификатор ошибается
- Чем дальше отступ от нуля, тем больше уверенности



Порог

$$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x \rangle - t)$$

- t — порог классификатора

- Можно подбирать для оптимизации функции потерь, отличной от использованной при обучении

Линейный классификатор

- Линейный классификатор разделяет два класса гиперплоскостью
- Чем больше отступ по модулю, тем дальше объект от гиперплоскости
- Знак отступа говорит о корректности предсказания

Обучение линейных классификаторов

Функция потерь в классификации

- Частый выбор — бинарная функция потерь

$$L(y, a) = [a \neq y]$$

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

Доля ошибок для линейного классификатора

- Функционал ошибки:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\operatorname{sign}(\langle w, x_i \rangle) \neq y_i]$$

- Индикатор — недифференцируемая функция

Отступы для линейного классификатора

- Функционал ошибки:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\mathrm{sign}\,(\langle w, x_i \rangle) \neq y_i]$$

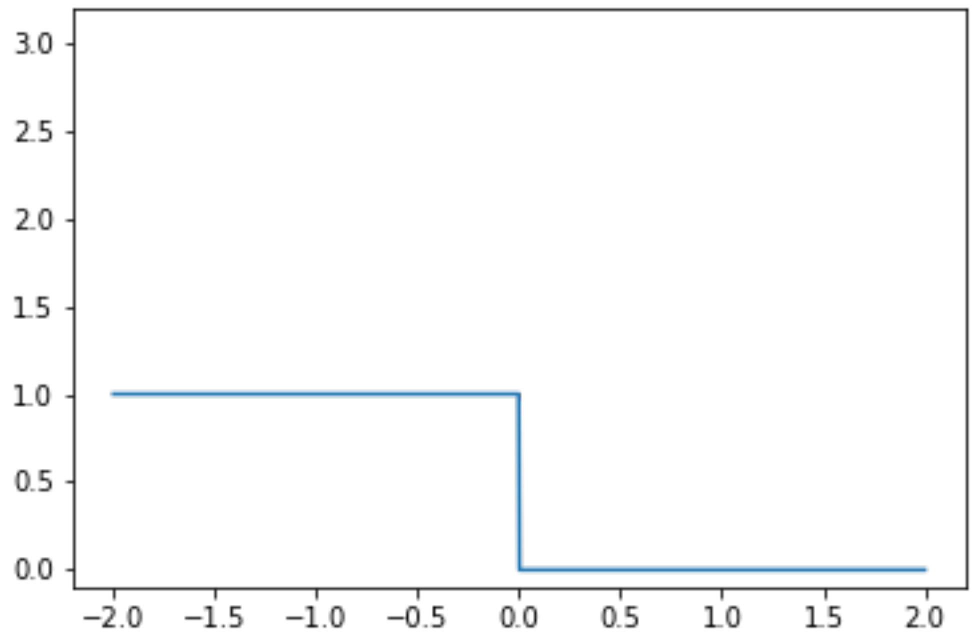
- Альтернативная запись:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\underbrace{y_i \langle w, x_i \rangle}_{M_i} < 0]$$

Отступы для линейного классификатора

$$L(M) = [M < 0]$$

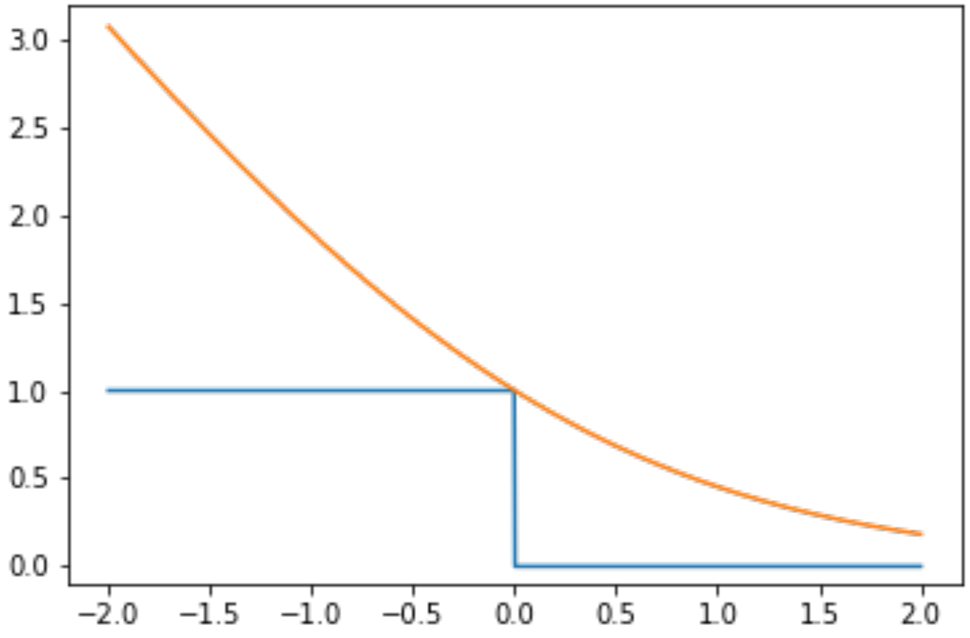
- Нельзя продифференцировать



Верхняя оценка

$$L(M) = [M < 0] \leq \tilde{L}\,(M)$$

- Оценим сверху дифференцируемой функцией



Верхняя оценка

$$0 \le \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [y_i \langle w, x_i \rangle < 0] \le \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \tilde{L}(y_i \langle w, x_i \rangle) \to \min_w$$

- Минимизируем верхнюю оценку
- Надеемся, что она прижмёт долю ошибок к нулю

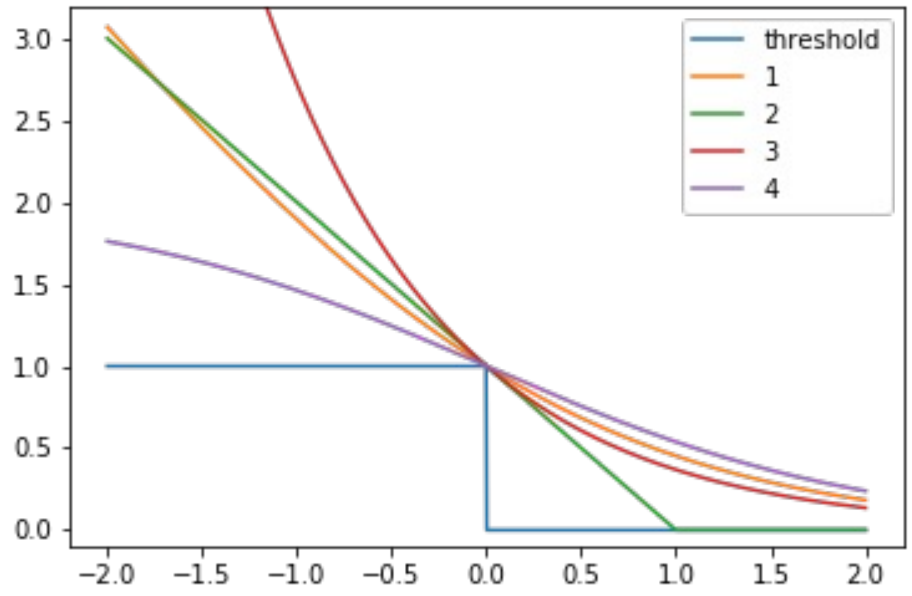
Примеры верхних оценок

1. $\tilde{L}(M) = \log(1 + e^{-M})$ — логистическая

2. $\tilde{L}(M) = \max(0, 1 - M)$ — кусочно-линейная

3. $\tilde{L}(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная

4. $\tilde{L}(M) = \frac{2}{1+e^{M}}$ — сигмоидная



Пример обучения

- Выбираем логистическую функцию потерь:

$$\tilde{Q}(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \log(1 + \exp(-y_i \langle w, x_i \rangle)) \to \min_{w}$$

- Вычисляем градиент:

$$\nabla_w \tilde{Q}(w, X) = -\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{y_i x_i}{1 + \exp(y_i \langle w, x_i \rangle)}$$

Пример обучения

- Делаем градиентный спуск:

$$w^{(t)} = w^{(t-1)} + \eta \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{y_i x_i}{1 + \exp(y_i \langle w, x_i \rangle)}$$

Пример регуляризации

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\log(1+\exp(-y_i\langle w, x_i\rangle)) + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

- Полностью аналогично линейной регрессии
- Важно не накладывать регуляризацию на свободный коэффициент
- Можно использовать L_1-регуляризацию

Метрики качества классификации

Качество классификации

- Доля неправильных ответов:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) \neq y_i]$$

Качество классификации

- Доля правильных ответов (accuracy):

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i]$$

Несбалансированные выборки

- Несбалансированная выборка — объектов одного класса существенного больше
- Пример: предсказание кликов по рекламе
- Пример: медицинская диагностика
- Пример: предсказание оттока клиентов
- Пример: специализированный поиск

Несбалансированные выборки

- Пример:
  - Класс -1: 950 объектов
  - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?

Несбалансированные выборки

- Пример:
    - Класс -1: 950 объектов
    - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?
- Модель не несёт экономической ценности
- Цены ошибок неравнозначны

Несбалансированные выборки

- q_0 — доля объектов самого крупного класса
- Для разумных алгоритмов:

$$\text{accuracy} \in [q_0, 1]$$

- Если получили большой accuracy — посмотрите на баланс классов

Улучшение метрики

- Два алгоритма
- Доли правильных ответов: r_1 и r_2
- Абсолютное улучшение: $r_2 - r_1$
- Относительное улучшение: $\frac{r_2 - r_1}{r_1}$

Улучшение метрики

- $r_1 = 0.8$
- $r_2 = 0.9$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 12.5\%$

- $r_1 = 0.5$
- $r_2 = 0.75$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 50\%$

- $r_1 = 0.001$
- $r_2 = 0.01$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 900\%$

Цены ошибок

- Пример: кредитный скоринг
- Модель 1:
  - 80 кредитов вернули
  - 20 кредитов не вернули
- Модель 2:
  - 48 кредитов вернули
  - 2 кредита не вернули
- Кто лучше?

Цены ошибок

- Что хуже?
  - Выдать кредит «плохому» клиенту
  - Не выдать кредит «хорошему» клиенту
- Доля верных ответов не учитывает цены ошибок

Матрица ошибок

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	True Positive (TP)	False Positive (FP)
$a(x) = -1$	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Матрица ошибок

- Модель $a_1(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- Модель $a_2(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

Точность (precision)

- Можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?

$$\text{precision}(a, X) = \frac{TP}{TP + FP}$$

Точность (precision)

- Модель $a_1(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{precision}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{precision}(a_2, X) = 0.96$

Полнота (recall)

- Как много положительных объектов находит классификатор?

$$\text{recall}(a, X) = \frac{TP}{TP + FN}$$

Полнота (recall)

- Модель $a_1(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{recall}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{recall}(a_2, X) = 0.48$

Антифрод

- Классификация транзакций на нормальные и мошеннические
- Высокая точность, низкая полнота:
  - Редко блокируем нормальные транзакции
  - Пропускаем много мошеннических
- Низкая точность, высокая полнота:
  - Часто блокируем нормальные транзакции
  - Редко пропускаем мошеннические

Кредитный скоринг

- Неудачных кредитов должно быть не больше 5%
- Ограничение: $\mathrm{precision}(a, X) \geq 0.95$
- Максимизируем полноту

Медицинская диагностика

- Надо найти не менее 80% больных
- Ограничение: $\mathrm{recall}(a, X) \geq 0.8$
- Максимизируем точность

Несбалансированные выборки

- $\text{accuracy}(a, X) = 0.99$
- $\text{precision}(a, X) = 0.33$
- $\text{recall}(a, X) = 0.1$

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	10	20
$a(x) = -1$	90	10000

Совмещение точности и полноты

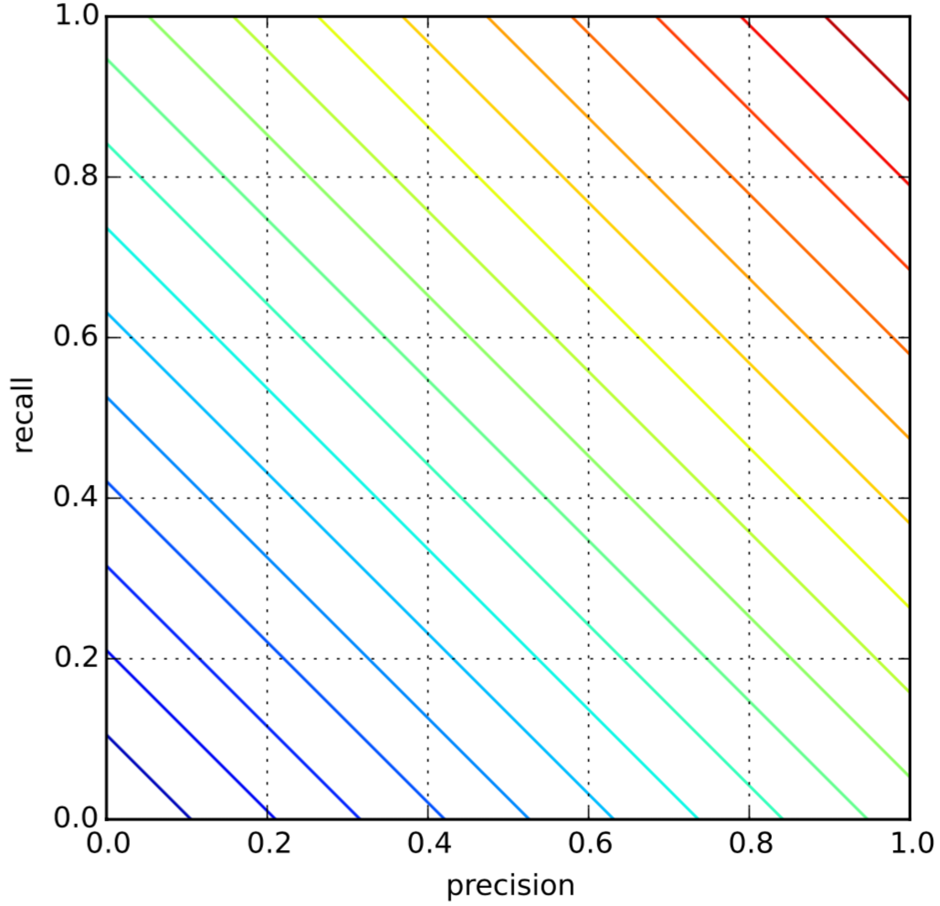
Точность и полнота

- Точность — можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?
- Полнота — как много положительных объектов находит $a(x)$?

- Оптимизировать две метрики одновременно очень неудобно
- Как объединить?

Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

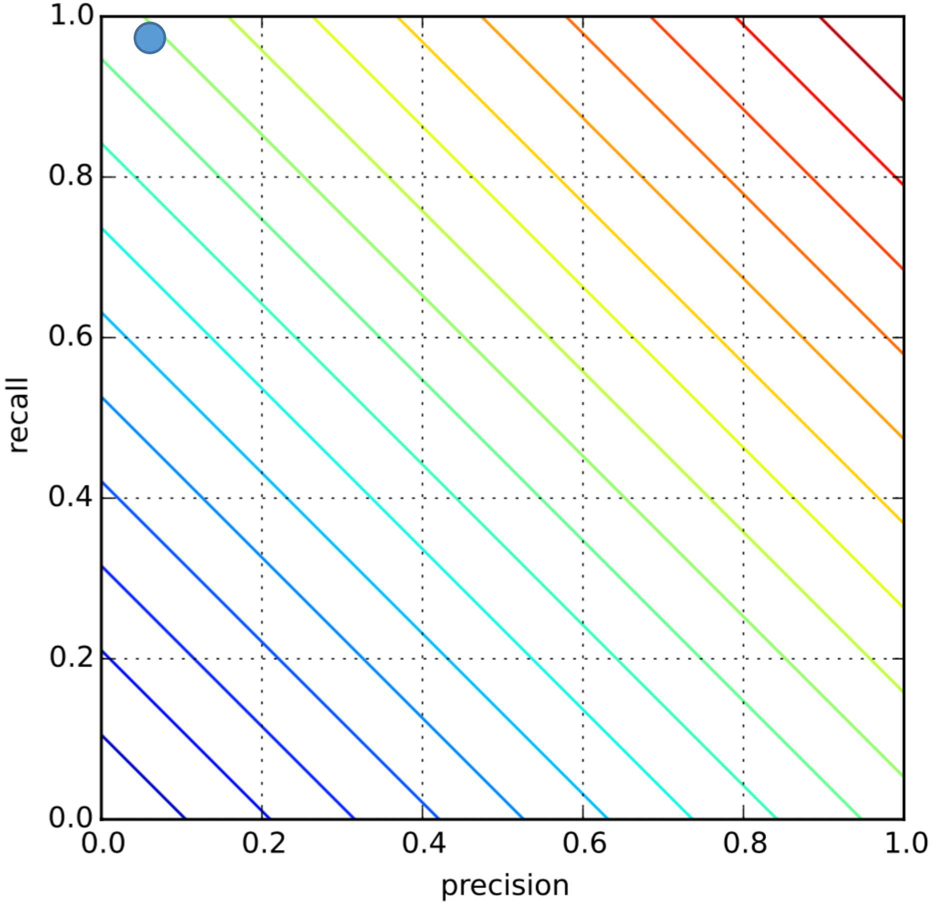


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.1$
- $\text{recall} = 1$
- $A = 0.55$

- Плохой алгоритм

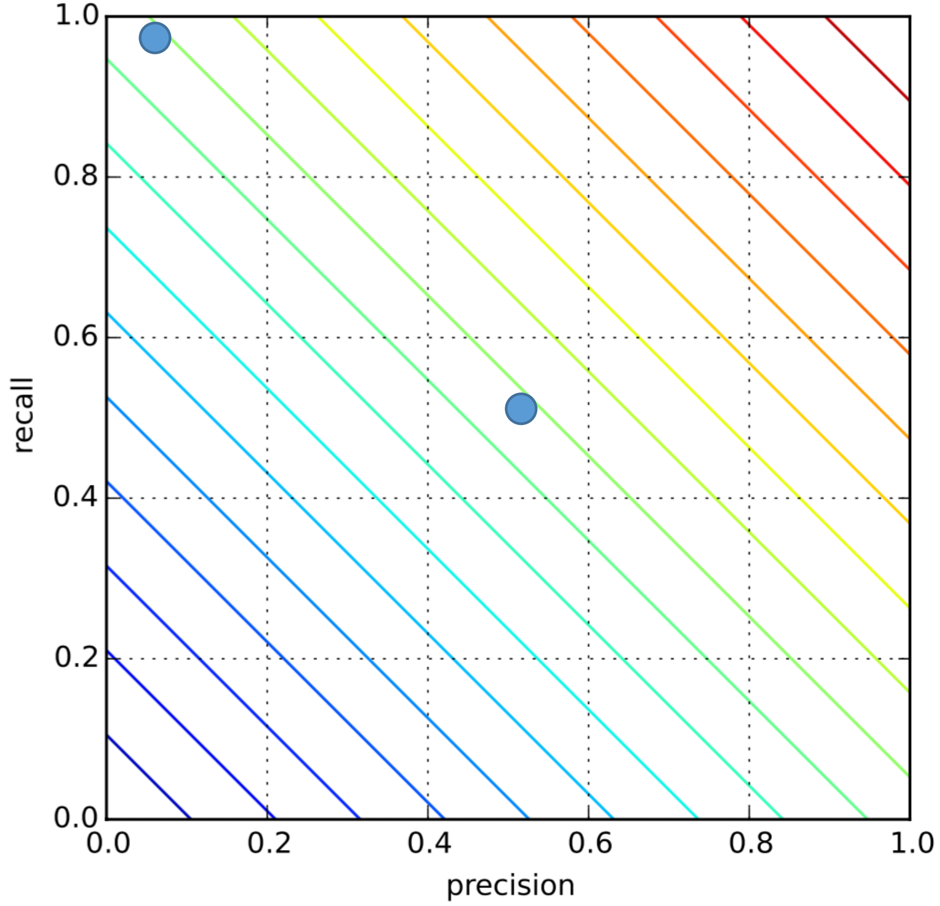


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

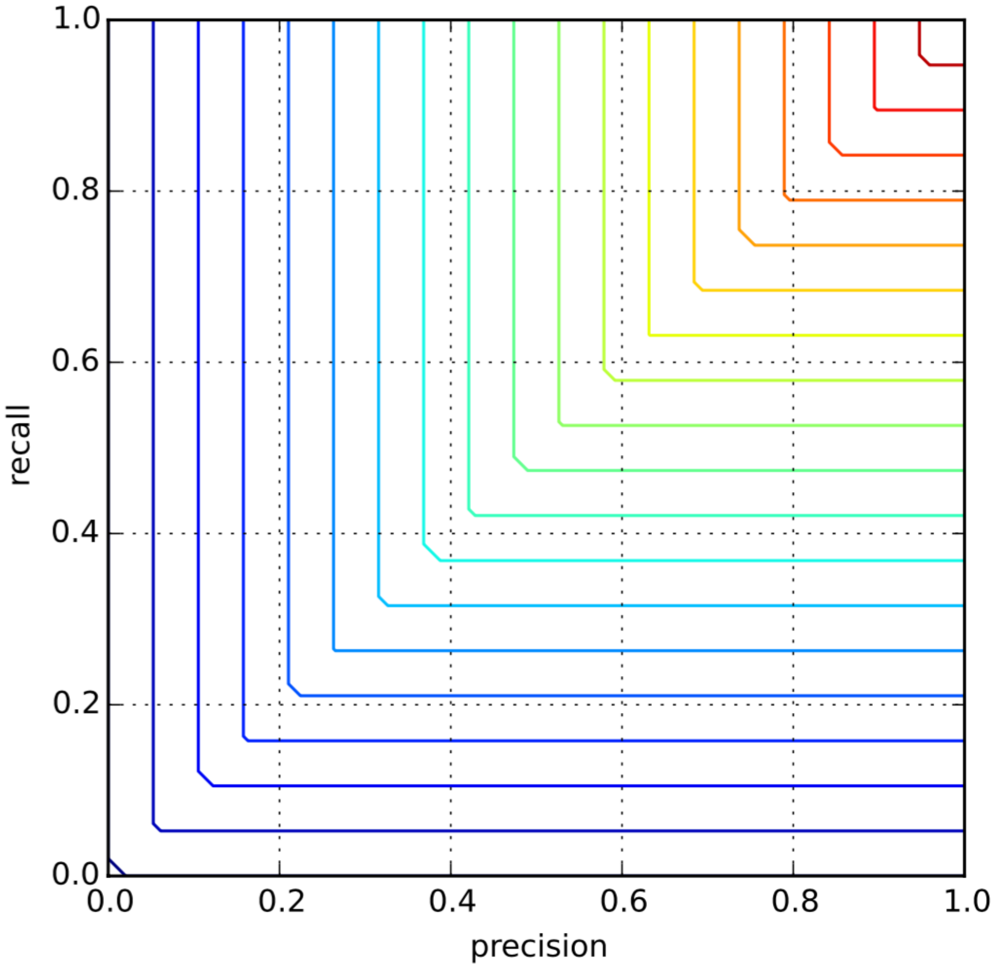
- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $A = 0.55$

- Нормальный алгоритм
- Но качество такое же, как у плохого



Минимум

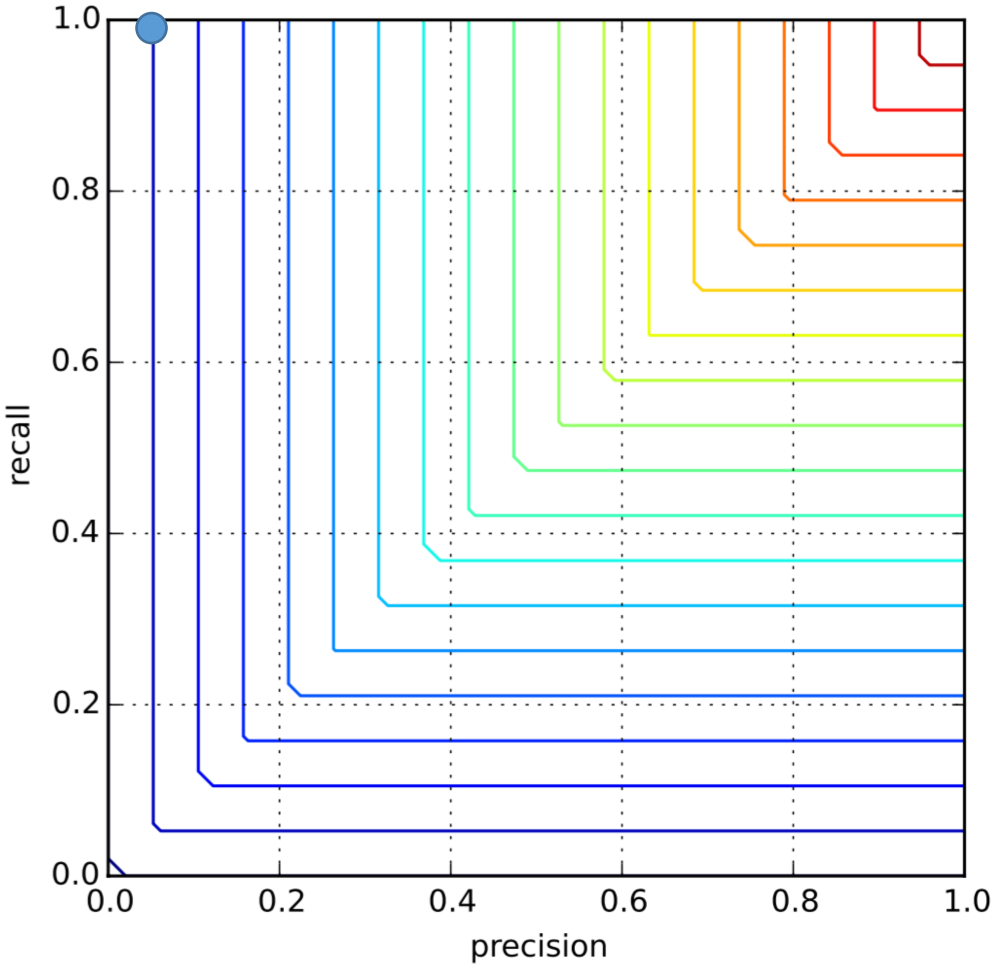
$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

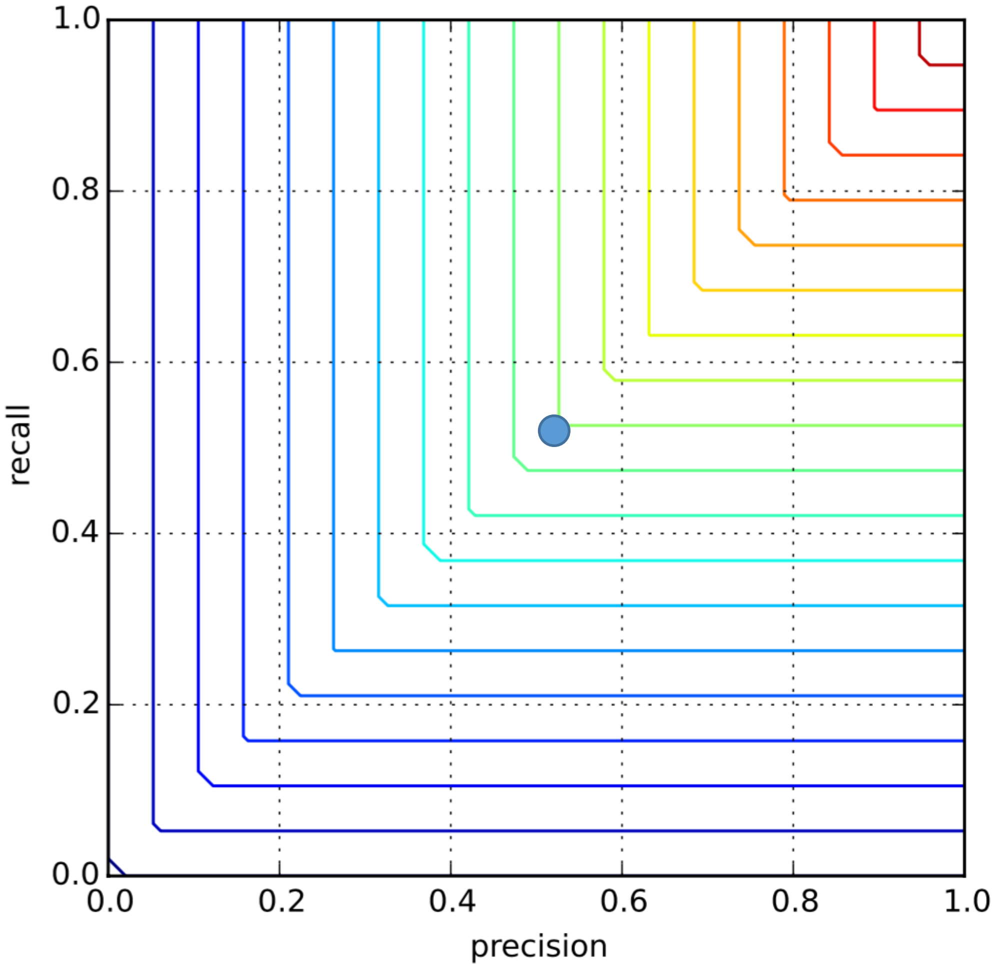
- $\text{precision} = 0.05$
- $\text{recall} = 1$
- $M = 0.05$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $M = 0.55$



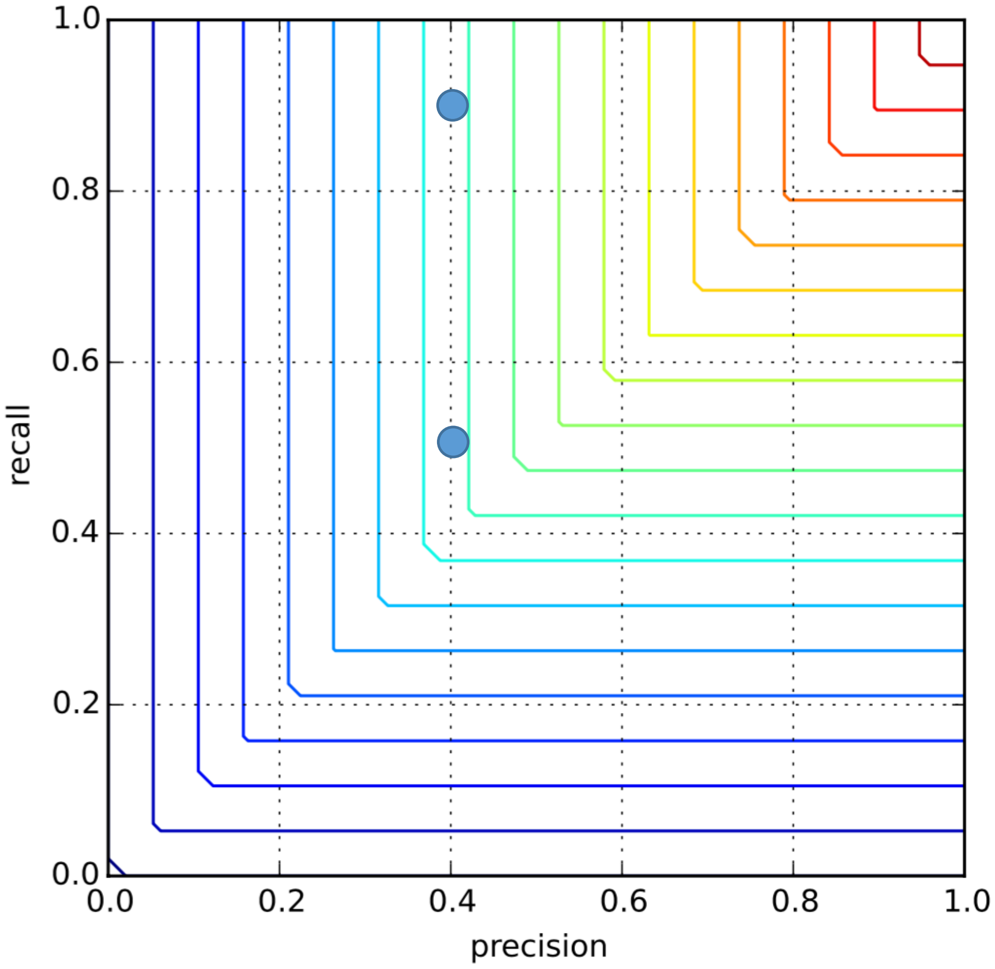
Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $M = 0.4$

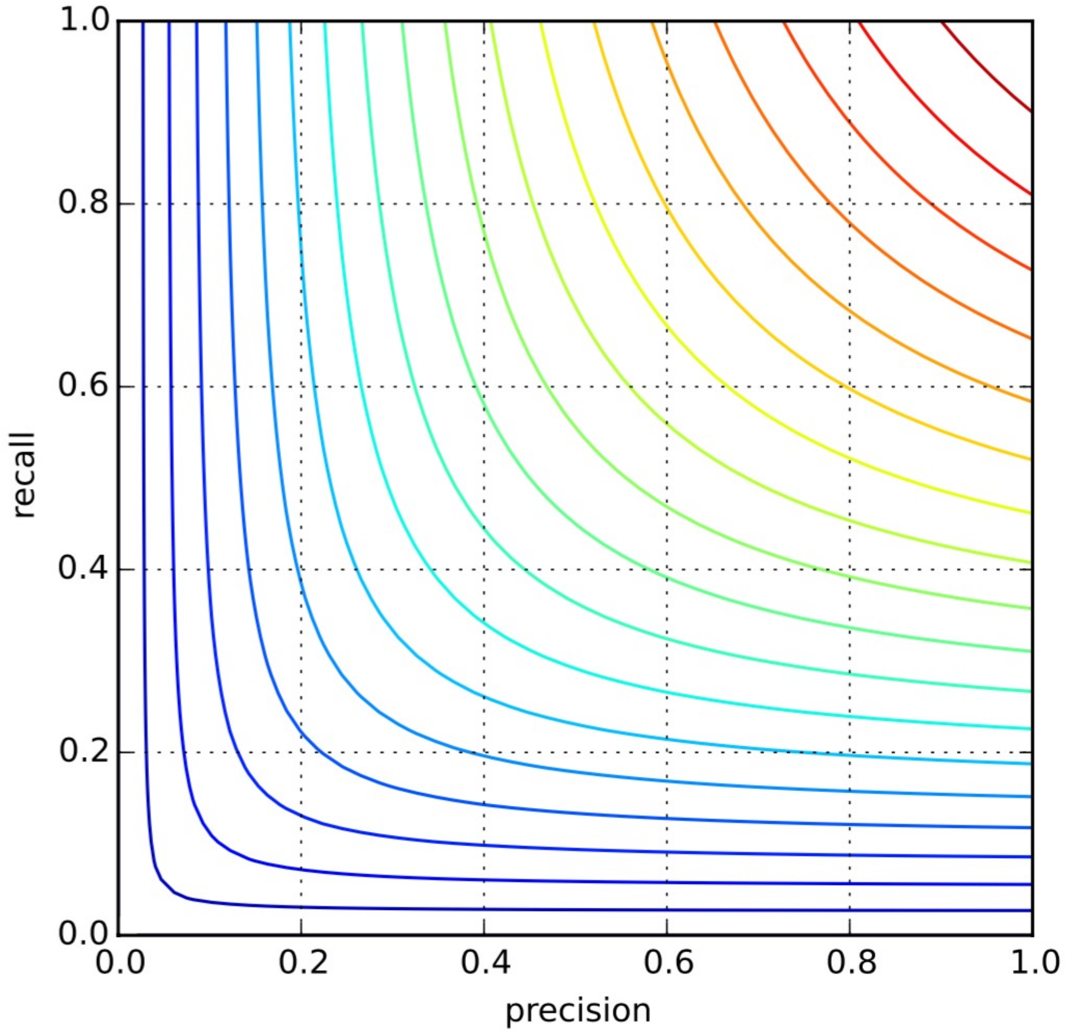
- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.4$

- Но второй лучше!



F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

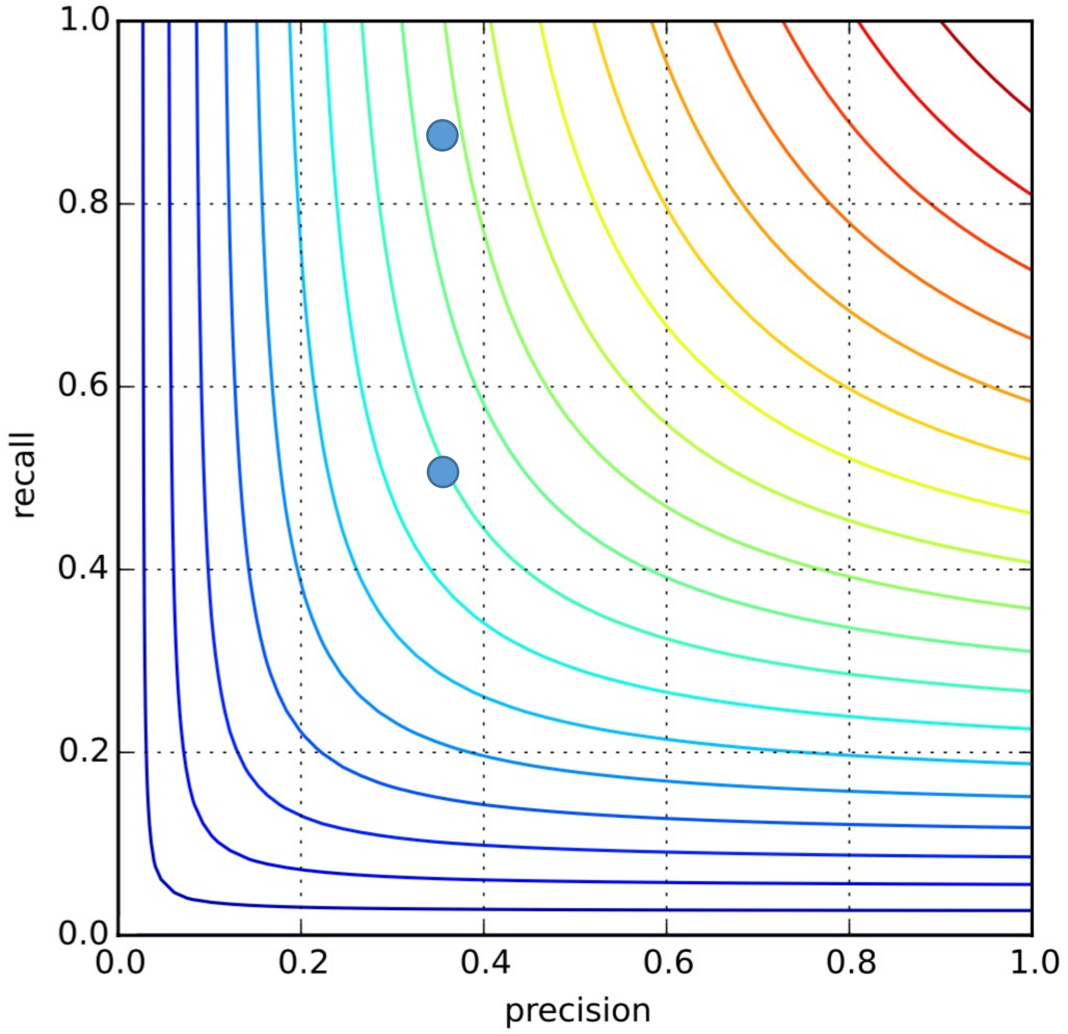


F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

- precision = 0.4, recall = 0.5
- $F = 0.44$

- precision = 0.4, recall = 0.9
- $M = 0.55$



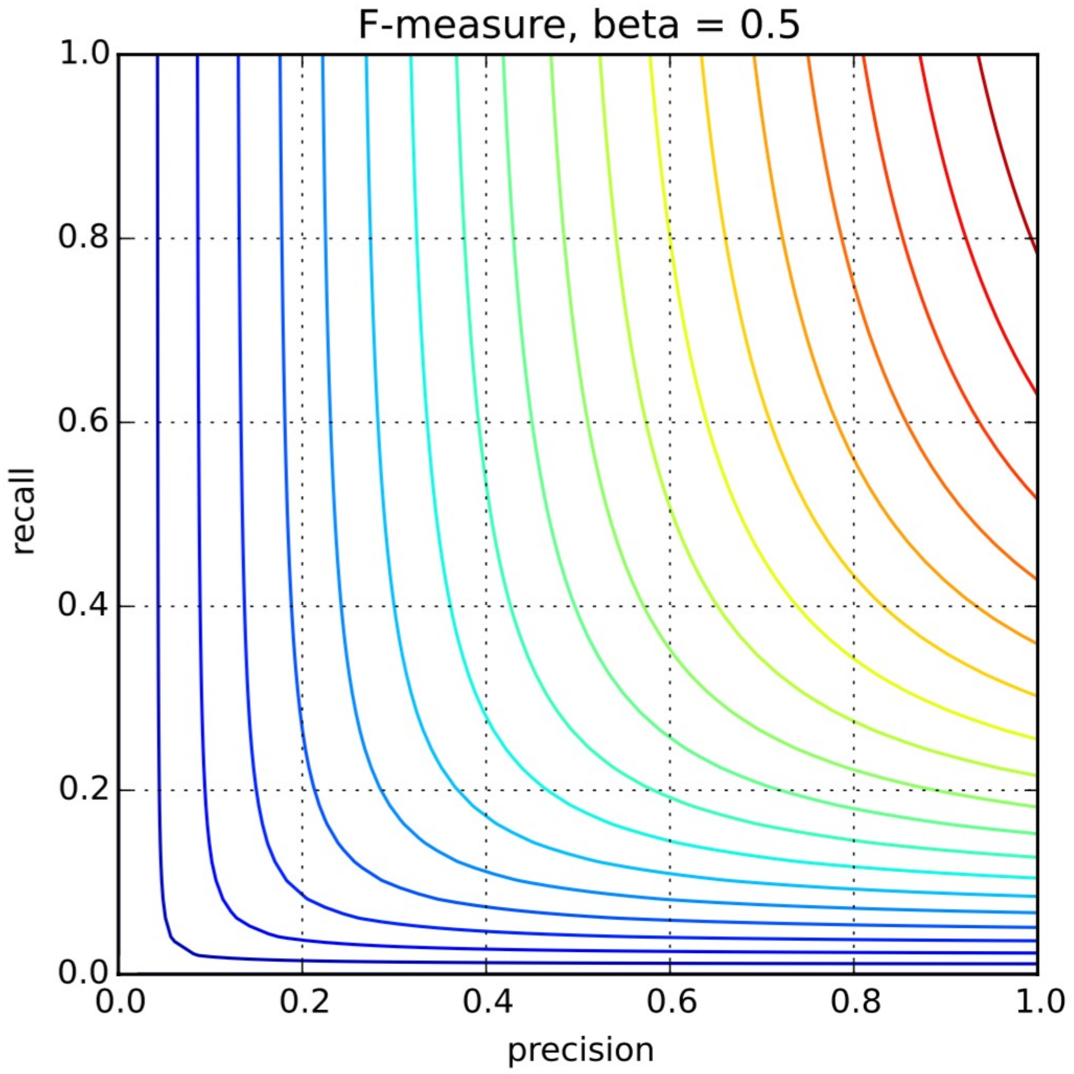
F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

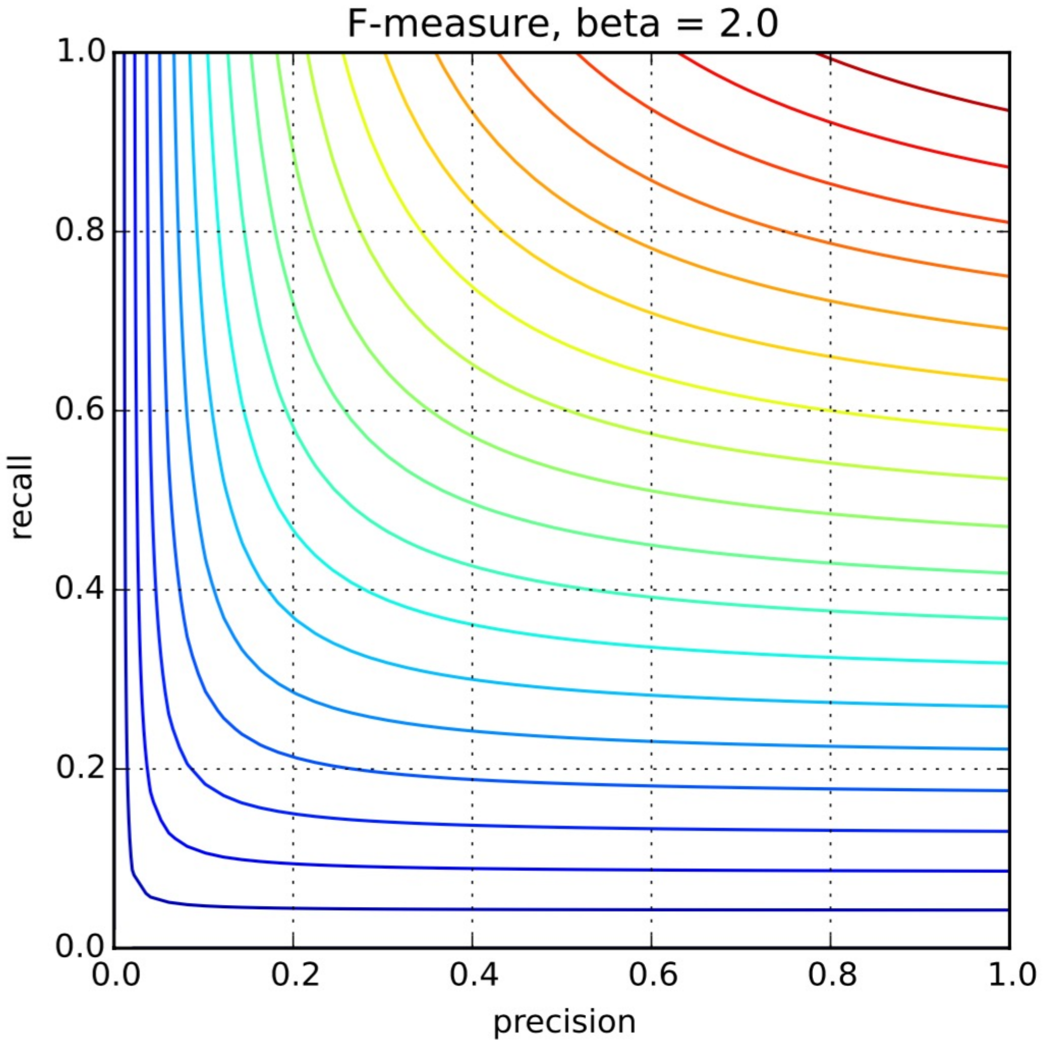
- $\beta = 0.5$
- Важнее точность



F-мера

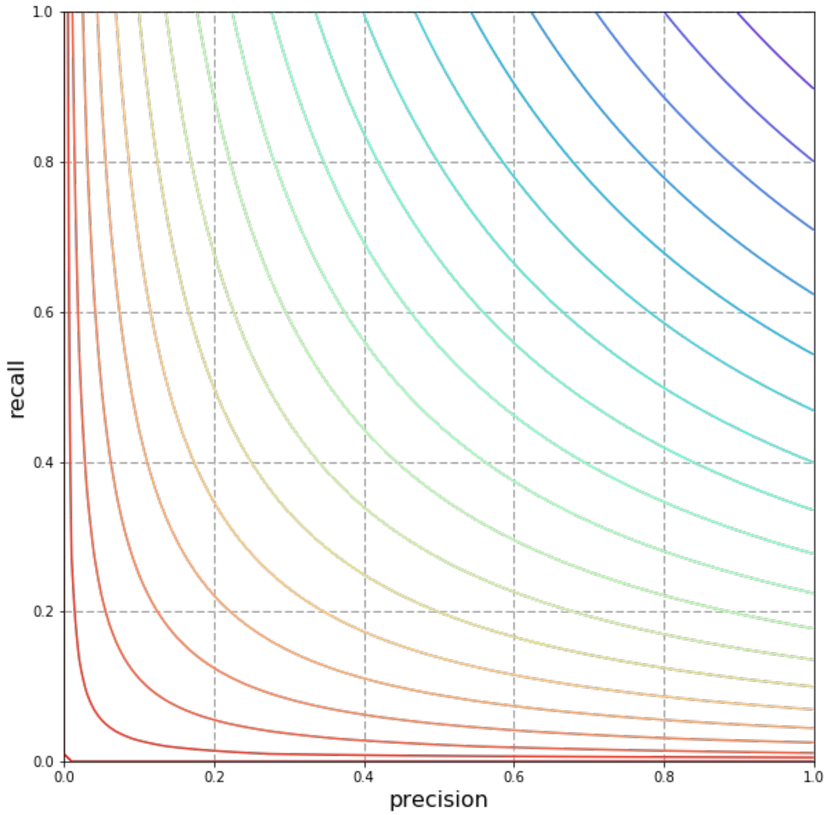
$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

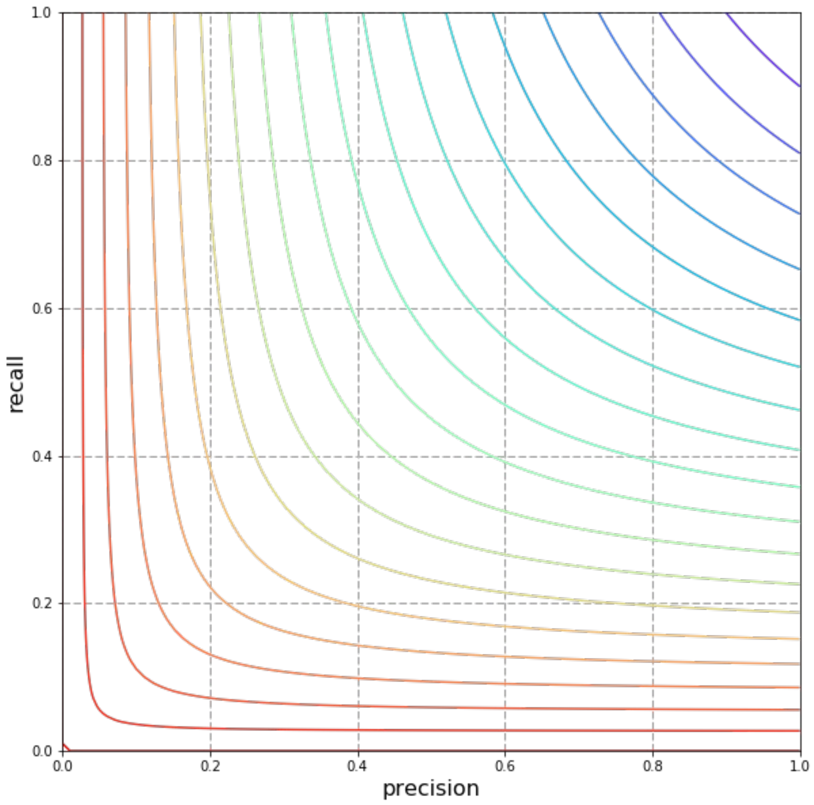
- $\beta = 2$
- Важнее полнота



Геометрическое среднее

$$\mathrm{G} = \sqrt{\text{precision} * \text{recall}} \qquad F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$





Геометрическое среднее

$$\mathrm{G} = \sqrt{\mathrm{precision} * \mathrm{recall}}$$

$$F = \frac{2 * \mathrm{precision} * \mathrm{recall}}{\mathrm{precision} + \mathrm{recall}}$$

- $\mathrm{precision} = 0.9$
- $\mathrm{recall} = 0.1$
- $G = 0.3$

- $\mathrm{precision} = 0.9$
- $\mathrm{recall} = 0.1$
- $F = 0.18$