

Введение в анализ данных

Лекция 7

Линейная классификация

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2020

Метрики качества ранжирования

Классификатор

- Линейный классификатор:

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - t) = 2[\langle w, x \rangle > t] - 1$$

- $\langle w, x \rangle$ — оценка принадлежности классу +1
- Нередко $t = 0$

Оценка принадлежности

- Как оценить качество $b(x)$?
- Порог выбирается позже
- Порог зависит от ограничений на точность или полноту

Оценка принадлежности

- Высокий порог:
 - Мало объектов относим к +1
 - Точность выше
 - Полнота ниже
- Низкий порог:
 - Много объектов относим к +1
 - Точность ниже
 - Полнота выше


Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности



-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

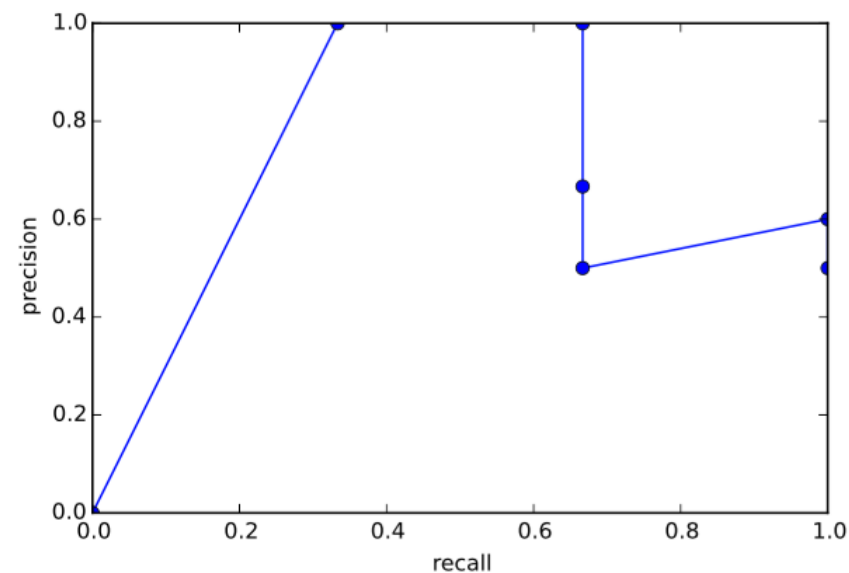
-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

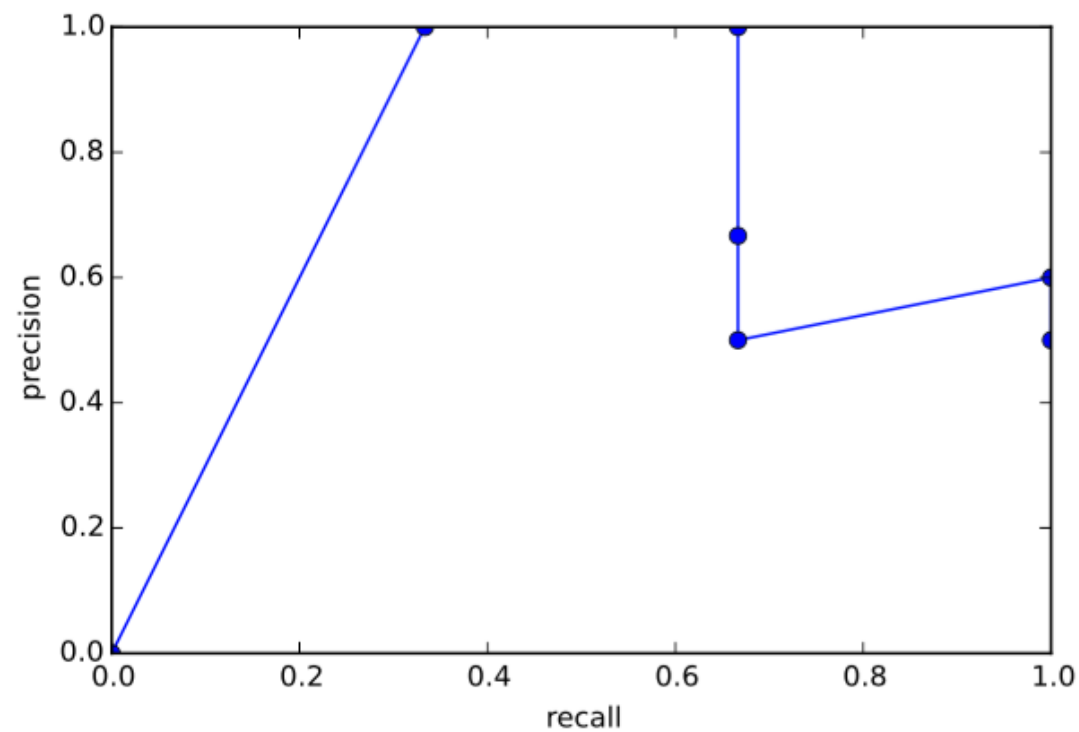
- Пример: кредитный скоринг
- $b(x)$ — оценка вероятности возврата кредита
- $a(x) = [b(x) > 0.5]$
- precision = 0.1, recall = 0.7
- В чем дело — в пороге или в алгоритме?

PR-кривая

- Кривая точности-полноты
- Ось X — полнота
- Ось Y — точность
- Точки — значения точности и полноты при последовательных порогах

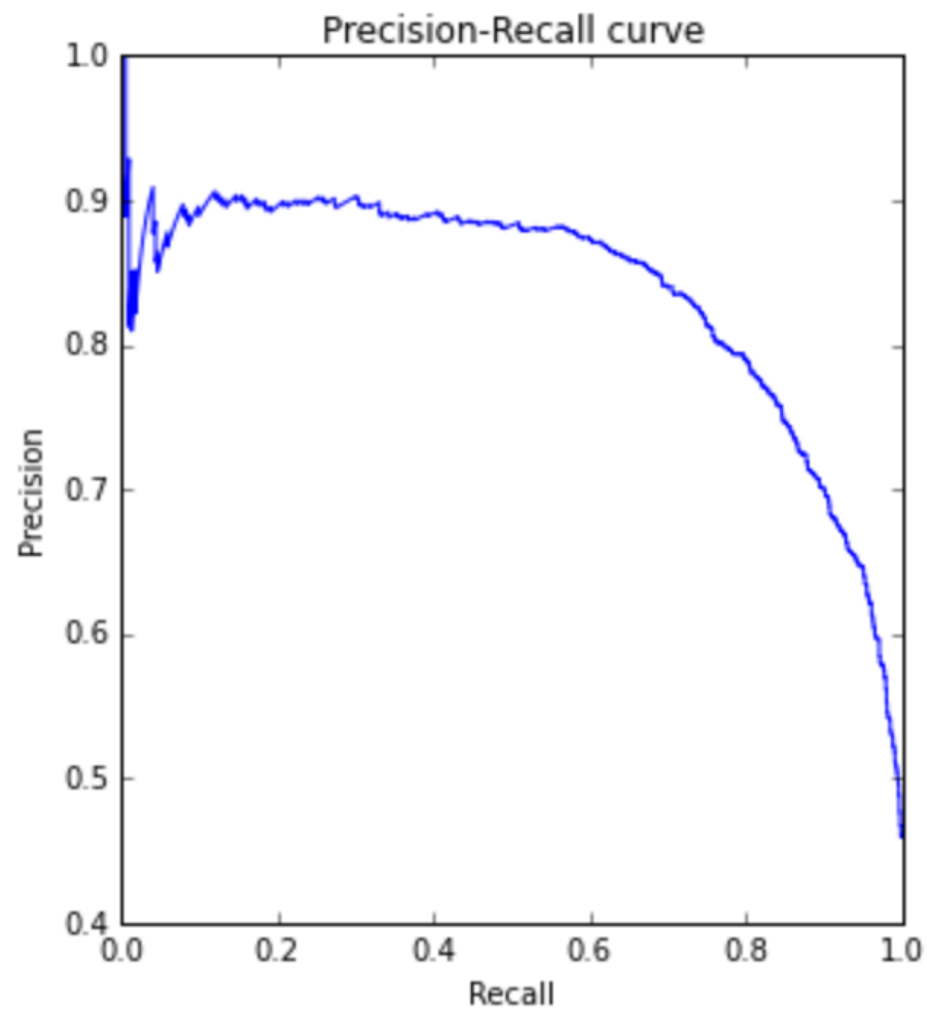


PR-кривая



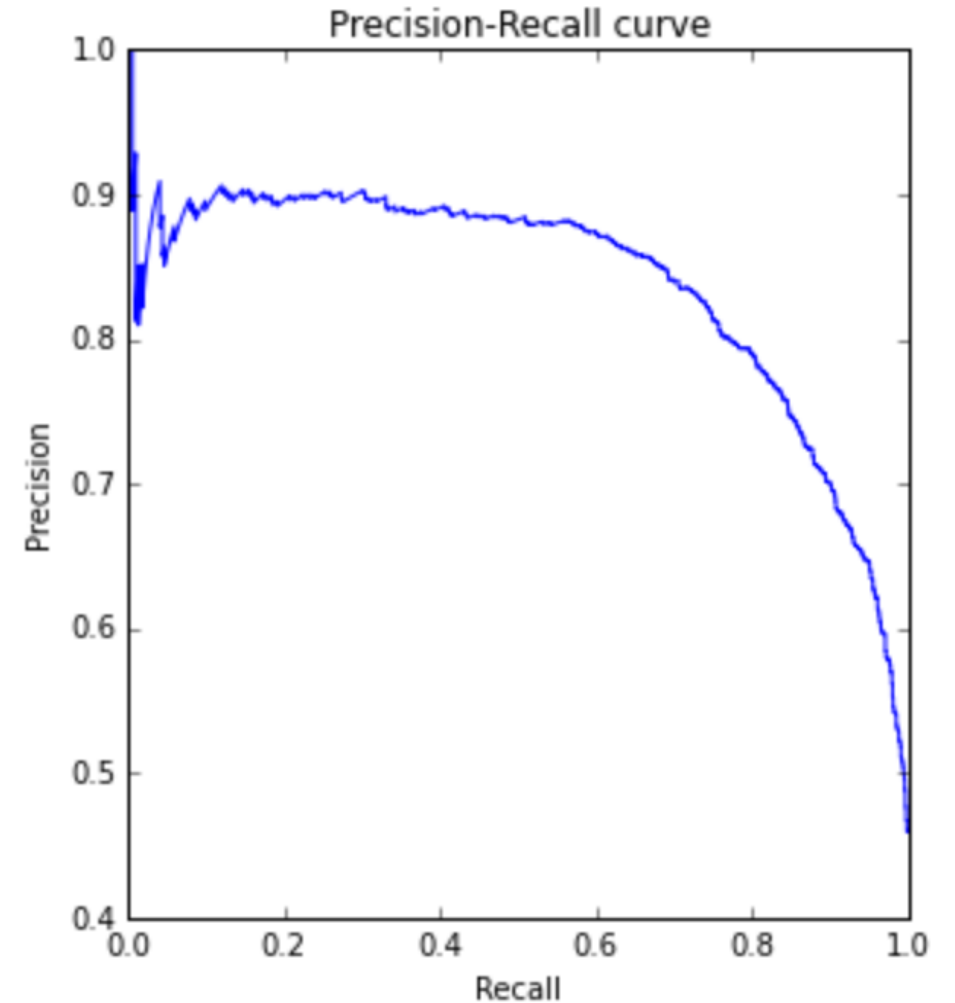
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

PR-кривая в реальности

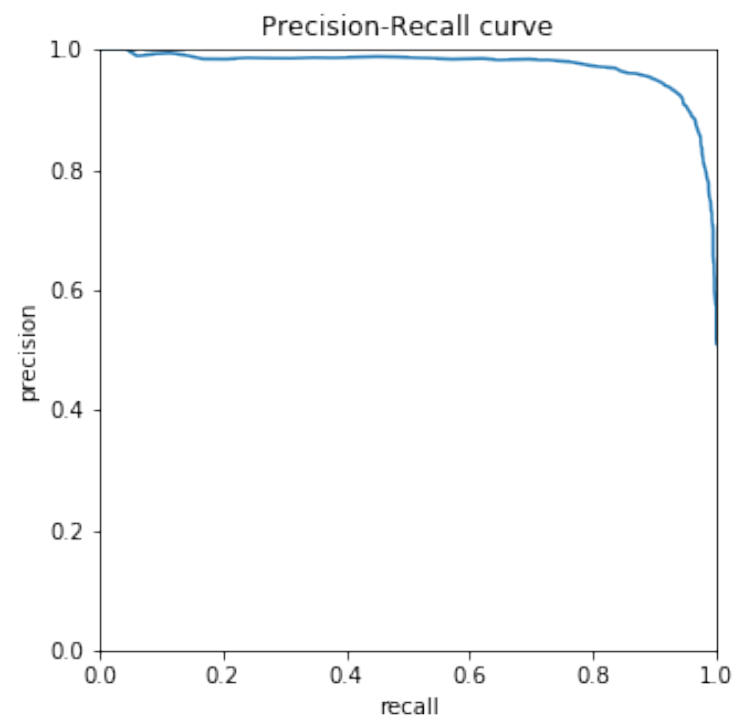
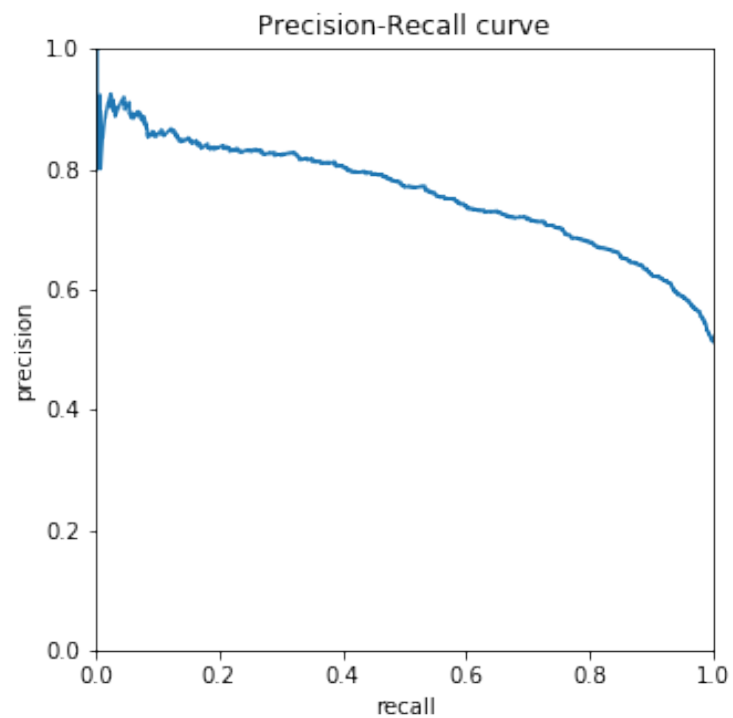


PR-кривая

- Левая точка: $(0, 1)$
- Правая точка: $(1, r)$, r — доля положительных объектов
- Для идеального классификатора проходит через $(1, 1)$
- AUC-PRC — площадь под PR-кривой



PR-кривая



ROC-кривая

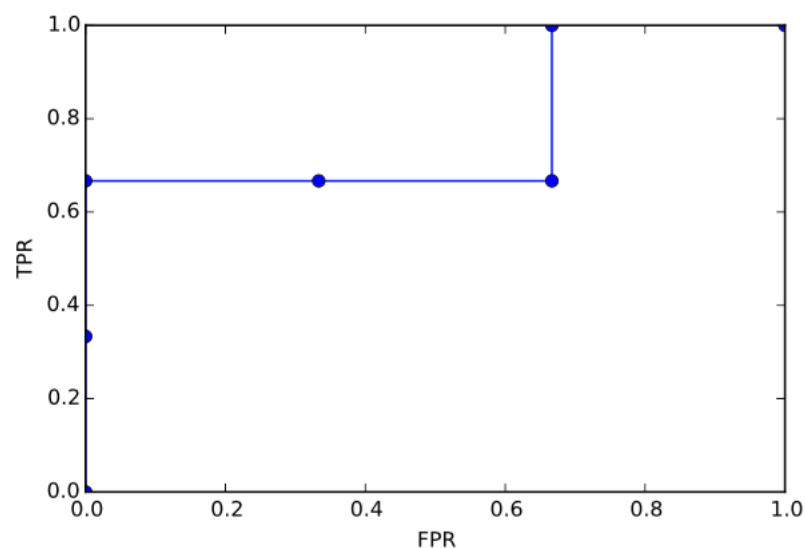
- Receiver Operating Characteristic

- Ось X — False Positive Rate

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$



ROC-кривая

- Receiver Operating Characteristic

- Ось X — False Positive Rate

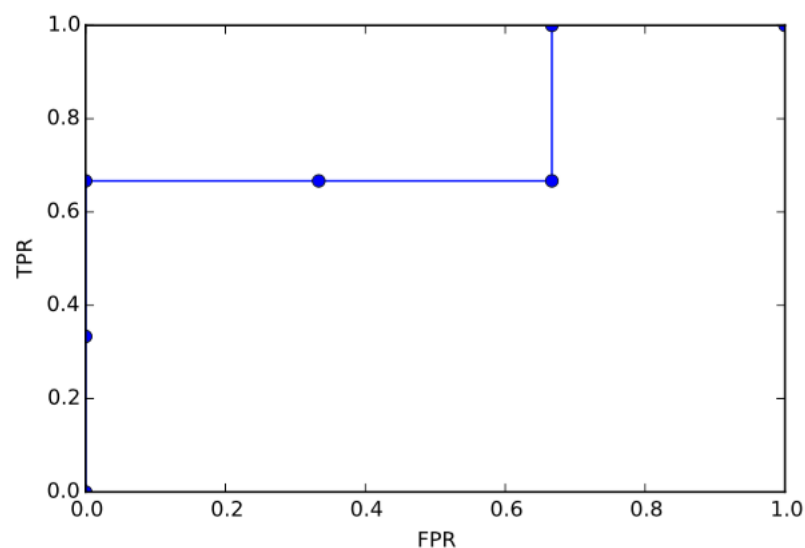
$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

Число
отрицательных
объектов

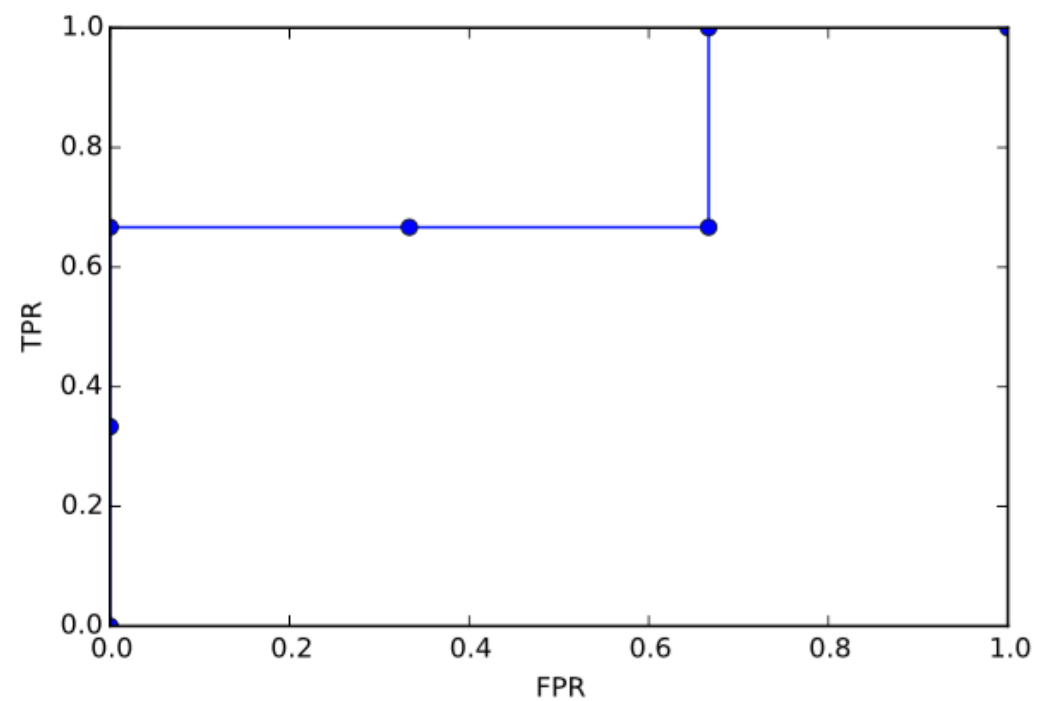
- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$

Число
положительных
объектов

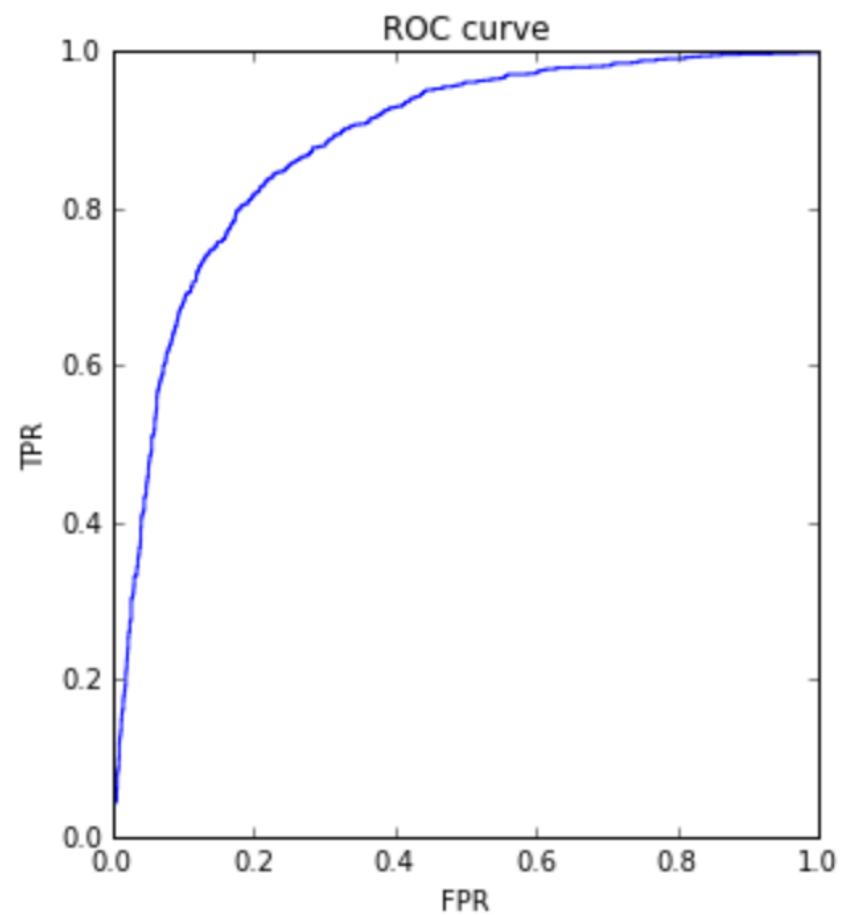


ROC-кривая



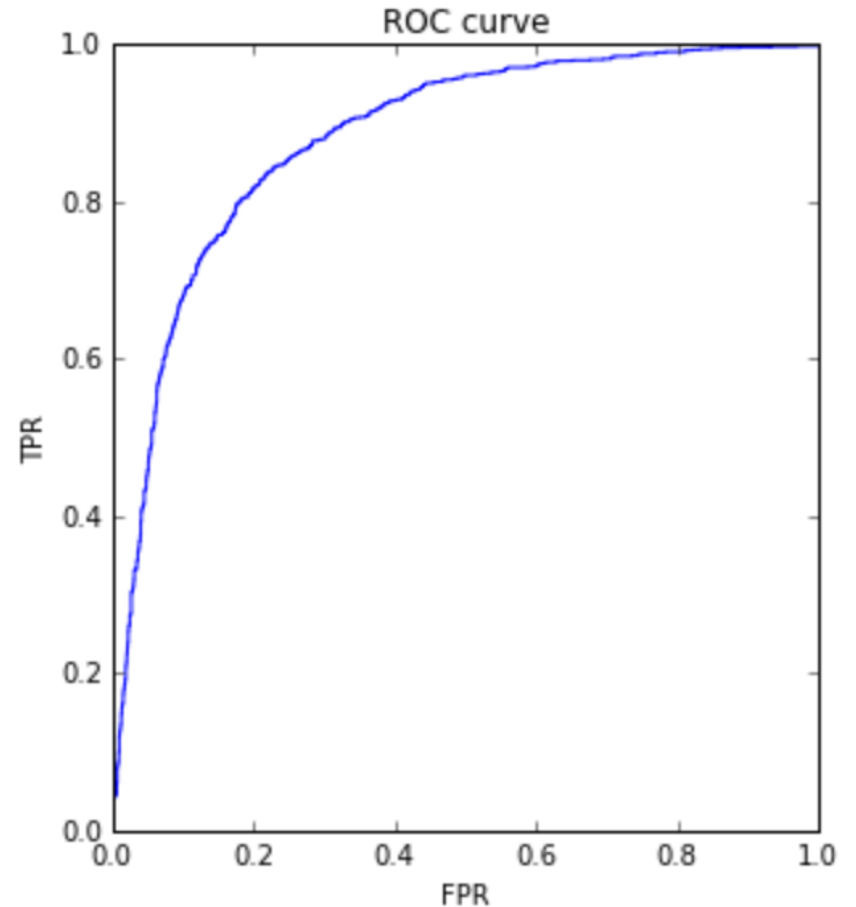
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

ROC-кривая в реальности

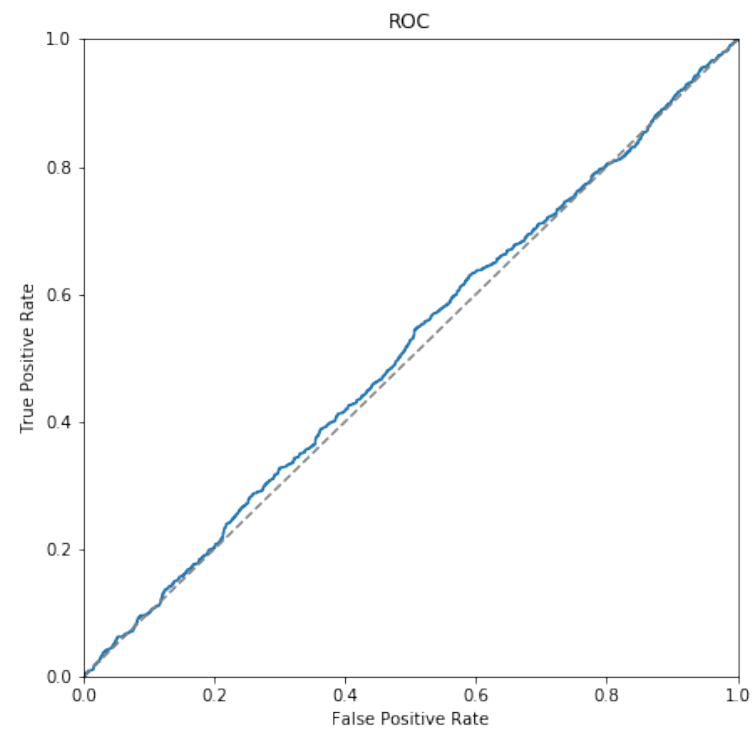
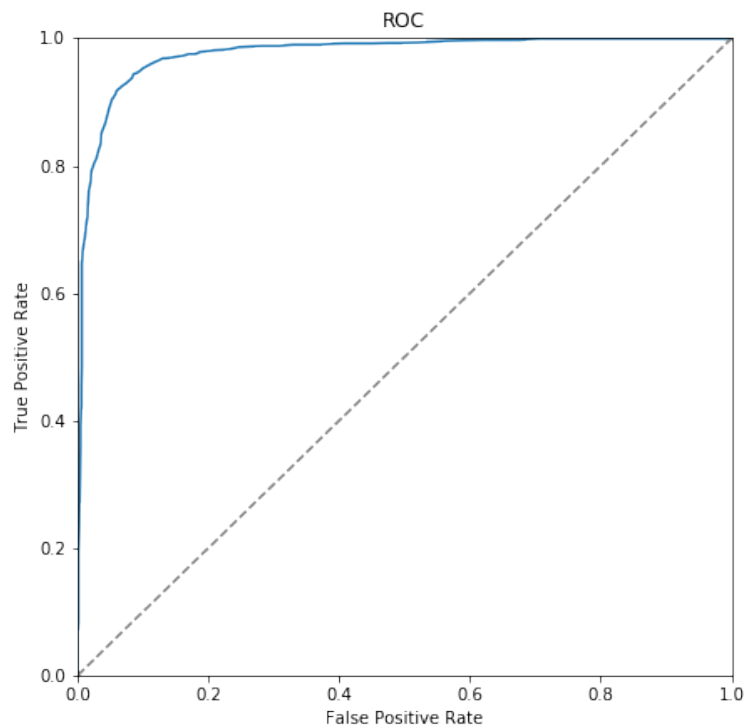


ROC-кривая

- Левая точка: $(0, 0)$
- Правая точка: $(1, 1)$
- Для идеального классификатора проходит через $(0, 1)$
- AUC-ROC — площадь под ROC-кривой



ROC-кривая



AUC-ROC

$$FPR = \frac{FP}{FP+TN};$$

$$TPR = \frac{TP}{TP+FN}$$

- FPR и TPR нормируются на размеры классов
- AUC-ROC не поменяется при изменении баланса классов
- Идеальный алгоритм: $AUC-ROC = 1$
- Худший алгоритм: $AUC-ROC \approx 0.5$

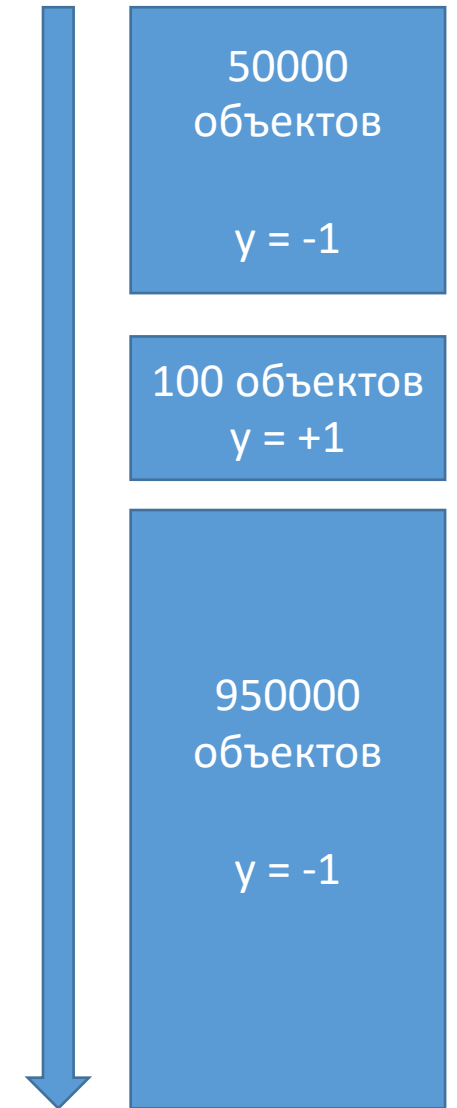
AUC-PRC

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP+FP}; \quad \text{recall} = \frac{TP}{TP+FN}$$

- Точность поменяется при изменении баланса классов
- AUC-PRC идеального алгоритма зависит от баланса классов
- Проще интерпретировать, если выборка несбалансированная
- Лучше, если задачу надо решать в терминах точности и полноты

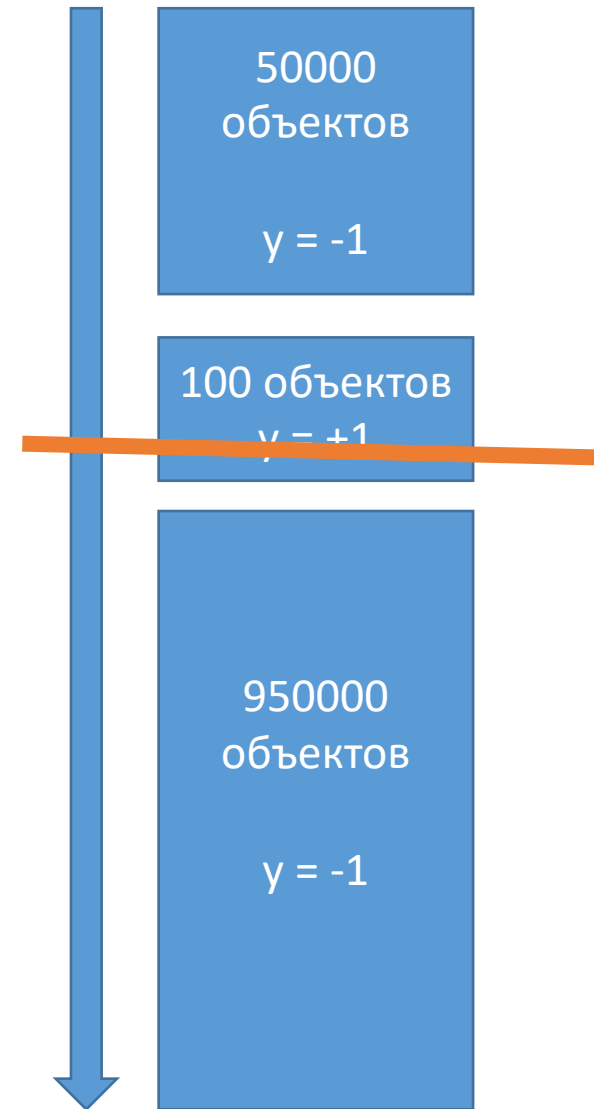
Пример

- AUC-ROC = 0.95
- AUC-PRC = 0.001



Пример

- Выберем конкретный классификатор
- $a(x) = 1$ — 50095 объектов
- Из них FP = 50000, TP = 95
- TPR = 0.95, FPR = 0.05
- precision = 0.0019, recall = 0.95



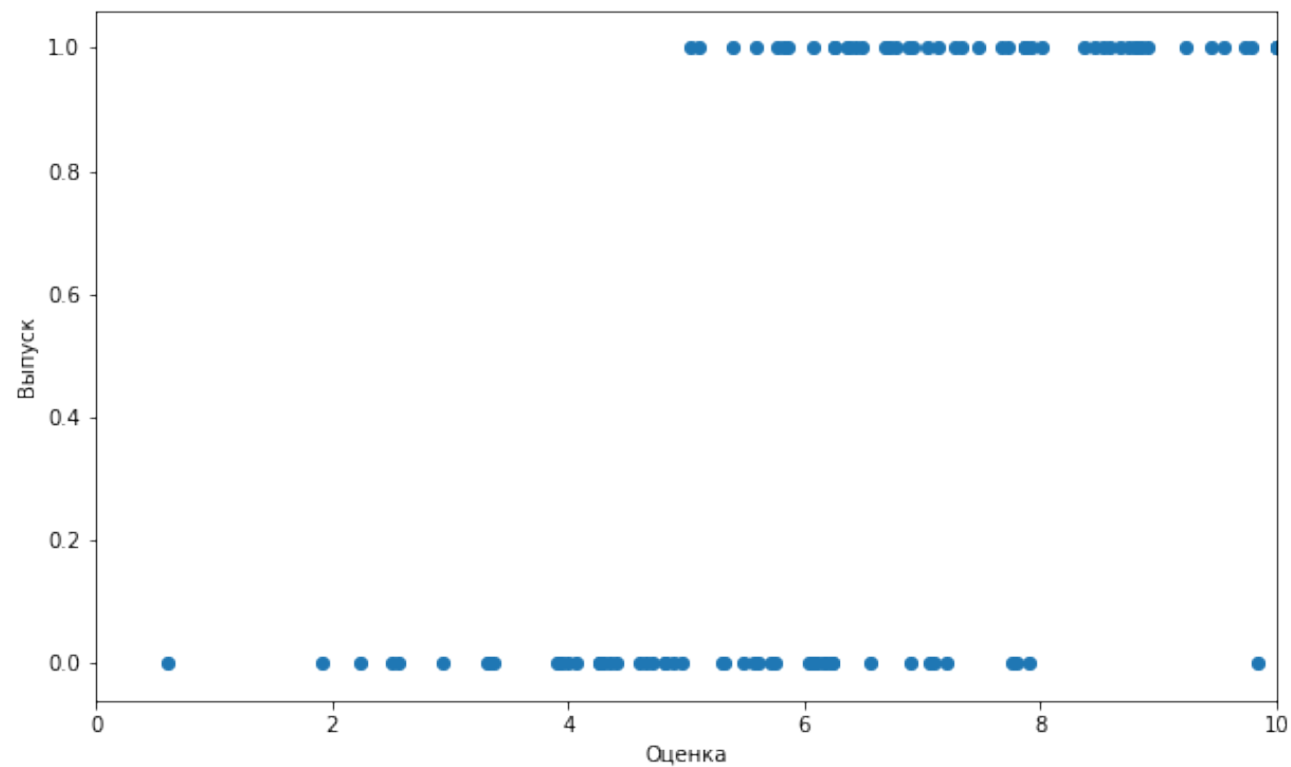
Логистическая регрессия:
простое объяснение

Логистическая регрессия

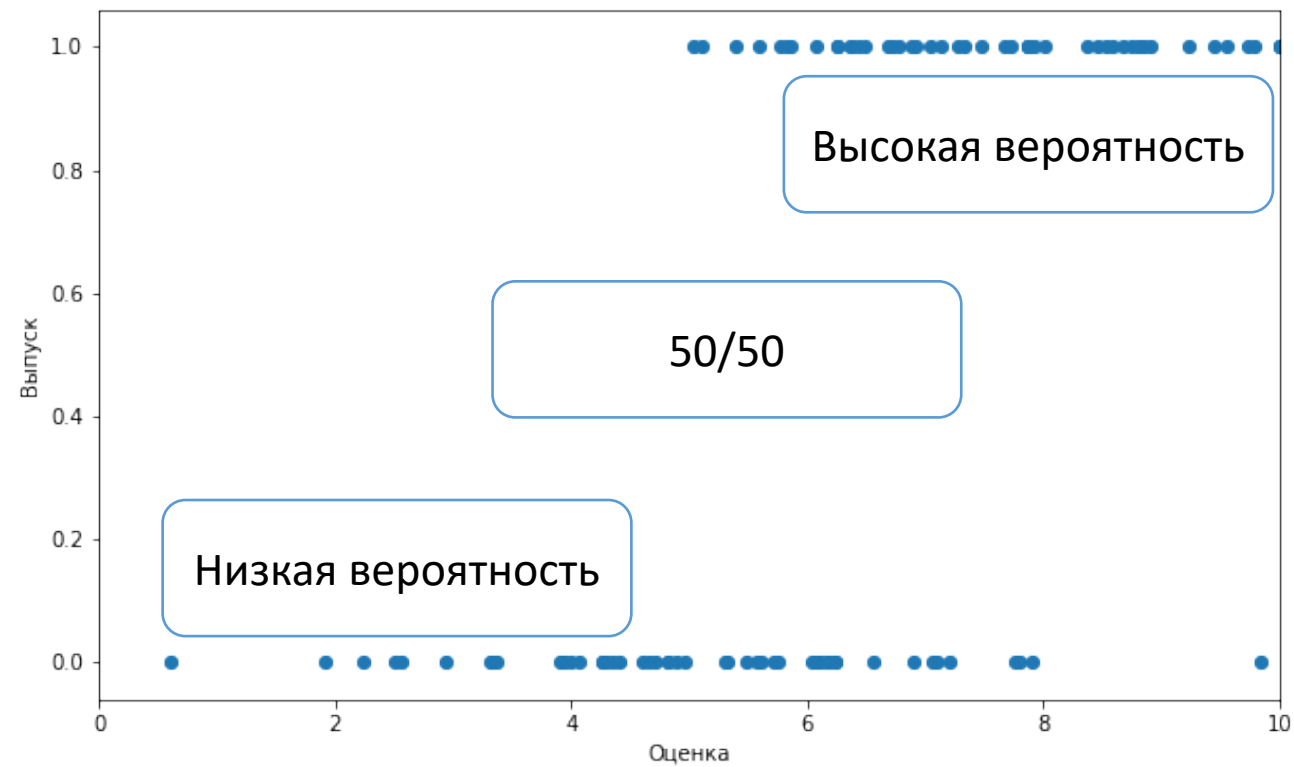
- Решаем задачу бинарной классификации: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$
- Минимизация верхней оценки:

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

Предсказание вероятностей



Предсказание вероятностей



Предсказание вероятностей

- Кредитный скоринг
- Стратегия: выдавать кредит только клиентам с $b(x) > 0.9$
- 10% невозвращённых кредитов — нормально

Предсказание вероятностей

- Баннерная реклама
- $b(x)$ — вероятность, что пользователь кликнет по рекламе
- $c(x)$ — прибыль в случае клика
- $c(x)b(x)$ — хотим оптимизировать

Предсказание вероятностей

- Прогнозирование оттока клиентов
- Медицинская диагностика
- Поисковое ранжирование (насколько веб-страница соответствует запросу?)

Предсказание вероятностей

Будем говорить, что модель $b(x)$ предсказывает вероятности, если среди объектов с $b(x) = p$ доля положительных равна p .

Предсказание вероятностей



Линейный классификатор

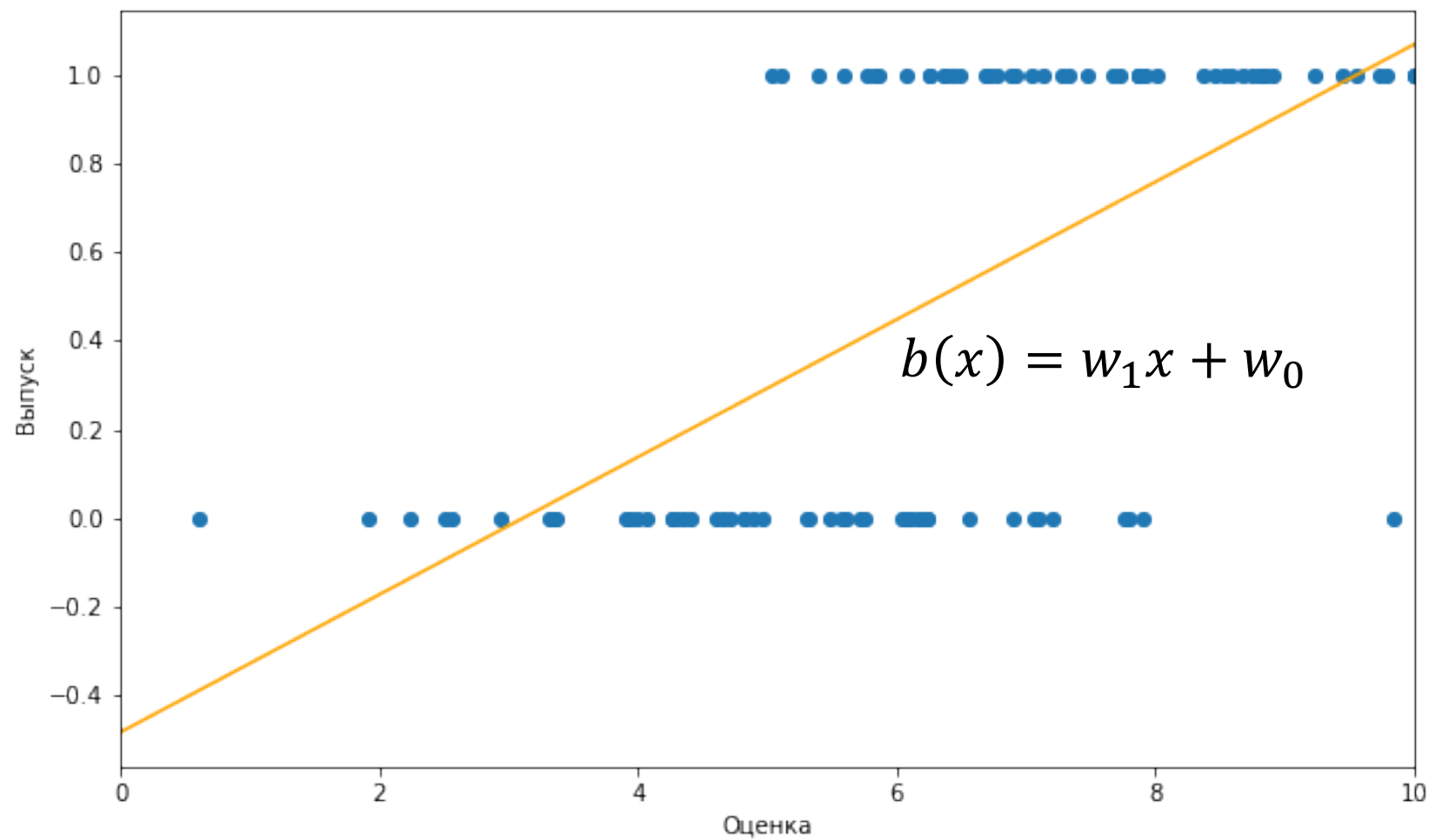
$$a(x) = \text{sign } \langle w, x \rangle$$

- Обучим как-нибудь — например, на логистическую функцию потерь:

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

- Может, $\langle w, x \rangle$ сойдёт за оценку?

Предсказание вероятностей

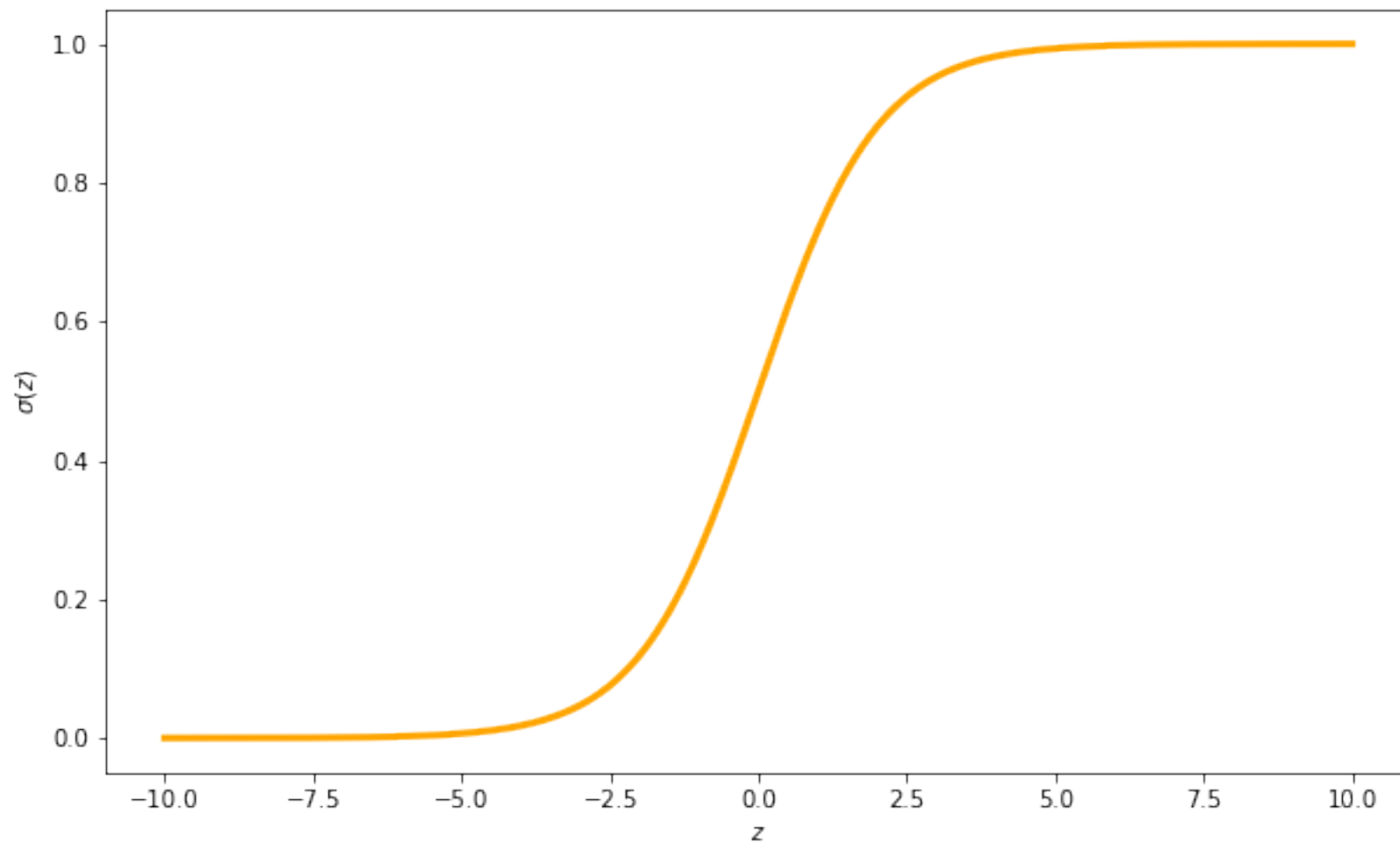


Линейный классификатор

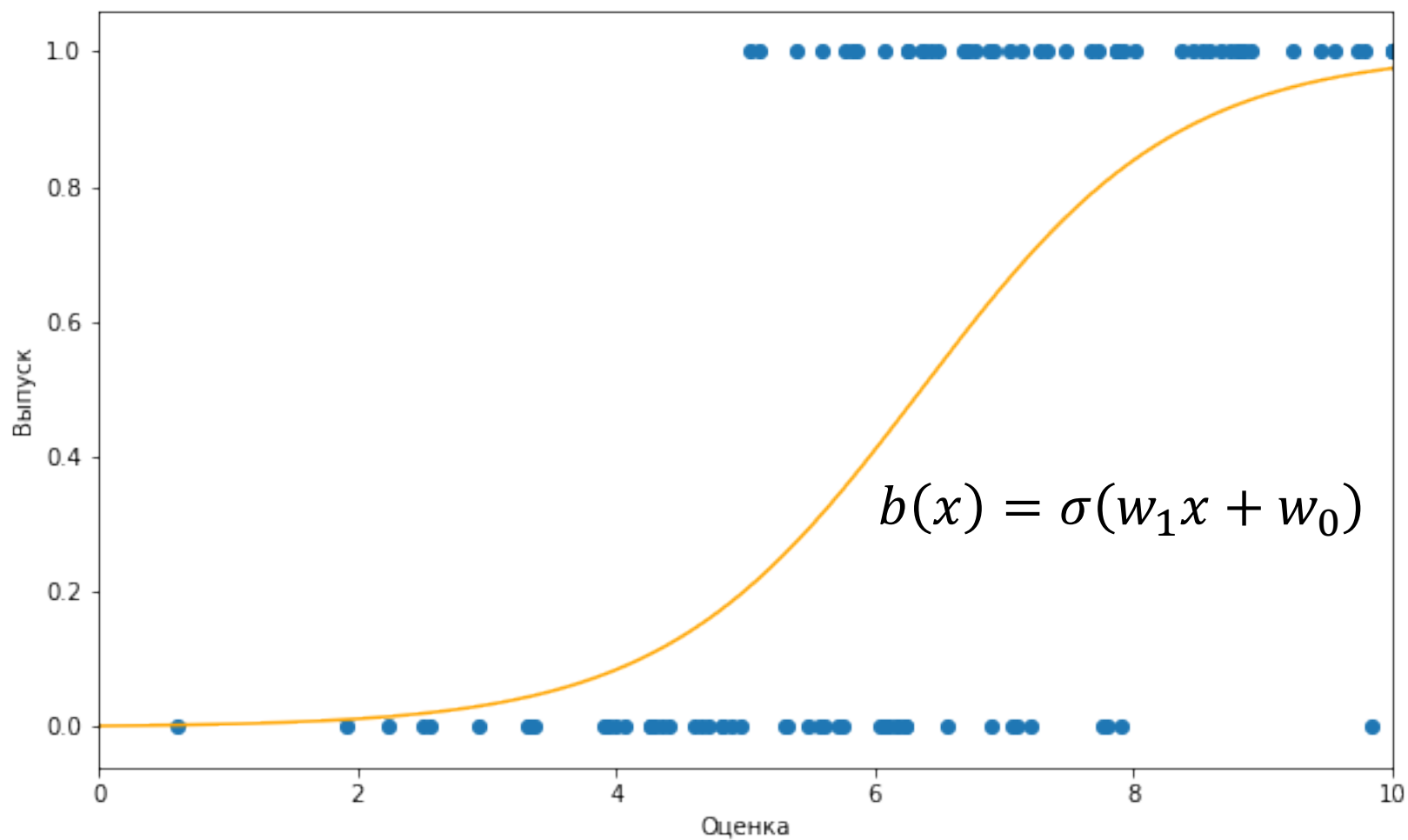
- Переведём выход модели на отрезок $[0, 1]$
- Например, с помощью сигмоиды:

$$\sigma(\langle w, x \rangle) = \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)}$$

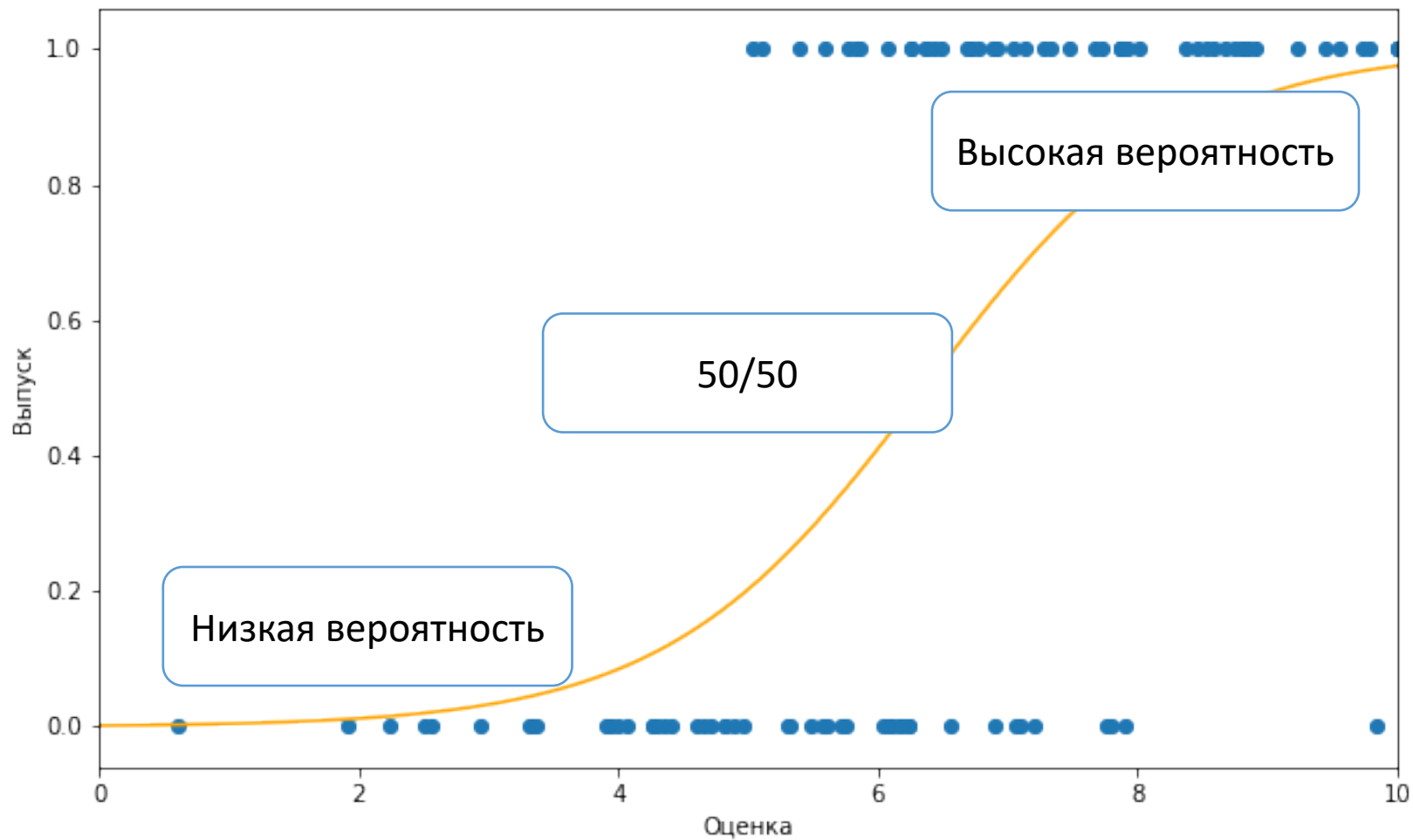
Сигмоида



Предсказание вероятностей



Предсказание вероятностей



Предсказание вероятностей

- Модель для оценивания вероятностей:

$$b(x) = \sigma(\langle w, x \rangle)$$

- Как обучать?

Предсказание вероятностей

- Модель для оценивания вероятностей:

$$b(x) = \sigma(\langle w, x \rangle)$$

- Как обучать?
- Если $y_i = +1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 1$
- Если $y_i = -1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 0$

Предсказание вероятностей

- Модель для оценивания вероятностей:

$$b(x) = \sigma(\langle w, x \rangle)$$

- Как обучать?
- Если $y_i = +1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 1$ или $\langle w, x_i \rangle \rightarrow +\infty$
- Если $y_i = -1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 0$ или $\langle w, x_i \rangle \rightarrow -\infty$

Предсказание вероятностей

- Если $y_i = +1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 1$ или $\langle w, x_i \rangle \rightarrow +\infty$
- Если $y_i = -1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 0$ или $\langle w, x_i \rangle \rightarrow -\infty$
- То есть задача — сделать отступы на всех объектах максимальными

$$y_i \langle w, x_i \rangle \rightarrow \max_w$$

Предсказание вероятностей

- Если $y_i = +1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 1$
- Если $y_i = -1$, то $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \rightarrow 0$

$$-\sum_{i=1}^{\ell} \{ [y_i = 1] \sigma(\langle w, x_i \rangle) + [y_i = -1] (1 - \sigma(\langle w, x_i \rangle)) \} \rightarrow \min_w$$

Предсказание вероятностей

$$-\sum_{i=1}^{\ell} \{ [y_i = 1] \sigma(\langle w, x_i \rangle) + [y_i = -1] (1 - \sigma(\langle w, x_i \rangle)) \} \rightarrow \min_w$$

- Если $y_i = +1$ и $\sigma(\langle w, x_i \rangle) = 0$, то штраф равен 1
- Надо строже!

Предсказание вероятностей

$$-\sum_{i=1}^{\ell} \{ [y_i = 1] \log \sigma(\langle w, x_i \rangle) + [y_i = -1] \log(1 - \sigma(\langle w, x_i \rangle)) \} \rightarrow \min_w$$

- Если $y_i = +1$ и $\sigma(\langle w, x_i \rangle) = 0$, то штраф равен $-\log 0 = +\infty$
- Достаточно строго
- Функция потерь называется **log-loss**

$$L(y, z) = -[y = 1] \log z - [y = -1] \log(1 - z)$$

Логистическая регрессия

$$\begin{aligned} & - \sum_{i=1}^{\ell} \{ [y_i = 1] \log \sigma(\langle w, x_i \rangle) + [y_i = -1] \log(1 - \sigma(\langle w, x_i \rangle)) \} = \\ & - \sum_{i=1}^{\ell} \left\{ [y_i = 1] \log \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)} + [y_i = -1] \log \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)} \right) \right\} = \\ & - \sum_{i=1}^{\ell} \left\{ [y_i = 1] \log \frac{1}{1 + \exp(-\langle w, x \rangle)} + [y_i = -1] \log \left(\frac{1}{1 + \exp(\langle w, x \rangle)} \right) \right\} = \\ & \sum_{i=1}^{\ell} \{ [y_i = 1] \log(1 + \exp(-\langle w, x \rangle)) + [y_i = -1] \log(1 + \exp(\langle w, x \rangle)) \} = \\ & \sum_{i=1}^{\ell} \log(1 + \exp(-y_i \langle w, x_i \rangle)) \end{aligned}$$