Линейная классификация - 2

Елена Кантонистова

ПЛАН ЛЕКЦИИ

1) Логистическая регрессия (вероятностное обоснование)
2) Метрики качества классификации (вспоминаем)

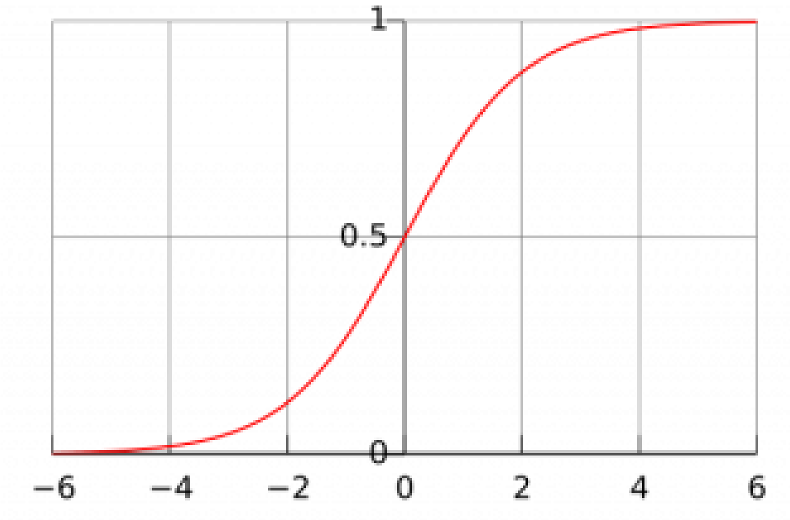
ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ

Хотим предсказывать не классы, а вероятности классов.

- Линейная регрессия: $a(x, w) = (x, w) = w^T x \in \mathbb{R}$
- Логистическая регрессия: $\boldsymbol{a(x, w) = \sigma(w^T x)}$,

где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ - сигмоида (логистическая функция),

$\sigma(z) \in (0; 1)$.



Логистическая регрессия: $\boldsymbol{a(x, w) = \frac{1}{1+e^{-w^T x}}}$

ВЕРОЯТНОСТНЫЙ СМЫСЛ

Утверждение. $a(x, w)$ **–** вероятность того**,** что $y = +1$ на объекте x**,** т.е.

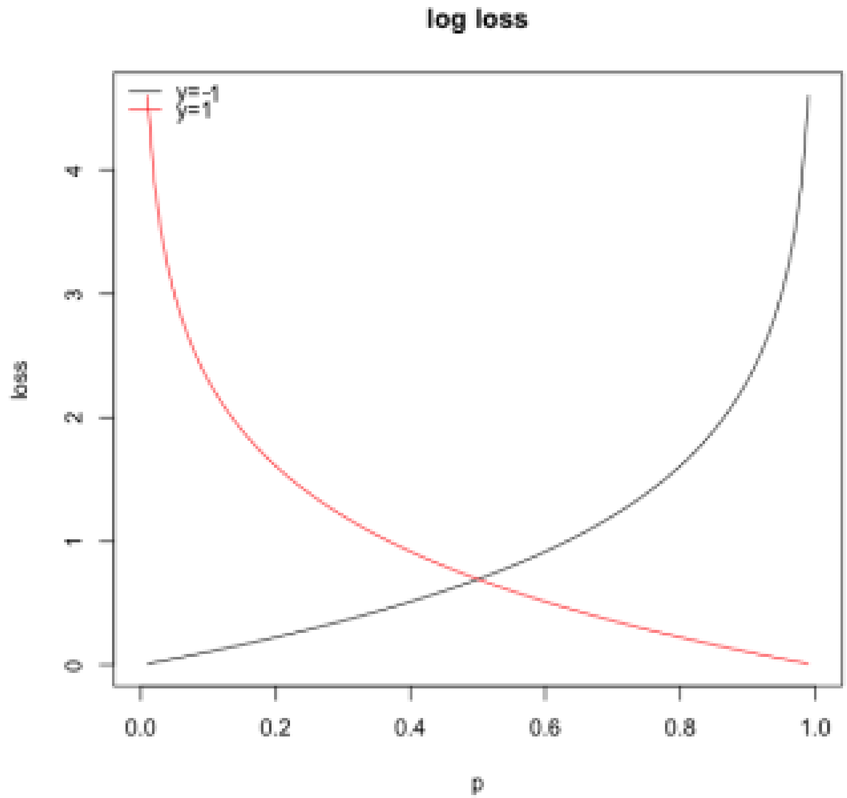
$$\boldsymbol{a(x, w) = P(y = +1 | x; w)}$$

Доказательство. Дальше в лекции.

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ЛОГИСТИЧЕСКОЙ РЕГРЕССИИ

Возьмем логистическую функцию потерь (***log-loss***):

$$Q(w) = -\sum_{i=1}^{l}([y_i = +1] \cdot \log(a(x_i, w)) + [y_i = -1] \cdot \log(1 - a(x_i, w)))$$



ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ: ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположение: В каждой точке x пространства объектов задана вероятность $p(y = +1|x)$

Объекты с одинаковым признаковым описанием могут иметь разные значения целевой переменной.

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположение: В каждой точке x пространства объектов задана вероятность $p(y = +1|x)$

Объекты с одинаковым признаковым описанием могут иметь разные значения целевой переменной.

Цель: построить алгоритм $b(x)$, в каждой точке x предсказывающий $p(y = +1|x)$.

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположение: В каждой точке x пространства объектов задана вероятность $p(y = +1|x)$

Объекты с одинаковым признаковым описанием могут иметь разные значения целевой переменной.

Цель: построить алгоритм $b(x)$, в каждой точке x предсказывающий $p(y = +1|x)$.

Комментарий: *пока что мы будем решать задачу в общем виде, то есть у нас нет ограничений на вид алгоритма $b(x)$ и на вид функции потерь $L(y, b)$.*

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- Пусть объект x встречается в выборке n раз с ответами $\{y_1, \dots, y_n\}$. Хотим, чтобы алгоритм выдавал вероятность положительного класса:

$$b_*(x) = \underset{b \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, b) \approx p(y = +1|x)$$

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- Пусть объект x встречается в выборке n раз с ответами $\{y_1, \dots, y_n\}$. Хотим, чтобы алгоритм выдавал вероятность положительного класса:

$$b_*(x) = \operatorname*{argmin}_{b \in \mathbb{R}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, b) \approx p(y = +1|x)$$

По закону больших чисел при $n \to \infty$ получаем

$$b_*(x) = \operatorname*{argmin}_{b \in \mathbb{R}} E[L(y, b)|x]$$

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

- Пусть объект x встречается в выборке n раз с ответами $\{y_1, \dots, y_n\}$. Хотим, чтобы алгоритм выдавал вероятность положительного класса:

$$b_*(x) = \underset{b \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(y_i, b) \approx p(y = +1|x)$$

По закону больших чисел при $n \to \infty$ получаем

$$b_*(x) = \underset{b \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} E[L(y, b)|x]$$

Отсюда получаем ***условие на функцию потерь***:

$$\mathbf{argmin}\, \boldsymbol{E[L(y, b)|x] = p(y = +1|x)}$$

ФУНКЦИИ ПОТЕРЬ

Подходят:

- **Квадратичная**

$$L(y, z) = (y - z)^2$$

- **Логистическая (log-loss)**

$$L(y, z) = [y = +1] \cdot \log\big(b(x, w)\big) + [y = -1] \cdot \log(1 - b(x, w))$$

Не подходят:

- **Модуль**

$$L(y, z) = |\mathrm{y} - \mathrm{z}|$$

ПРАВДОПОДОБИЕ И LOG-LOSS

- Вероятности, которые выдает алгоритм $b(x)$, должны согласовываться с выборкой
- Вероятность того, что в выборке встретится объект x с классом y:

$$b(x)^{[y=+1]} \cdot \big(1 - b(x)\big)^{[y=-1]}$$

ПРАВДОПОДОБИЕ И LOG-LOSS

- Вероятности, которые выдает алгоритм $b(x)$, должны согласовываться с выборкой
- Вероятность того, что в выборке встретится объект x с классом y:

$$b(x)^{[y=+1]} \cdot \big(1 - b(x)\big)^{[y=-1]}$$

Правдоподобие выборки:

$$(b, X) = \prod_{i=1}^{l} b(x_i)^{[y_i=+1]} \cdot \big(1 - b(x_i)\big)^{[y_i=-1]}$$

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ

- Для нахождения оптимальных параметров алгоритма можно воспользоваться методом максимума правдоподобия (ММП):

$$(b, X) = \prod_{i=1}^{l} b(x_i)^{[y_i=+1]} \cdot \left(1 - b(x_i)\right)^{[y_i=-1]} \to \max_{b}$$

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ

- Для нахождения оптимальных параметров алгоритма можно воспользоваться методом максимума правдоподобия (ММП):

$$(b, X) = \prod_{i=1}^{l} b(x_i)^{[y_i=+1]} \cdot \big(1 - b(x_i)\big)^{[y_i=-1]} \to \max_b$$

- Прологарифмируем правдоподобие и поставим перед ним минус, получим следующую эквивалентную задачу:

$$-\sum_{i=1}^{l}([y_i = +1] \log b(x_i) + [y_i = -1] \log(1 - b(x_i))) \to \min_b$$

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ

- Для нахождения оптимальных параметров алгоритма можно воспользоваться методом максимума правдоподобия (ММП):

$$(b, X) = \prod_{i=1}^{l} b(x_i)^{[y_i=+1]} \cdot \left(1 - b(x_i)\right)^{[y_i=-1]} \to \max_b$$

- Прологарифмируем правдоподобие и поставим перед ним минус, получим следующую эквивалентную задачу:

Это log-loss!

$$-\sum_{i=1}^{l} \left([y_i = +1] \log b(x_i) + [y_i = -1] \log(1 - b(x_i))\right) \to \min_b$$

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ

- Для нахождения оптимальных параметров алгоритма можно воспользоваться методом максимума правдоподобия (ММП):

$$(b, X) = \prod_{i=1}^{l} b(x_i)^{[y_i=+1]} \cdot \big(1 - b(x_i)\big)^{[y_i=-1]} \to \max_b$$

- Прологарифмируем правдоподобие и поставим перед ним минус, получим следующую эквивалентную задачу:

Это log-loss!

$$-\sum_{i=1}^{l} ([y_i = +1] \log b(x_i) + [y_i = -1] \log(1 - b(x_i))) \to \min_b$$

Вывод: *логистическая функция потерь корректно предсказывает вероятности.*

ВЫБОР АЛГОРИТМА $b(x)$

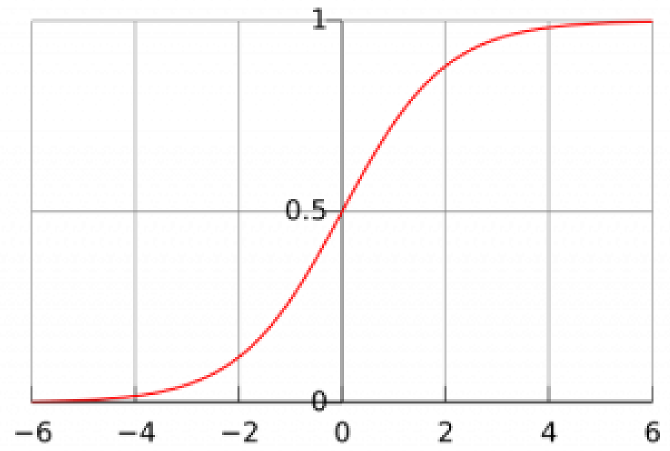
- Хотим, чтобы алгоритм $b(x)$ возвращал числа из отрезка $[0,1]$.

ВЫБОР АЛГОРИТМА $b(x)$

- Хотим, чтобы алгоритм $b(x)$ возвращал числа из отрезка $[0, 1]$.
- Можно взять $b(x) = \sigma(w^T x)$, где σ – любая монотонно неубывающая функция с областью значений $[0, 1]$.

ВЫБОР АЛГОРИТМА $b(x)$

- Хотим, чтобы алгоритм $b(x)$ возвращал числа из отрезка $[0, 1]$.
- Можно взять $b(x) = \sigma(w^T x)$, где σ – любая монотонно неубывающая функция с областью значений $[0, 1]$.
- Возьмем ***сигмоиду***: $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$



СМЫСЛ (w, x) В ЛОГИСТИЧЕСКОЙ РЕГРЕССИИ

- Логистическая регрессия в каждой точке x предсказывает вероятность того, что x принадлежит положительному классу $p(y=+1|x)$.
- То есть $p(y=+1|x) = \frac{1}{1+e^{-w^T x}}$. Отсюда можно выразить $(w, x) = w^T x$:

$$\boxed{(w, x) = w^T x = \log \frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)}}$$

СМЫСЛ (w, x) В ЛОГИСТИЧЕСКОЙ РЕГРЕССИИ

- Логистическая регрессия в каждой точке x предсказывает вероятность того, что x принадлежит положительному классу $p(y=+1|x)$.
- То есть $p(y=+1|x) = \frac{1}{1+e^{-w^T x}}$. Отсюда можно выразить $(w, x) = w^T x$:

$$\boxed{(w, x) = w^T x = \log \frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)}}$$

- Величина $\log \frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)}$ называется ***логарифм отношения шансов (log odds)***. Из формулы видно, что величина может принимать любое значение.

ЛОГАРИФМИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ

Утверждение. Логарифмическая функция потерь может быть записана в виде

$$\boldsymbol{L(b, X) = \sum_{i=1}^{l} \log(1 + e^{-y_i(w,x)})}$$

Идея доказательства:

Подставляем явный вид сигмоиды в логарифмическую функцию потерь:

$$-\sum_{i=1}^{l}([y_i = +1] \log \sigma(w^T x_i) + [y_i = -1] \log(1 - \sigma(w^T x_i))) \to \min_{w}$$

МЕТРИКИ КЛАССИФИКАЦИИ (НА ДОСКЕ)

- Какие метрики помните?
- Какие у них есть особенности?