Основы машинного обучения

Лекция 10

Логистическая регрессия и метод опорных векторов

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2025

Логистическая регрессия: простое объяснение

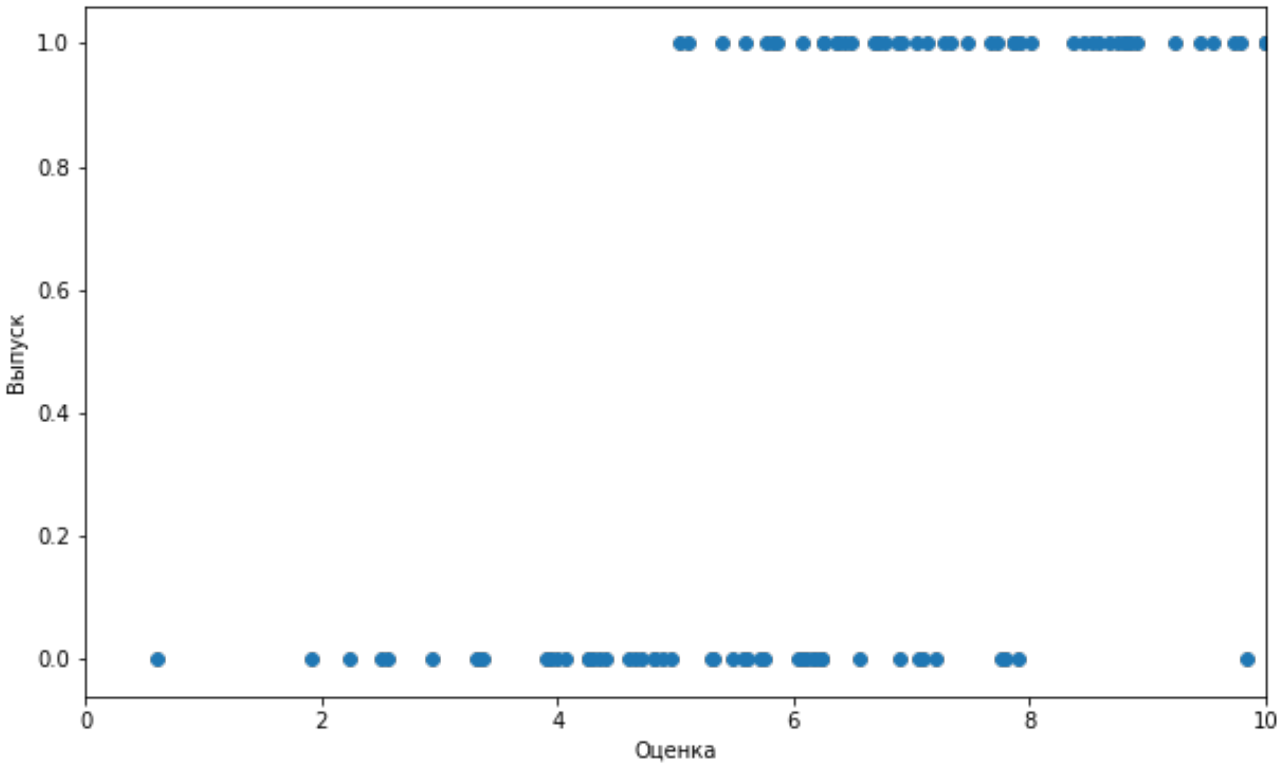
Логистическая регрессия

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

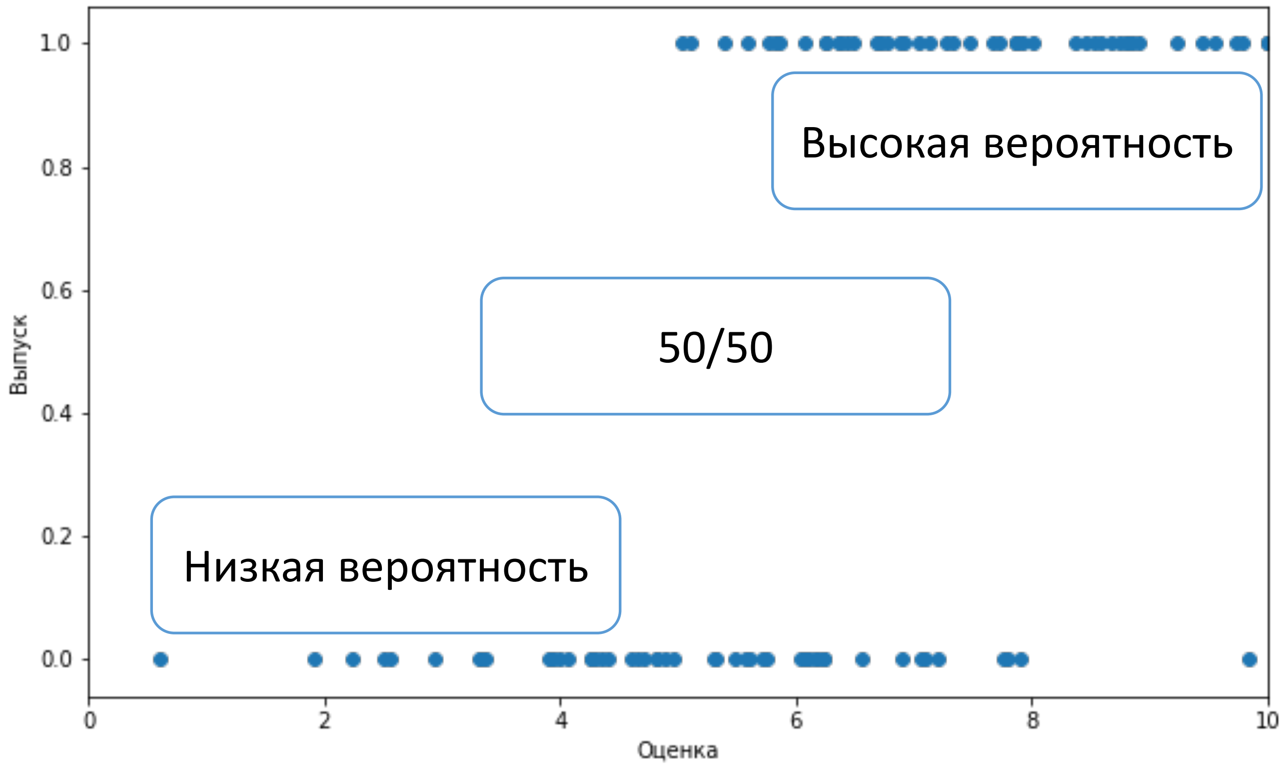
- Минимизация верхней оценки:

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

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

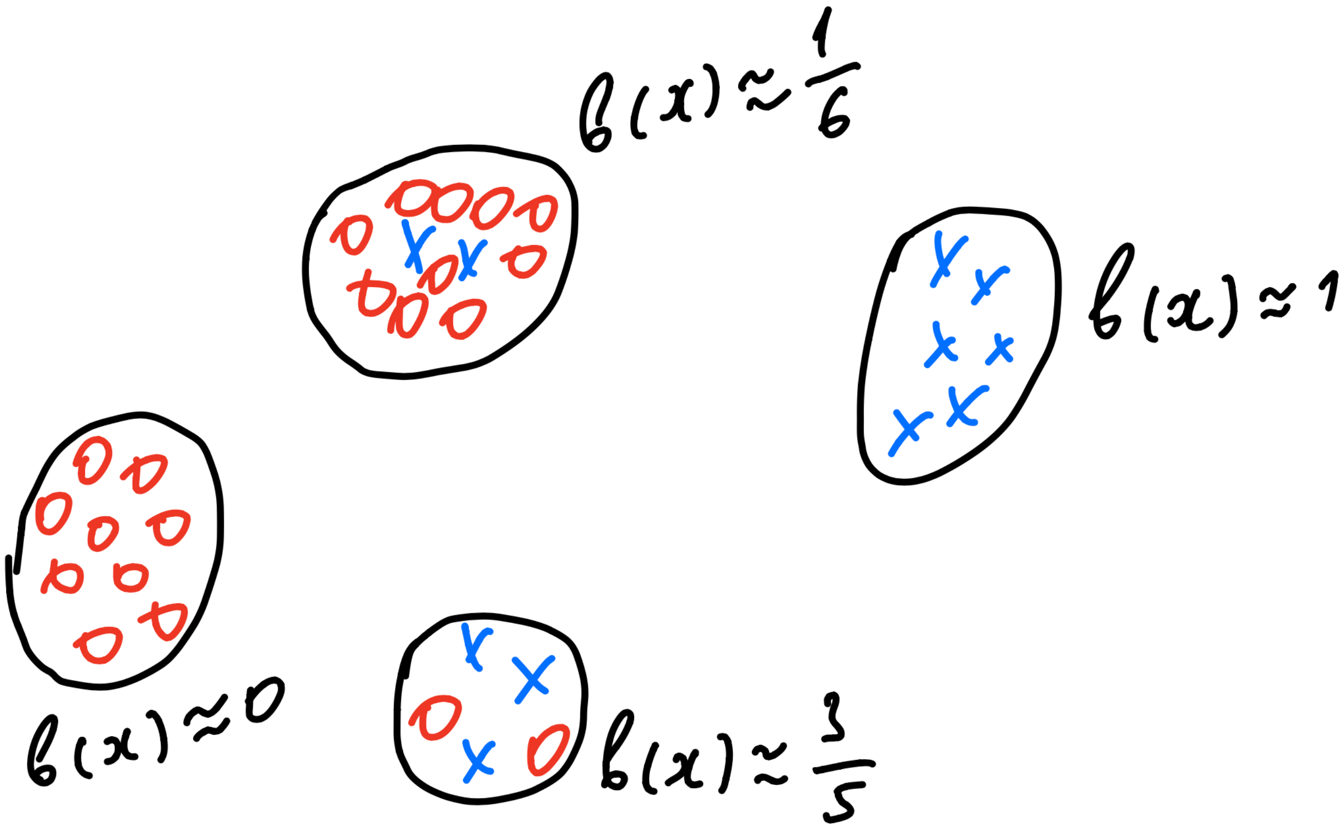
Предсказание вероятностей

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

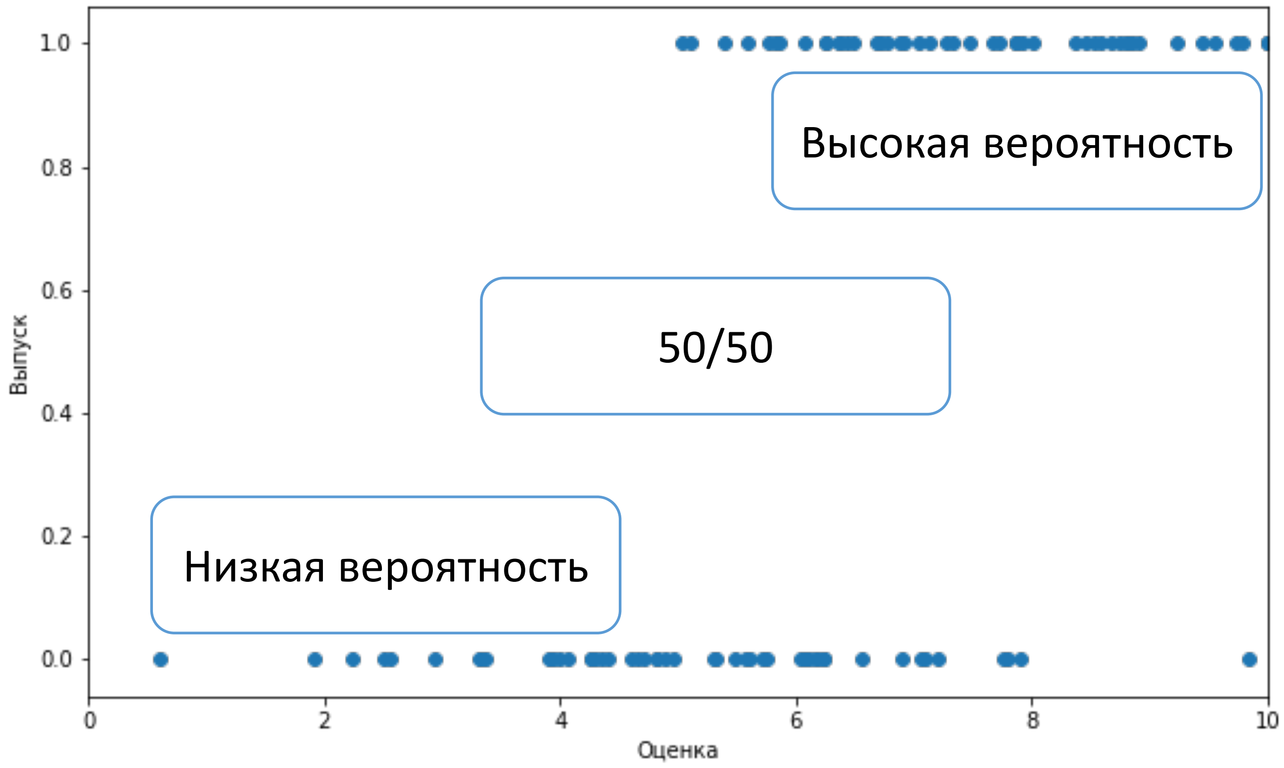
Предсказание вероятностей

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

Предсказание вероятностей



Предсказание вероятностей



Линейный классификатор

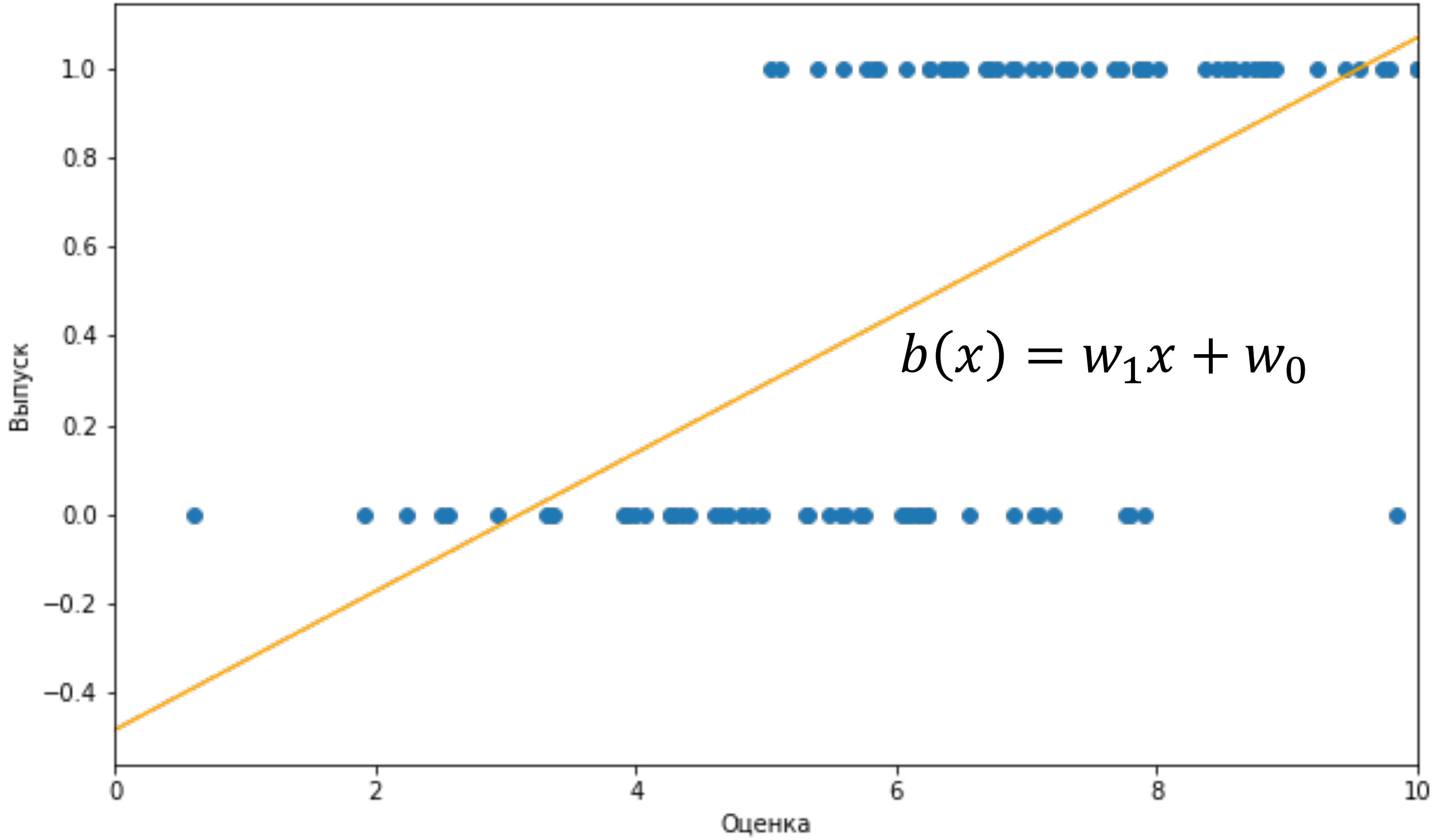
$$a(x) = \operatorname{sign} \langle w, x \rangle$$

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

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

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

Предсказание вероятностей

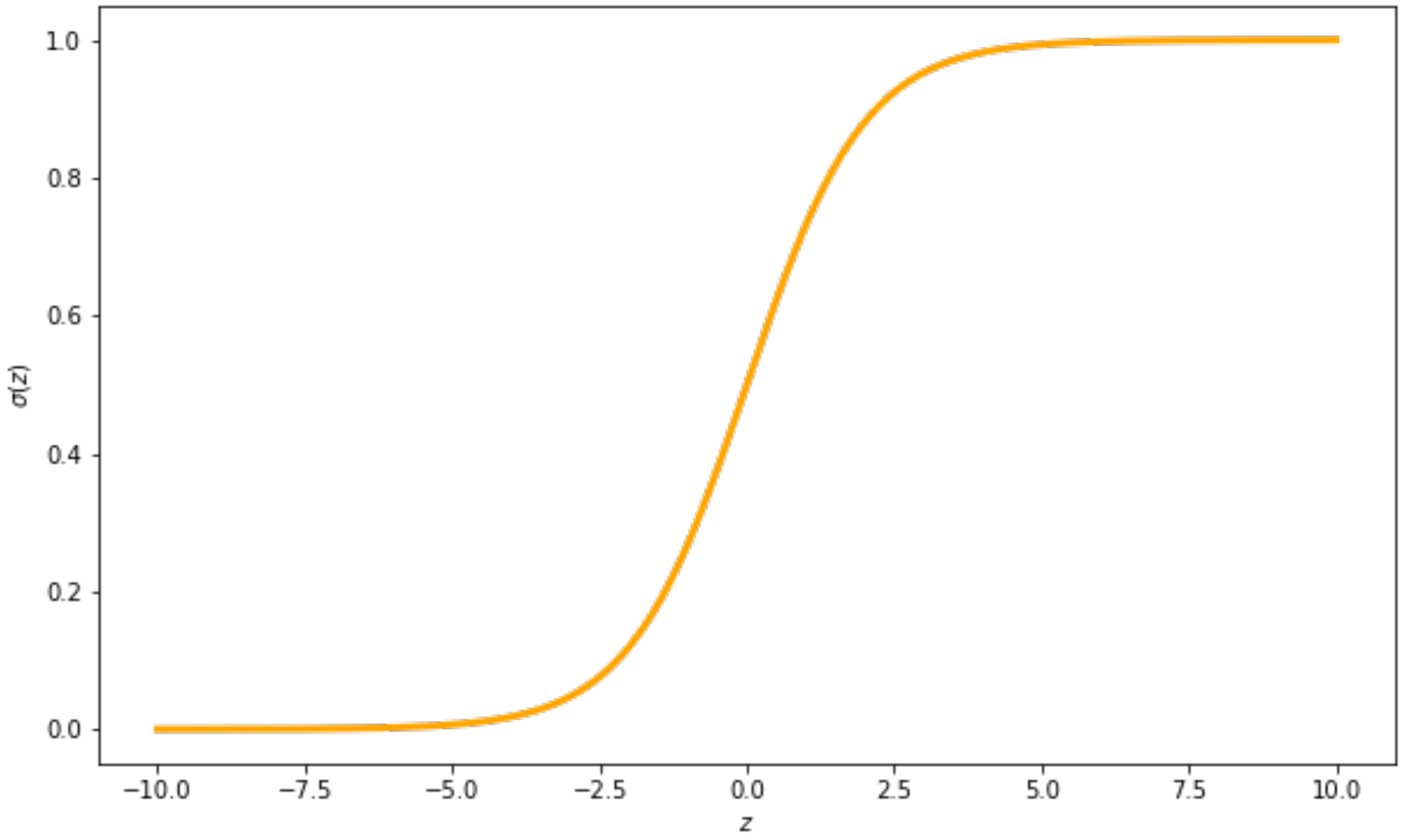


Линейный классификатор

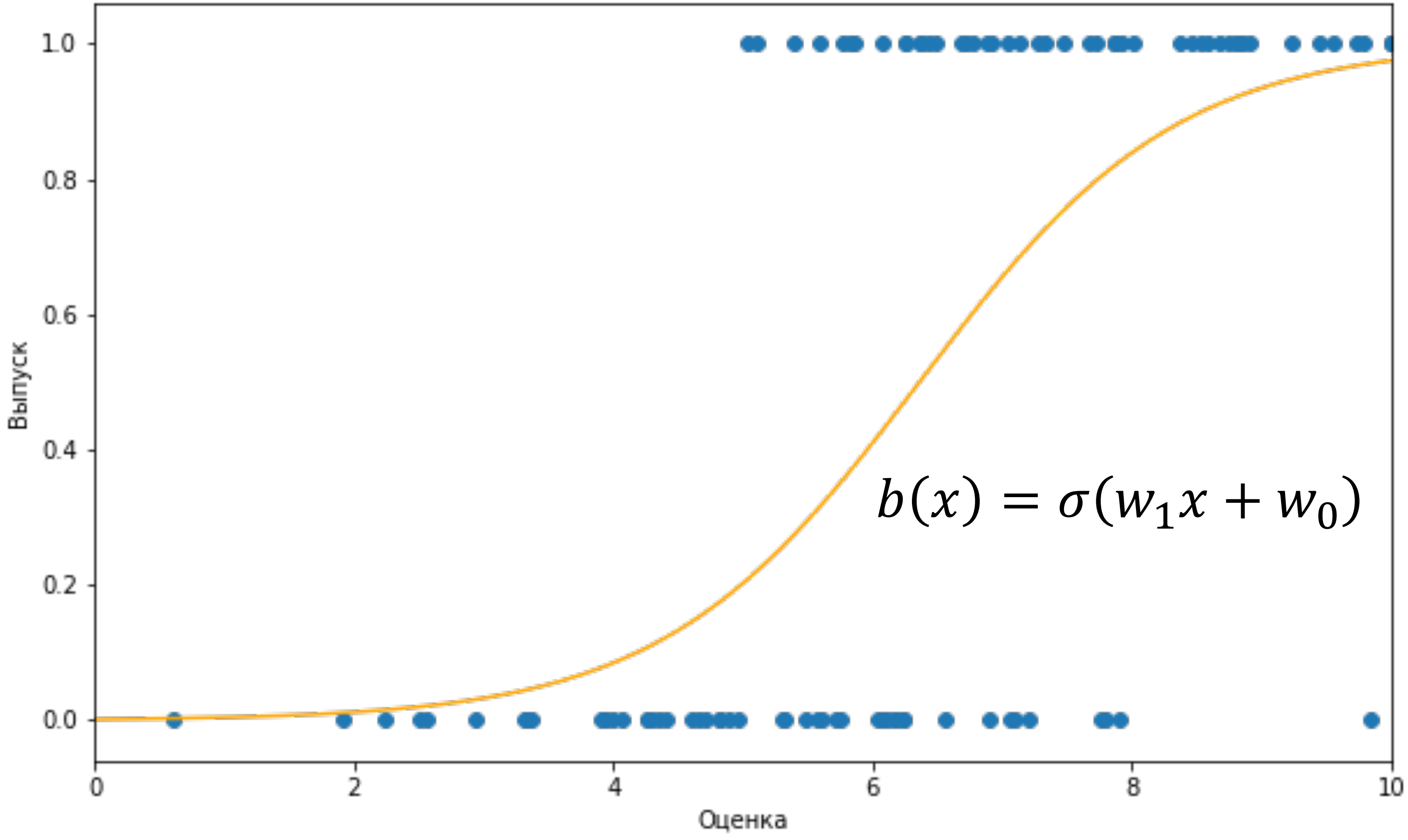
- Переведём выход модели на отрезок [0, 1]
- Например, с помощью сигмоиды:

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

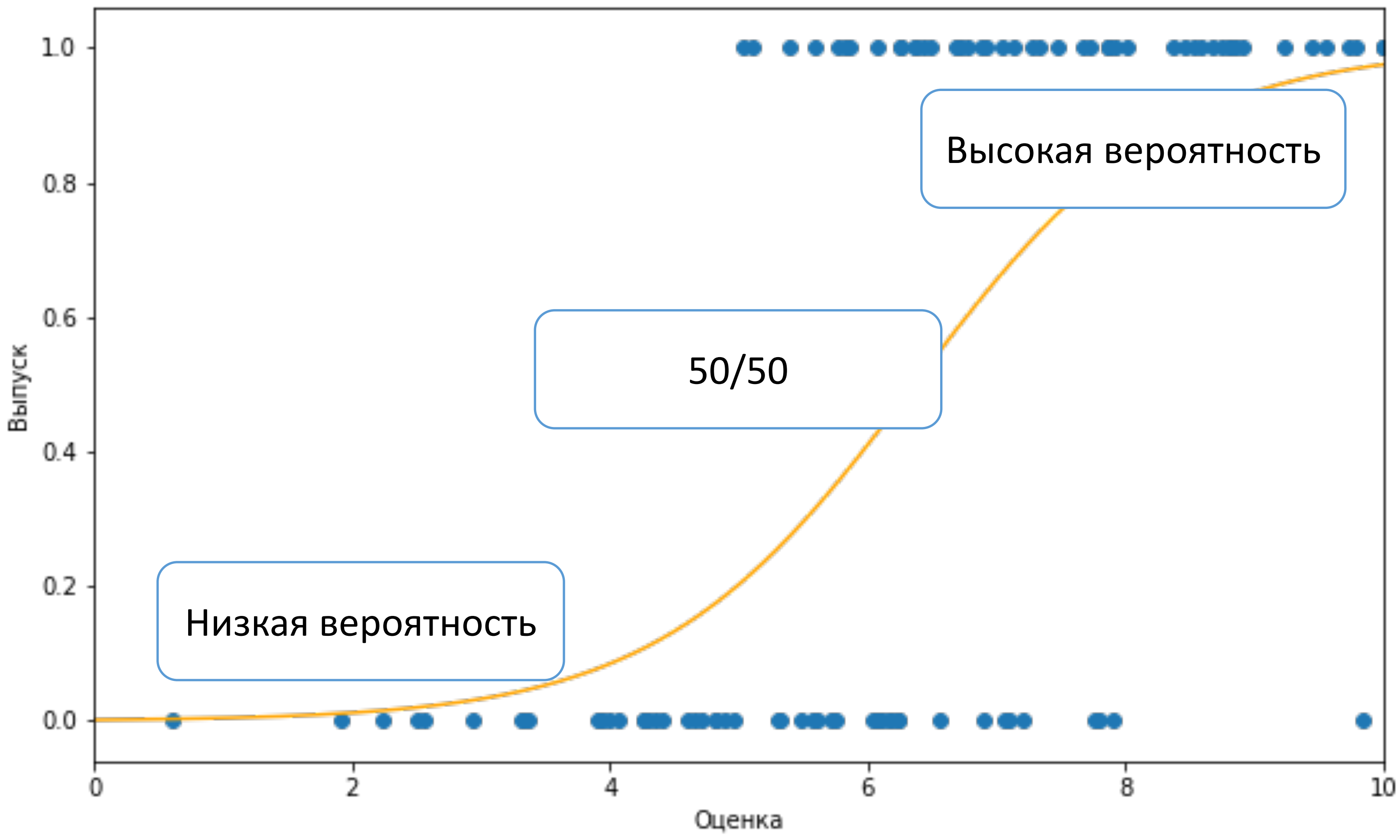
Сигмоида



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

Предсказание вероятностей

- Модель для оценивания вероятностей:

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

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

Предсказание вероятностей

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

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

Предсказание вероятностей

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

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

Предсказание вероятностей

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

- Если $y_i = +1$ и $\sigma(\langle w, x_i\rangle) = 0$, то штраф равен 1
- Если $y_i = +1$, то заменить $\sigma(\langle w, x_i\rangle) = 1$ на $\sigma(\langle w, x_i\rangle) = 0.5$ так же плохо, как заменить $\sigma(\langle w, x_i\rangle) = 0.5$ на $\sigma(\langle w, x_i\rangle) = 0$
- Надо строже!

Предсказание вероятностей

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

- 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

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

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

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

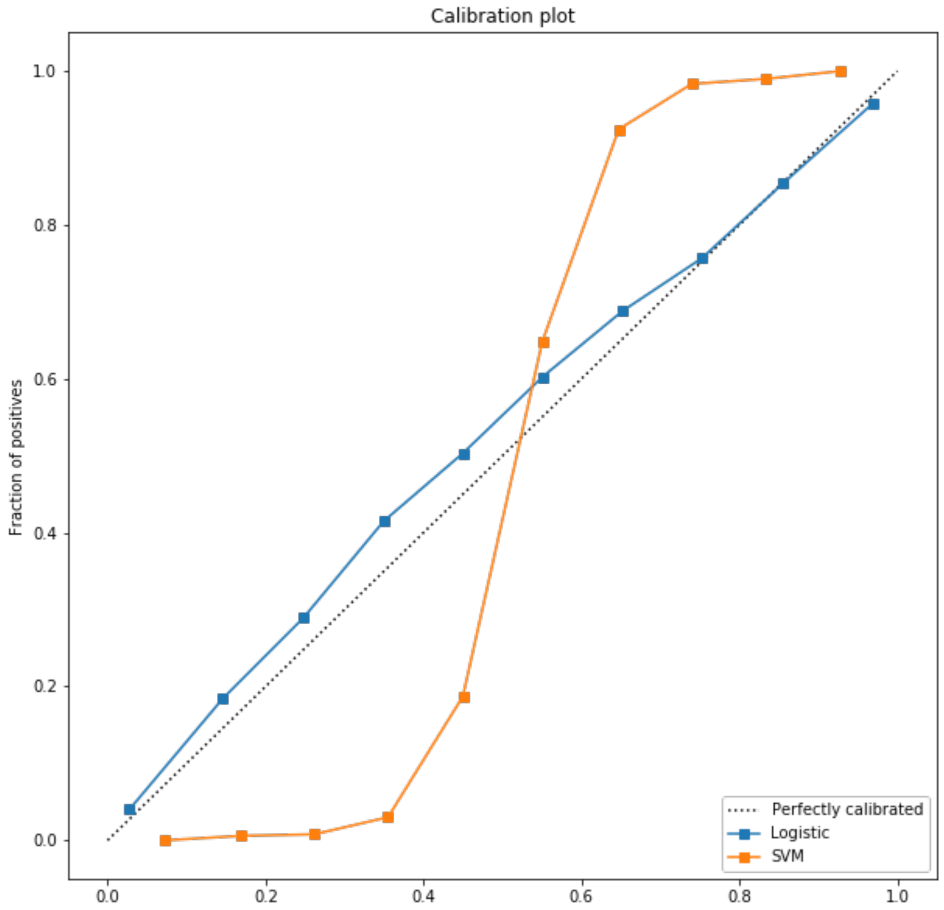
$$\sum_{i=1}^{\ell}\{[y_i = 1]\log(1 + \exp(-\langle w, x\rangle)) + [y_i = -1]\log(1 + \exp(\langle w, x\rangle))\} =$$

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

Калибровочная кривая

- Разобьём отрезок $[0, 1]$ на n корзинок $[0, t_1], [t_1, t_2], \dots, [t_{n-1}, 1]$ — это ось X
- Для каждого отрезка $[t_i, t_{i+1}]$ берём объекты, для которых $b(x) \in [t_i, t_{i+1}]$
- Считаем среди объектов долю положительных, откладываем её на оси Y

Калибровочная кривая



Метод опорных векторов

Hinge loss

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

- Минимизация верхней оценки:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} \max(0, 1 - y_i\langle w, x_i\rangle) \to \min_w$$

Какой классификатор лучше?