Машинное обучение

Лекция 5

Логистическая регрессия и SVM

Ковалев Евгений

ekovalev@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2020

Логистическая регрессия

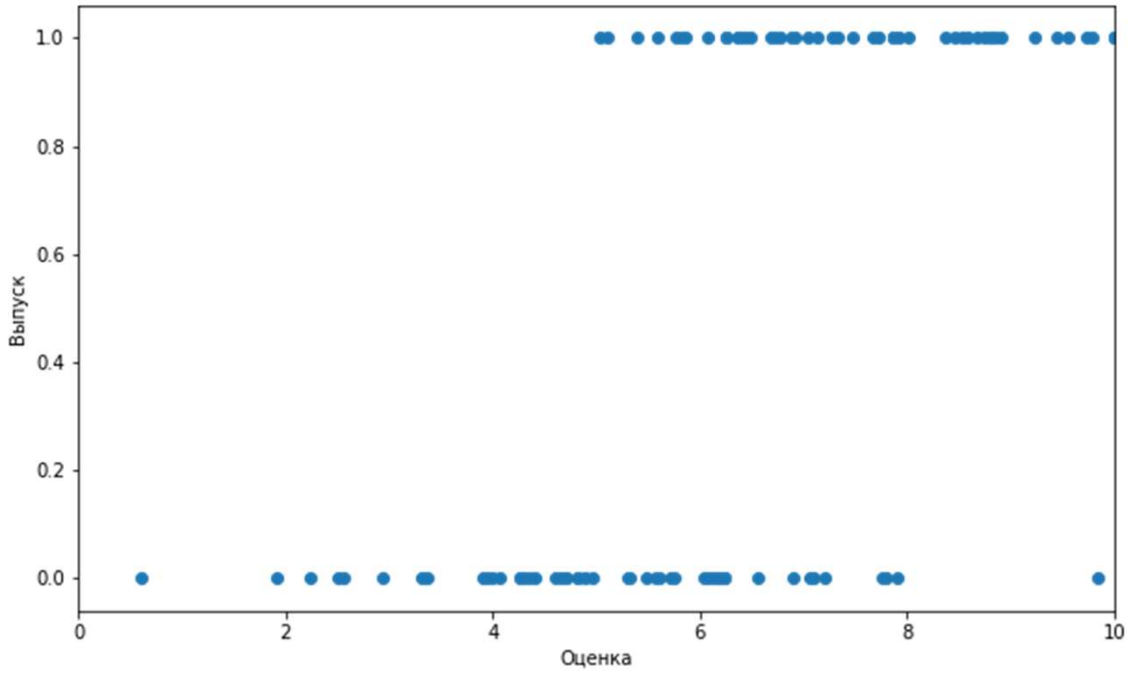
Логистическая регрессия

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

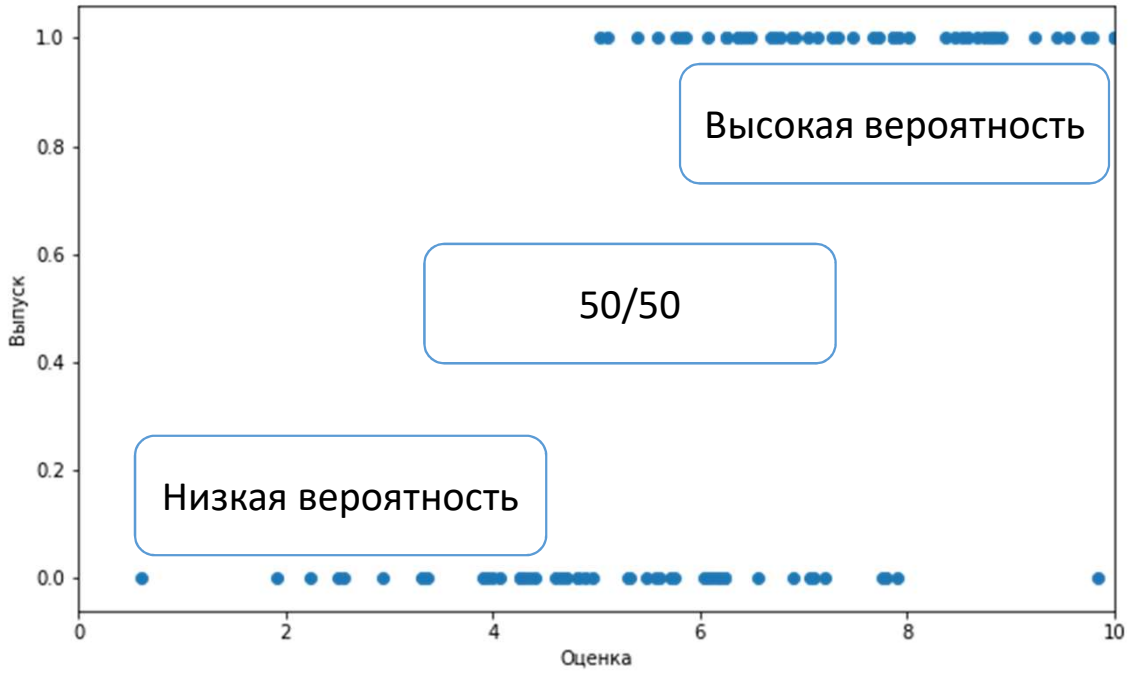
- Минимизация верхней оценки:

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

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

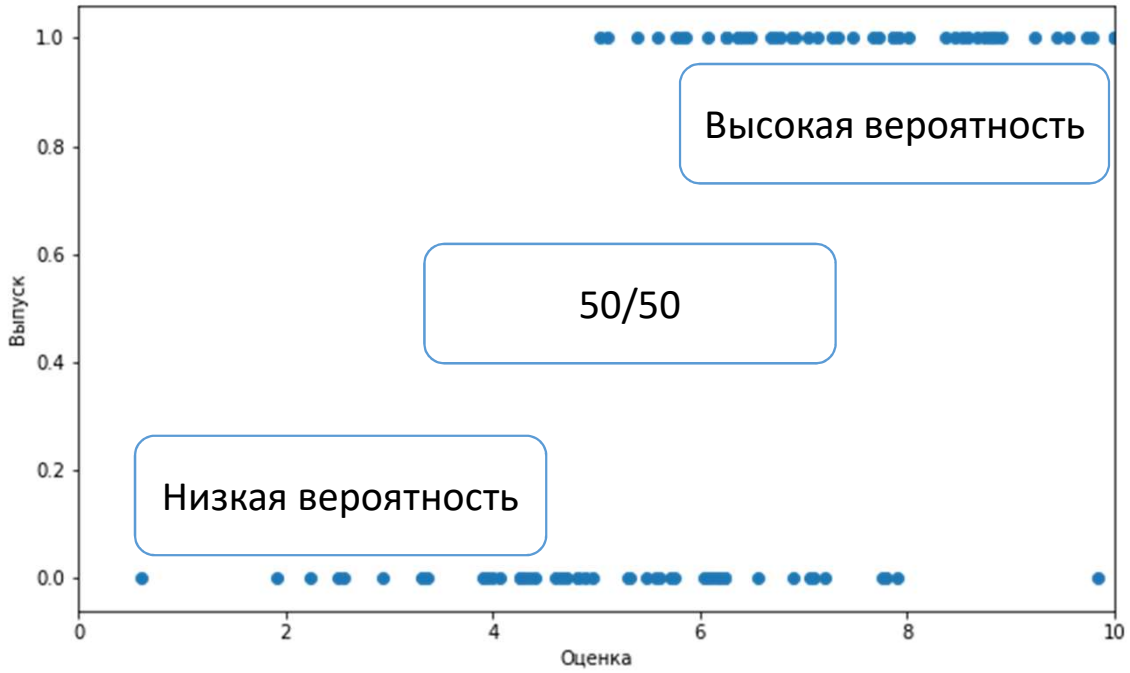
Предсказание вероятностей

- 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



Линейный классификатор

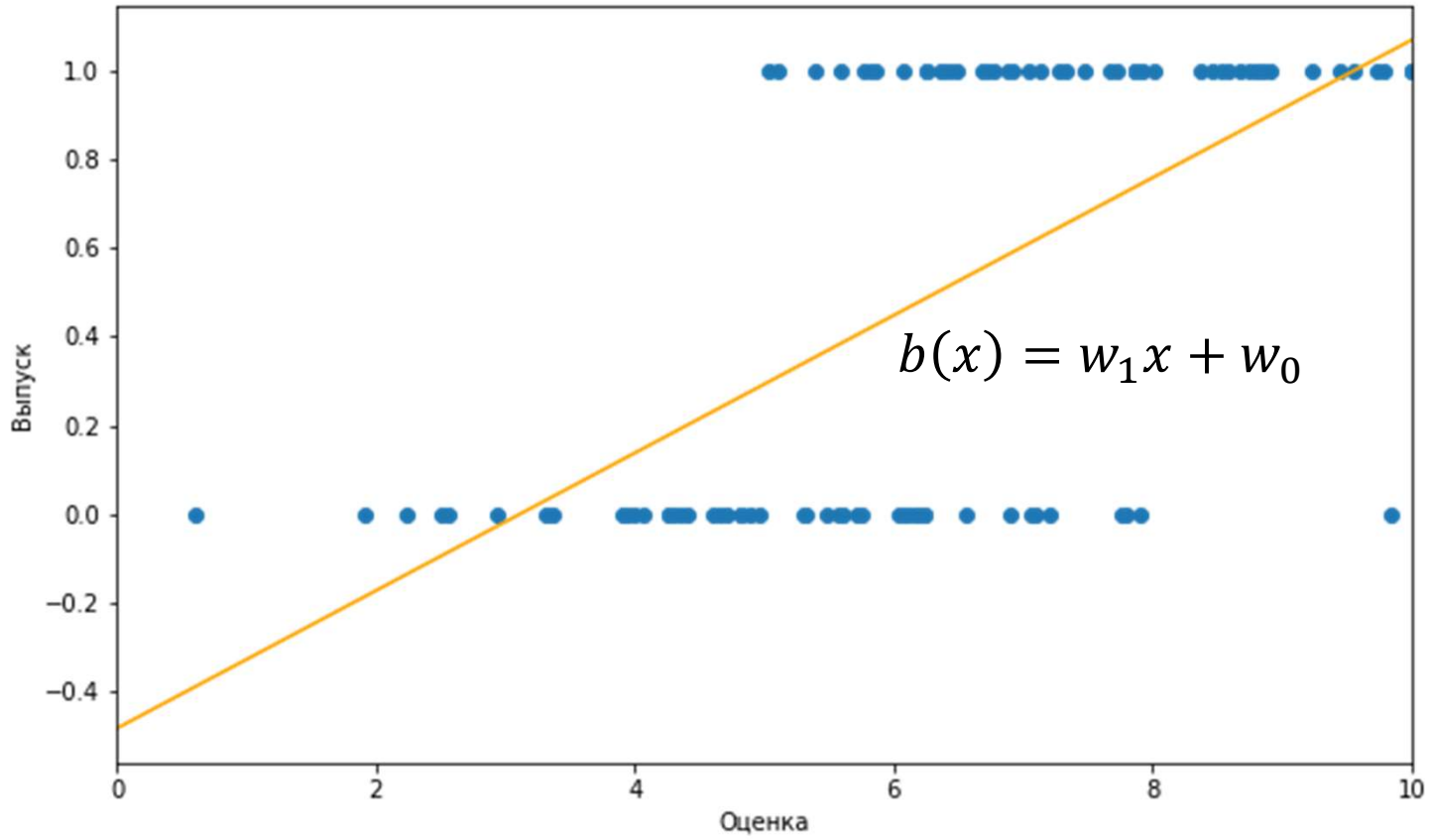
$$a(x) = \text{sign}\,\langle w, x\rangle$$

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

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

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

Предсказание вероятностей

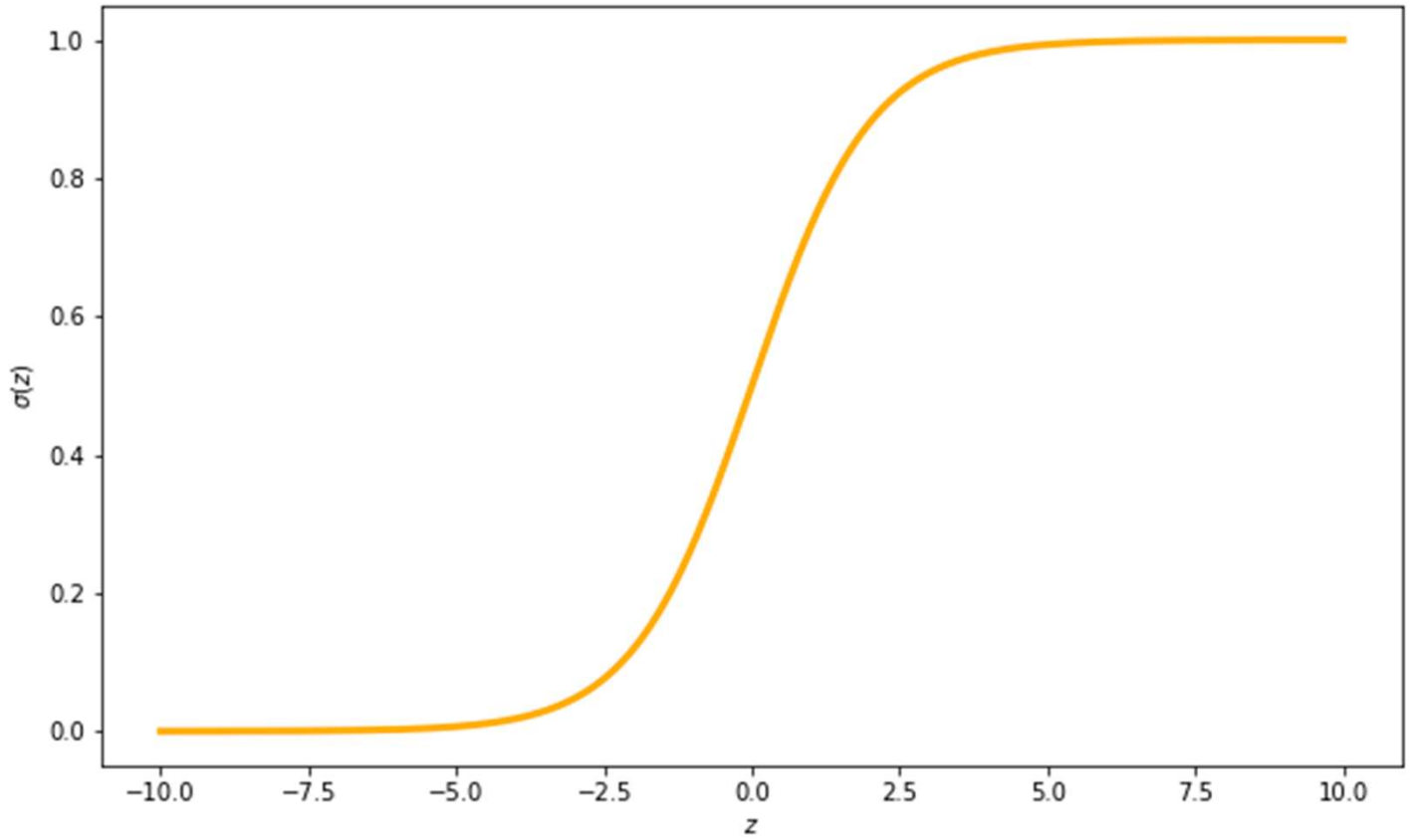


Линейный классификатор

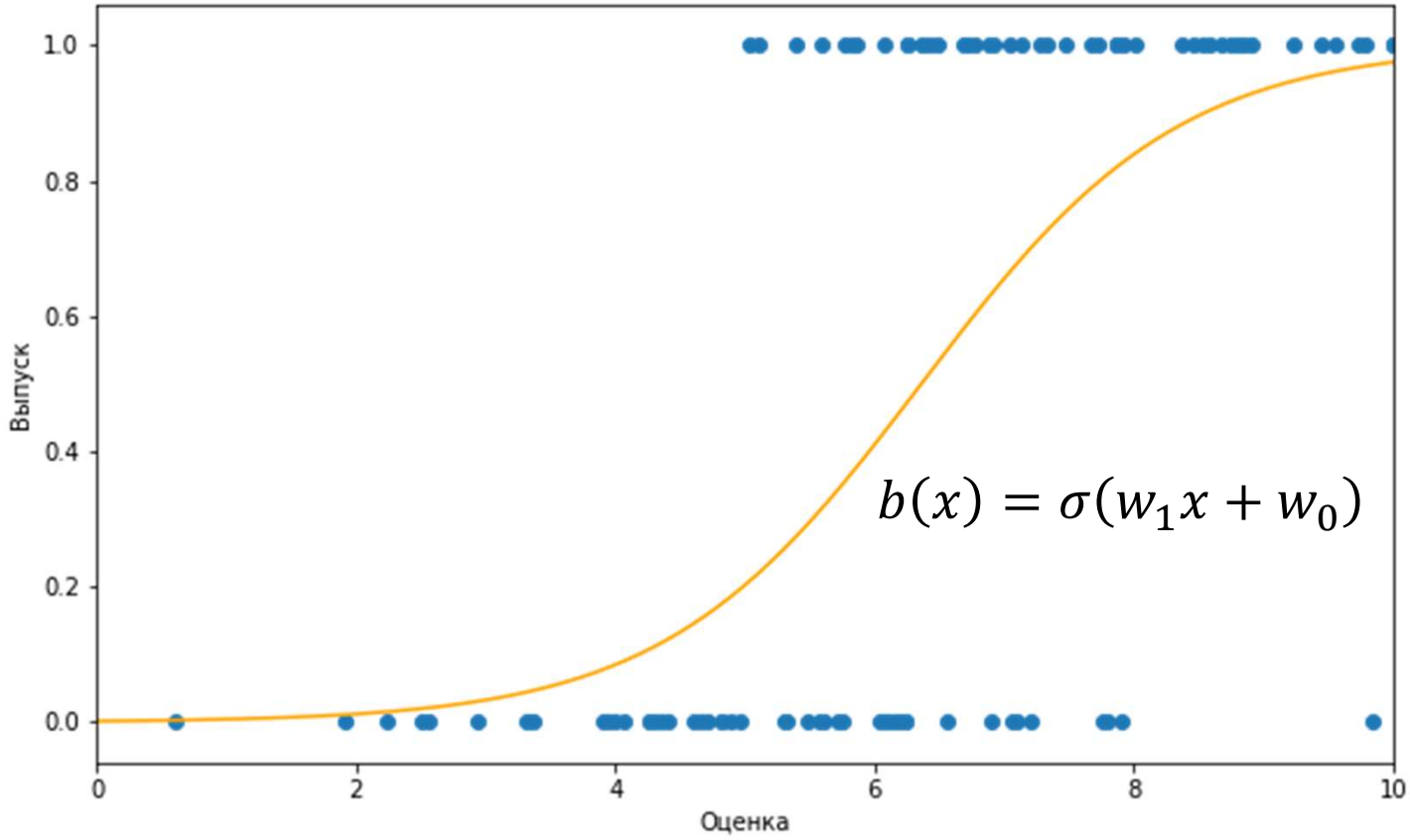
- Переведём выход модели на отрезок [0, 1]
- Например, с помощью сигмоиды:

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

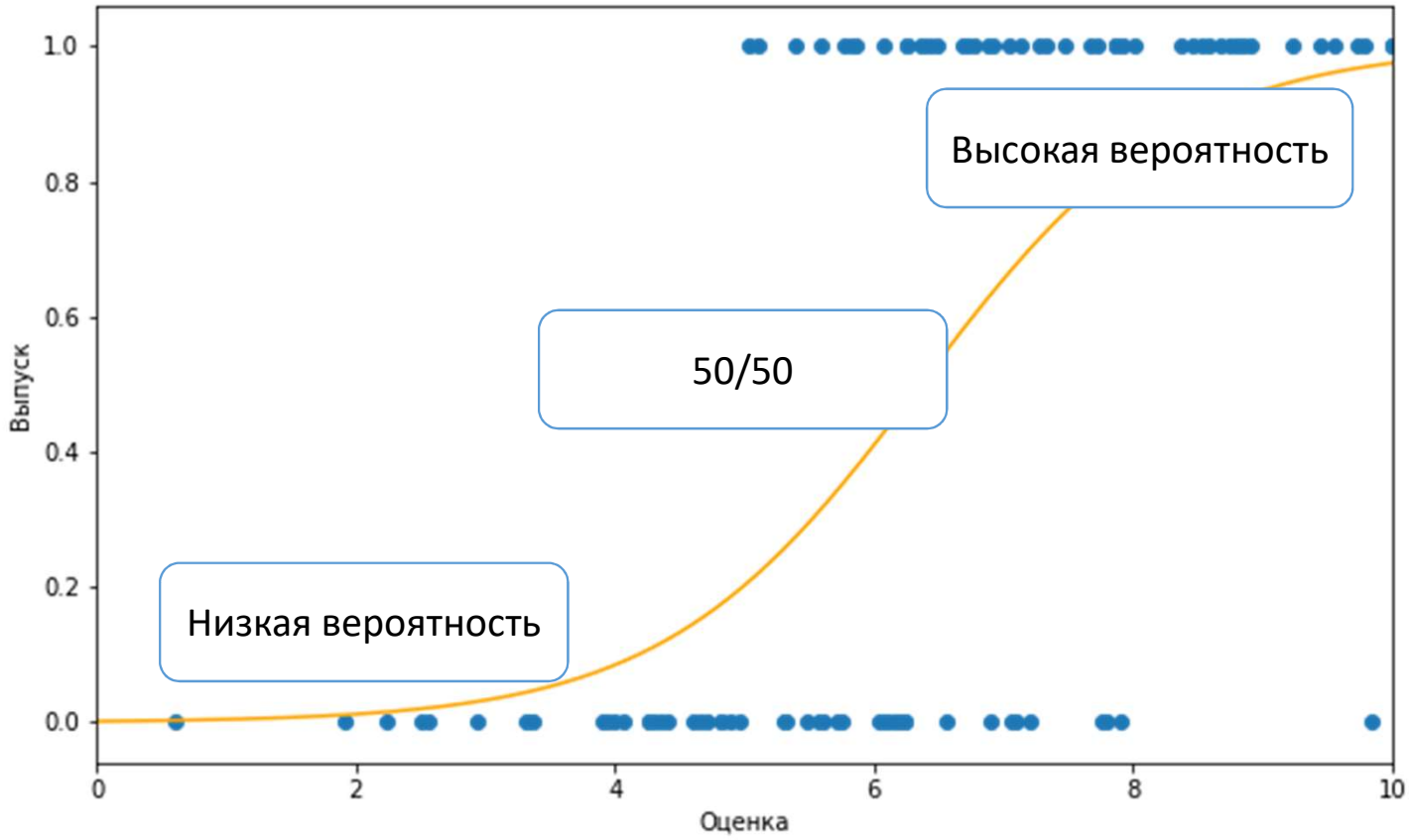
Сигмоида



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 $\sigma(\langle w, x_i \rangle) \to 0$

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

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
- 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

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

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

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

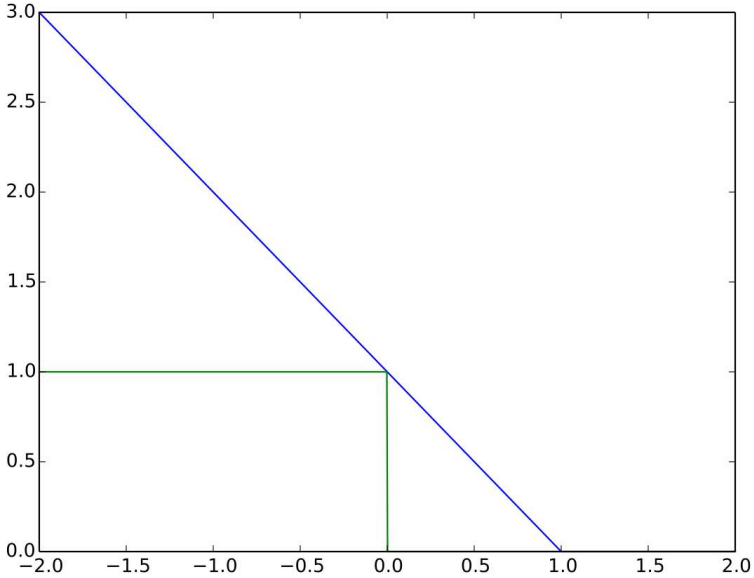
$$\sum_{i=1}^{\ell}\{[y_i = 1]\log(1+\exp(-\langle w, x\rangle)) + [y_i = -1]\log(1+\exp(\langle w, x\rangle))\} =$$

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

Метод опорных векторов

Hinge loss

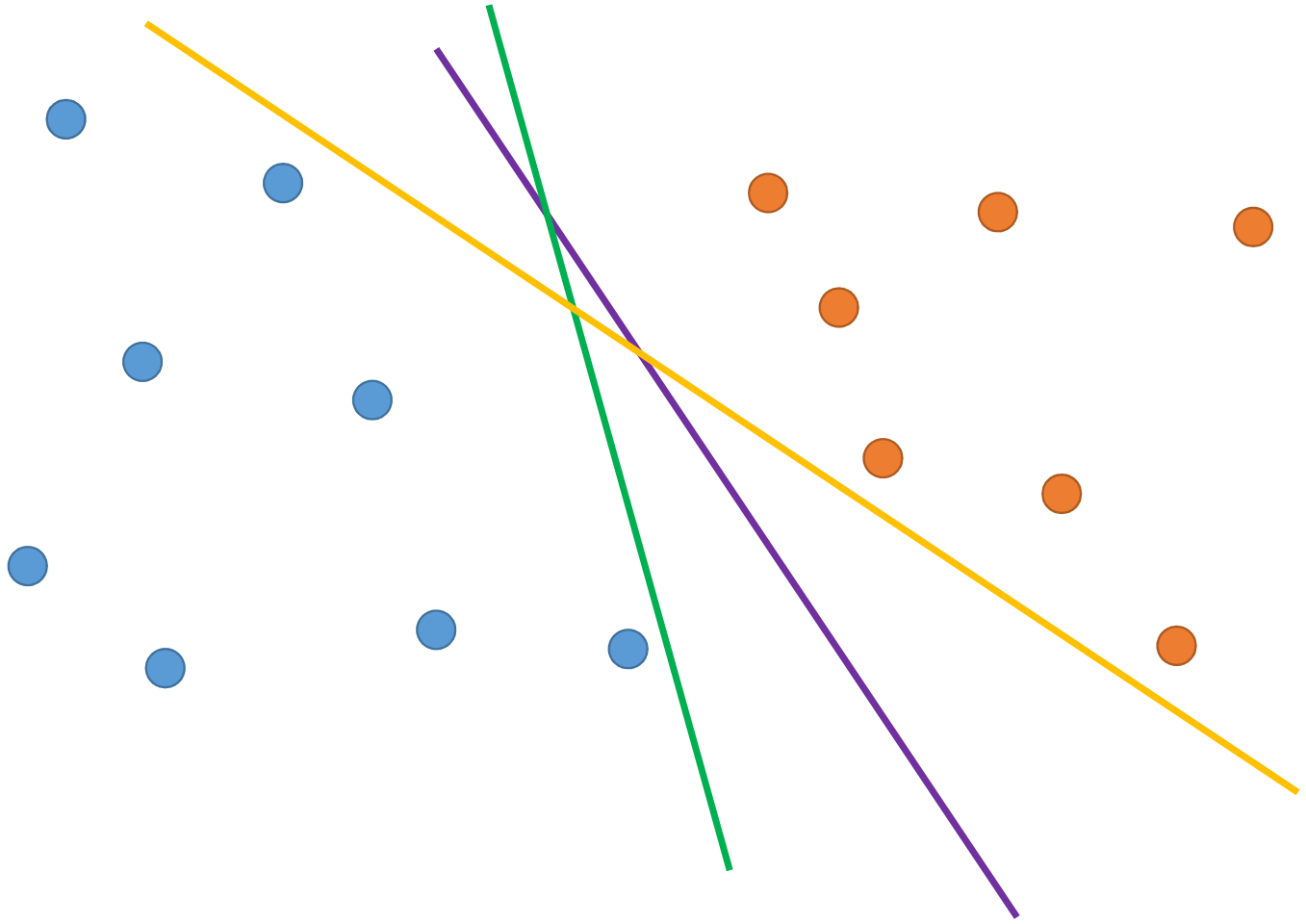
- Бинарная классификация: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$



- Минимизация верхней оценки:

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

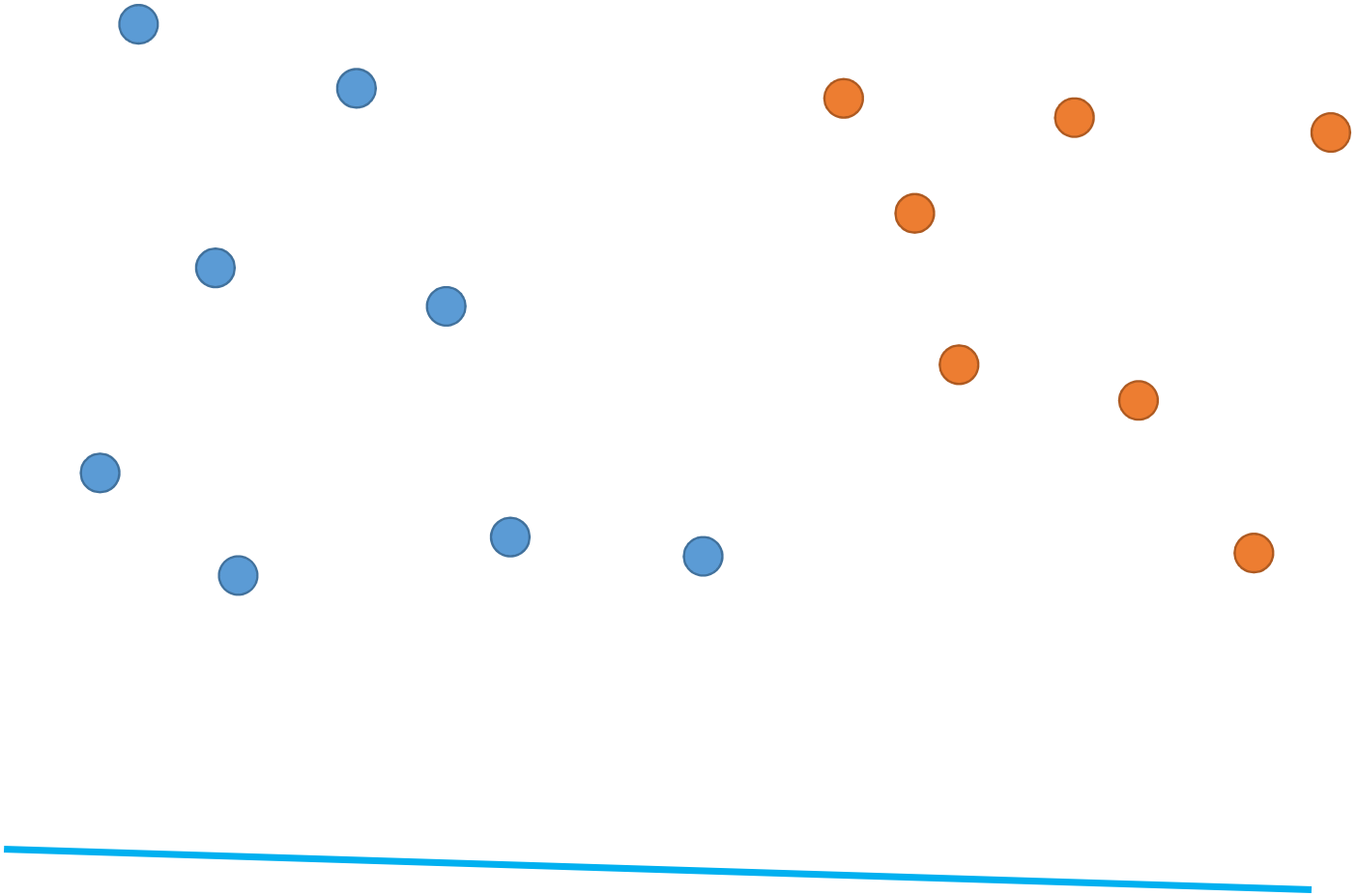
Какой классификатор лучше?



Отступ классификатора

- Будем максимизировать отступ классификатора — расстояние от гиперплоскости до ближайшего объекта

Отступ классификатора



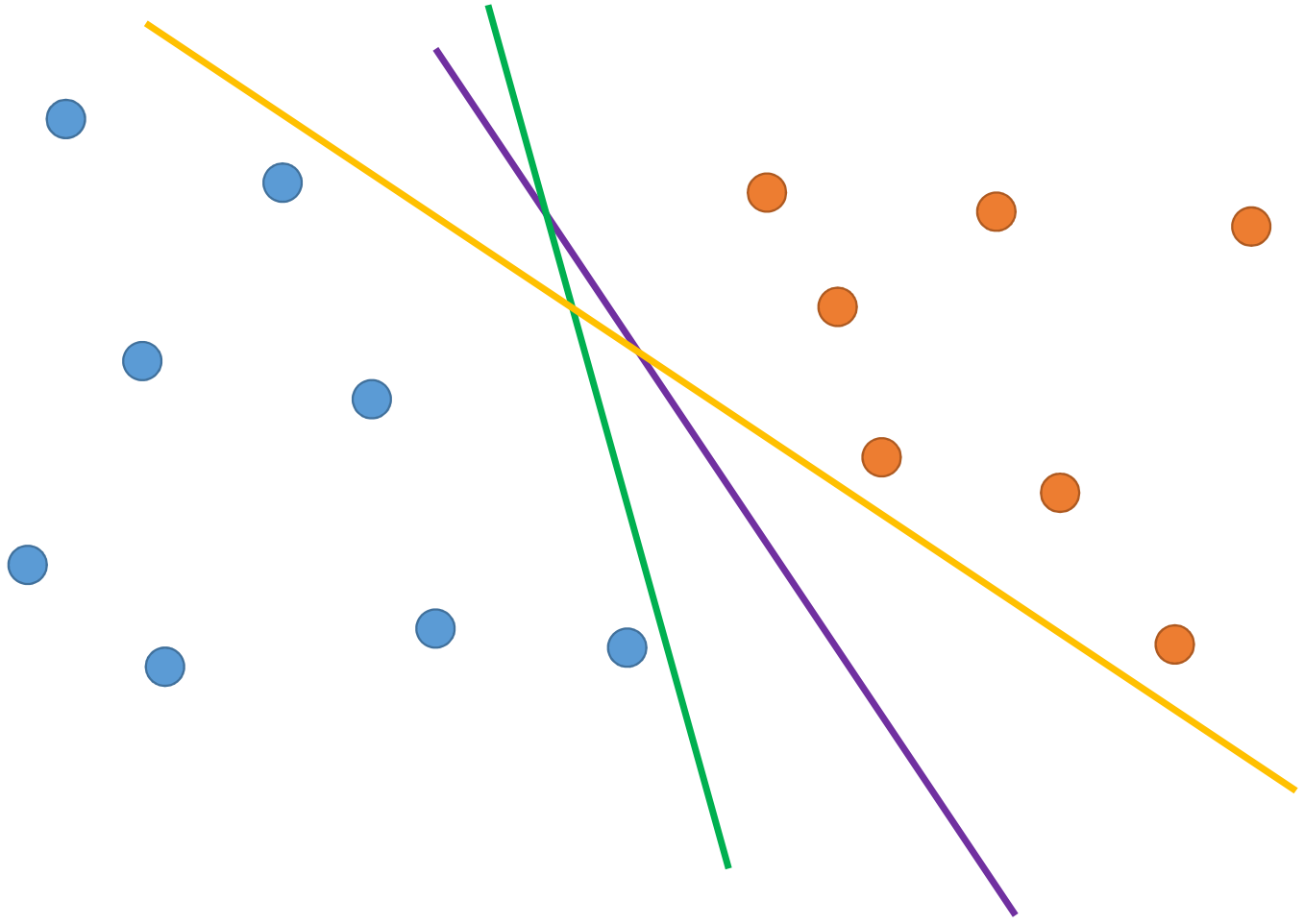
Отступ классификатора

- Будем максимизировать отступ классификатора — расстояние от гиперплоскости до ближайшего объекта
- При этом будет стараться сделать поменьше ошибок
- По сути, делаем как можно меньше предположений о модели, и верим, что это понизит вероятность переобучения

Простой случай

- Будем считать, что выборка линейно разделима
- Существует линейный классификатор, не допускающий ни одной ошибки

Линейно разделимый случай



Линейно разделимый случай

- **Требование 1**: $y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) > 0$ для всех $i = 1, \dots, \ell$
- **Требование 2**: максимальный отступ классификатора

Отступ классификатора

- Расстояние от точки до гиперплоскости $\langle w, x \rangle + w_0 = 0$:

$$\frac{|\langle w, x \rangle + w_0|}{\|w\|}$$

- Отступ классификатора:

$$\min_{i=1,\ldots,\ell} \frac{|\langle w, x_i \rangle + w_0|}{\|w\|}$$

Небольшое предположение

- Линейный классификатор:

$$a(x) = \text{sign}\left(\langle w, x_i \rangle + w_0\right)$$

- Если мы поделим w и w_0 на число $\mathrm{k} > 0$, то выходы классификатора никак не поменяются:

$$a(x) = \text{sign}\left(\frac{\langle w, x_i \rangle + w_0}{k}\right) = \text{sign}\left(\langle w, x_i \rangle + w_0\right)$$

Небольшое предположение

- Поделим w и w_0 на $\min\limits_{i=1,\ldots,\ell} |\langle w, x_i \rangle + w_0| > 0$, после этого будет выполнено

$$\min_{i=1,\ldots,\ell} |\langle w, x_i \rangle + w_0| = 1$$

Отступ классификатора

- Расстояние от точки до гиперплоскости $\langle w, x \rangle + w_0 = 0$:

$$\frac{|\langle w, x \rangle + w_0|}{\|w\|}$$

- Отступ классификатора:

$$\min_{i=1,\ldots,\ell} \frac{|\langle w, x_i \rangle + w_0|}{\|w\|} = \frac{\min\limits_{i=1,\ldots,\ell} |\langle w, x_i \rangle + w_0|}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|}$$

Линейно разделимый случай

- **Требование 1**: $y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) > 0$ для всех $i = 1, \dots, \ell$
- **Требование 2**: максимальный отступ классификатора

$$\frac{1}{\|w\|} \to \max_w$$

Линейно разделимый случай

- **Требование 1**: $y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) > 0$ для всех $i = 1, \dots, \ell$
- **Требование 2**: максимальный отступ классификатора

$$\frac{1}{\|w\|} \to \max_w$$

- При условии, что $\min\limits_{i=1,\dots,\ell} |\langle w, x_i \rangle + w_0| = 1$

Линейно разделимый случай

- **Требование 1**: $y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) > 0$ для всех $i = 1, \dots, \ell$
- **Требование 2**: максимальный отступ классификатора

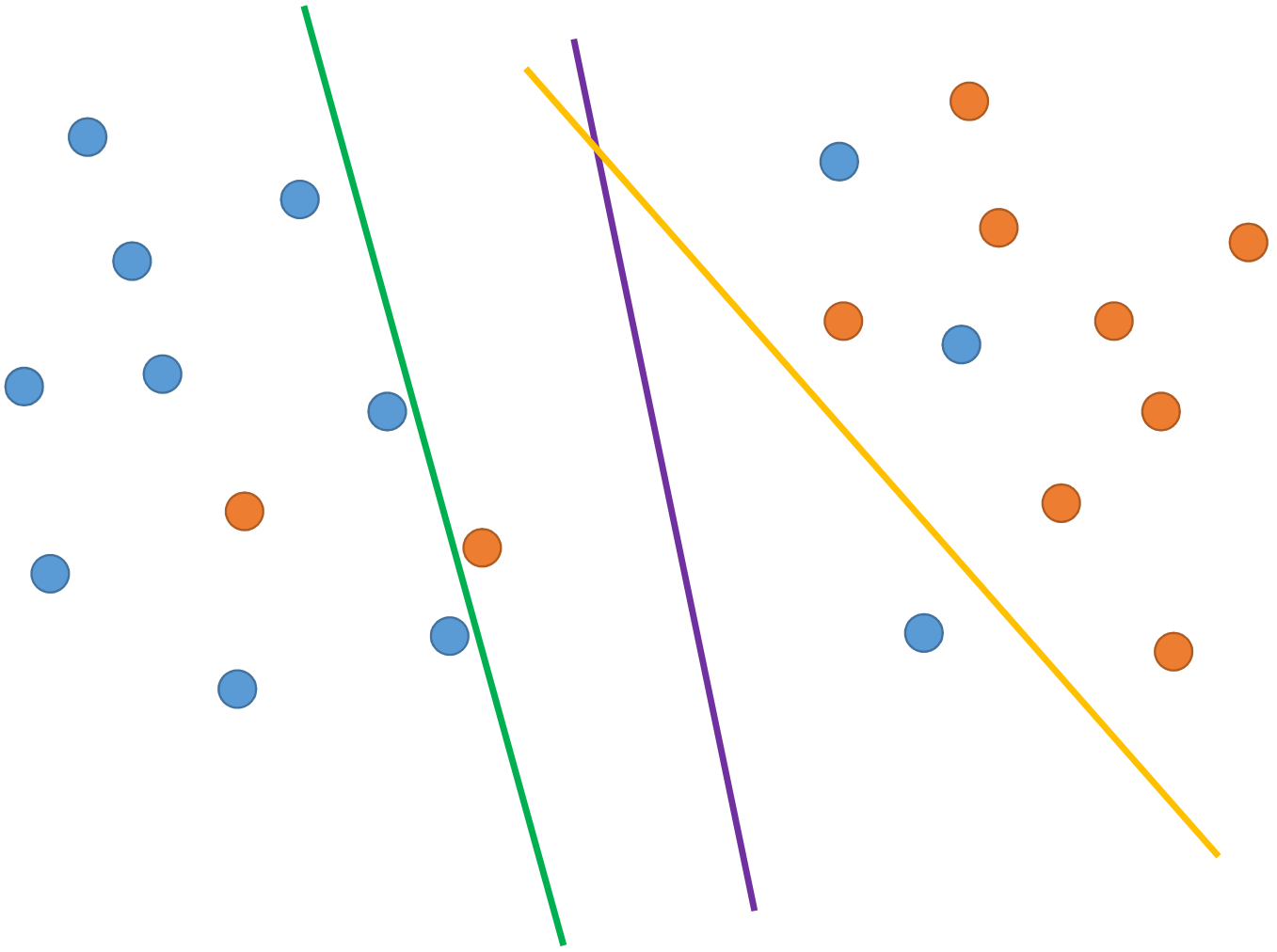
$$\frac{1}{\|w\|} \to \max_w$$

- При условии, что $|\langle w, x_i \rangle + w_0| \geq 1$
- И мы минимизируем $\|w\|$ — тогда где-то модуль отступа будет равен 1

Метод опорных векторов (SVM)

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w,w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай



Линейно неразделимый случай

- Любой линейный классификатор допускает хотя бы одну ошибку

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w, w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 \end{cases}$$

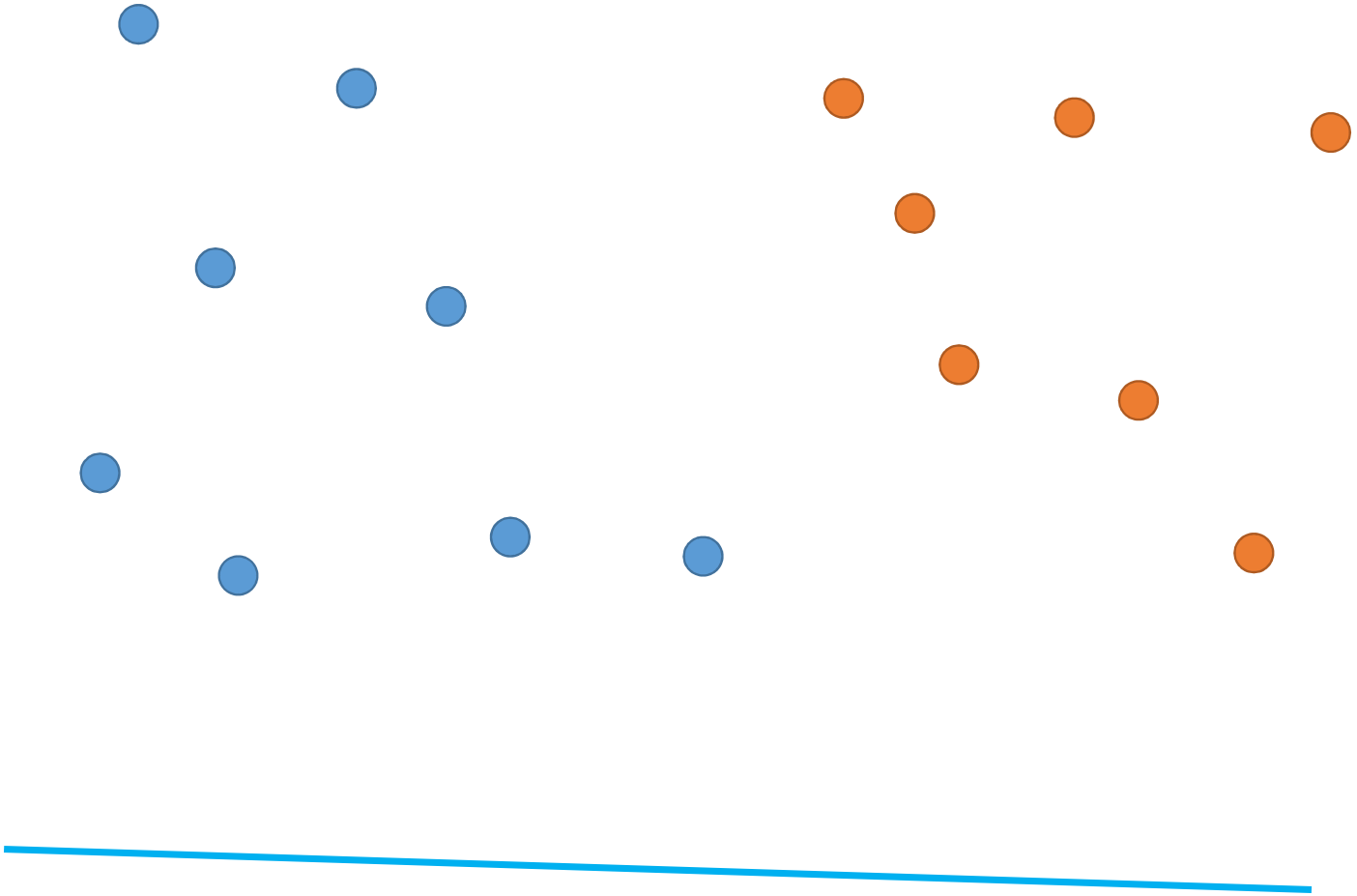
Линейно неразделимый случай

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w,w_0} \\ y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w,w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - 10^{1000} \end{cases}$$

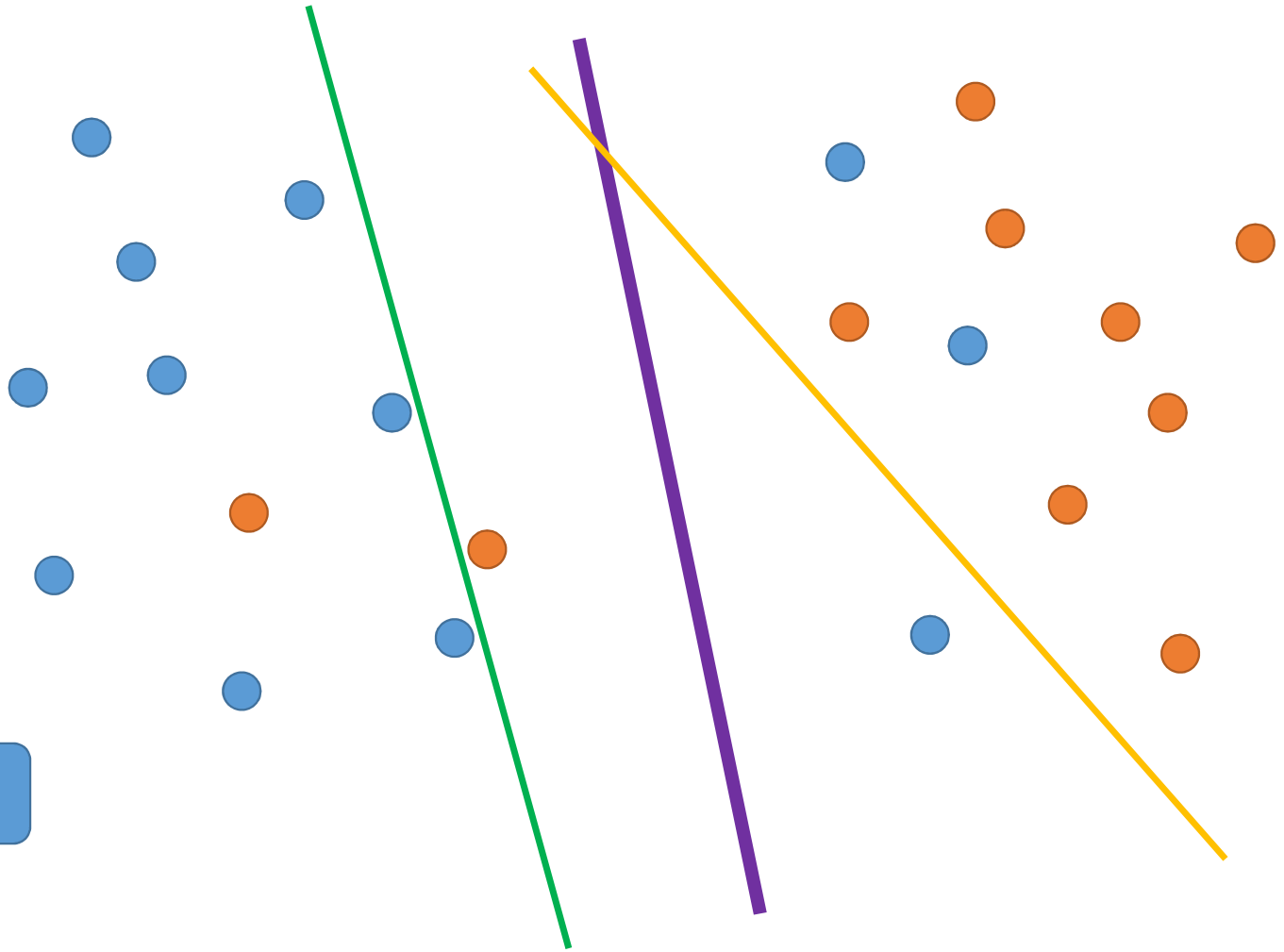
Отступ классификатора



Метод опорных векторов

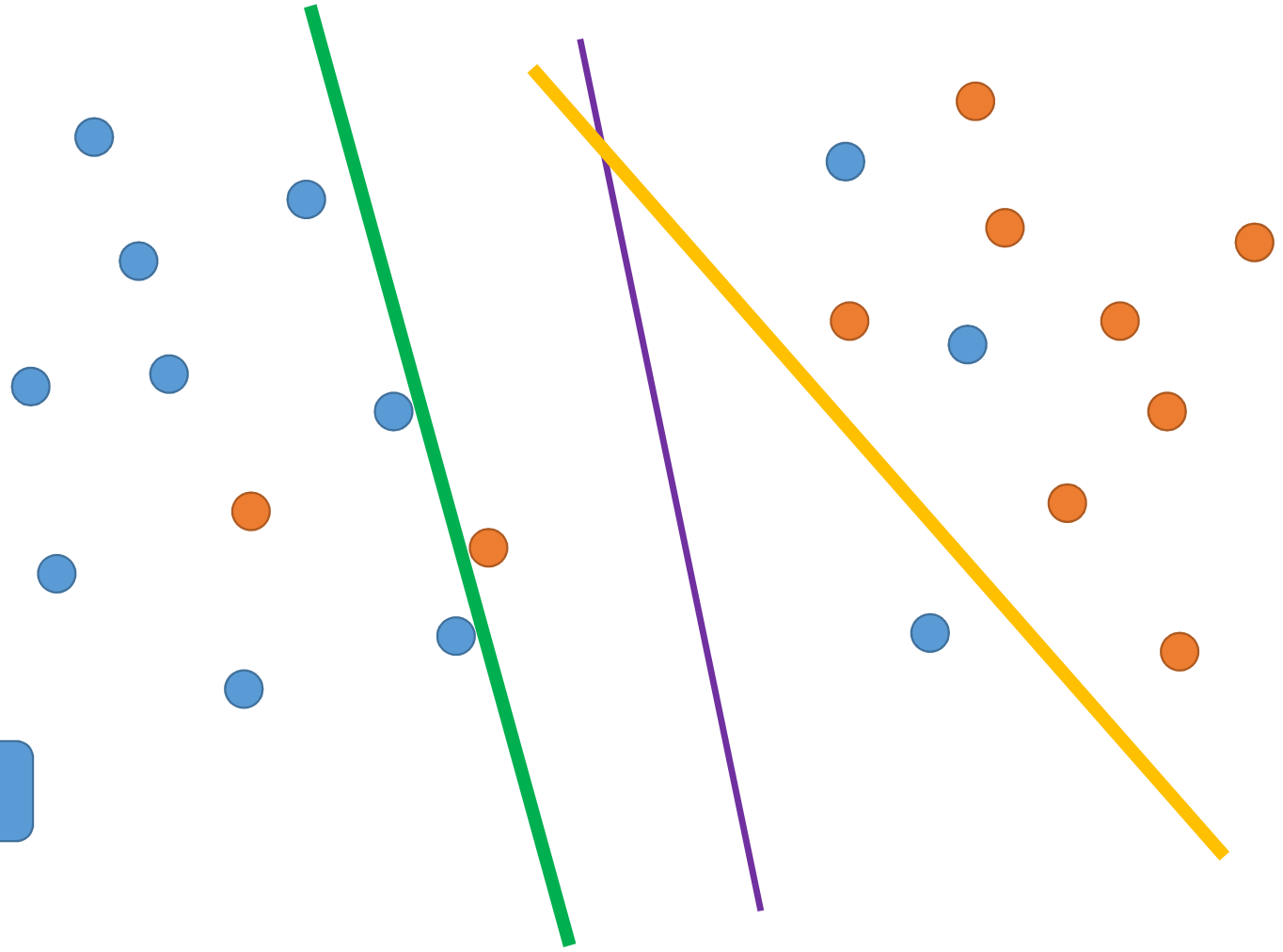
$$\begin{cases} \|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min\limits_{w, w_0, \xi_i} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай



Маленькое C

Линейно неразделимый случай



Большое C

Метод опорных векторов

$$\begin{cases} \|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min\limits_{w, w_0, \xi_i} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

- Объединим ограничения:

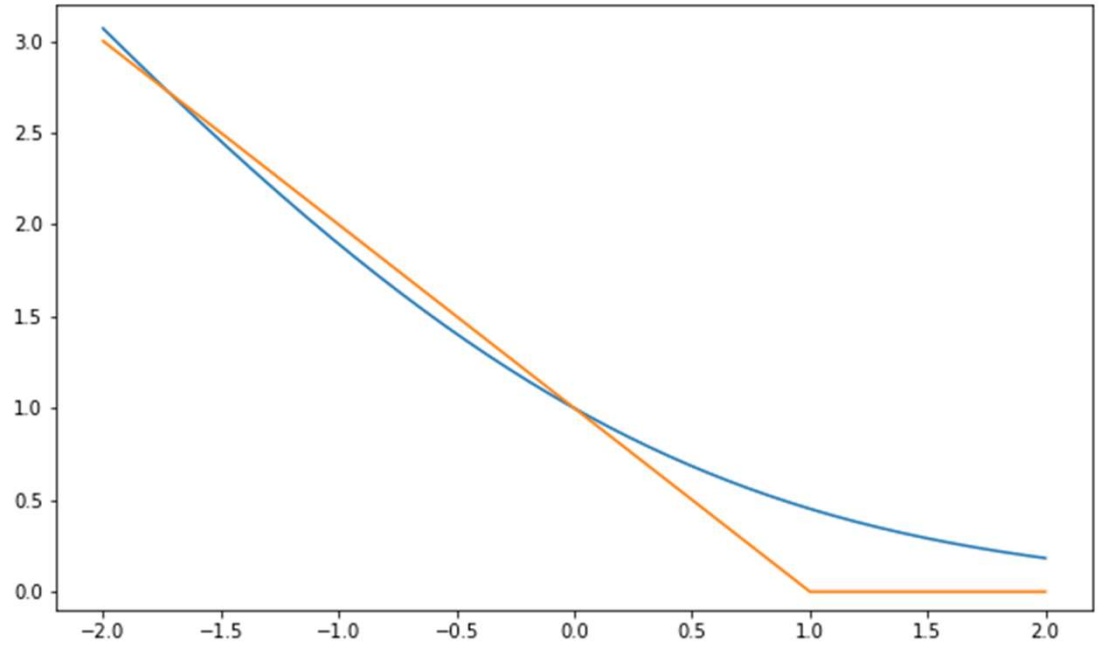
$$\xi_i \geq \max\big(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0)\big)$$

Метод опорных векторов

$$C\sum_{i=1}^{\ell}\max\bigl(0,1-y_i(\langle w,x_i\rangle+w_0)\bigr)\ +\|w\|^2\to\min_{w,w_0}$$

- Функция потерь (hinge loss) + регуляризация

Сравнение логистической регрессии и SVM



Резюме

- Логистическая регрессия минимизирует логистические потери
- Метод опорных векторов основан на идее максимизации отступа классификатора