Машинное обучение, ФКН ВШЭ Метрики классификации и логистическая регрессия

Задача 1. Бандерлог из Лога¹ ведёт свой блог, любит считать логарифмы и оценивать логистические регрессии. С помощью нового классификатора b(x), предсказывающего оценку принадлежности объекта положительному классу, Бандерлог решил задачу классификации на 8 объектах. Предсказания b(x) и реальные метки объектов приведены ниже:

$$b(x_1) = 0.1, \quad y_1 = +1,$$

$$b(x_2) = 0.8, \quad y_2 = +1,$$

$$b(x_3) = 0.2, \quad y_3 = -1,$$

$$b(x_4) = 0.25, \quad y_4 = -1,$$

$$b(x_5) = 0.9, \quad y_5 = +1,$$

$$b(x_6) = 0.3, \quad y_6 = +1,$$

$$b(x_7) = 0.6, \quad y_7 = -1,$$

$$b(x_8) = 0.95, \quad y_8 = +1.$$

- 1. Постройте ROC-кривую и вычислите AUC-ROC для множества классификаторов a(x;t), порожденных b(x), на выборке X.
- 2. Постройте PR-кривую и найдите площадь под ней для того же множества классификаторов.
- 3. Как по-английски будет «бревно»?

Задача 2. Пусть дан классификатор b(x), который возвращает оценку принадлежности объекта x положительному классу. Отсортируем все объекты по неубыванию ответа классификатора: $b(x_{(1)}) \leq \cdots \leq b(x_{(\ell)})$. Обозначим истинные ответы на этих объектах через $y_{(1)}, \ldots, y_{(\ell)}$.

1. Покажите, что AUC-ROC для данной выборки будет равен вероятности того, что случайно выбранный положительный объект окажется в отсортированном списке не раньше случайно выбранного отрицательного объекта.

¹деревня в Кадуйском районе Вологодской области

2. Покажите, что число дефектных пар в выборке $y_{(1)}, \ldots, y_{(\ell)}$ будет совпадать с числом итераций, которые нужно сделать для того, чтобы отсортировать этот массив с помощью сортировки пузырьком.

Задача 3. Пусть дана некоторая выборка X и классификатор b(x), возвращающий в качестве оценки принадлежности объекта x положительному классу 0 или 1 (а не некоторое вещественное число, как предполагалось на семинарах).

- 1. Постройте ROC-кривую для классификатора b(x) на выборке X.
- 2. Покажите, что AUC-ROC классификатора b(x) на выборке X может быть выражен через долю правильных ответов и полноту классификатора a(x;t), получающегося при выборе некоторого порога $t \in (0;1)$. Помимо указанных величин в формулу могут входить только величины ℓ_- , ℓ_+ , ℓ (количество отрицательных, положительных и общее количество объектов в выборке X соответственно).
- 3. Покажите, что в случае сбалансированной выборки ($\ell_- = \ell_+$) AUC-ROC классификатора b(x) на выборке X совпадает с долей правильных ответов классификатора при выборе некоторого порога $t \in (0; 1)$.

Задача 4. В анализе данных для сравнения среднего значения некоторой величины у объектов двух выборок часто используется критерий Манна–Уитни–Уилкоксона², основанный на вычислении U-статистики.

Пусть у нас имеется выборка X и классификатор b(x), возвращающий оценку принадлежности объекта x положительному классу. Тогда вычисление U-статистики для подвыборки X, состоящей из объектов положительного класса, производится следующим образом: объекты обеих выборок сортируются по неубыванию значения b(x), после чего каждому объекту в полученном упорядоченном ряду $x_{(1)}, \ldots, x_{(\ell)}$ присваивается ранг — номер позиции $r_{(i)}$ в ряду (начиная с 1, при этом для объектов с одинаковыми значением b(x) в качестве ранга присваивается среднее значение ранга для таких объектов). Тогда U-статистика для объектов положительного класса равна:

$$U_{+} = \sum_{\substack{i=1\\y_{(i)}=+1}}^{\ell} r_{(i)} - \frac{\ell_{+}(\ell_{+}+1)}{2}.$$

Покажите, что для значения AUC-ROC классификатора b(x) на выборке X и U-статистики верно следующее соотношение:

$$AUC = \frac{U_+}{\ell_-\ell_+}.$$

Задача 5. Женя хочет построить в этом новом мире атмосферу доброты и взаимоподдержки. Для этого он собирается обучить классификатор токсичных сообщений, чтобы тот их автоматически банил. В выборке Жени половина сообщений токсичные. В обучающей 9000 сообщений, в тестовой 1000 сообщений.

²https://en.wikipedia.org/wiki/Mann-Whitney U test

- 1. В качестве порога для бана Женя взял 0.5. Точность классификатора (precision) получилась 0.9. Полнота (recall) получилась 0.7. Как выглядит матрица ошибок (confusion matrix)?
- 2. На самом деле в чате токсик встречается только в 20% случаев. Женя натравил классификатор на 1000 свежих сообщений. Сколько из них классификатор назовёт токсичными? Сколько раз он ошибётся в этом? Как примерно будет выглядеть матрица ошибок?
- 3. Айнура требует от Жени метрики качества его классификатора. Женя разметил 100 случайных сообщений, которые классификатор забанил и 100 случайных сообщений, которые классифкатор не стал банить. По этой выборке он оценил precision, recall, ассигасу и FPR. Он утверждает, что эти метрики отражают качество работы классифкатора на потоке свежих сообщений.

Айнура не согласна с Женей и считает, что его оценки смещены из-за того, что они посчитаны на сбалансированной выборке, а токсика всего лишь 20%. Правда ли это?

4. Чтобы все метрики качества соответствовали потоку, можно было бы сделать случайную выборку из него. Однако Айнуре лень. Помогите ей вывести формулы, которые скорректируют оценки Жени.

Задача 6. Рассмотрим целевую функцию логистической регрессии

$$Q(w) = \frac{1}{\ell} \log(1 + \exp(-y \langle w, x \rangle)),$$

1. Найдите градиент ∇Q_w и упростите итоговое выражение таким образом, чтобы в нём участвовала сигмоидная функция

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}.$$

При решении данной задачи вам может понадобиться следующий факт (убедитесь, что он действительно выполняется):

$$\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z)).$$

- 2. Выпишите, как будет выглядеть шаг градиентного спуска.
- 3. Найдите вторую производную целевой функции по w.
- 4. Выпишите квадратичную аппроксимацию для Q(w) в окрестности w=0. Для этого разложите функцию потерь в ряд Тейлора до второго члена в окрестности точки w=0. С какой задачей совпадает задача минимизации квадратичной аппроксимации?