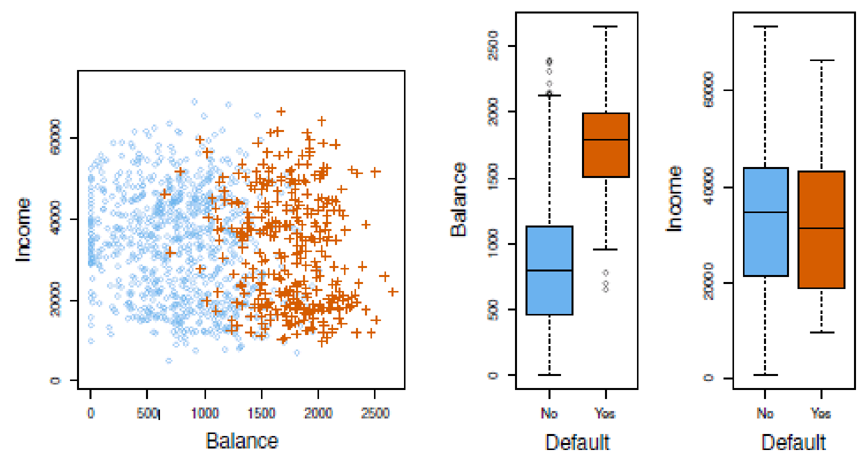
Лекция 9:
Задача классификации. Оценка качества моделей.

Задача классификации

- Переменная отклика является *категориальной,* например:
  - *Бинарная классификация:* почтовое сообщение может принадлежать одному из следующих классов Y = (spam; ham)
  - *Многоклассовая классификация:* изображение цифры принадлежит одному из классов $\mathrm{Y} = \{0, \dots, 9\}$
- Цели:
  - Построить классификатор $a: X \to Y$, который связывает метку класса с неразмеченным x
  - Понимание роли различных предикторов $x = (x_1, \dots, x_p)$
  - Оценка достижимого **качества** классификации



Задача классификации

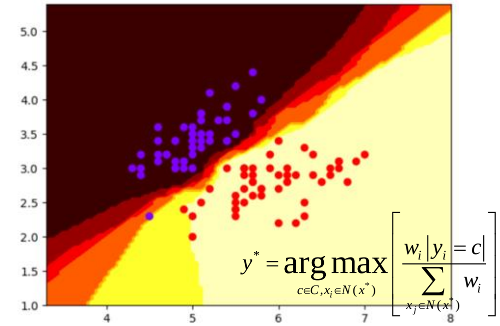
- Дано: множество «размеченных» примеров :
  - обучающая выборка или тренировочный набор:
    $$Z = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{l}$$
  - $y_i \in Y = \{C_1, \dots, C_k\}$: известный **категориальный** отклик и его множество значений мощности *K*
- Основные определения:
  - Постановка задачи: найти алгоритм (или гипотезу, или модель)
    $$a_Z : X \to Y$$
  - Естественная функция потерь – несовпадение прогноза (неудобно - не дифференцируема):
    $$L(x, y) = [y \neq a(x)]$$

Дискриминантные функции

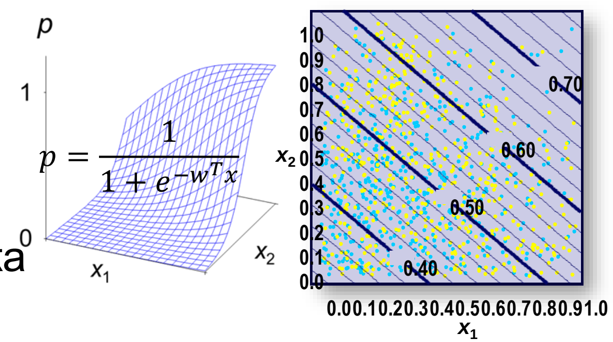
- Во многих случаях удобно пользоваться дискриминантными функциями для каждого класса c: $g_c: X \to G \subset \mathbb{R}$, такими что:
$$a^*(x) = \operatorname*{argmax}_c g_c(x)$$
- Частный (и частый) случай *байесовский классификатор*:
$$g_c(x) = P(y = c|x),\ G = [0,1]$$
- Граница между классами i и j:
$$\{x \in X | g_i(x) = g_j(x)\}$$
- Отступ оценивает «гладкое» качество классификации:
$$M(x, y) = g_y(x) - \max_{c \neq y} g_c(x)$$
- Линейный классификатор:
$$g_c(x) = \langle w_c, x \rangle, \text{ где вектор } x = [x_1, \dots, x_p, 1]$$

Примеры методов классификации

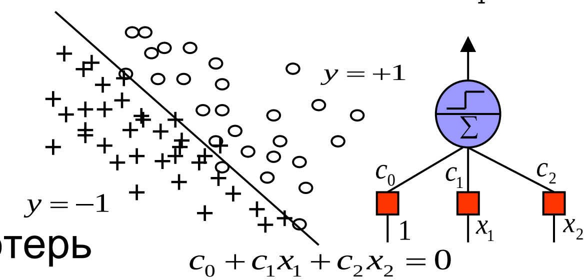
- KNN (не линейный):
  - Взвешенные, kernel и др.
  - Прогноз – голосование соседей по окрестности
  - Дискр. ф-ция – усредненные голосов
  - Обучения нет, вместо него поиск



- Логистическая регрессия (линейная):
  - GLM с распределением Бернулли
  - Прогноз – вероятность целевого отклика
  - Дискр. ф-ция – линейная $w^T x$
  - Обучение – методы оптимизации 1 или 2 порядка



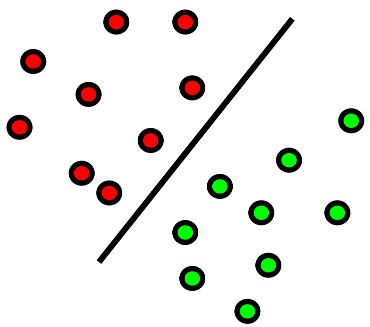
- Линейные гиперплоскости (персептроны):
  - Разделяющие гиперплоскости
  - Прогноз – знак в уравнении гиперплоскости
  - Дискр. ф-ция – расстояние до гиперплоскости
  - Обучение – например, SGD, разные функции потерь



Бинарный классификатор

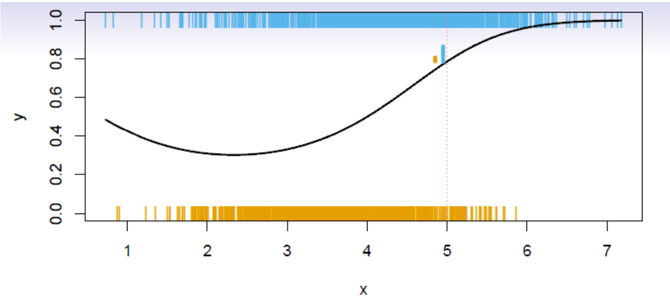
- Два класса $|Y| = 2$
  - например $Y = \{0,1\}$, $Y = \{-,+\}$, $Y = \{no, yes\}$
  - один класс – целевой, или класс «событие», обычно 1, +, yes
  - другой класс - не целевой или «не событие», обычно 0, -, no
- Дискриминантная функция, отступ и модель, примеры:
  - Разделяющая гиперплоскость:

$$\mathrm{Y} = \{-1, +1\},\ \ g(x) = g_{+}(x) - g_{-}(x),$$
$$M(x,y) = yg(x),$$
$$a(x) = sign(g(x))$$



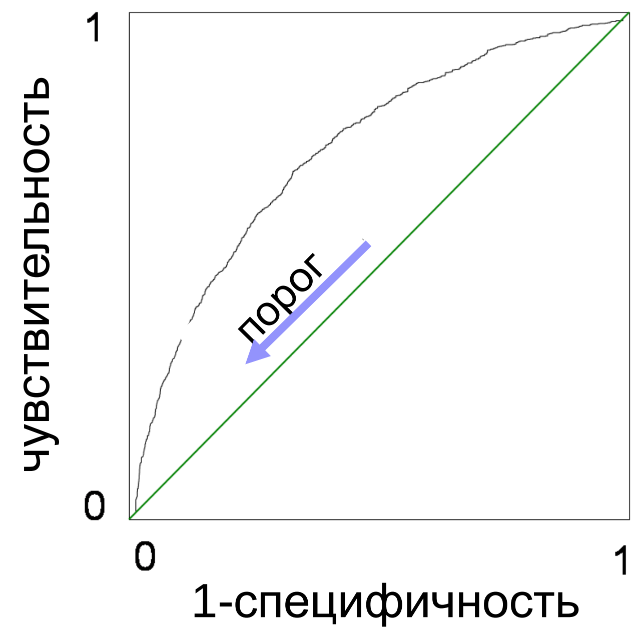
  - Вероятностная модель:

$$\mathrm{Y} = \{0,1\}\,,\ g(x) = p(y=1|x),$$
$$M(x,y) = p(y=1|x) - p(y=0|x) =$$
$$= 2p(y=1|x) - 1,$$
$$a(x) = [M(x)]_{+}$$



Оценка качества бинарного классификатора

Реальность \ Прогноз	0	1	
0	True Negative	False Positive	Всего 0 (не событий)
1	False Negative	True Positive	Всего 1 (событий)
	Всего прогноз 0 (не событий)	Всего прогноз 1 (событий)	



ЧУВСВИТЕЛЬНОСТЬ (true positive rate (TPR), hit rate, recall)
TPR = R = SE = TP / (TP+FN)

СПЕЦИФИЧНОСТЬ (true negative rate (TNR))
SPC = TN / (FP + TN)

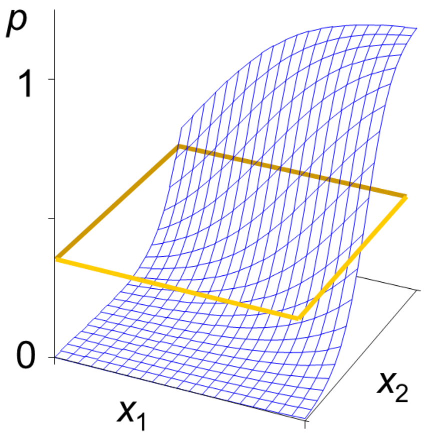
«АККУРАТНОСТЬ»
ACC= (TN+TP) / (FP + FN+TP+TN)

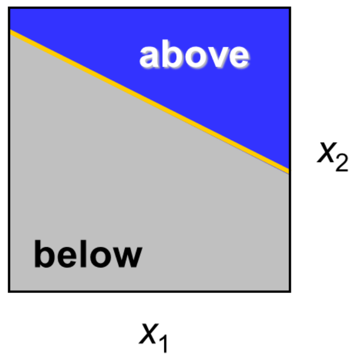
F-МЕРА(гарм. среднее)
F_b = (1-b^2)*P*R/(b^2*(P+R))

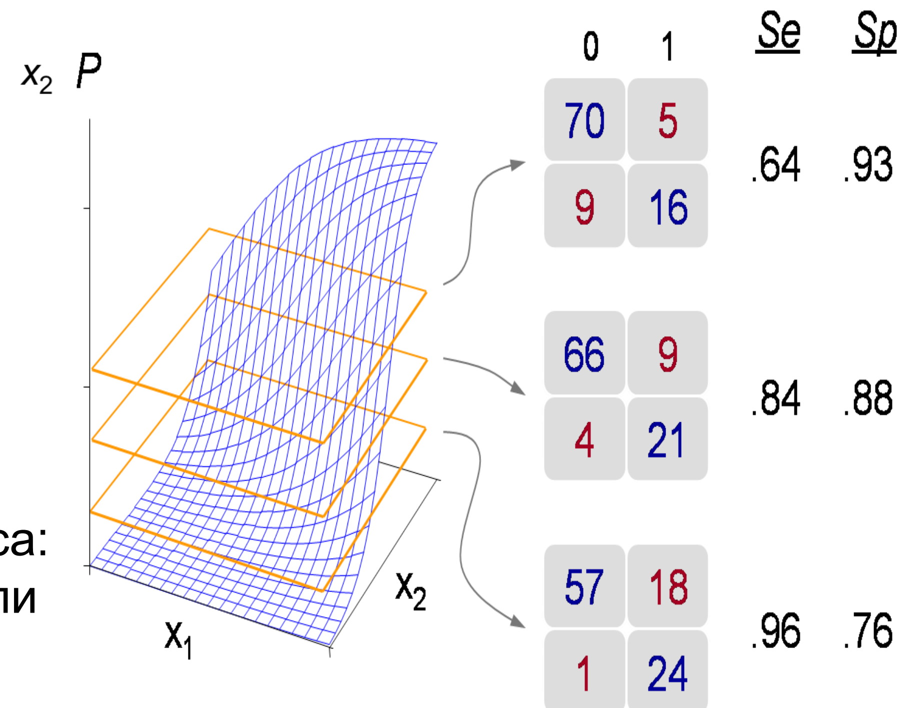
УРОВЕНЬ ОШИБОК
ERR = 1-ACC

ТОЧНОСТЬ (Precision)
P= TP / (TP+FP)

Оценка бинарного классификатора







Матрица выигрыша-проигрыша:

решение

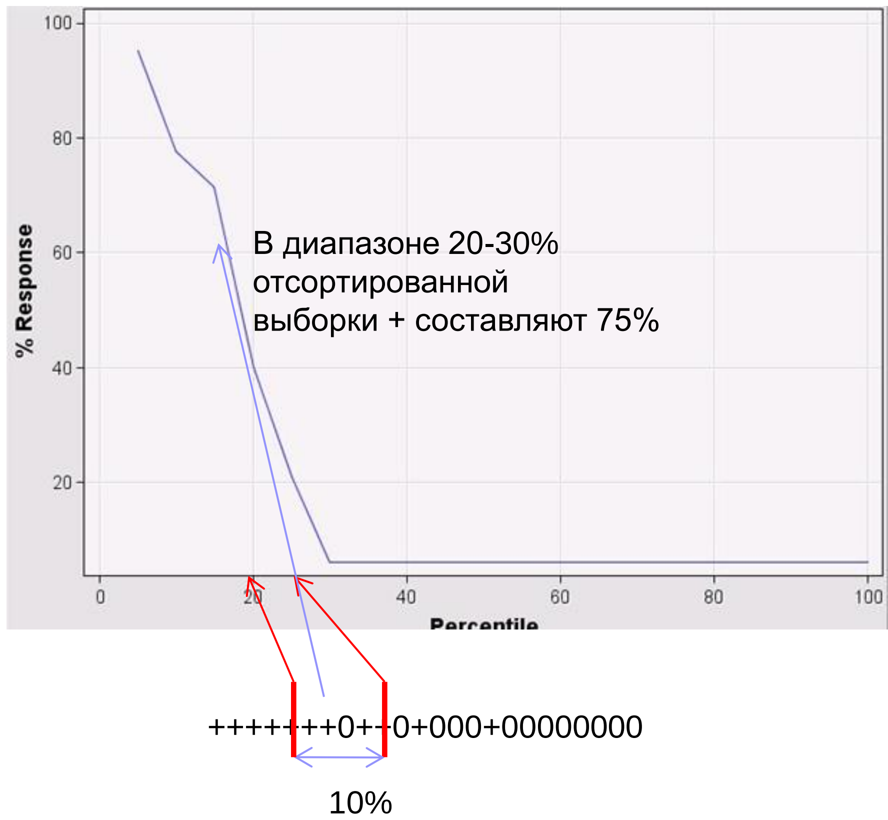
Реальность	0	1
0	δ_{TN}	δ_{FP}
1	δ_{FN}	δ_{TP}

Правило Байеса:
Решение 1 если

$$P > \frac{1}{1 + \left(\dfrac{\delta_{\mathrm{TP}} - \delta_{\mathrm{FN}}}{\delta_{\mathrm{TN}} - \delta_{\mathrm{FP}}}\right)}$$

Графические средства сравнения моделей: Response (отклик)

- Процедура построения:
  - Сортируем (например, слева направо) набор по убыванию дискриминантной функции
  - Идем порогом отсечения по отсортированному набору (слева направо) с некоторым диапазоном (как правило кратно 5%)
  - Для каждого положения диапазона считаем отношение числа положительных примеров к числу всех примеров внутри диапазона
  - Ставим точку на графике
- Агрегированный отклик (cumulative response):
  - Диапазон всегда с 0

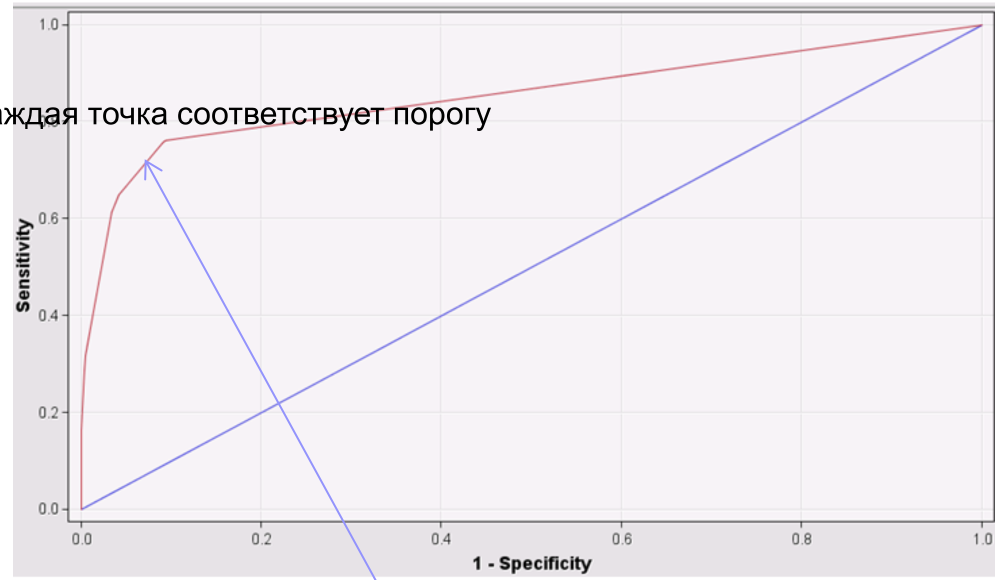


Графические средства сравнения моделей: Lift (подъем)

- Процедура построения:
  - Сортируем (например, слева направо) набор по убыванию дискриминантной функции
  - Идем порогом отсечения по отсортированному набору (слева направо) с некоторым диапазоном (как правило кратно 5%)
  - Для каждого положения диапазона считаем отношение числа положительных примеров к числу положительных примеров, которые могли бы быть выбраны «случайно» - без модели
  - Ставим точку на графике
- Агрегированный подъем(cumulative lift):
  - Диапазон всегда с 0

ROC кривая

- Процедура построения:
  - Сортируем набор по убыванию дискриминантной функции
  - Идем порогом отсечения по отсортированному набору
  - Для каждого положения порога считаем:
    1. отношение числа положительных примеров «слева» от порога к числу всех положительных примеров – true positive rate
    2. отношение числа отрицательных примеров «слева» от порога к числу всех отрицательных примеров – false positive rate
  - Ставим точку на графике



Ошибки 1 и второго рода

+++++++0++0+000+00000000

+? 0?

Оценка на основе согласованности всевозможных пар наблюдений (правильной упорядоченности наблюдений в паре), принадлежащих разным классам.

AUC – мера согласованности

- Дано:
  - бинарная задача классификации в постановке $Y = \{-1, +1\}$
  - $x_{(1)}, \dots, x_{(l)}$- упорядочены по $g\left(x_{(i)}\right) \le g\left(x_{(i+1)}\right)$
- Поскольку:

$$TPR_k = \frac{1}{l_+} \sum_{i=k}^{l} [y_{(i)} = +1],\ FPR_k = \frac{1}{l_-} \sum_{i=k}^{l} [y_{(i)} = -1]$$

- Получаем AUC:
  - вероятность правильно упорядочить пары наблюдений из разных классов:

$$AUC = \sum_{k=1}^{l-1} \frac{TPR_{k+1} - TPR_k}{2} (FPR_k - FPR_{k+1}) =$$

$$= \frac{1}{l_- l_+} \sum_{k=1}^{l-1} \sum_{i=k+1}^{l} [y_{(i)} = +1][y_{(k)} = -1] = \frac{1}{l_- l_+} \sum_{k<i} [y_{(i)} > y_{(k)}]$$

  - не все однозначно с «ничьими», обычно их берут с весом 0.5, но есть разные подходы (в том числе 0 – считать ничьи несогласованными, 1 – считать ничьи согласованными)

Максимизация AUC напрямую с помощью линейной модели

- Дано:
  - бинарная задача классификации в постановке $Y = \{-1, +1\}$
  - Модель классификации в классе $a(x, w) = sign(g(x, w))$
- Поскольку AUC – доля правильно упорядоченных пар из разных классов, то

$$AUC(w) = \frac{1}{l_- l_+} \sum_{i,j} [y_i < y_j]\left(g(x_i, w) - g\left(x_j, w\right)\right) \to \max_w$$

- Эмпирический риск (функция потерь ранжирования):

$$1 - AUC(w) \leq Q(w) = \frac{1}{l_- l_+} \sum_{i,j: y_i < y_j} L\underbrace{\left(g(x_i, w) - g\left(x_j, w\right)\right)}_{\text{Отступ для пары } x_i, x_j\text{: } M(x_i, x_j, w)} \to \min_w$$

- Алгоритм – например, SGD

Логистическая функция потерь для оценки качества вероятностных моделей

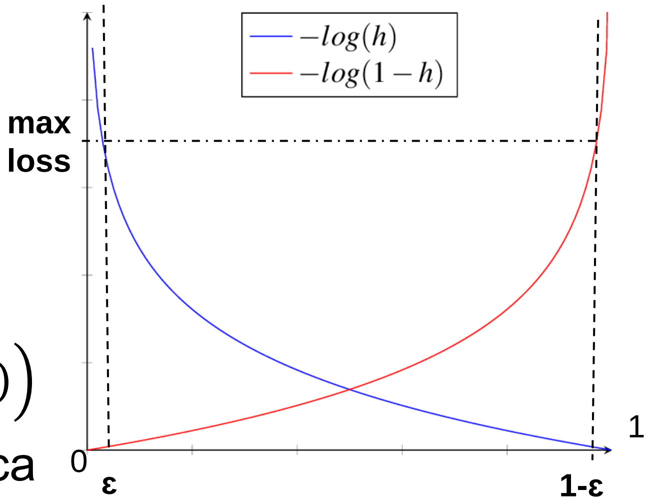
- AUC инвариантна к монотонному преобразованию отклика – не лучший вариант для вероятностных классификаторов
- Поэтому используют логарифмическое правдоподобие для распределения Бернулли
- Если $Y = \{0,1\}, Z = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{l}$, $p(x) = a(x) = \underset{y \in Y}{\operatorname{argmax}} P(y|x)$:

$$logloss(Z, p(x)) = -\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left[y_i \log\left(p(x_i)\right) + (1 - y_i)\log(1 - p(x_i))\right]$$

- Ключевой недостаток:
  - чувствительность к «грубым» ошибкам
  - неограниченный рост потерь
  - делают «пороги толерантности»
- Многоклассовое (С классов) обобщение:

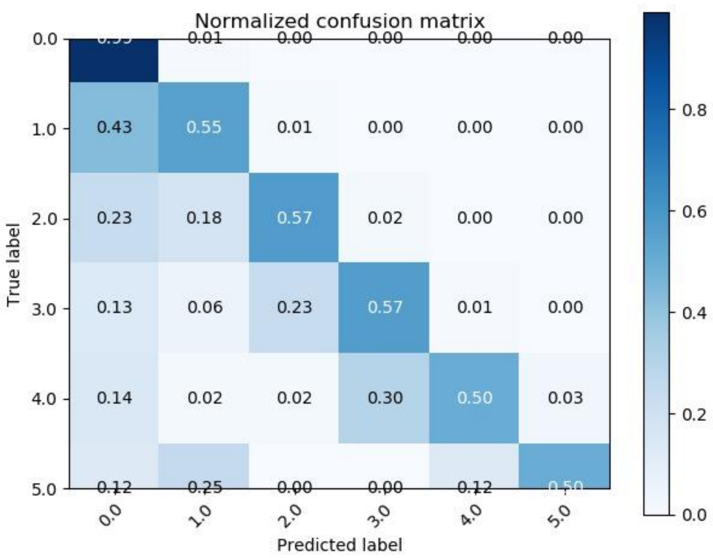
$$logloss(Z, p(x)) = -\frac{1}{lC}\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{C} y_{ij} \log\left(p_j(x_i)\right)$$

y_{ij} - бинарный OneHotEncoding метки класса

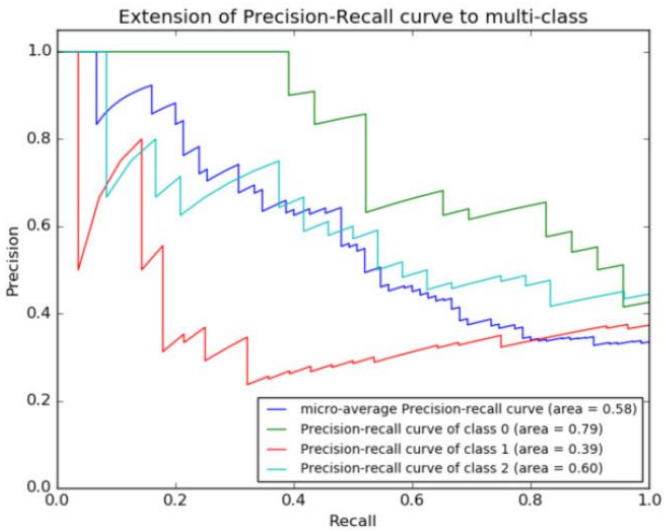


Многоклассовый случай

Многоклассовая матрица ошибок



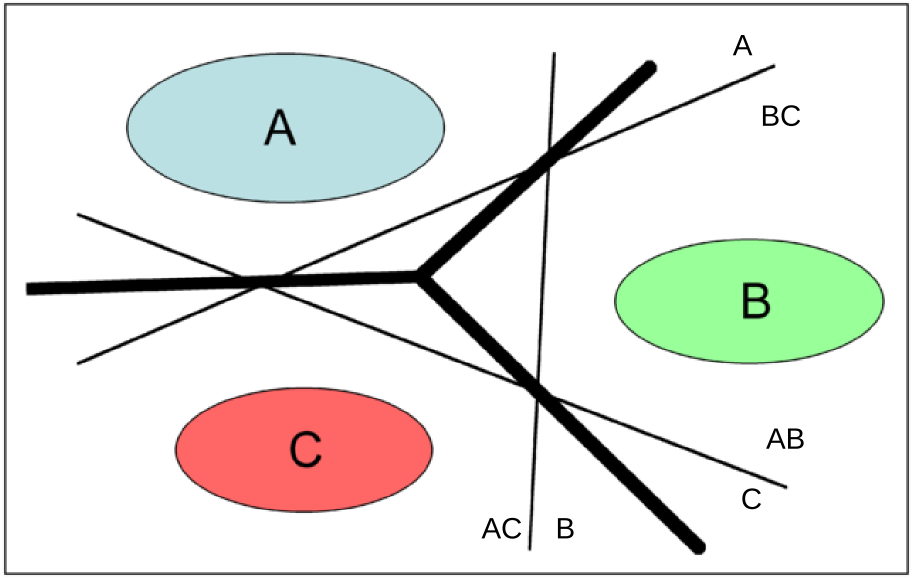
«Бинарные» оценки графики по каждому классу



	бинарный случай	макроусреднение	микроусреднение
Точность	$\frac{TP}{\widehat{P}}$	$\frac{1}{C}\sum_{c=1}^{C}\frac{TP_c}{\widehat{P}_c}$	$\frac{\sum_{c=1}^{C} TP_c}{\sum_{c=1}^{C} \widehat{P}_c}$
Полнота	$\frac{TP}{P}$	$\frac{1}{C}\sum_{c=1}^{C}\frac{TP_c}{P_c}$	$\frac{\sum_{c=1}^{C} TP_c}{\sum_{c=1}^{C} P_c}$

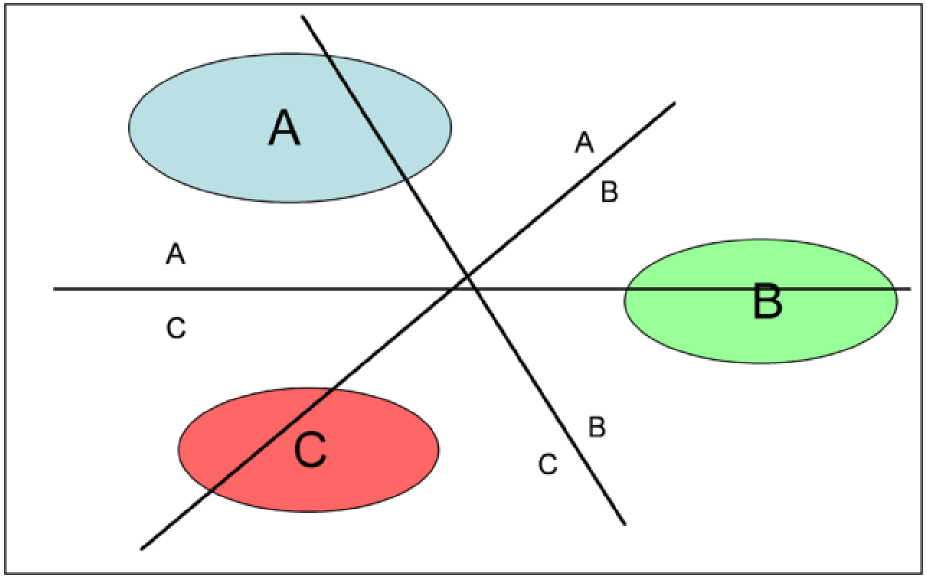
Декомпозиция много-классовой задачи в ансамбль бинарных

Каждый против всех



k бинарных моделей (границ)

Каждый против каждого



k(k-1)/2 бинарных моделей (границ)

Много-классовые задачи:
Error Correcting Output Coding (ECOC)

- Идея из теории информации и телекоммуникаций:
  - В телекоммуникациях: использовать избыточные коды для коррекции ошибок при передачи данных по «зашумленному» каналу
  - В машинном обучении: использовать избыточное число бинарных моделей (кодируется множество классов в супер-классы = группы) для повышения точности классификации, т.е. отклик избыточно кодируется
- Три этапа в ECOC:
  - Coding (кодирование): составление кодовой матрицы (coding matrix) и на ее основе обучающих выборок для бинарных задач
  - Learning (обучение): строятся бинарные модели
  - Decoding (декодирование): прогнозируется отклик (метка класса) на основе индивидуальных прогнозов бинарных классификаторов и кодовой матрицы.

Кодирование в ECOC

- Исходная задача с k классами конвертируется в m бинарных подзадач с помощью кодовой матрицы

m бинарных задач

k классов

	1	2	...	s	...	m
1	+1	+1	...	-1	...	0
2	0	-1	...	0		+1
...	...	...	...	...	...	...
j	0	-1	...	-1	...	-1
...	...	...	...	...	...	...
k	-1	0	...	+1	...	-1

j-й класс

$M \in \{-1,0,1\}^{k\times m}$

s-ая бинарная задача

- Каждый j-й класс имеет кодовое слово, соответствующее строке в матрице M
- Каждая s-я бинарная задача имеет 3 типа классов :
  - "positive": $I_s^+ = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = +1\}$
  - "negative": $I_s^- = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = -1\}$
  - "ignored": $I_s^0 = \{y | y \in Y \wedge M(y,s) = 0\}$

Кодирование в ECOC

- "Разреженный" ECOC – общий случай:
  - "Плотный" ECOC – матрица без 0
  - "Каждый против всех":

	1	*2*	…	…	*k-1*	*k*
1	+1	-1	-1	-1	-1	-1
2	-1	+1	-1	-1	-1	-1
…	-1	-1	+1	-1	-1	-1
…	-1	-1	-1	+1	-1	-1
k-1	-1	-1	-1	-1	+1	-1
k	-1	-1	-1	-1	-1	+1

"Каждый против каждого":

	1	*2*	…	*k-1*	*k*	*k+1*	…	$\binom{k}{2}$
1	+1	+1	…	+1	0	0	…	0
2	-1	0	…	0	+1	+1	…	0
…	0	-1	…	0	-1	0	…	0
…	0	0	…	0	0	-1	…	0
…	0	0	…	0	0	0	…	+1
k	0	0	…	-1	0	0	…	-1

- Методы кодирования:
  - *Алгебраическая теория кодирования* (коды Хэмминга, например)
  - *Задаче-зависимое кодирование*: группы задает эксперт или ищутся на основе матрицы ошибок в "Каждый против всех" или "Каждый против каждого"
  - **Случайные коды**: случайные длинные «хорошо разделимые»

Обучение в ECOC

- m бинарных задач решаются независимо:
  - *s-й* бинарный классификатор отделяет *s-ые* “положительные” примеры от *s-х* “отрицательных, так что *s-й* тренировочный набор*:*

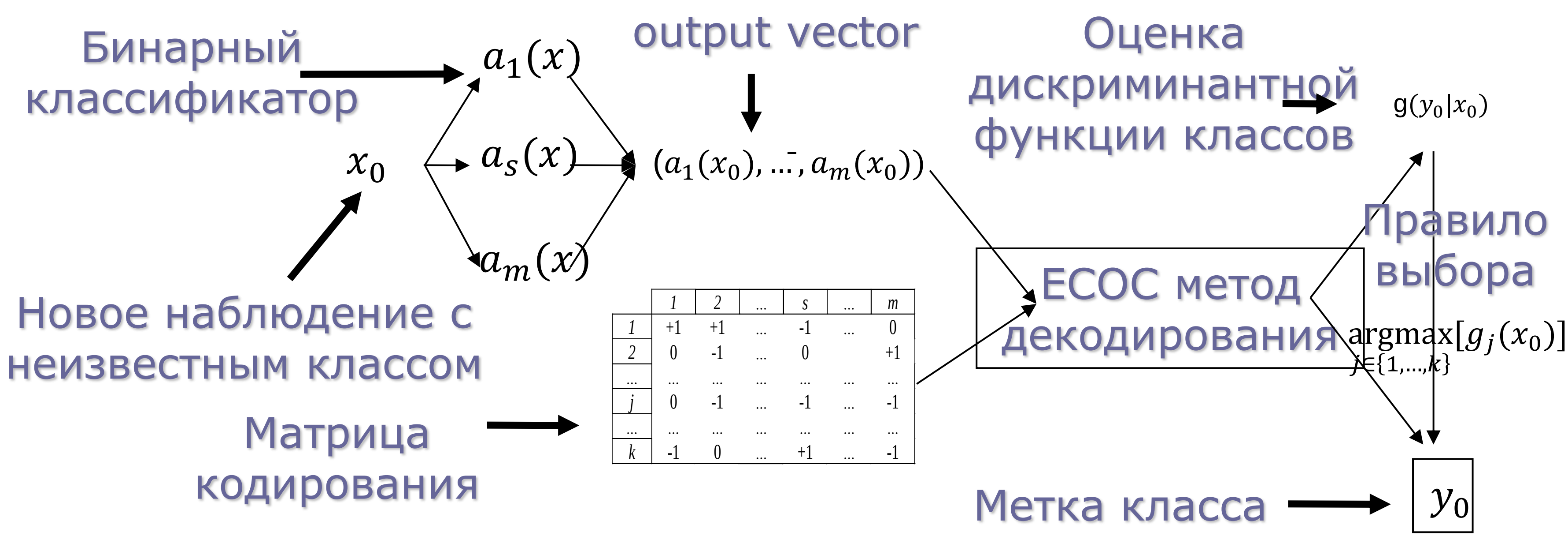
$$Z_s = \{(x_i, M(y_i, s)) | (x_i, y_i) \in Z \wedge (y_i \in I_s^- \vee y_i \in I_s^+)\} \in X \times \{-1, +1\}$$

  - Строится бинарные классификаторы $a_s: X \to Y_{bin}$ и получаем m моделей бинарной классификации (m гипотез) $a_1(x), \ldots, a_m(x)$
- Типы бинарного отклика:
  - *Булевый* (hard-level): $Y_{hard} = \{-1, +1\}$
  - *Вещественный* (soft-level): $Y_{soft} = [-1,1]$
  - *Вероятностный*:

$$Y_{prob} = \{-r_s(x) = P(a_s(x) \in I_s^+ | a_s(x) \in I_s^+ \cup I_s^-)$$

Декодирование в ECOC

- Процесс прогнозирования:



	1	2	...	s	...	m
1	+1	+1	...	-1	...	0
2	0	-1	...	0		+1
...	...	...	...	...	...	...
j	0	-1	...	-1	...	-1
...	...	...	...	...	...	...
k	-1	0	...	+1	...	-1

  - Применить все бинарные классификаторы, получить вектор откликов длины m
  - Применить к нему выбранный метод декодирования и получить прогноз

Декодирование в ECOC

- На основе расстояний:
  - Поиск ближайшего к вектору откликов кодового слова

Выходной вектор прогнозов

$\bar{a}(x_0) = (0,1,\ldots,-1)$

Ближайший код

	1	2	...	s	...	l
1	+1	+1	...	-1	...	0
2	0	-1	...	0		+1
...	...	...	...	...	...	...
j	0	-1	...	-1	...	-1
...	...	...	...	...	...	...
k	-1	0	...	+1	...	-1

$y_0 = j$

Предсказанный класс

- Используются разные метрики:
  - Хэмминга (hard-level): $d_H(\bar{a}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m}[1 - \mathrm{sgn}(M(y,s)a_s(x))]$
  - Минковского (probabilistic): $d_{L1}(\bar{r}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m}|M(y,s) - r_s(x)|$
  - На основе функции потерь:

$$Loss(\bar{a}(x), M(y)) = \sum_{s=1}^{m} loss(M(y,s)a_s(x))$$

  - Вероятностные (например, на основе модели попарных сравнений Бредли-Терри) и др.

Пример

```python
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

```python
from sklearn.multiclass import OneVsRestClassifier
from sklearn.multiclass import OneVsOneClassifier
from sklearn.multiclass import OutputCodeClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.inspection import DecisionBoundaryDisplay
```

```python
X, y = load_iris(return_X_y=True)
X = X[:, :2]
X.shape, y.shape
```

```
((150, 2), (150,))
```

```python
ovr = OneVsRestClassifier(LogisticRegression()).fit(X, y)
ovo = OneVsOneClassifier(LogisticRegression()).fit(X, y)
ocs = OutputCodeClassifier(LogisticRegression(),code_size=5).fit(X, y)
print(ocs.code_book_)
```

```
[[ 1. -1. -1.  1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1. -1.  1.  1.  1.]
 [ 1. -1. -1.  1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1. -1. -1. -1.  1.]
 [-1.  1. -1.  1. -1. -1.  1.  1. -1. -1. -1.  1.  1. -1. -1.]]
```

```python
for estimator in [ovr, ovo, ocs]:
    DecisionBoundaryDisplay.from_estimator(estimator, X, cmap="Pastel1")
    plt.scatter(*X.T, c=y, cmap="Set1")
    plt.title(type(estimator).__name__)
```