Лекция 5
Линейные модели классификации. Часть 2.

Кантонистова Е.О.

ВШЭ, 2022

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)

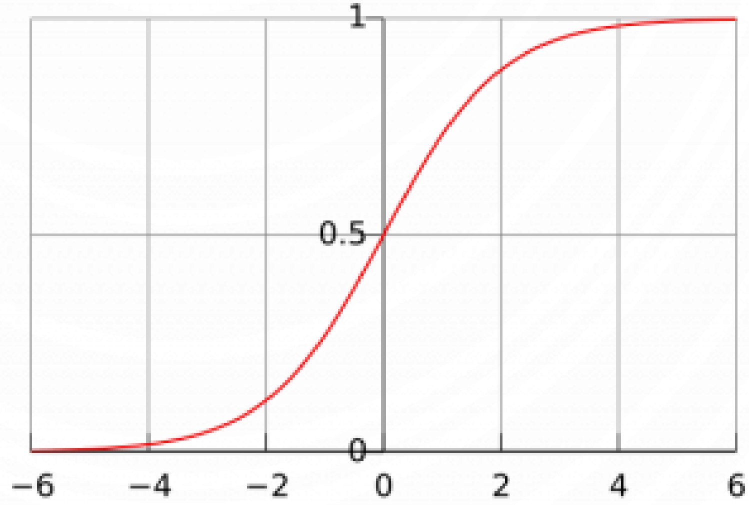
ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ

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

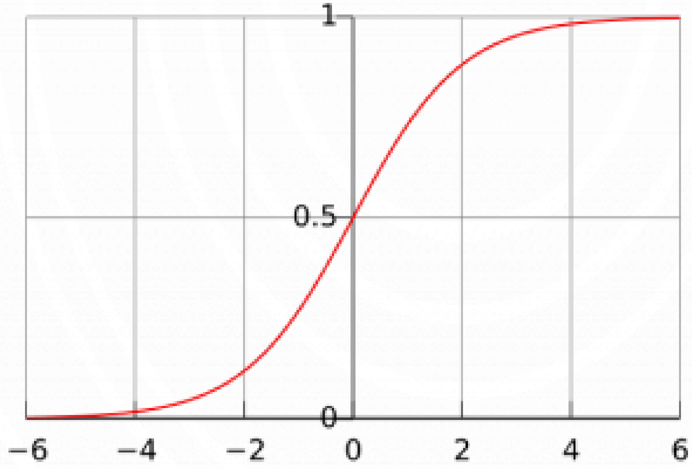
Утверждение. $a(x, w)$ – вероятность того, что $y = +1$ на объекте x, т.е.

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

Доказательство. Дальше в лекции.

РАЗДЕЛЯЮЩАЯ ГРАНИЦА

Предсказываем $y = +1$, если $a(x, w) \geq 0.5$.



$a(x, w) = \sigma(w^T x) \geq 0.5$, если $w^T x \geq 0$.

Получаем, что

- $y = +1 \text{ при } w^T x \geq 0$
- $y = -1 \text{ при } w^T x < 0$,

т.е. $w^T x = 0$ – разделяющая гиперплоскость.

ЛОГИСТИЧЕСКАЯ РЕГРЕССИЯ

Логистическая регрессия - это линейный классификатор!

ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ЛОГИСТИЧЕСКОЙ РЕГРЕССИИ

Если взять квадратичную функцию потерь $L(a, y) = (a - y)^2$,

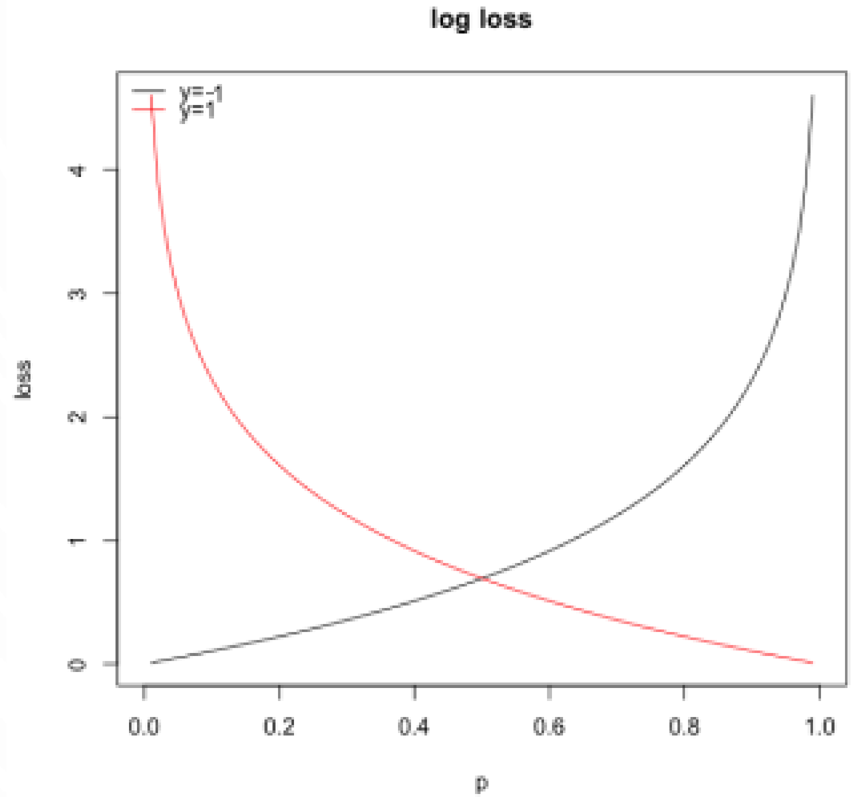
то возникнут проблемы:

- $Q(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(\frac{1}{1+e^{-w^T x}} - y\right)^2$ - не выпуклая функция (можем не попасть в глобальный минимум при оптимизации)
- На совсем неправильном предсказании маленький штраф (пусть предсказали вероятность 0% на объекте класса $y = +1$, тогда штраф всего $(1 - 0)^2 = 1$)

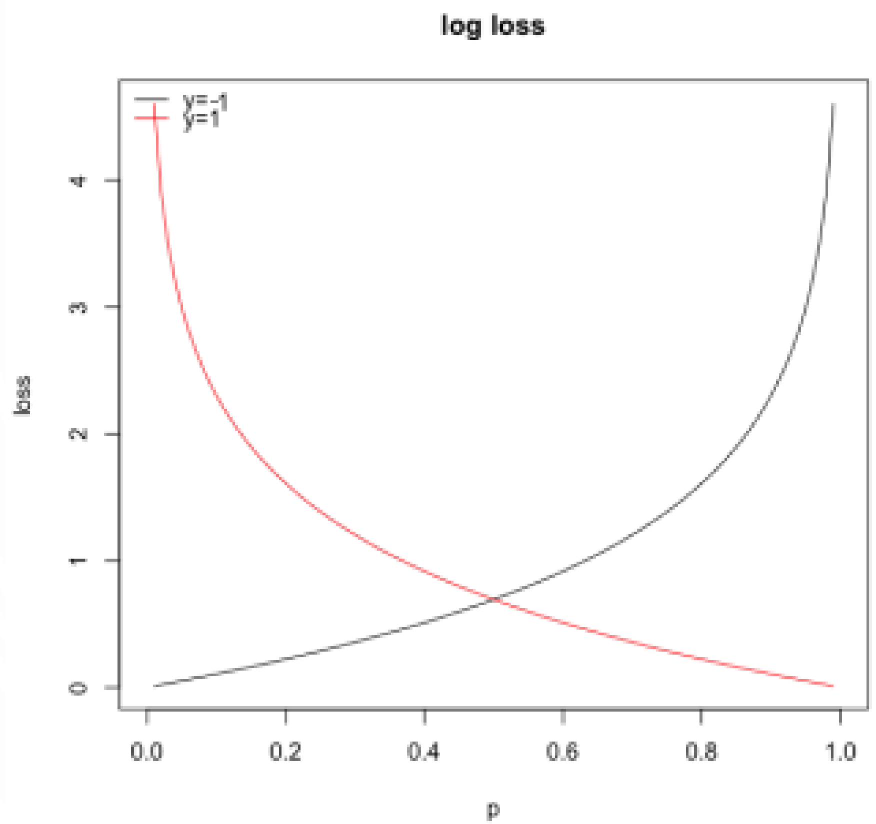
ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ ЛОГИСТИЧЕСКОЙ РЕГРЕССИИ

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

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



ЛОГИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ПОТЕРЬ



- если $a(x, w) = 1$ и $y = +1$, то штраф $L(a, y) = 0$
- если $a(x, w) \to 0$, а $y = +1$, то штраф $L(a, y) \to +\infty$

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:

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

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

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

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***:

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

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:

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

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):

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

- 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!

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

***Вывод:** логистическая функция потерь корректно предсказывает вероятности.*

ВЫБОР АЛГОРИТМА $b(x)$

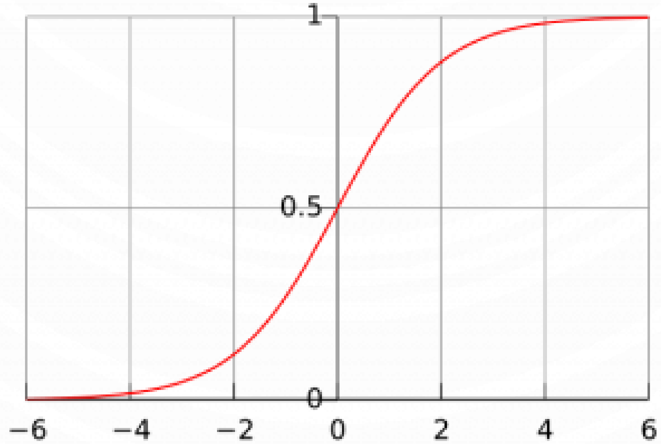
- Хотим, чтобы алгоритм $b(x)$ возвращал числа из отрезка $[0, 1]$.

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

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

Идея доказательства:

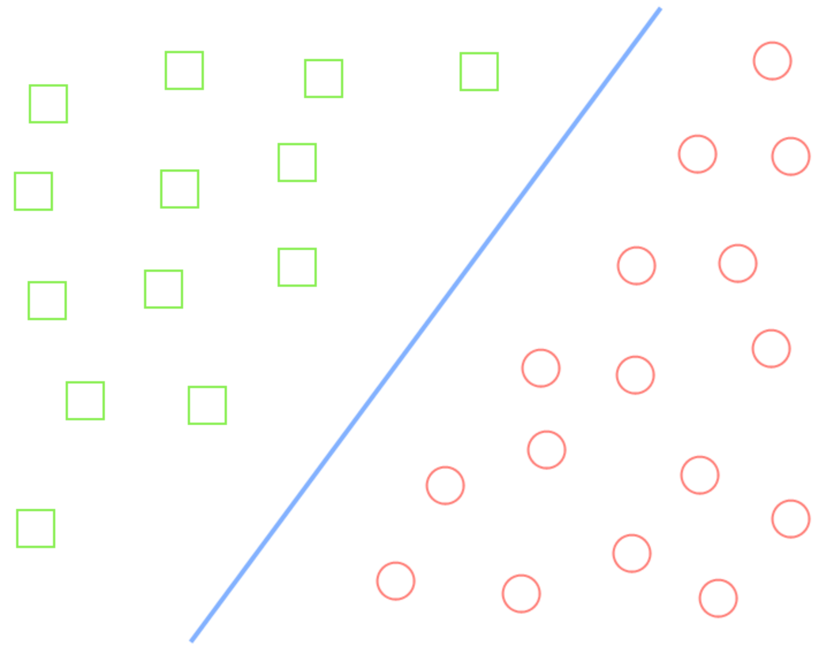
Подставляем явный вид сигмоиды в логарифмическую функцию потерь:

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

МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ

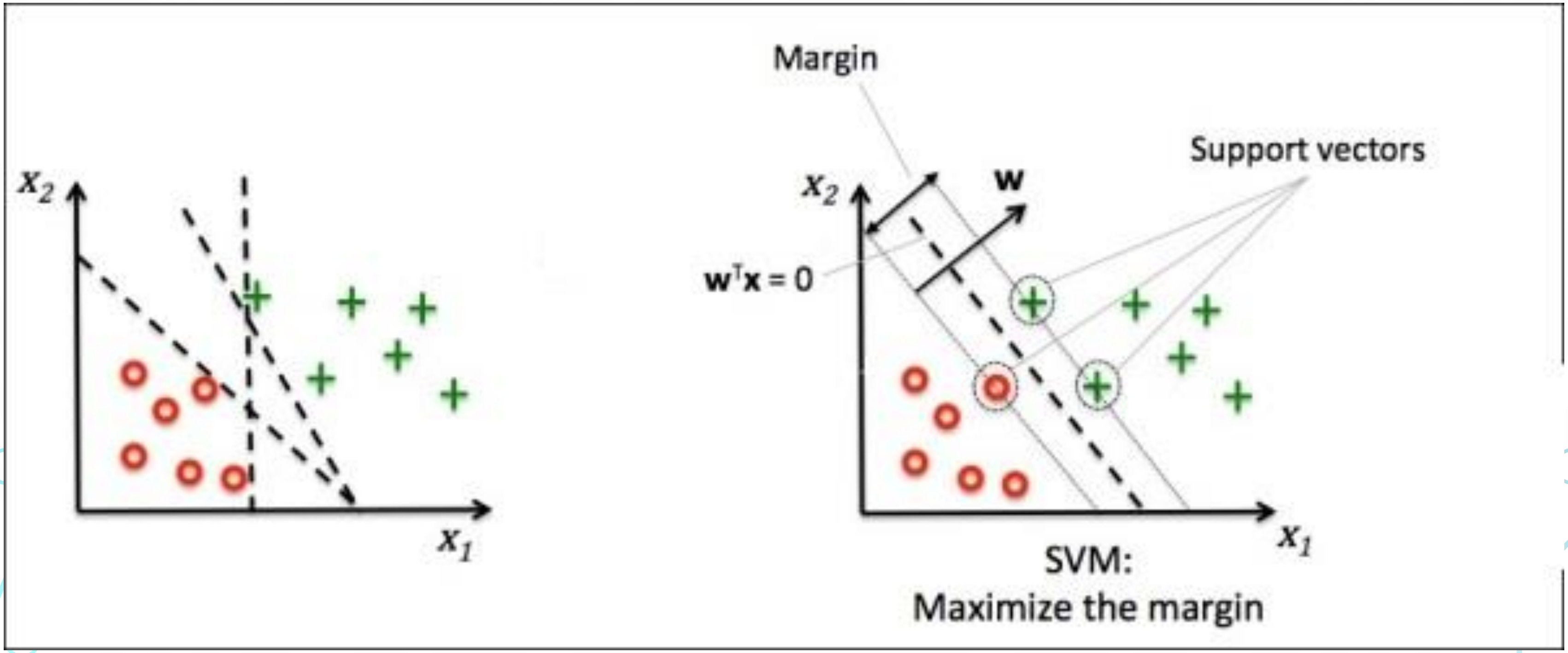
ЛИНЕЙНО РАЗДЕЛИМАЯ ВЫБОРКА

Выборка ***линейно разделима***, если существует такой вектор параметров w^*, что соответствующий классификатор $a(x)$ не допускает ошибок на этой выборке.



МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: РАЗДЕЛИМЫЙ СЛУЧАЙ

- Цель метода опорных векторов (Support Vector Machine) – максимизировать ширину разделяющей полосы.



МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: РАЗДЕЛИМЫЙ СЛУЧАЙ

- $a(x) = sign\big((w, x) + w_0\big)$
- Нормируем параметры w и w_0 так, что

$$\min_{x \in X} |(w, x) + w_0| = 1$$

МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: РАЗДЕЛИМЫЙ СЛУЧАЙ

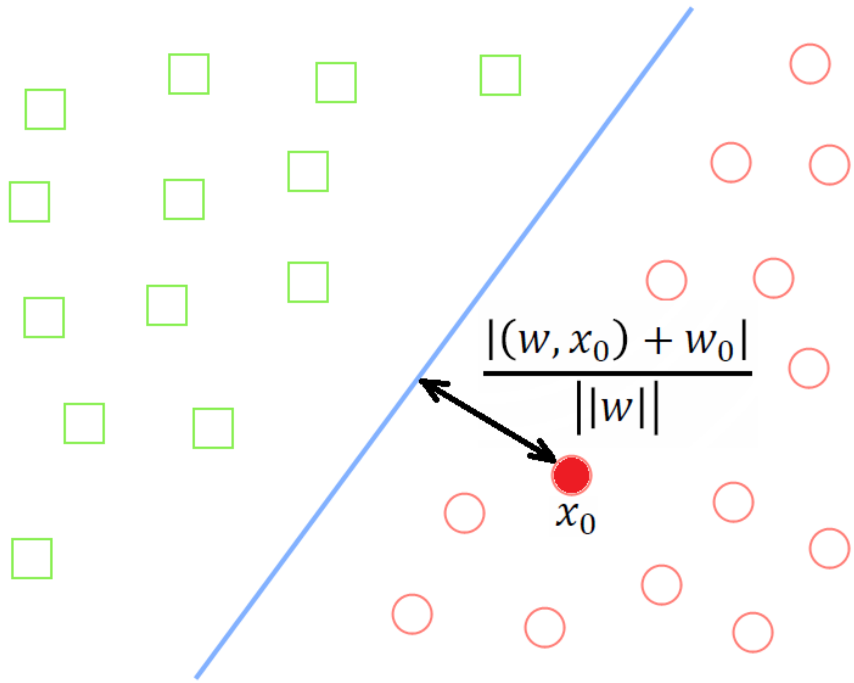
- $a(x) = sign\big((w, x) + w_0\big)$
- Нормируем параметры w и w_0 так, что

$$\min_{x \in X} |(w, x) + w_0| = 1$$

Расстояние от точки x_0 до разделяющей гиперплоскости, задаваемой

классификатором:

$$\rho(x_0, a) = \frac{|(w, x_0) + w_0|}{||w||}$$



МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: РАЗДЕЛИМЫЙ СЛУЧАЙ

- Нормируем параметры w и w_0 так, что

$$\min_{x \in X} |(w, x) + w_0| = 1$$

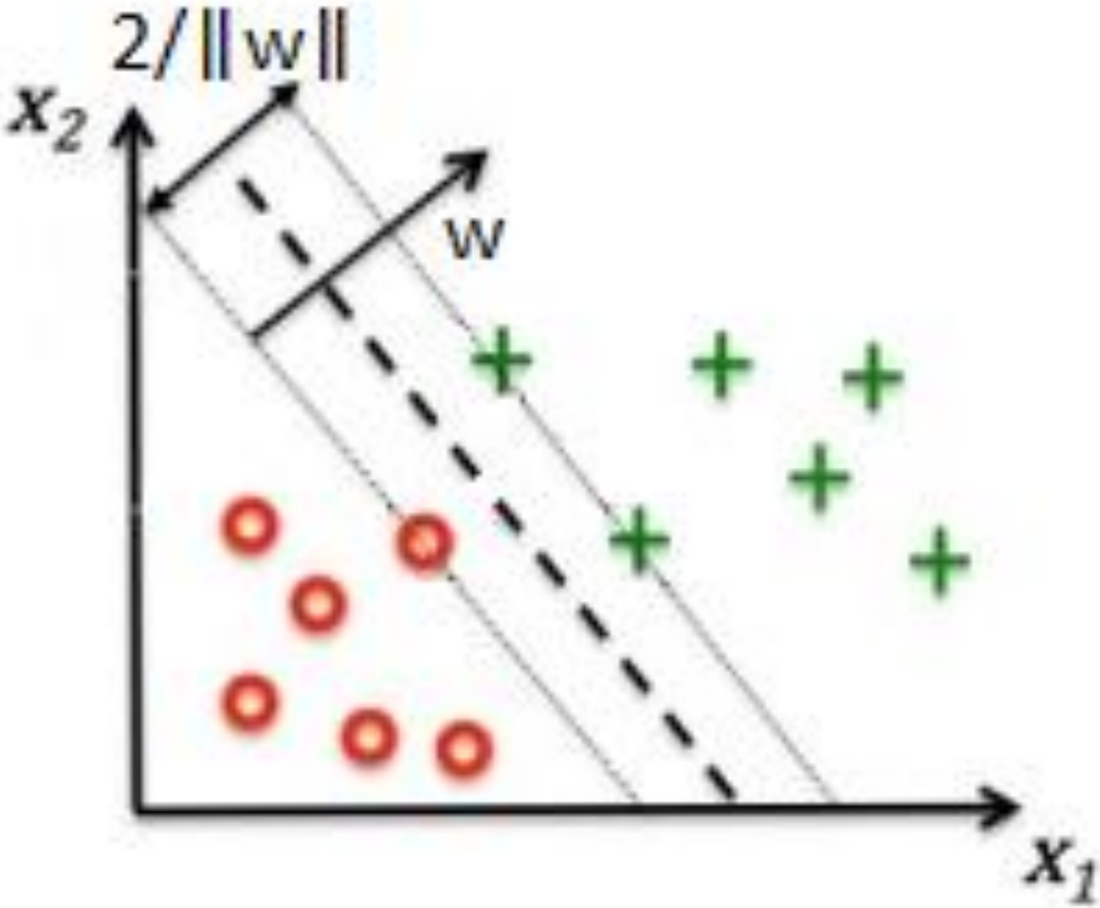
Тогда расстояние от точки x_0 до разделяющей гиперплоскости, задаваемой классификатором:

$$\rho(x_0, a) = \frac{|(w, x_0) + w_0|}{||w||}$$

- Расстояние до ближайшего объекта $x \in X$:

$$\min_{x \in \mathrm{X}} \frac{|(w, x) + w_0|}{||w||} = \frac{1}{||w||} \min_{x \in X} |(w, x) + w_0| = \frac{\mathbf{1}}{||\boldsymbol{w}||}$$

РАЗДЕЛЯЮЩАЯ ПОЛОСА



Оптимизационная задача SVM для разделимой выборки

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 \to \min\limits_{w} \\ y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1, i = 1, \dots, l \end{cases}$$

Утверждение. Данная оптимизационная задача имеет единственное решение.

ЛИНЕЙНО НЕРАЗДЕЛИМАЯ ВЫБОРКА

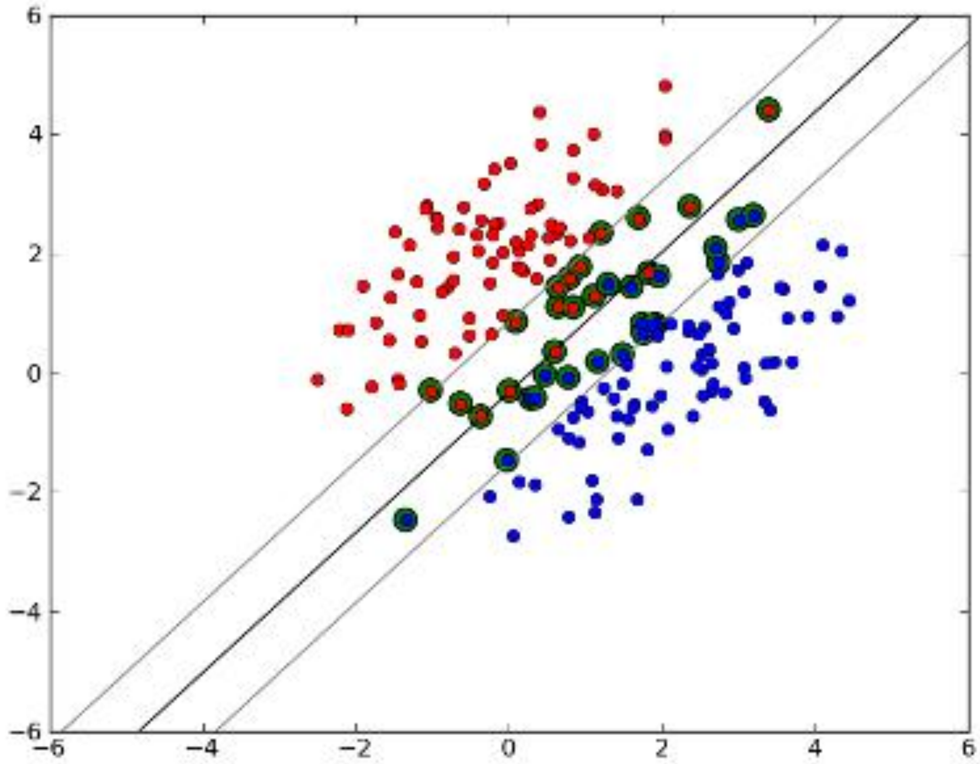
- Существует хотя бы один объект $x \in X$, что

$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) < 1$$

ЛИНЕЙНО НЕРАЗДЕЛИМАЯ ВЫБОРКА

- Существует хотя бы один объект $x \in X$, что

$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) < 1$$



ЛИНЕЙНО НЕРАЗДЕЛИМАЯ ВЫБОРКА

- Существует хотя бы один объект $x \in X$, что

$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) < 1$$

Смягчим ограничения, введя штрафы $\xi_i \geq 0$:

$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l$$

МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: НЕРАЗДЕЛИМЫЙ СЛУЧАЙ

Хотим:

- Минимизировать штрафы $\sum_{i=1}^{l} \xi_i$
- Максимизировать отступ $\frac{1}{||w||}$

Метод опорных векторов: неразделимый случай

Хотим:

- Минимизировать штрафы $\sum_{i=1}^{l} \xi_i$
- Максимизировать отступ $\frac{1}{||w||}$

Задача оптимизации:

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

Метод опорных векторов: неразделимый случай

Утверждение. Задача

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}\left|\left|w\right|\right|^2 + C\sum\limits_{i=1}^{l}\xi_i \to \min\limits_{w, w_0, \xi_i} \\ y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \\ \xi_i \geq 0, i = 1, \dots, l \end{cases}$$

Является выпуклой и имеет единственное решение.

СВЕДЕНИЕ К БЕЗУСЛОВНОЙ ЗАДАЧЕ

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\left\|w\right\|^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i \to \min\limits_{w,w_0,\xi_i} (1) \\ y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \ (2) \\ \xi_i \geq 0, i = 1, \dots, l \ (3) \end{cases}$$

- Перепишем (2) и (3):

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i\big((w, x_i) + w_0\big) = 1 - M_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

СВЕДЕНИЕ К БЕЗУСЛОВНОЙ ЗАДАЧЕ

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i \to \min\limits_{w,w_0,\xi_i} (1) \\ y_i\big((w,x_i)+w_0\big) \geq 1-\xi_i, i=1,\dots,l\ (2) \\ \xi_i \geq 0, i=1,\dots,l\ (3) \end{cases}$$

- Перепишем (2) и (3):

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i\big((w,x_i)+w_0\big) \\ \xi_i \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \xi_i = \max(0,1-y_i\big((w,x_i)+w_0\big))$$

СВЕДЕНИЕ К БЕЗУСЛОВНОЙ ЗАДАЧЕ

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{l}\xi_i \to \min\limits_{w,w_0,\xi_i} (1) \\ y_i\big((w,x_i)+w_0\big) \geq 1-\xi_i, i=1,\dots,l \ (2) \\ \xi_i \geq 0, i=1,\dots,l \ (3) \end{cases}$$

- Перепишем (2) и (3):

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i\big((w,x_i)+w_0\big) \\ \xi_i \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \xi_i = \max(0,1-y_i\big((w,x_i)+w_0\big))$$

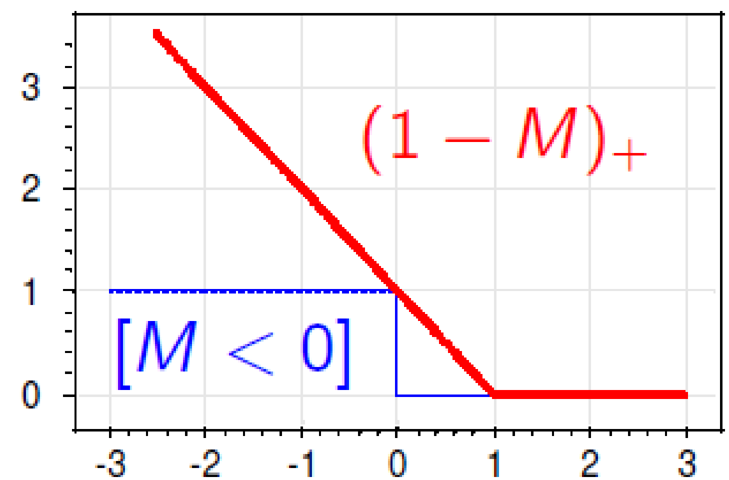
Получаем безусловную задачу оптимизации:

$$\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{l}\max\Big(0,1-y_i\big((w,x_i)+w_0\big)\Big) \to \min_{w,w_0}$$

МЕТОД ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ: ЗАДАЧА ОПТИМИЗАЦИИ

- На задачу оптимизации SVM можно смотреть, как на *оптимизацию функции потерь* $L(M) = max(0, 1 - M) = (1 - M)_+$ *с регуляризацией*:

$$Q(a, X) = \sum_{i=1}^{l} \left(1 - M_i(w, w_0)\right)_+ + \frac{1}{2C} \left|\left|w\right|\right|^2 \to \min_{w, w_0}$$

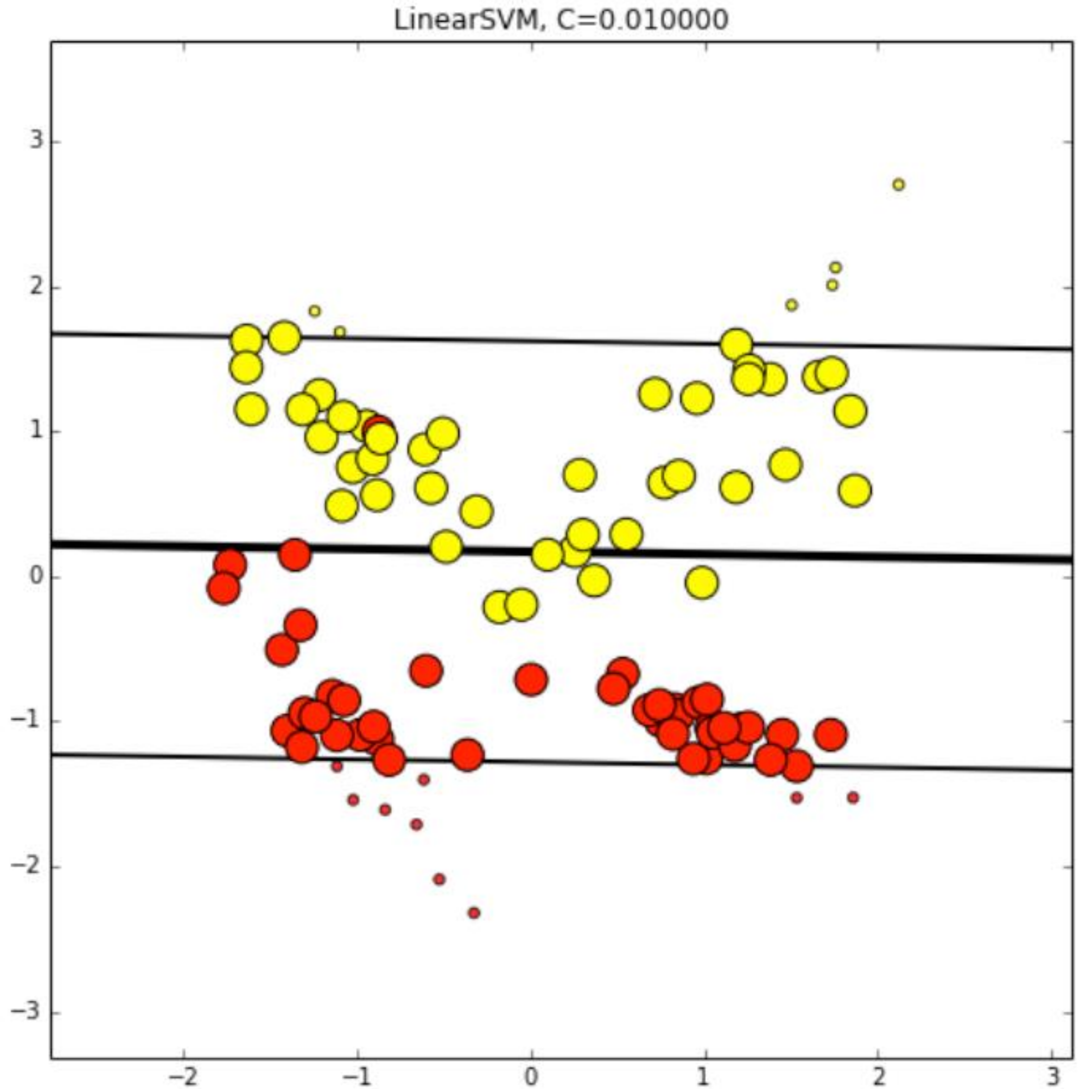


ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ C

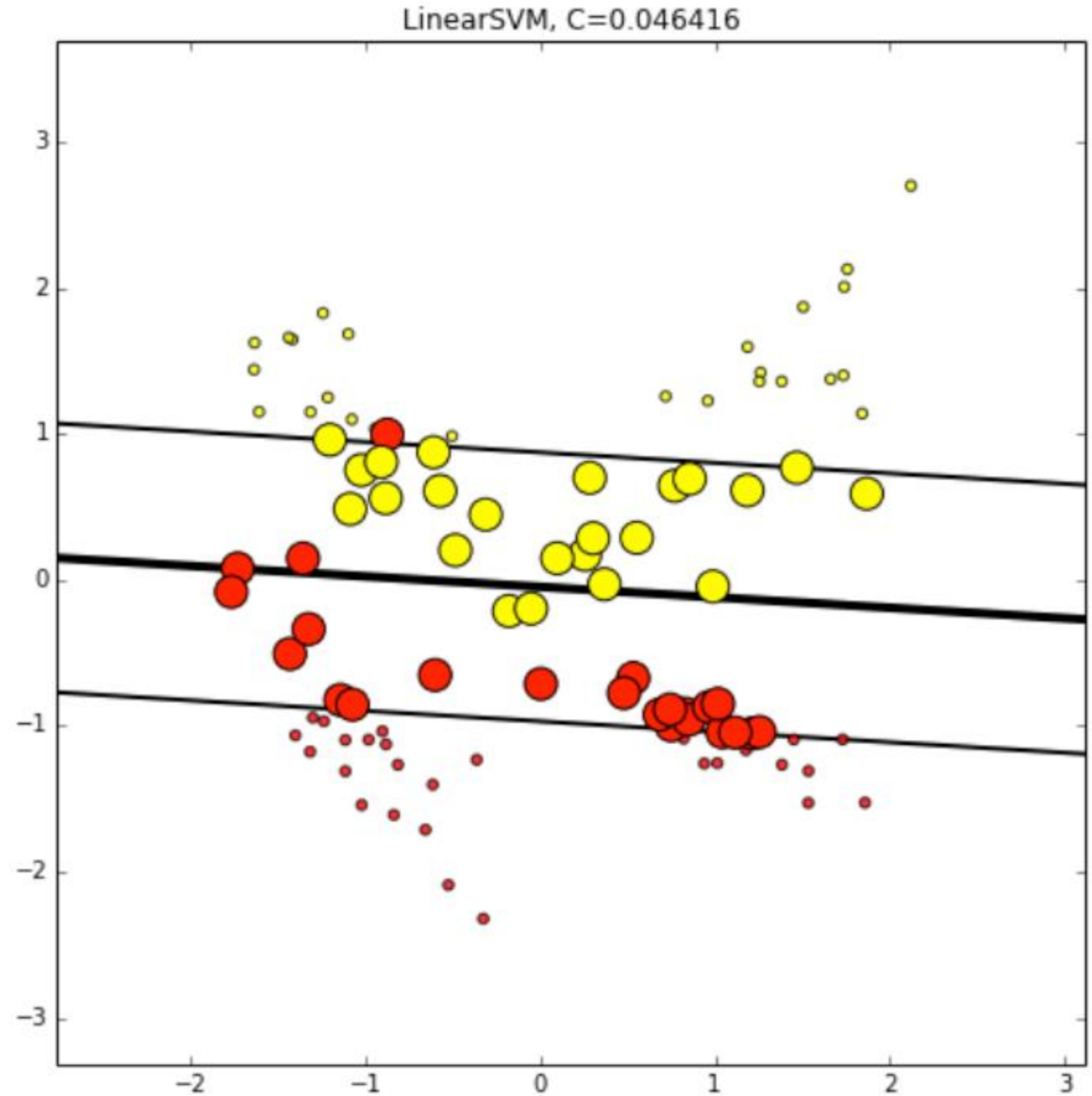
$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 + \boldsymbol{C}\sum_{i=1}^{l}\xi_i \to \min_{w,w_0,\xi_i} (1) \\ y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l\ (2) \\ \xi_i \geq 0, i = 1, \dots, l\ (3) \end{cases}$$

Положительная константа C является управляющим параметром метода и позволяет находить компромисс между максимизацией разделяющей полосы и минимизацией суммарной ошибки.

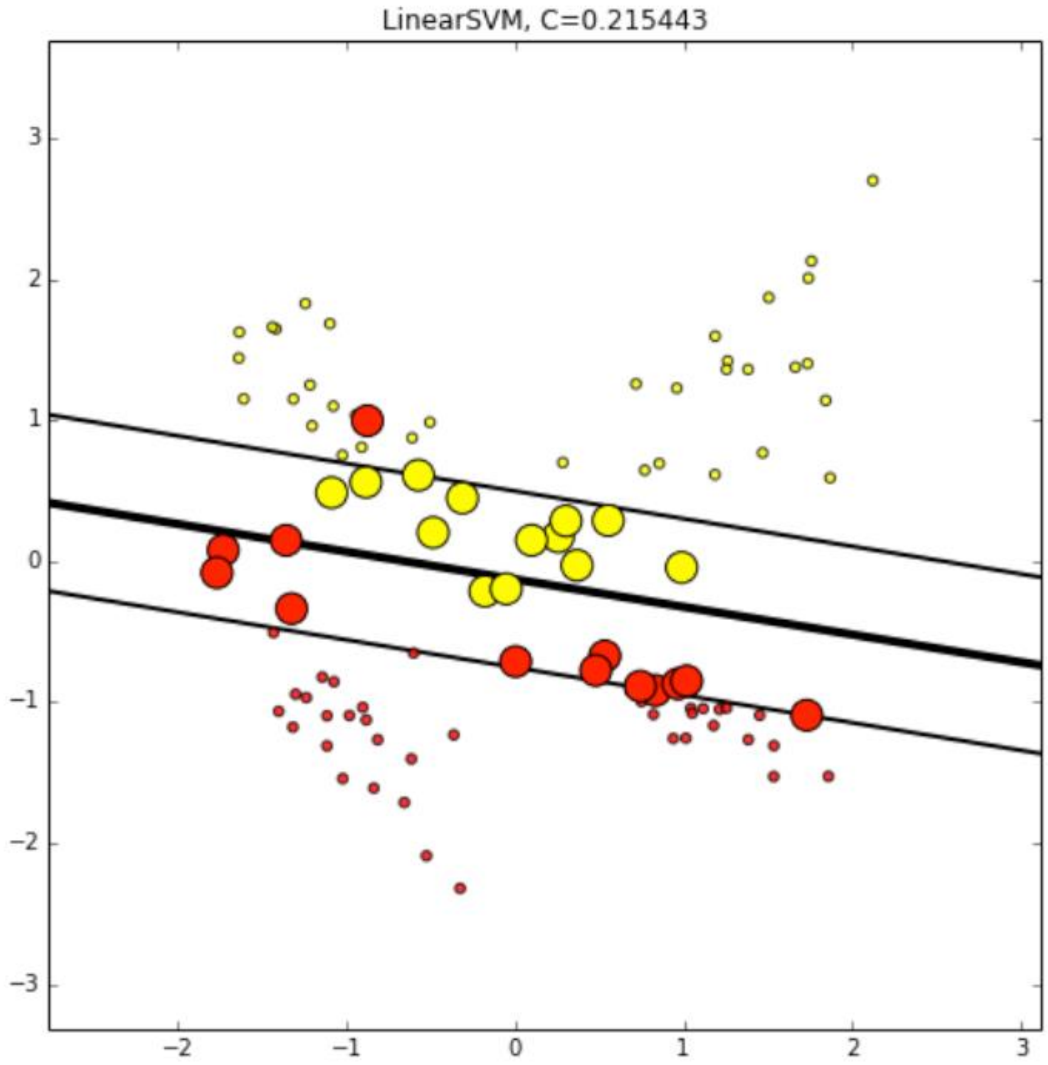
ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ C



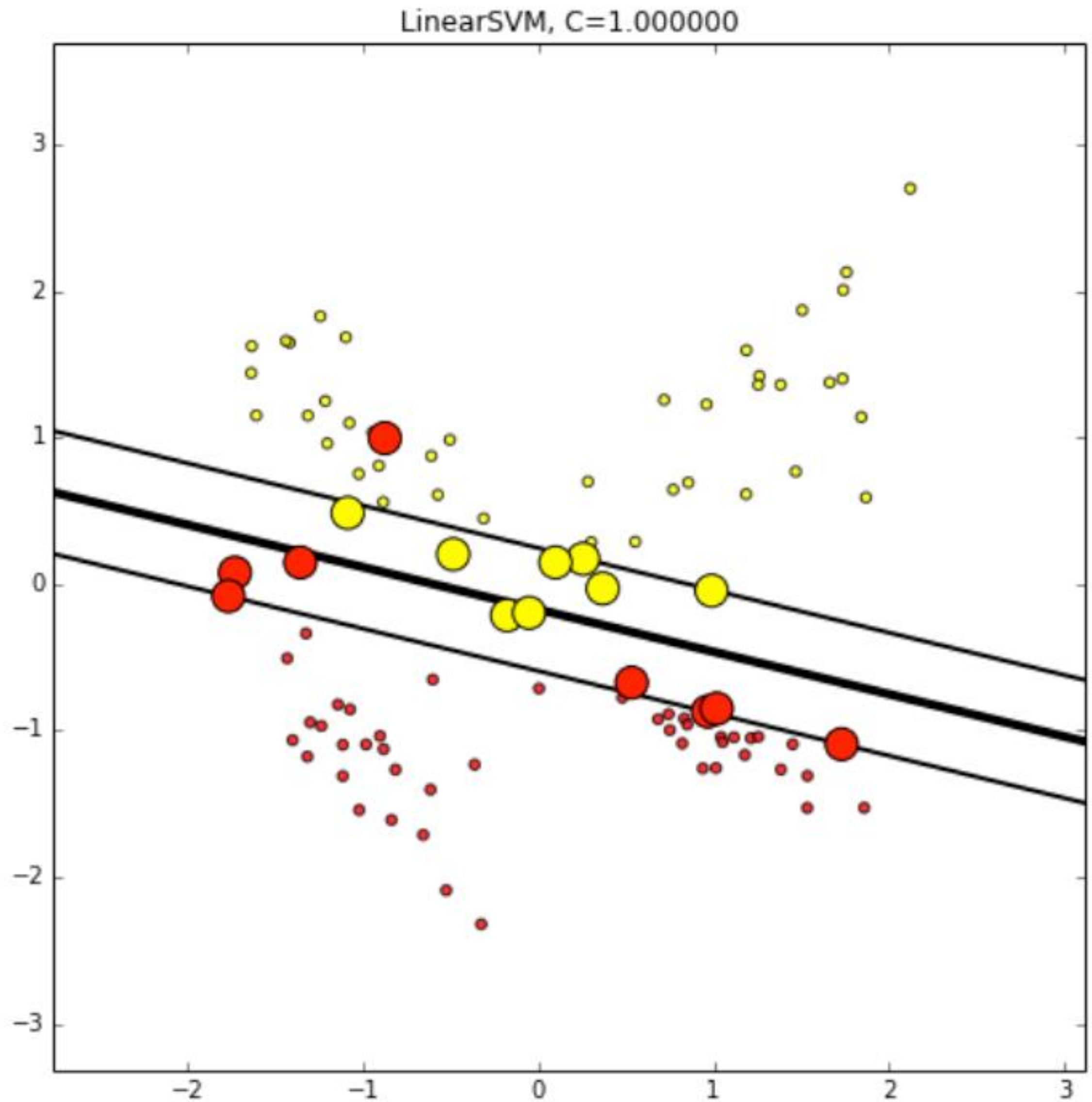
ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ С



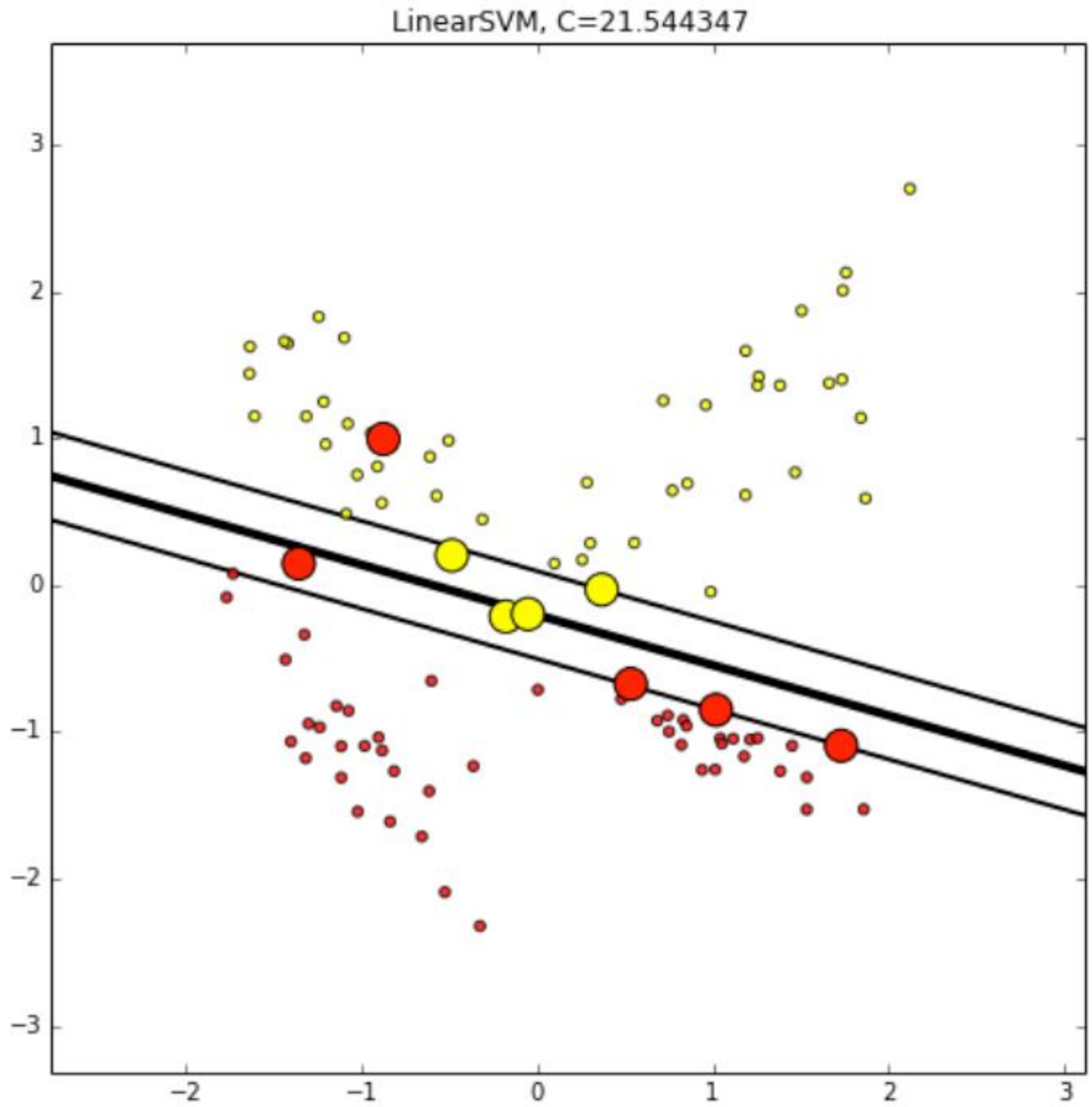
ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ C



ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ C



ЗНАЧЕНИЕ КОНСТАНТЫ C



ТИПЫ ОБЪЕКТОВ В SVM