Лекция 10

Логистическая регрессия. Метрики в задаче классификации

Курс: Введение в DS на УБ и МиРА (весна, 2022)
Преподаватель: Владимир Омелюсик

6 июня 2022 г.

В предыдущих сериях

- Линейная регрессия с точки зрения машинного обучения.
- Метод k ближайших соседей.

Логистическая регрессия: вводные данные

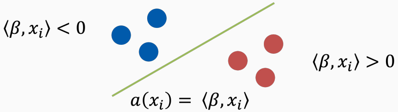
- Дано: X и y.
- Будем решать задачу бинарной классификации: $y_i \in \{-1, 1\}$.

Линейная классификация

- Попробуем как-то использовать линейную модель. Для этого перепишем её в виде скалярного произведения:

$$a(x_i) = \langle \hat{\beta}, x_i \rangle = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i^1 + \ldots$$

- Уравнение $\langle \hat{\beta}, x_i \rangle$ задаёт гиперплоскость в пространстве признаков (аналог прямой в двумерном пространстве).
- Если $\langle \hat{\beta}, x_i \rangle < 0$, то объект находится слева от гиперплоскости, а если $\langle \hat{\beta}, x_i \rangle > 0$, то справа.



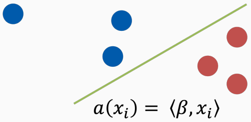
- Предсказания будем делать как $\hat{y}_i = \operatorname{sign} a(x_i) = \operatorname{sign}\langle \hat{\beta}, x_i \rangle$

Линейная классификация

- Расстояние от точки до гиперплоскости $\langle \hat{\beta}, x_i \rangle = 0$:

$$\frac{|\langle \hat{\beta}, x_i \rangle|}{\|\hat{\beta}\|_2}$$

- Чем больше $\langle \hat{\beta}, x_i \rangle$, тем дальше объект от гиперплоскости и тем увереннее ответ классификатора.



- Эту идею можно переписать в виде **отступа** $M_i = y_i \langle \hat{\beta}, x_i \rangle$.
- $M_i > 0 \Rightarrow$ классификатор даёт верный ответ, $M_i < 0 \Rightarrow$ классификатор ошибается.

Обучение линейного классификатора

- Будем штрафовать за неправильную классификацию.

$$L(y_i, \hat{y}_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [\text{sign}(\langle \hat{\beta}, x_i \rangle) \neq y_i]$$

- Функцию потерь также можно записать в терминах отступа:

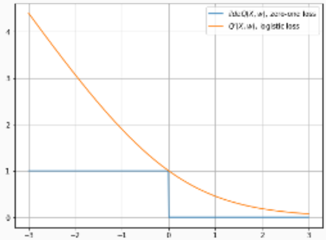
$$L(y_i, \hat{y}_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [y_i \langle \hat{\beta}, x_i \rangle < 0]$$

Верхняя оценка на функцию потерь

- Проблема: функцию $L(x) = [x < 0]$ нельзя продифференцировать.
- Решение: оценим сверху дифференцируемой функцией потерь:

$$L(X) = [x < 0] \leqslant \tilde{L}(x)$$

- Будем минимизировать $\tilde{L}(x)$ и надеяться, что также проминимизируем $L(x)$.



Логистическая функция потерь

- Используем логистическую функцию потерь.

$$\tilde{L}(x) = \log(1 + e^{-x})$$

- Тогда задачу можно переписать как

$$\tilde{L}(y_i, \hat{y}_i) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \log(1 + e^{-y_i\langle\hat{\beta}, x_i\rangle}) \to \min_{\hat{\beta}}$$

- Такую задачу мы уже имеем решать!

Оптимизация

- Можно посчитать градиент:

$$\nabla_{\hat{\beta}} \tilde{L}(y_i, \hat{y}_i) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i x_i}{1 + \exp^{y_i \langle \hat{\beta} x_i \rangle}}$$

- И запустить градиентный спуск:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha \nabla_{\hat{\beta}} \tilde{L}(y_i, \hat{y}_i)|_{\hat{\beta}_t}$$

- Можно добавить регуляризацию:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \log(1 + e^{-y_i \langle \hat{\beta}, x_i \rangle}) + \lambda \|\hat{\beta}\|_2^2 \to \min_{\hat{\beta}}$$

Мягкая и жёсткая классификация

- **Жёсткая классификация** – предсказываем метку класса.
- **Мягкая классификация** – предсказываем вероятность принадлежности к классу.
- От мягкой классификации можно перейти к жёсткой, сравнив вероятность с некоторым порогом t:

$$y_i = [\hat{p}_i > t]$$

Предсказания вероятностей

- Предсказываем метки как

$$\hat{y}_i = \operatorname{sign} a(x_i) = \operatorname{sign}\langle\hat{\beta}x_i\rangle$$

- Можно ли использовать $a(x_i) = \langle\hat{\beta}x_i\rangle$ для предсказания вероятностей? Нет!
- Для предсказания вероятностей обернём выход модели в некоторую функцию, которая выдаёт числа от 0 до 1. Например, сигмоиду:

$$\hat{p}_i = \sigma(\langle\hat{\beta}x_i\rangle) = \frac{1}{1 + e^{-\langle\hat{\beta}x_i\rangle}}$$

Предсказания вероятностей

- Можно показать, что

$$
\begin{aligned}
\tilde{L}(y_i, \hat{y}_i) &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \log(1 + e^{-y_i \langle \hat{\beta}, x_i \rangle}) = \\
&= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} [y_i = 1] \log \sigma(\langle \hat{\beta} x_i \rangle) + [y_i = -1] \log(1 - \sigma(\langle \hat{\beta} x_i \rangle))
\end{aligned}
$$

- То есть обучая модель по схеме выше, мы обучаем её и правильно предсказывать вероятности.

Accuracy (доля правильных ответов)

$$\text{Accuracy} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[y_i = \hat{y}_i]$$

- Проста и хорошо интерпретируема.
- Неустойчива к дисбалансу классов.

Матрица ошибок

	$y_i = 1$	$y_i = -1$
$a(x_i) = 1$	True Positive	False Positive
$a(x_i) = -1$	False Negative	True Negative

В терминах матрицы ошибок:

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN}$$

Precision (точность)

	$y_i = 1$	$y_i = -1$
$a(x_i) = 1$	True Positive	False Positive
$a(x_i) = -1$	False Negative	True Negative

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$

- Показывает, сколько среди предсказанных положительных объектов действительно положительных.
- Насколько можно доверять классификатору, когда он предсказывает положительный класс?

Recall (полнота)

	$y_i = 1$	$y_i = -1$
$a(x_i) = 1$	True Positive	False Positive
$a(x_i) = -1$	False Negative	True Negative

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FN}$$

- Показывает, сколько объектов положительного класса было найдено классификатором.

Выбор между Precision и Recall

- Между Precision и Recall существует выбор.
- Высокая Precision, низкая Recall:
  - Редко ошибаемся при предсказании положительного класса.
  - Находим мало объектов положительного класса.
- Precision и Recall устойчивы к дисбалансу классов.

	$y_i = 1$	$y_i = -1$
$a(x_i) = 1$	10	20
$a(x_i) = -1$	90	10 000

Accuracy = 0.99
Precision = 0.33
Recall = 0.1

F-мера

- Precision и Recall можно объединить в одну метрику:

$$F_1 = \frac{2 \times \text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}}$$

Порог

- От мягкой классификации можно перейти к жёсткой, сравнив вероятность с некоторым порогом:

$$y_i = [\sigma(\langle \hat{\beta}, x_i \rangle) > t]$$

- В зависимости от порога будут получаться разные значения TP, FP, FN, TN в матрице ошибок.
- Высокий порог: Precision выше, Recall ниже.

ROC-кривая

- Receiving Operating Characteristic.
- По оси X – False Positive Rate:

$$\color{red}{FPR} = \frac{FP}{FP + TN}$$

- По оси Y – True Positive Rate (Recall):

$$\color{green}{TPR} = \text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$

	$y_i = 1$	$y_i = -1$
$a(x_i) = 1$	True Positive	False Positive
$a(x_i) = -1$	False Negative	True Negative

Пример

y	-1	1	-1	1	1	1
p	0.9	0.7	0.5	0.2	0.1	0.1

$$\boldsymbol{t = 1:} TPR = \frac{0}{4} = 0, FPR = \frac{0}{2} = 0$$

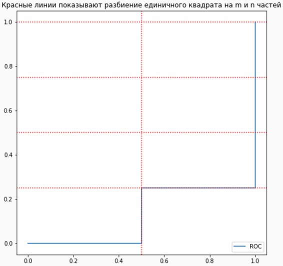
$$\boldsymbol{t = 0.8:} TPR = \frac{0}{4} = 0, FPR = \frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{t = 0.6:} TPR = \frac{1}{4}, FPR = \frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{t = 0.4:} TPR = \frac{1}{4}, FPR = \frac{2}{2}$$

$$\boldsymbol{t = 0.15:} TPR = \frac{2}{4}, FPR = \frac{2}{2}$$

$\dots$



Свойства

- Лежит в единичном квадрате.
- Для идеального классификатора проходит через $(0, 1)$.
- AUC ROC – площадь под ROC-кривой.
- Для идеального классификатора AUC ROC $= 1$.
- Для худшего классификатора AUC ROC ~ 0.5 (или 0).