Введение в анализ данных

Лекция 4. Линейная классификация

Модель линейной классификации

Классификация

- $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$
- -1 — отрицательный класс
- $+1$ — положительный класс
- $a(x)$ должен возвращать одно из двух чисел

Линейная регрессия

$$a(x) = \boxed{w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x_j}$$

Вещественное число!

Линейный классификатор

$$a(x) = \operatorname{sign}\left(w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x_j\right)$$

Линейный классификатор

$$a(x) = \operatorname{sign}\left(w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x_j\right)$$

Свободный коэффициент

Веса

Признаки

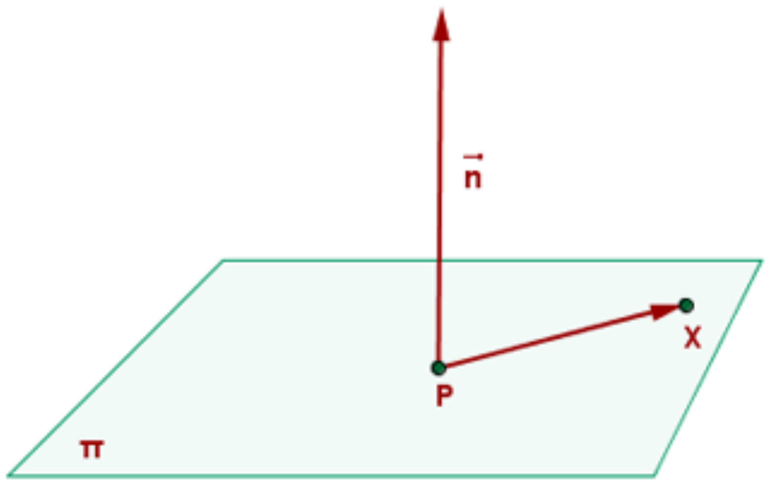
Линейный классификатор

- Будем считать, что есть единичный признак

$$a(x) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{d} w_j x_j = \operatorname{sign} \langle w, x \rangle$$

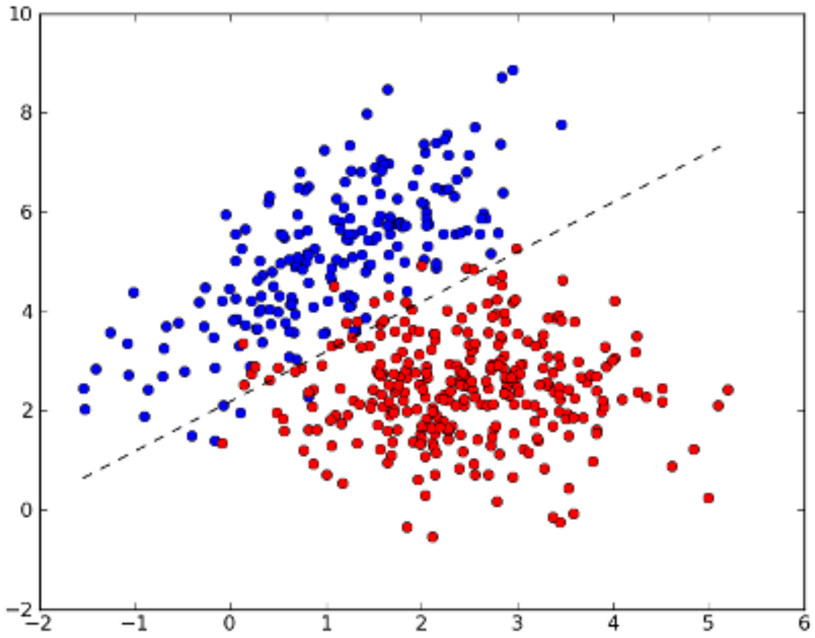
Геометрия линейного классификатора

Уравнение гиперплоскости: $\langle w, x \rangle = 0$



Геометрия линейного классификатора

- Линейный классификатор проводит гиперплоскость
- $\langle w, x \rangle < 0$ — объект «слева» от неё
- $\langle w, x \rangle > 0$ — объект «справа» от неё



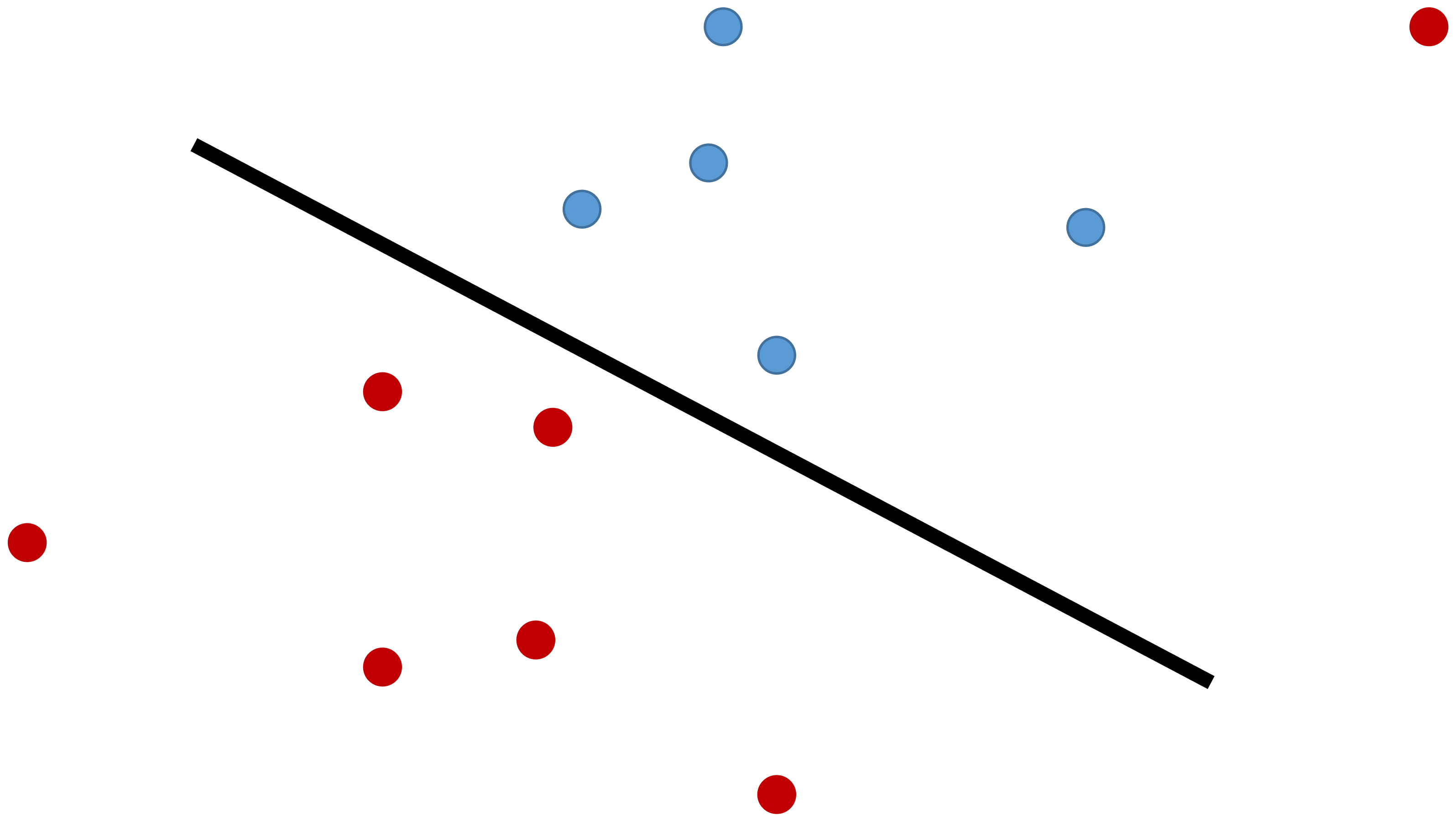
Геометрия линейного классификатора

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

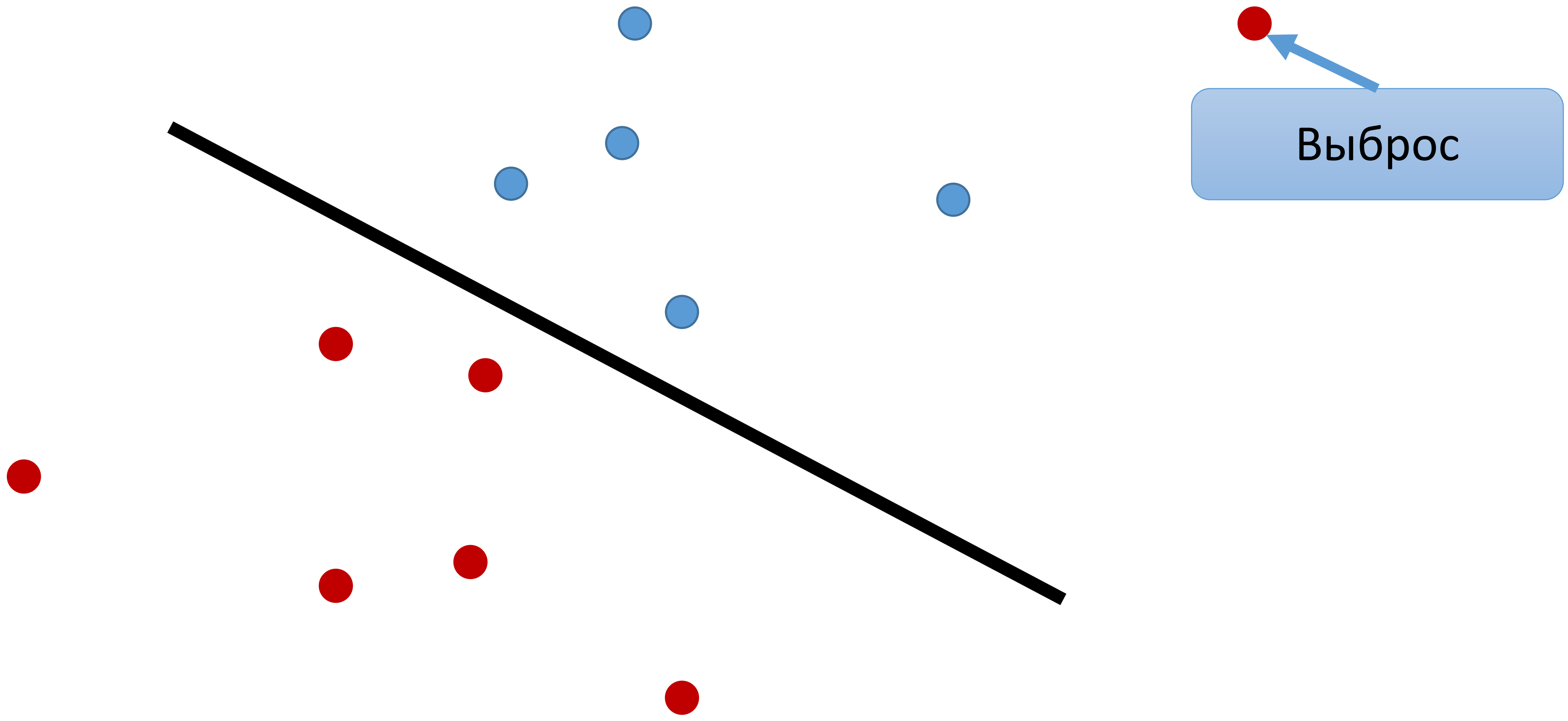
$$\frac{|\langle w, x \rangle|}{\|w\|}$$

- Чем больше $\langle w, x \rangle$, тем дальше объект от разделяющей гиперплоскости

Геометрия линейного классификатора

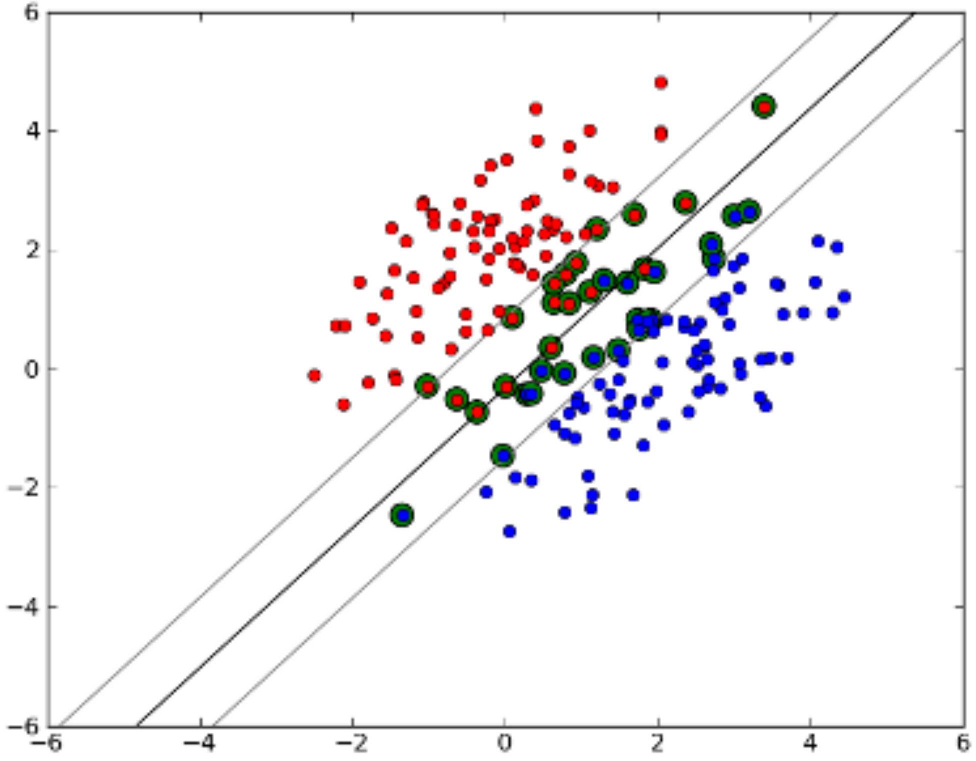


Геометрия линейного классификатора



Отступ

- $M_i = y_i \langle w, x_i \rangle$
- $M_i > 0$ — классификатор дает верный ответ
- $M_i < 0$ — классификатор ошибается
- Чем дальше отступ от нуля, тем больше уверенности



Порог

$$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x \rangle - t)$$

- t — порог классификатора
- Можно подбирать для оптимизации функции потерь, отличной от использованной при обучении

Линейный классификатор

- Линейный классификатор разделяет два класса гиперплоскостью
- Чем больше отступ по модулю, тем дальше объект от гиперплоскости
- Знак отступа говорит о корректности предсказания

Функции потерь в задачах регрессии

Среднеквадратичная ошибка

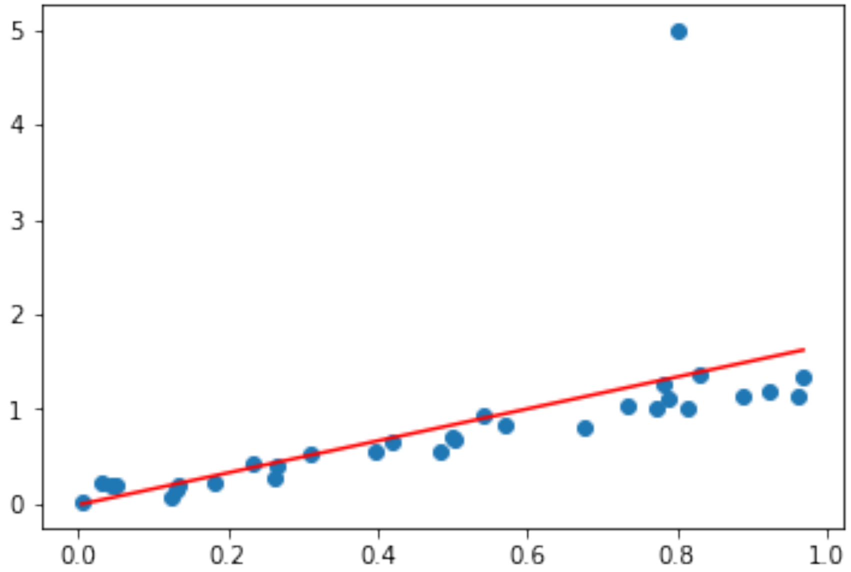
- Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y, a) = (a - y)^2$$

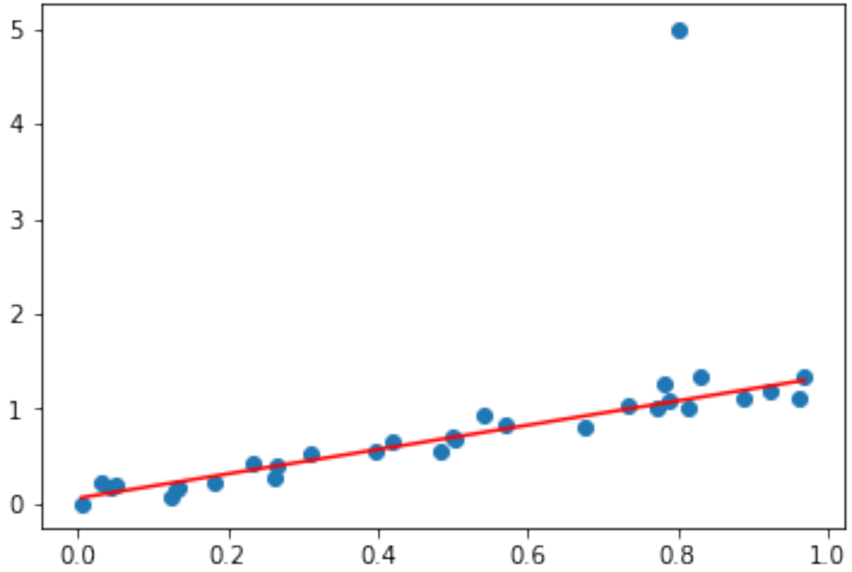
- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

Выбросы



С учётом выброса



Без учёта выброса

Обучение на среднеквадратичную ошибку

Выбросы

$a(x)$	y	$(a(x) - y)^2$
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	8649
6	7	1

$$MSE \approx 1236$$

Выбросы

$a(x)$	y	$(a(x) - y)^2$
4	1	9
5	2	9
6	3	9
7	4	9
8	5	9
10	100	8100
10	7	9

$$MSE \approx 1164$$

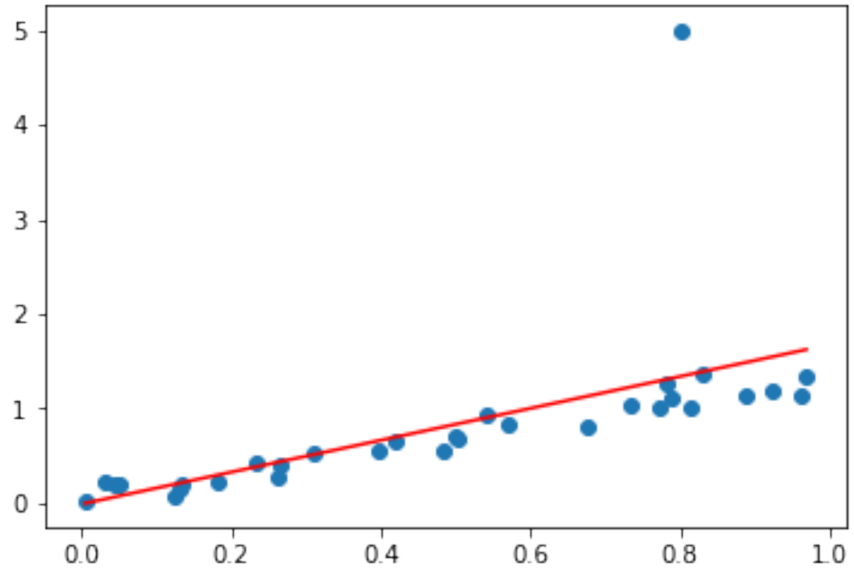
Средняя абсолютная ошибка

$$L(y, a) = |a - y|$$

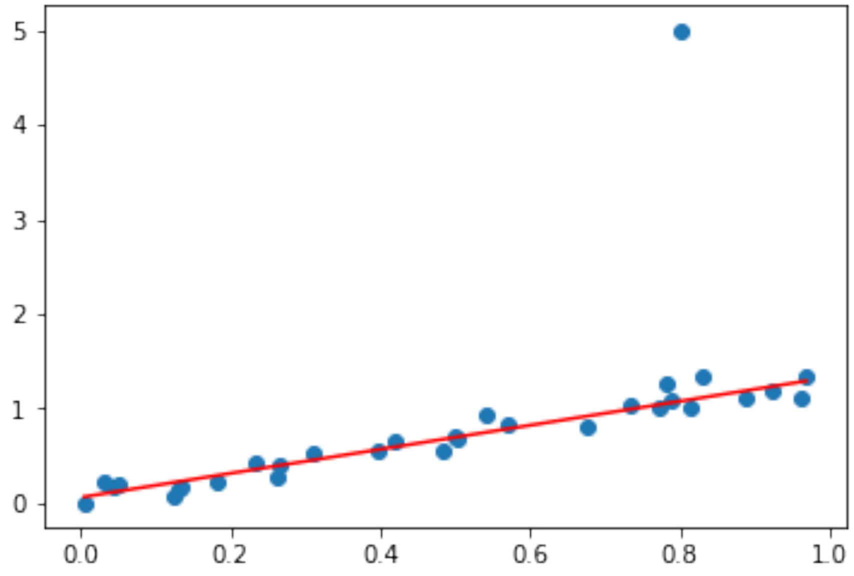
- Функционал ошибки — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

Выбросы



Обучение на MSE



Обучение на MAE

Выбросы

$a(x)$	y	$\|a(x) - y\|$
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	93
6	7	1

$$MAE \approx 14.14$$

Выбросы

$a(x)$	y	$\lvert a(x) - y\rvert$
4	1	3
5	2	3
6	3	3
7	4	3
8	5	3
10	100	90
10	7	3

$$MAE \approx 15.43$$

Функция потерь Хубера

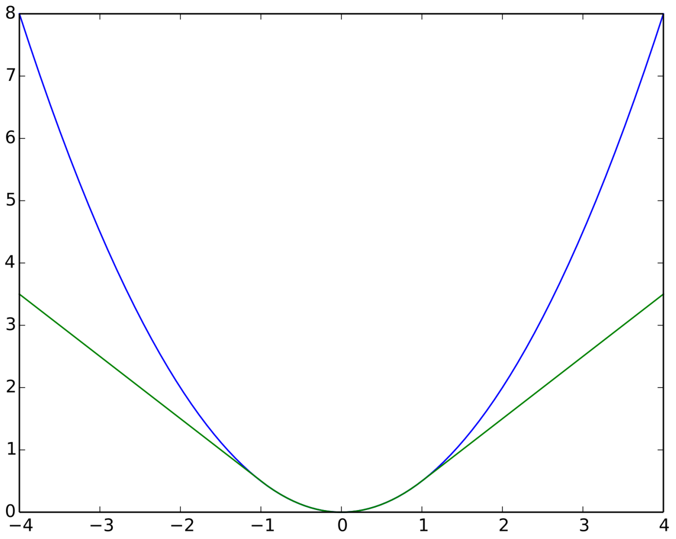
$$L_H(y,a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y-a)^2, & |y-a| < \delta \\ \delta\left(|y-a| - \frac{1}{2}\delta\right), & |y-a| \geq \delta \end{cases}$$

- Функционал ошибки:

$$Q(a,X) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} L_H\big(y_i, a(x_i)\big)$$

Функция потерь Хубера

$$L_H(y,a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y-a)^2, & |y-a| < \delta \\ \delta\left(|y-a| - \frac{1}{2}\delta\right), & |y-a| \geq \delta \end{cases}$$



MAPE

- Mean Absolute Percentage Error (средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \left|\frac{y - a}{y}\right|$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left|\frac{a(x_i) - y_i}{y_i}\right|$$

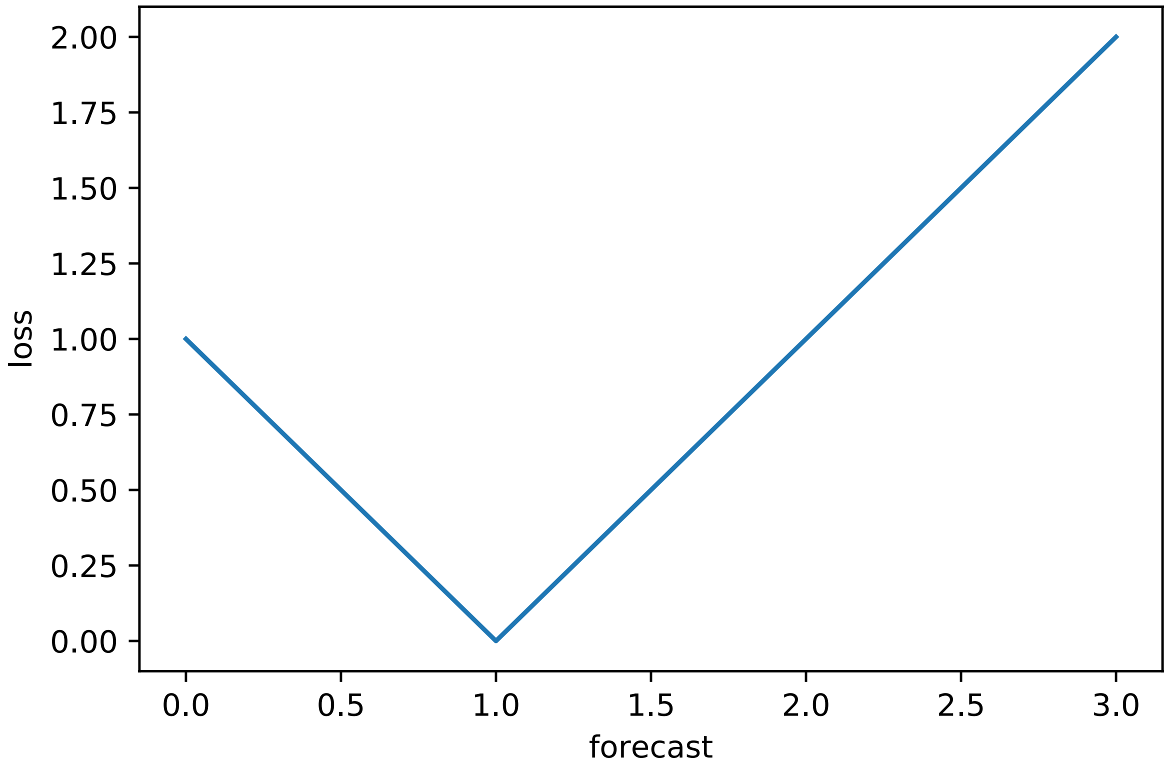
MAPE

$$L(y, a) = \left|\frac{y - a}{y}\right|$$

- Особенности (при $a \geq 0$):
- Недопрогноз штрафуется максимум на единицу
- Перепрогноз может быть оштрафован любым числом
- Несимметричная функция потерь (отдаёт предпочтение недопрогнозу)

MAPE

$$L(y, a) = \left|\frac{y - a}{y}\right|$$



SMAPE

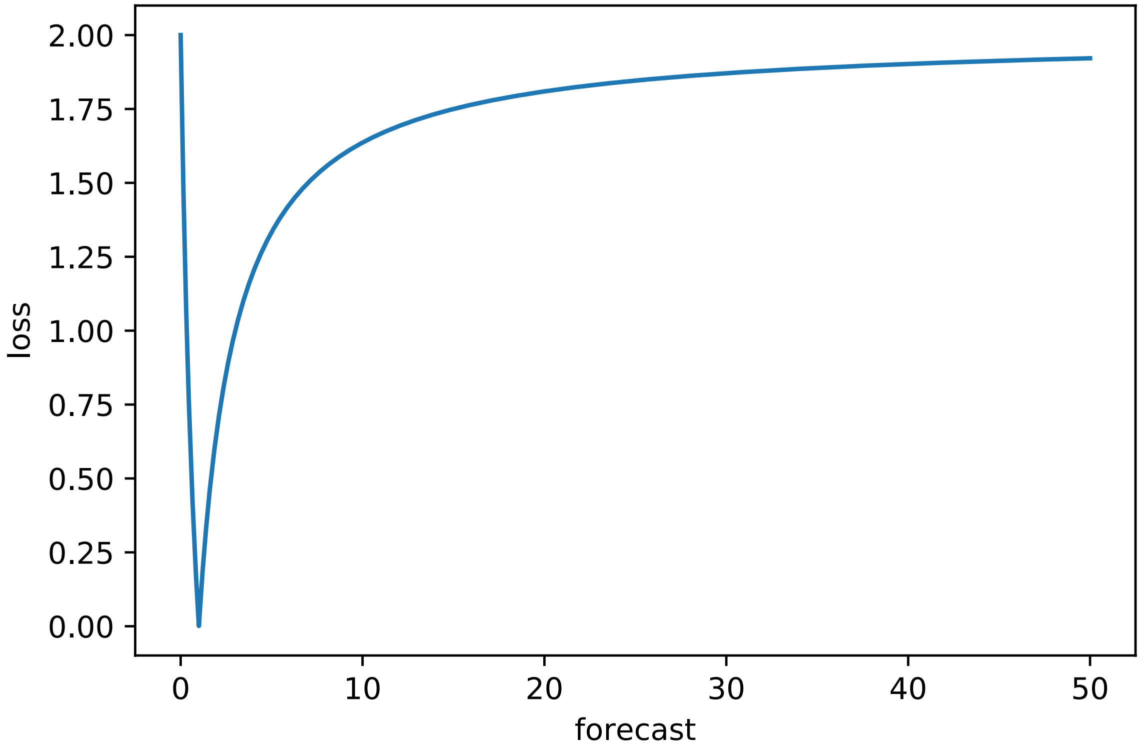
- Symmetric Mean Absolute Percentage Error (симметричный средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \frac{|y - a|}{(|y| + |a|)/2}$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|y_i - a(x_i)|}{(|y_i| + |a(x_i)|)/2}$$

SMAPE

$$L(y, a) = \frac{|y - a|}{(|y| + |a|)/2}$$



Метрики качества классификации

Качество классификации

- Доля неправильных ответов:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) \neq y_i]$$

Качество классификации

- Доля правильных ответов (accuracy):

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i]$$

Несбалансированные выборки

- Несбалансированная выборка — объектов одного класса существенного больше
- Пример: предсказание кликов по рекламе
- Пример: медицинская диагностика
- Пример: предсказание оттока клиентов
- Пример: специализированный поиск

Несбалансированные выборки

- Пример:
  - Класс -1: 950 объектов
  - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?

Несбалансированные выборки

- Пример:
  - Класс -1: 950 объектов
  - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?
- Модель не несёт экономической ценности
- Цены ошибок неравнозначны

Несбалансированные выборки

- q_0 — доля объектов самого крупного класса
- Для разумных алгоритмов:

$$\text{accuracy} \in [q_0, 1]$$

- Если получили большой accuracy — посмотрите на баланс классов

Улучшение метрики

- Два алгоритма
- Доли правильных ответов: r_1 и r_2
- Абсолютное улучшение: $r_2 - r_1$
- Относительное улучшение: $\frac{r_2 - r_1}{r_1}$

Улучшение метрики

- $r_1 = 0.8$
- $r_2 = 0.9$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 12.5\%$

- $r_1 = 0.5$
- $r_2 = 0.75$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 50\%$

- $r_1 = 0.001$
- $r_2 = 0.01$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 900\%$

Цены ошибок

- Пример: кредитный скоринг
- Модель 1:
    - 80 кредитов вернули
    - 20 кредитов не вернули
- Модель 2:
    - 48 кредитов вернули
    - 2 кредита не вернули
- Кто лучше?

Цены ошибок

- Что хуже?
  - Выдать кредит «плохому» клиенту
  - Не выдать кредит «хорошему» клиенту
- Доля верных ответов не учитывает цены ошибок

Матрица ошибок

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	True Positive (TP)	False Positive (FP)
$a(x) = -1$	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Матрица ошибок

- Модель $a_1(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- Модель $a_2(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

Точность (precision)

- Можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?

$$\text{precision}(a, X) = \frac{TP}{TP + FP}$$

Точность (precision)

- Модель $a_1(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{precision}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{precision}(a_2, X) = 0.96$

Полнота (recall)

- Как много положительных объектов находит классификатор?

$$\mathrm{recall}(a, X) = \frac{TP}{TP + FN}$$

Полнота (recall)

- Модель $a_1(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{recall}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{recall}(a_2, X) = 0.48$

Антифрод

- Классификация транзакций на нормальные и мошеннические
- Высокая точность, низкая полнота:
  - Редко блокируем нормальные транзакции
  - Пропускаем много мошеннических
- Низкая точность, высокая полнота:
  - Часто блокируем нормальные транзакции
  - Редко пропускаем мошеннические

Кредитный скоринг

- Неудачных кредитов должно быть не больше 5%
- Ограничение: $\text{precision}(a, X) \geq 0.95$
- Максимизируем полноту

Медицинская диагностика

- Надо найти не менее 80% больных
- Ограничение: $\mathrm{recall}(a, X) \geq 0.8$
- Максимизируем точность

Несбалансированные выборки

- $\text{accuracy}(a, X) = 0.99$
- $\text{precision}(a, X) = 0.33$
- $\text{recall}(a, X) = 0.1$

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	10	20
$a(x) = -1$	90	10000

Совмещение точности и полноты

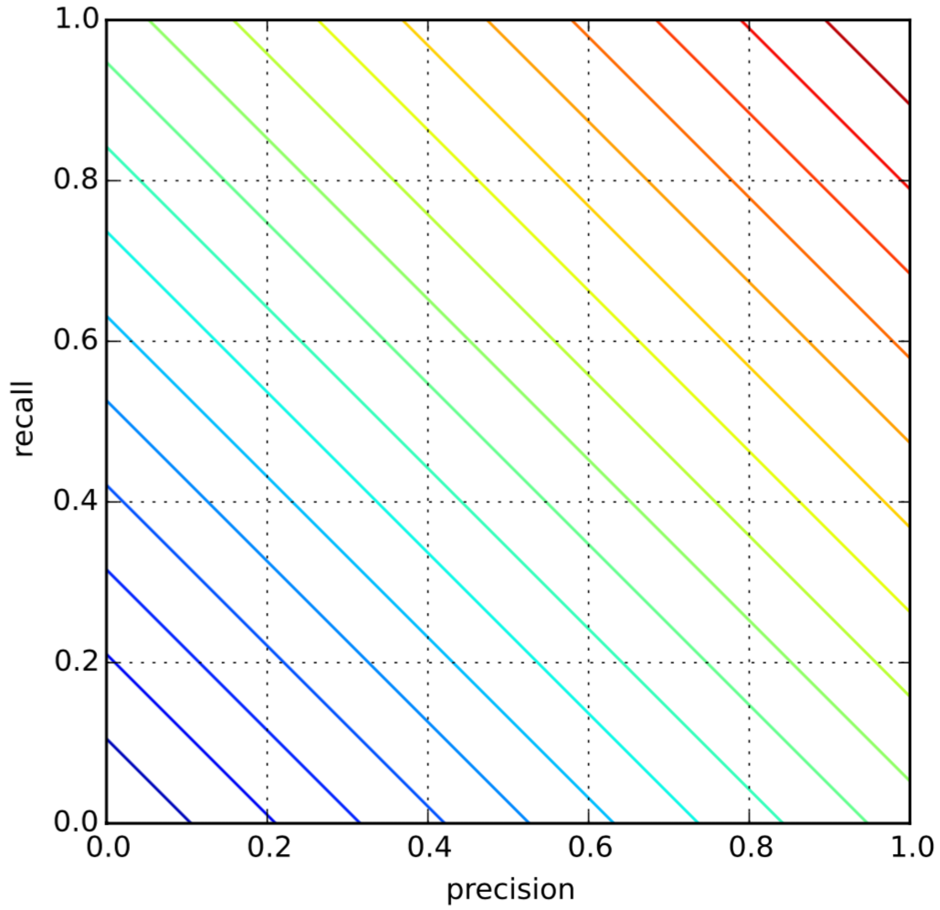
Точность и полнота

- Точность — можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?
- Полнота — как много положительных объектов находит $a(x)$?

- Оптимизировать две метрики одновременно очень неудобно
- Как объединить?

Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

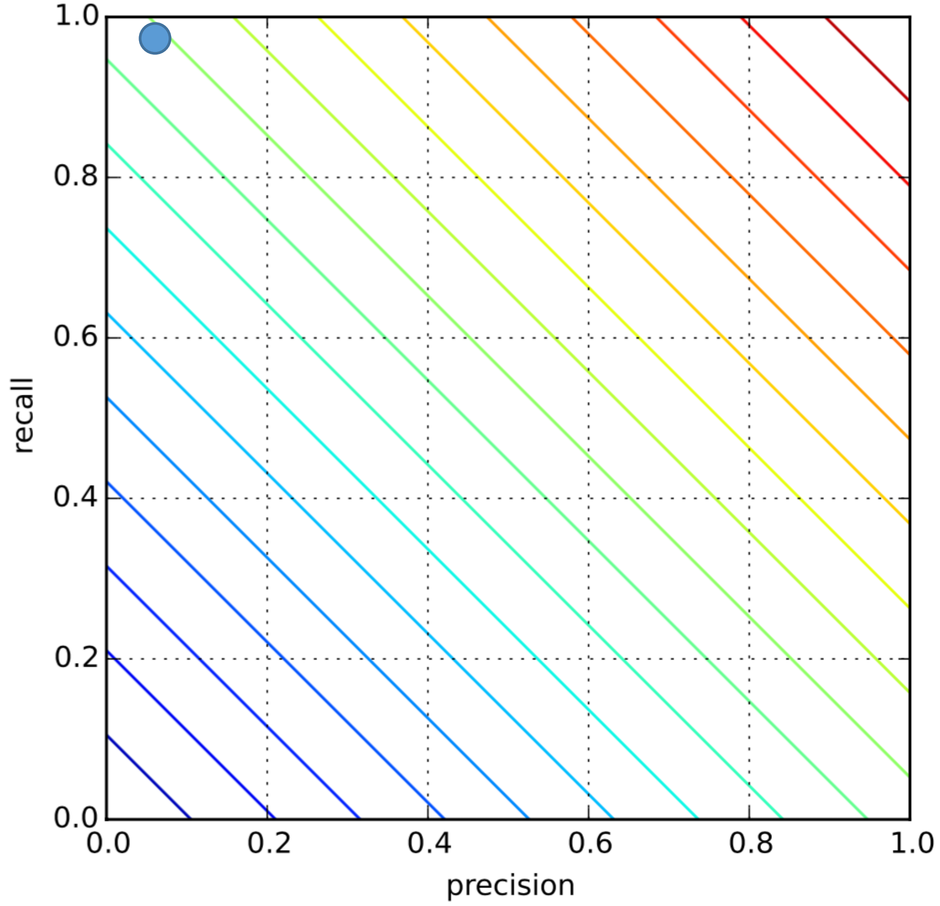


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.1$
- $\text{recall} = 1$
- $A = 0.55$

- Плохой алгоритм

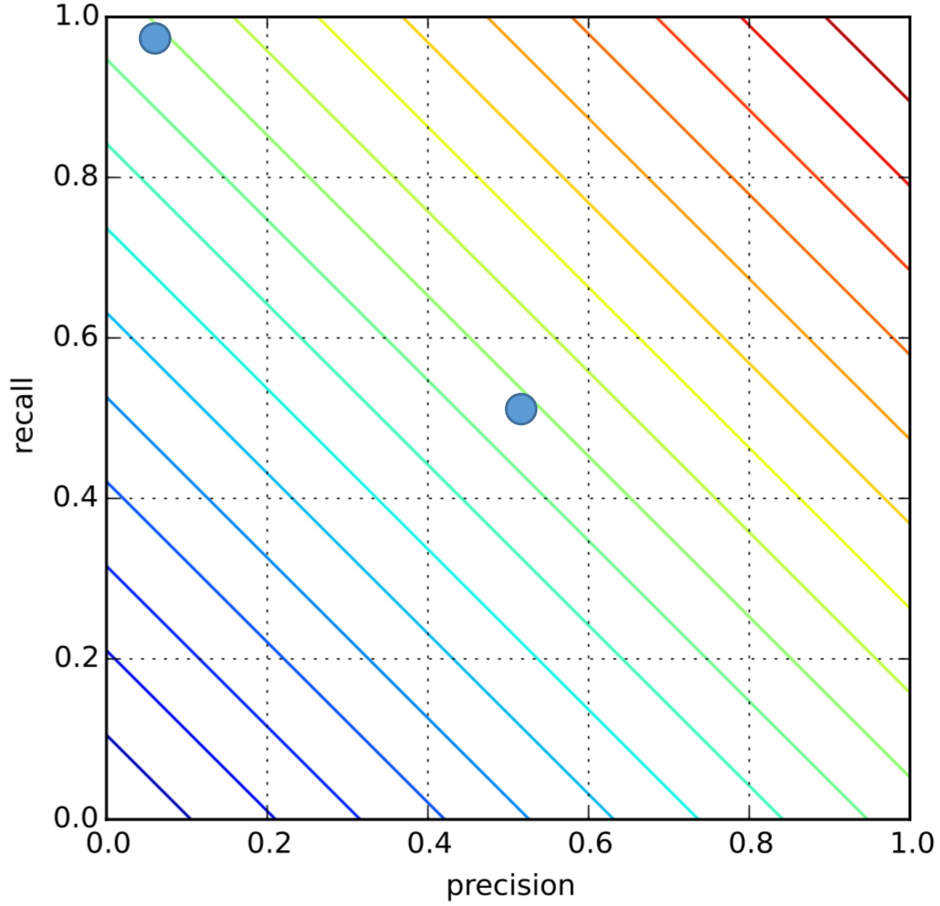


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

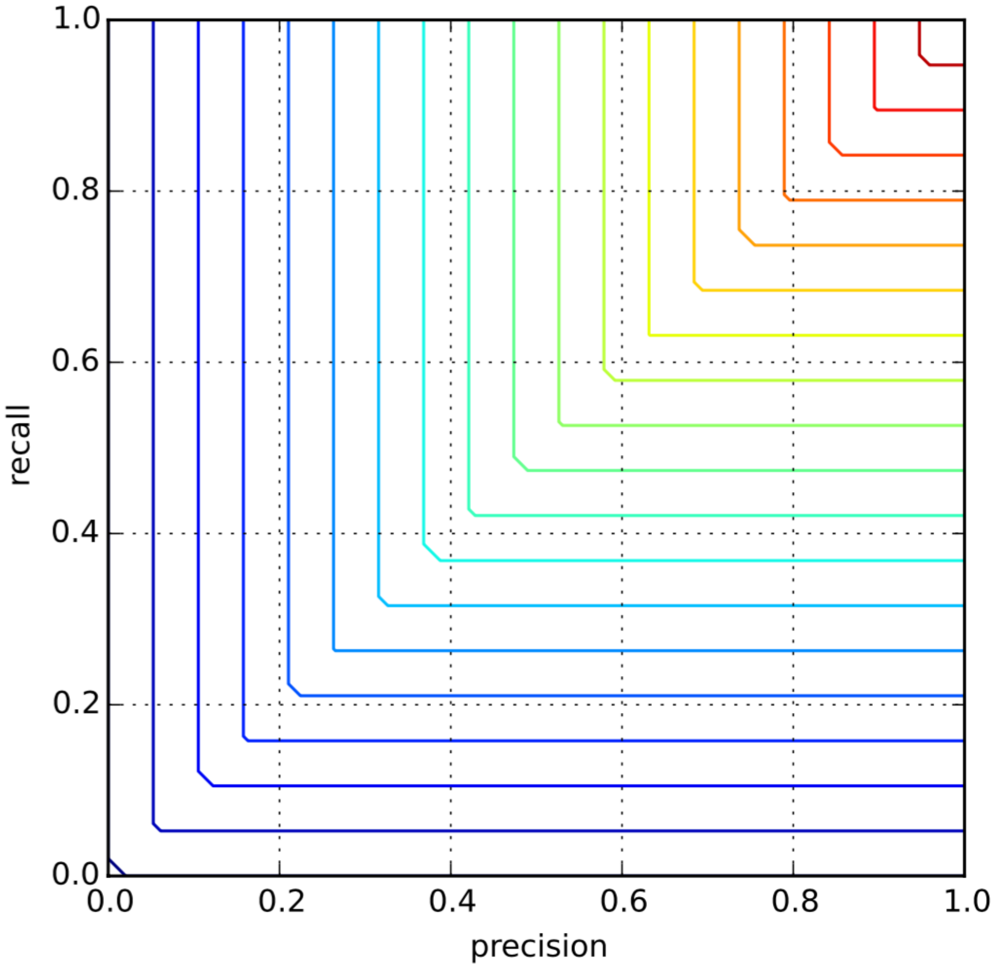
- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $A = 0.55$

- Нормальный алгоритм
- Но качество такое же, как у плохого



Минимум

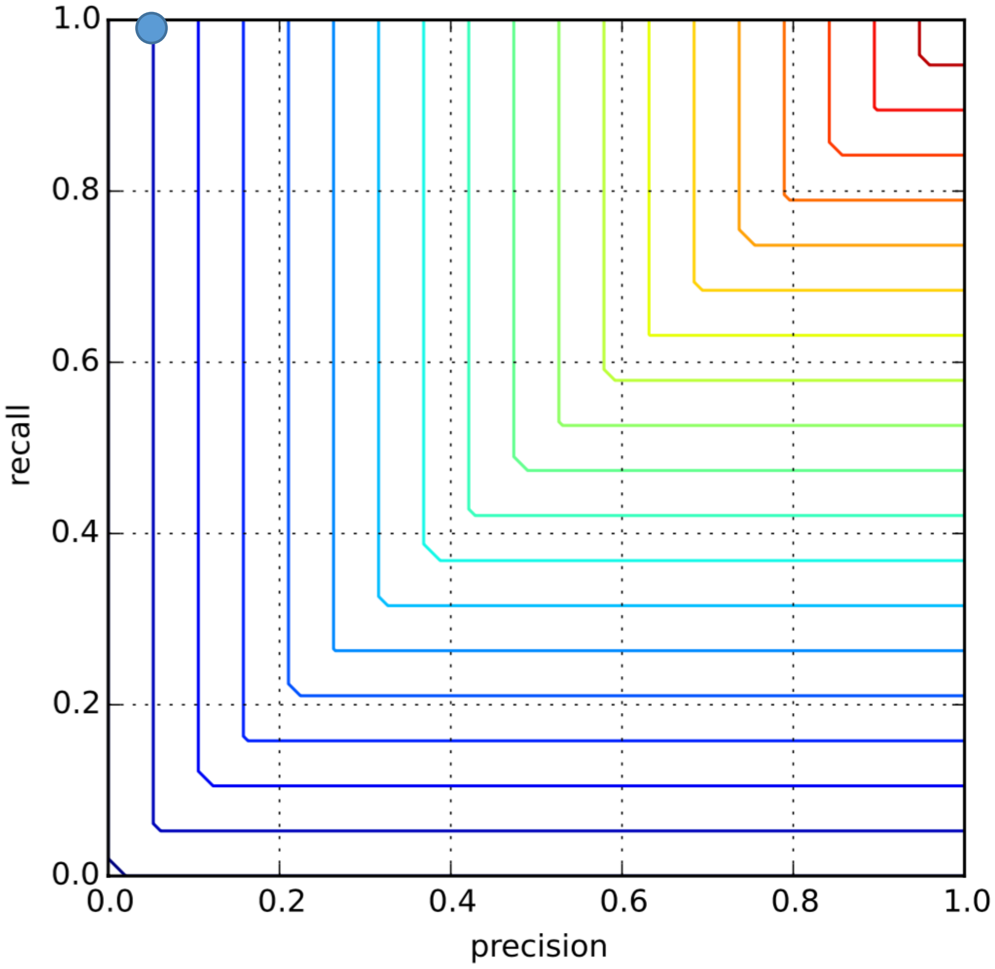
$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

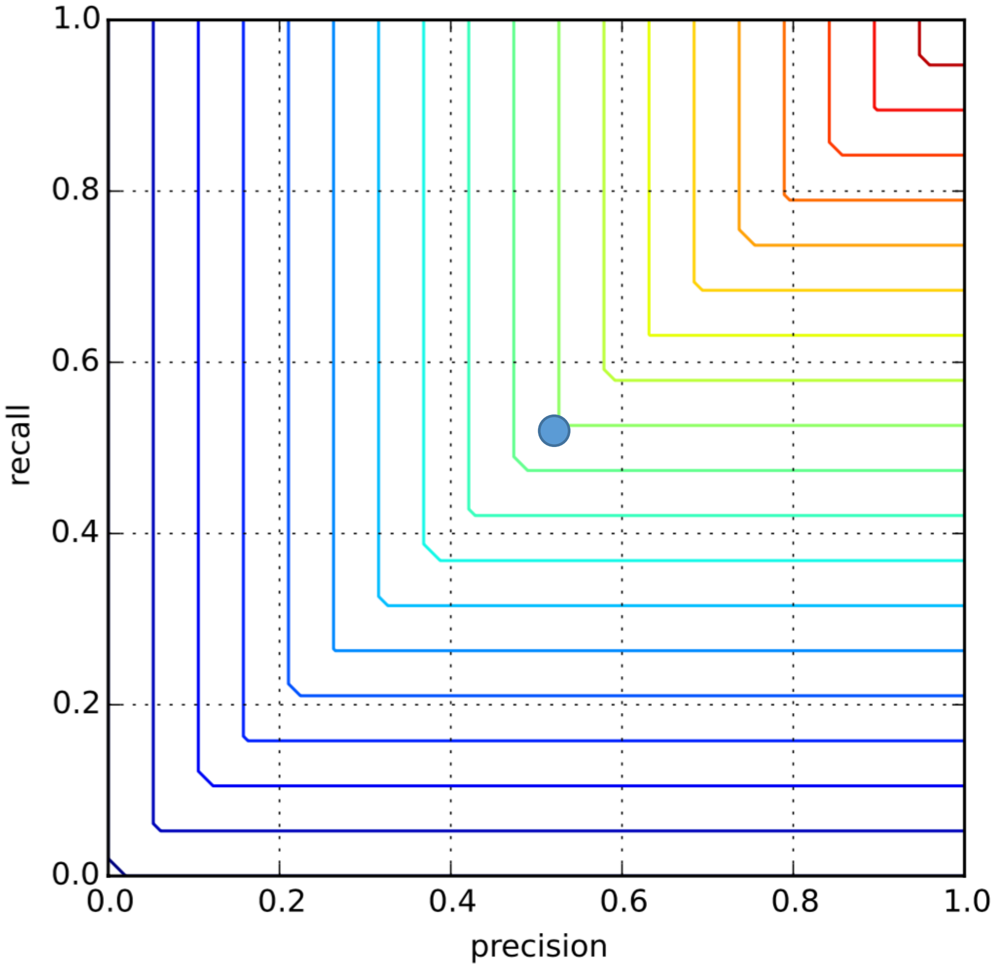
- $\text{precision} = 0.05$
- $\text{recall} = 1$
- $M = 0.05$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $M = 0.55$



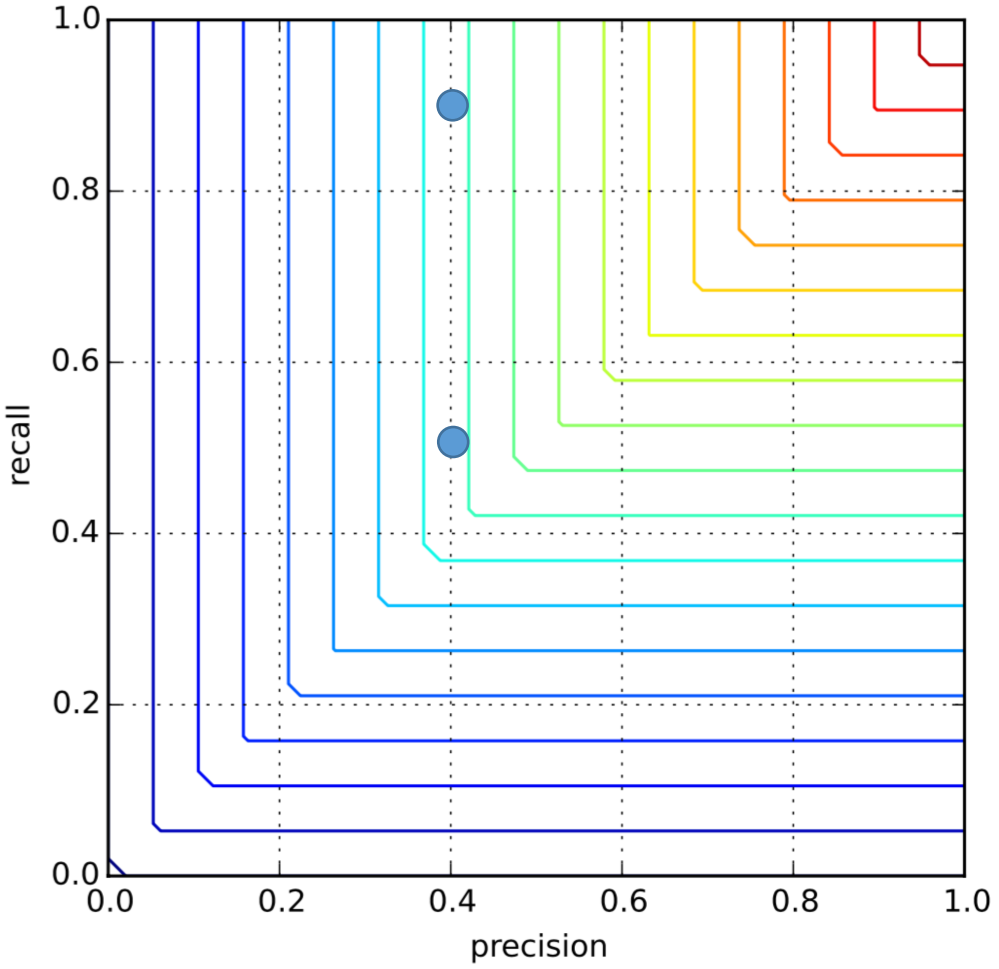
Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $M = 0.4$

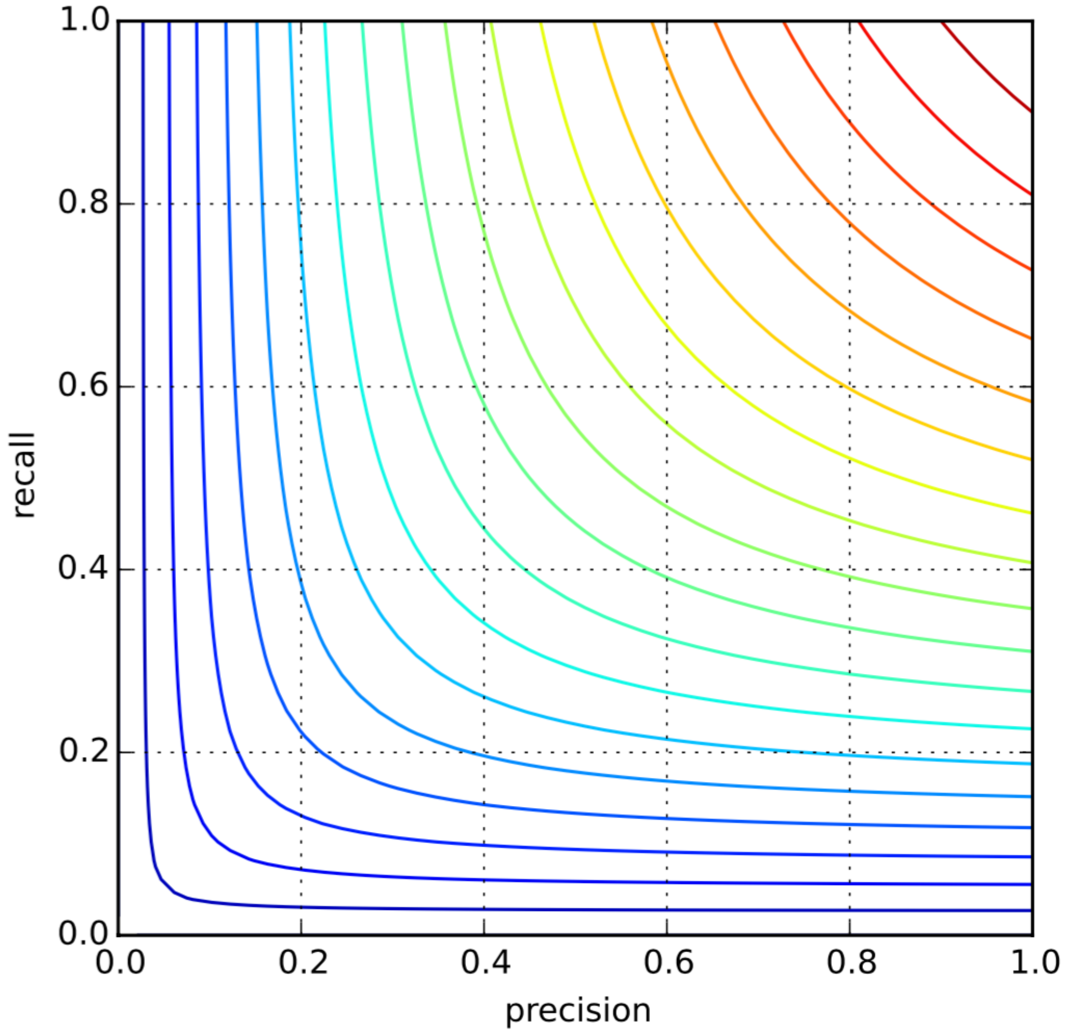
- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.4$

- Но второй лучше!



F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

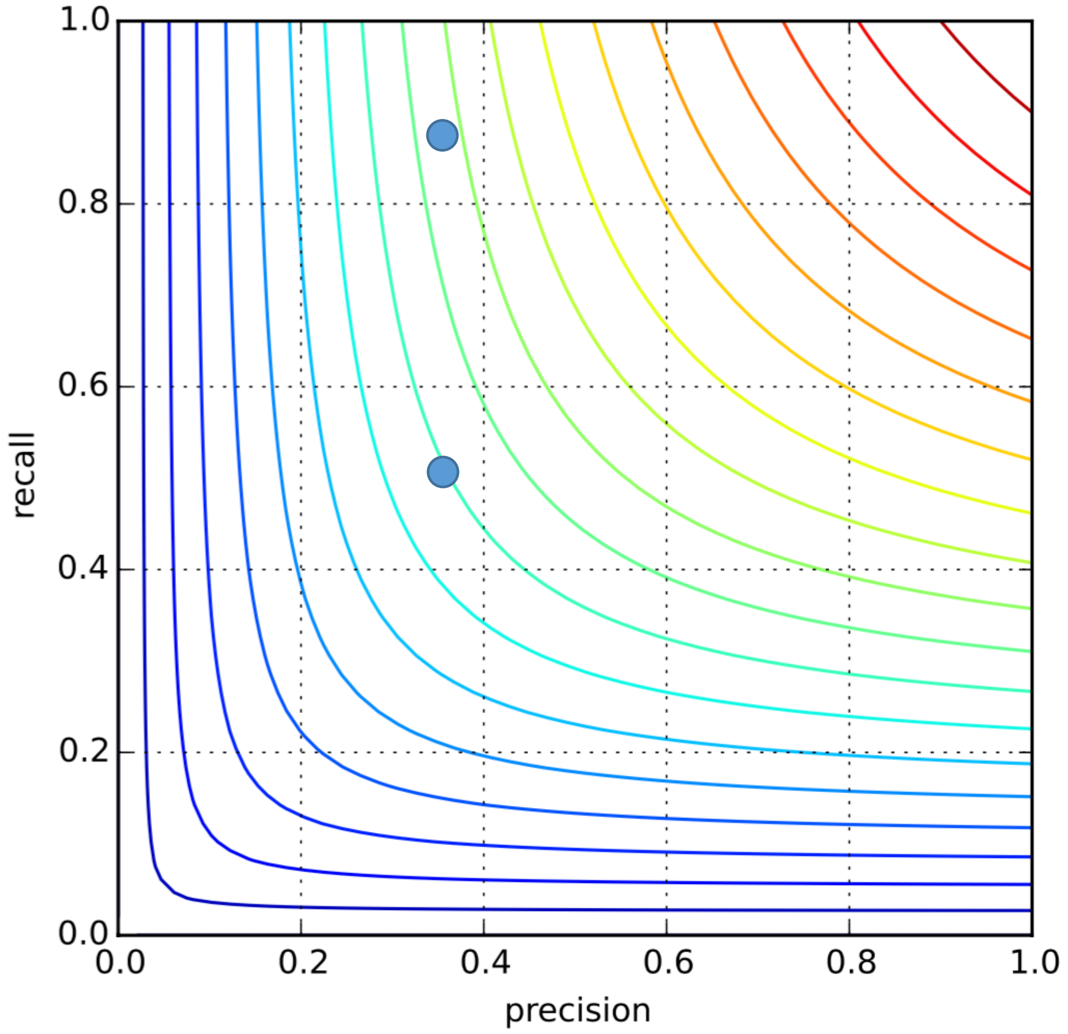


F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $F = 0.44$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.55$



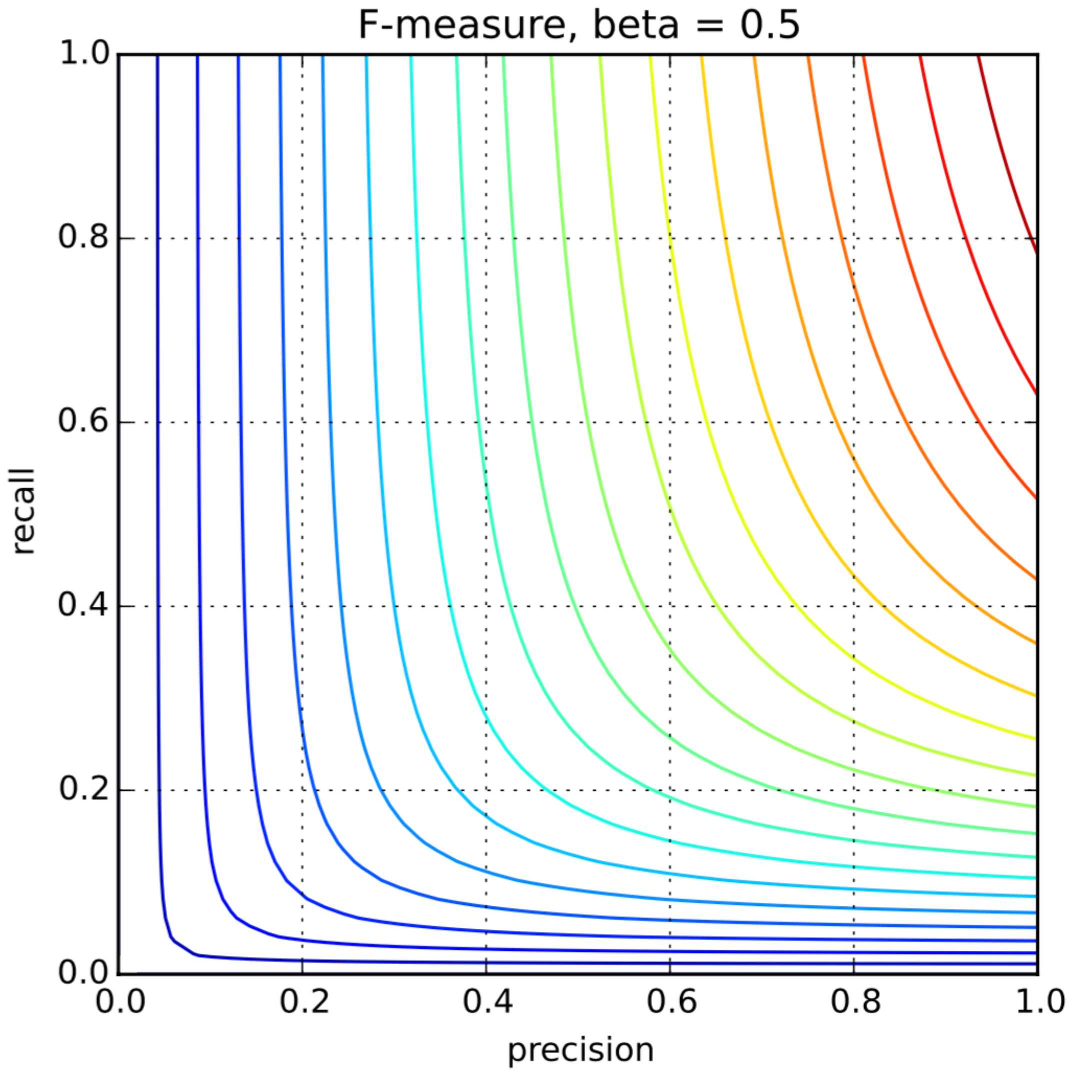
F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

F-мера

$$F_\beta = (1 + \beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

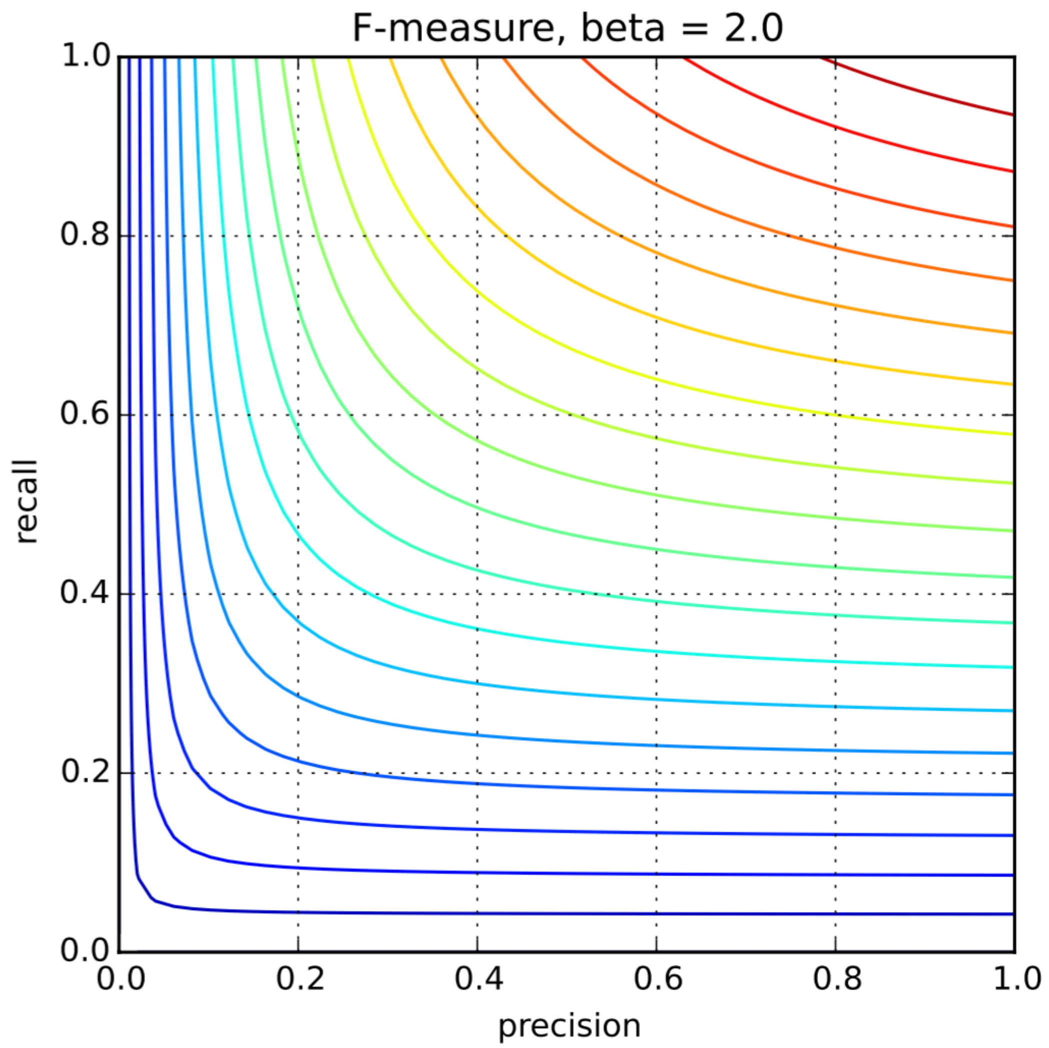
- $\beta = 0.5$
- Важнее точность



F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

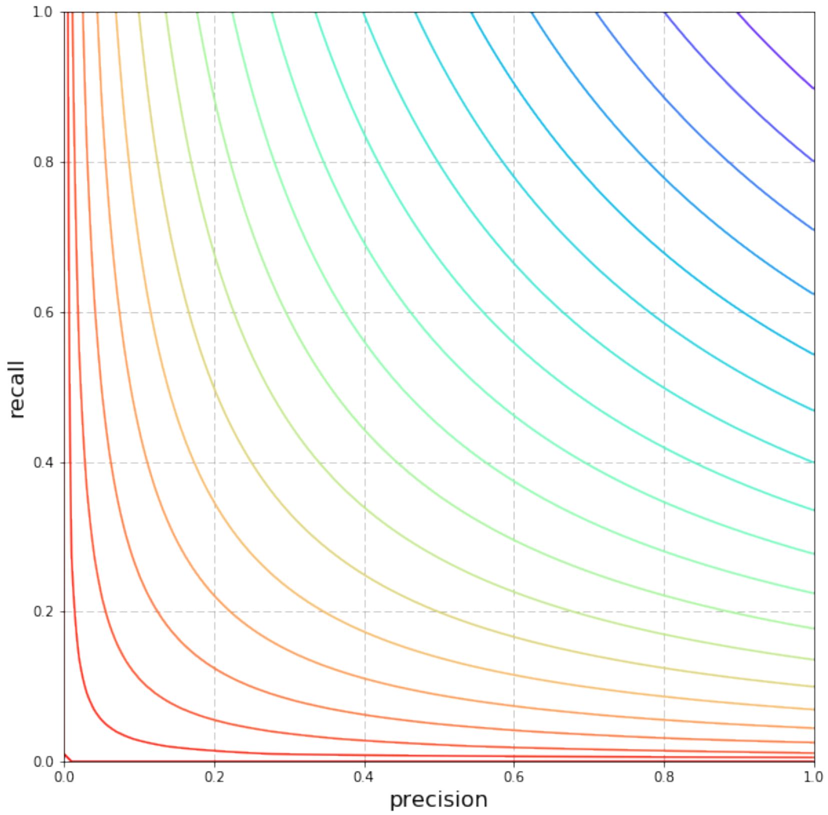
- $\beta = 2$
- Важнее полнота

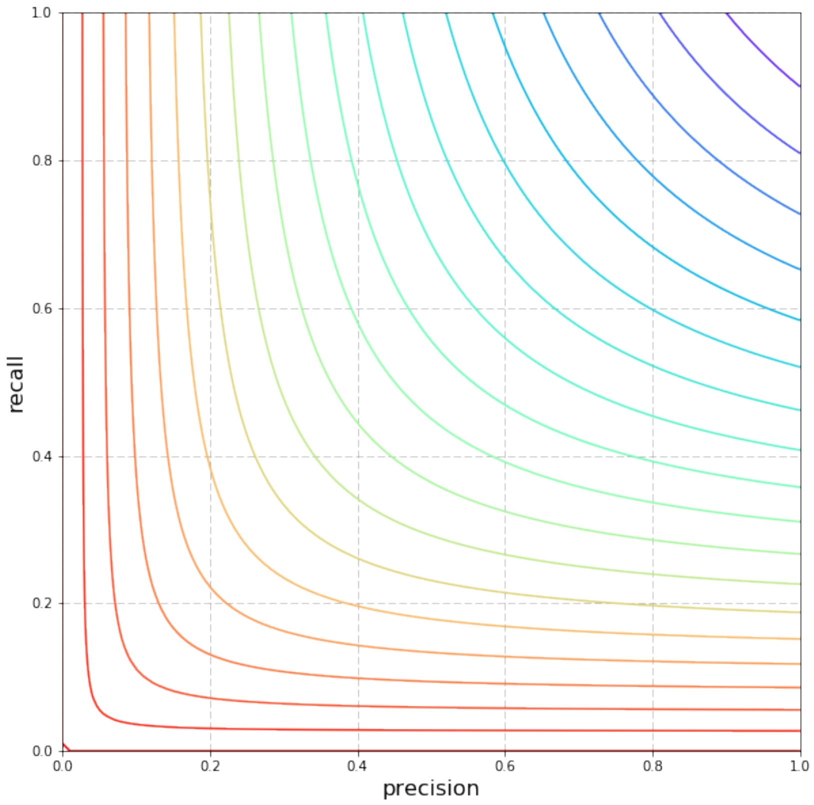


Геометрическое среднее

$$G = \sqrt{\text{precision} * \text{recall}}$$

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$





Геометрическое среднее

$$\mathrm{G} = \sqrt{\text{precision} * \text{recall}}$$

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

- $\text{precision} = 0.9$
- $\text{recall} = 0.1$
- $G = 0.3$

- $\text{precision} = 0.9$
- $\text{recall} = 0.1$
- $F = 0.18$

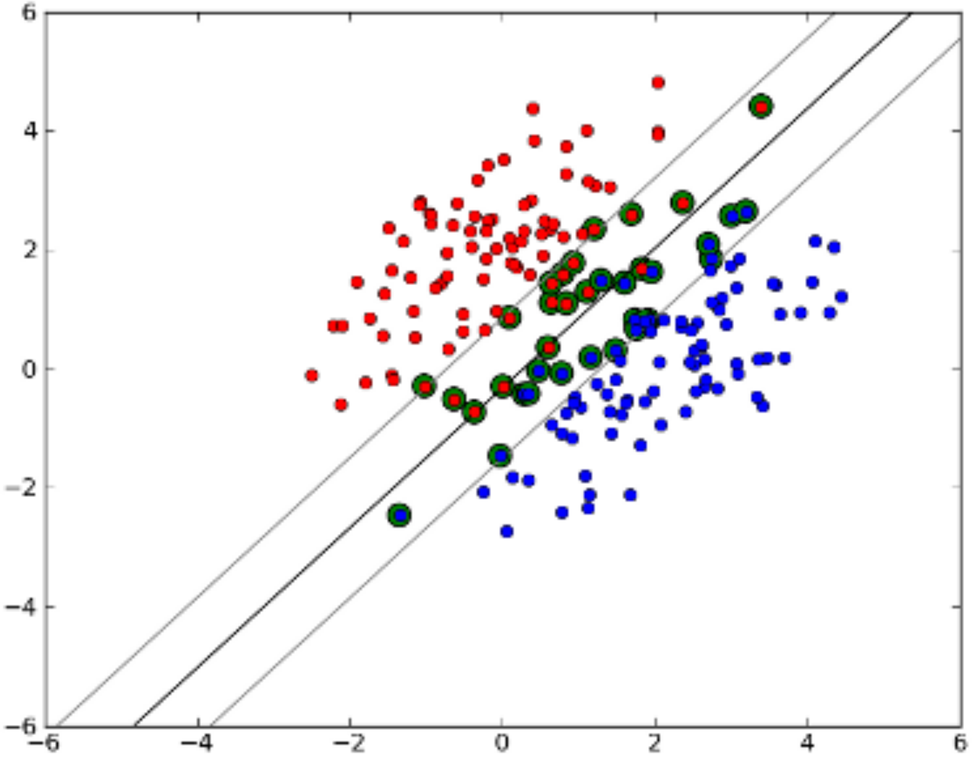
Линейный классификатор

- Будем считать, что есть единичный признак

$$a(x) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{d} w_j x_j = \operatorname{sign} \langle w, x \rangle$$

Отступ

- $M_i = y_i \langle w, x_i \rangle$
- $M_i > 0$ — классификатор дает верный ответ
- $M_i < 0$ — классификатор ошибается
- Чем дальше отступ от нуля, тем больше уверенности



Порог

$$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x \rangle - t)$$

- t — порог классификатора
- Можно подбирать для оптимизации функции потерь, отличной от использованной при обучении

Линейный классификатор

- Линейный классификатор разделяет два класса гиперплоскостью
- Чем больше отступ по модулю, тем дальше объект от гиперплоскости
- Знак отступа говорит о корректности предсказания

Обучение линейных классификаторов

Функция потерь в классификации

- Частый выбор — бинарная функция потерь

$$L(y, a) = [a \neq y]$$

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

Доля ошибок для линейного классификатора

- Функционал ошибки:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\mathrm{sign}\,(\langle w, x_i \rangle) \neq y_i]$$

- Индикатор — недифференцируемая функция

Отступы для линейного классификатора

- Функционал ошибки:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\operatorname{sign}(\langle w, x_i \rangle) \neq y_i]$$

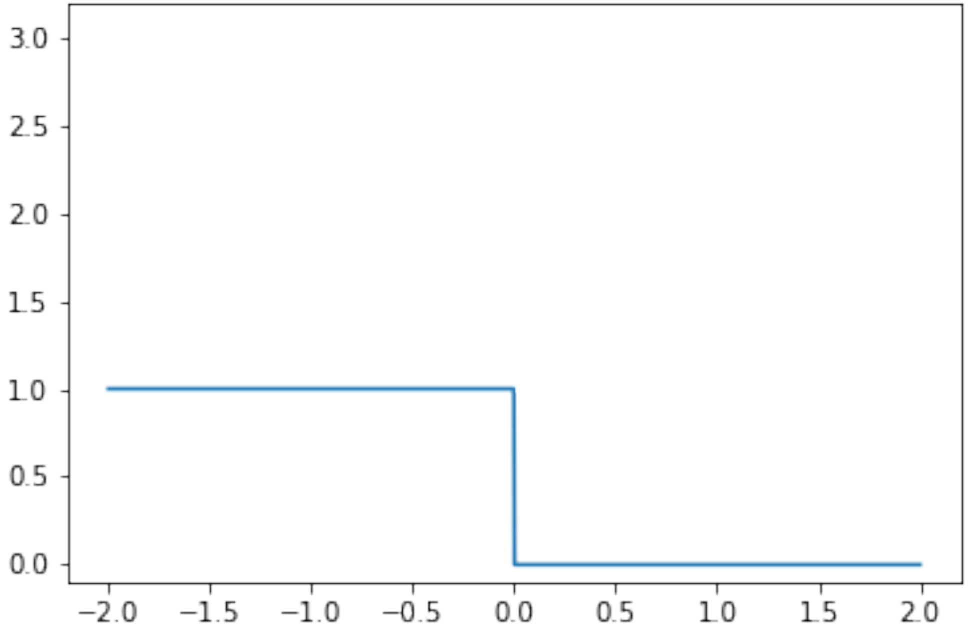
- Альтернативная запись:

$$Q(w, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [\underbrace{y_i \langle w, x_i \rangle}_{M_i} < 0]$$

Отступы для линейного классификатора

$$L(M) = [M < 0]$$

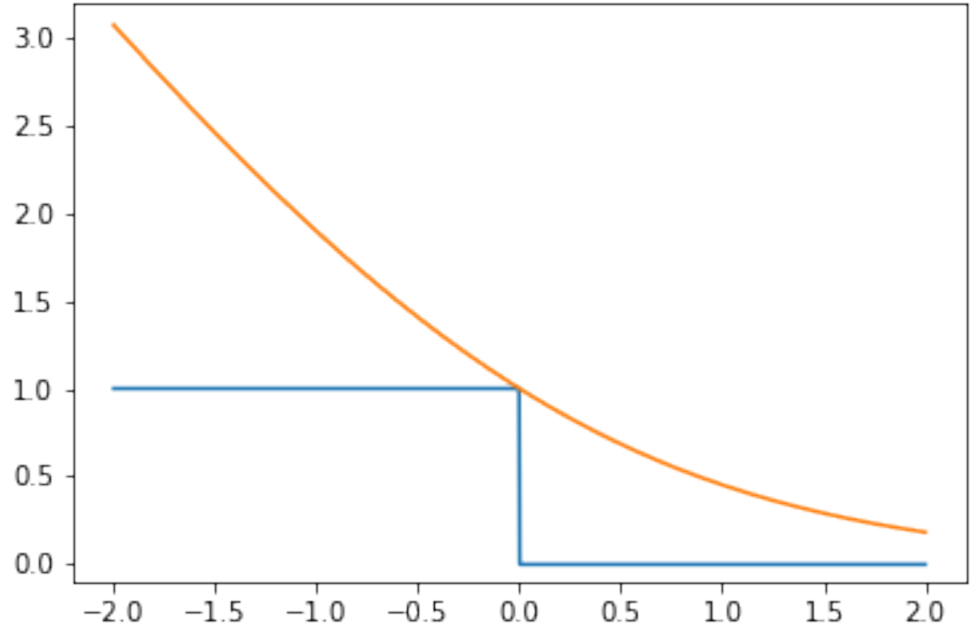
- Нельзя продифференцировать



Верхняя оценка

$$L(M) = [M < 0] \leq \tilde{L}\,(M)$$

- Оценим сверху дифференцируемой функцией



Верхняя оценка

$$0 \le \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[y_i\langle w, x_i\rangle < 0] \le \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\tilde{L}(y_i\langle w, x_i\rangle) \to \min_w$$

- Минимизируем верхнюю оценку
- Надеемся, что она прижмёт долю ошибок к нулю

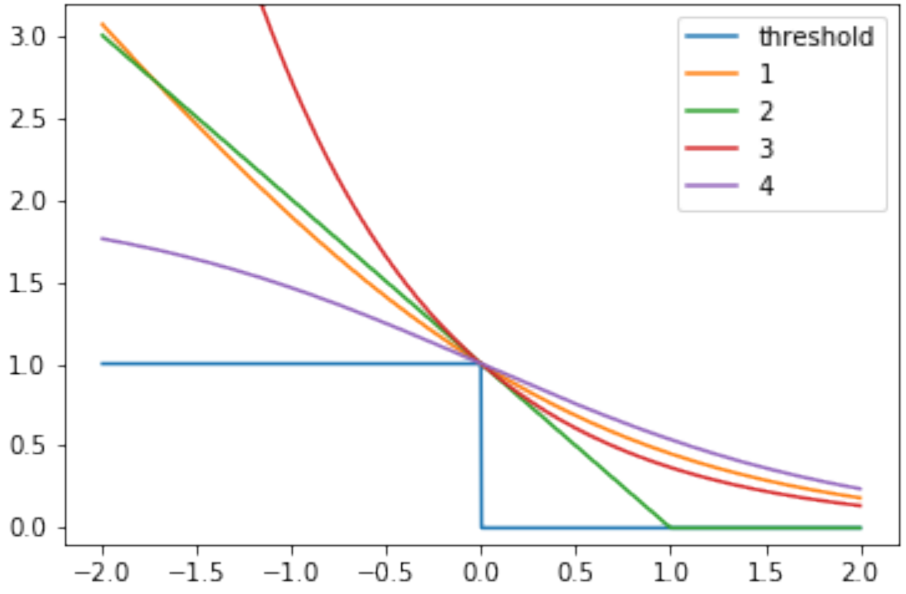
Примеры верхних оценок

1. $\tilde{L}(M) = \log(1 + e^{-M})$ — логистическая

2. $\tilde{L}(M) = \max(0, 1 - M)$ — кусочно-линейная

3. $\tilde{L}(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная

4. $\tilde{L}(M) = \frac{2}{1+e^{M}}$ — сигмоидная



Пример обучения

- Выбираем логистическую функцию потерь:

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

- Вычисляем градиент:

$$\nabla_w \tilde{Q}(w, X) = -\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{y_i x_i}{1 + \exp(y_i \langle w, x_i \rangle)}$$

Пример обучения

- Делаем градиентный спуск:

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

Пример регуляризации

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} \log(1 + \exp(-y_i \langle w, x_i \rangle)) + \lambda \|w\|^2 \to \min_w$$

- Полностью аналогично линейной регрессии
- Важно не накладывать регуляризацию на свободный коэффициент
- Можно использовать L_1-регуляризацию

Метрики качества ранжирования

Классификатор

- Линейный классификатор:

$$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x \rangle - t) = 2[\langle w, x \rangle > t] - 1$$

- $\langle w, x \rangle$ — оценка принадлежности классу +1
- Нередко $t = 0$

Оценка принадлежности

- Высокий порог:
  - Мало объектов относим к +1
  - Точность выше
  - Полнота ниже
- Низкий порог:
  - Много объектов относим к +1
  - Точность ниже
  - Полнота выше

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

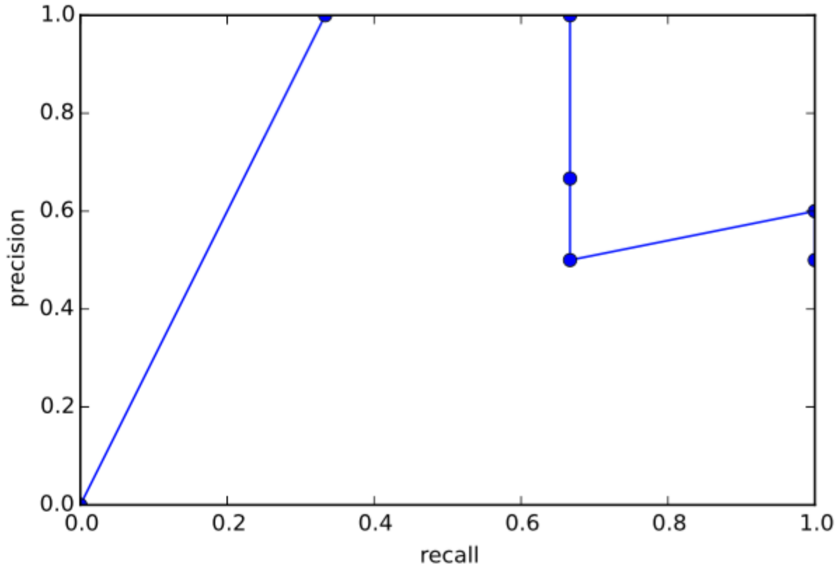
- Как оценить качество $b(x)$?
- Порог выбирается позже
- Порог зависит от ограничений на точность или полноту

Оценка принадлежности

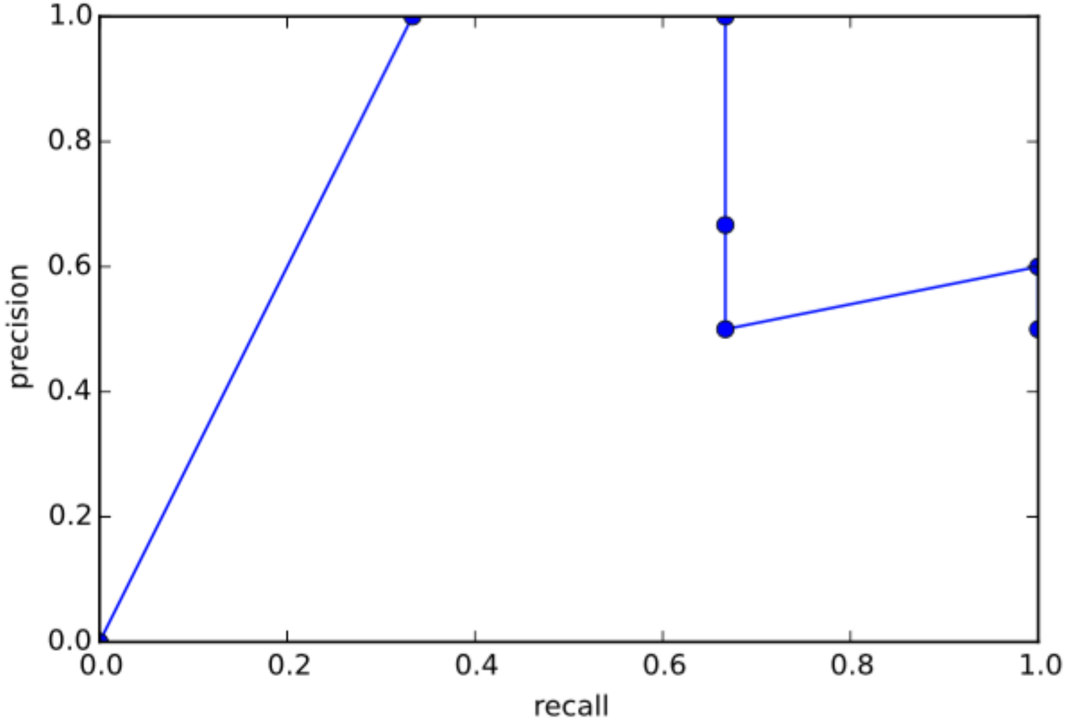
- Пример: кредитный скоринг
- $b(x)$ — оценка вероятности возврата кредита
- $a(x) = [b(x) > 0.5]$
- $\mathrm{precision} = 0.1, \mathrm{recall} = 0.7$
- В чем дело — в пороге или в алгоритме?

PR-кривая

- Кривая точности-полноты
- Ось X — полнота
- Ось Y — точность
- Точки — значения точности и полноты при последовательных порогах

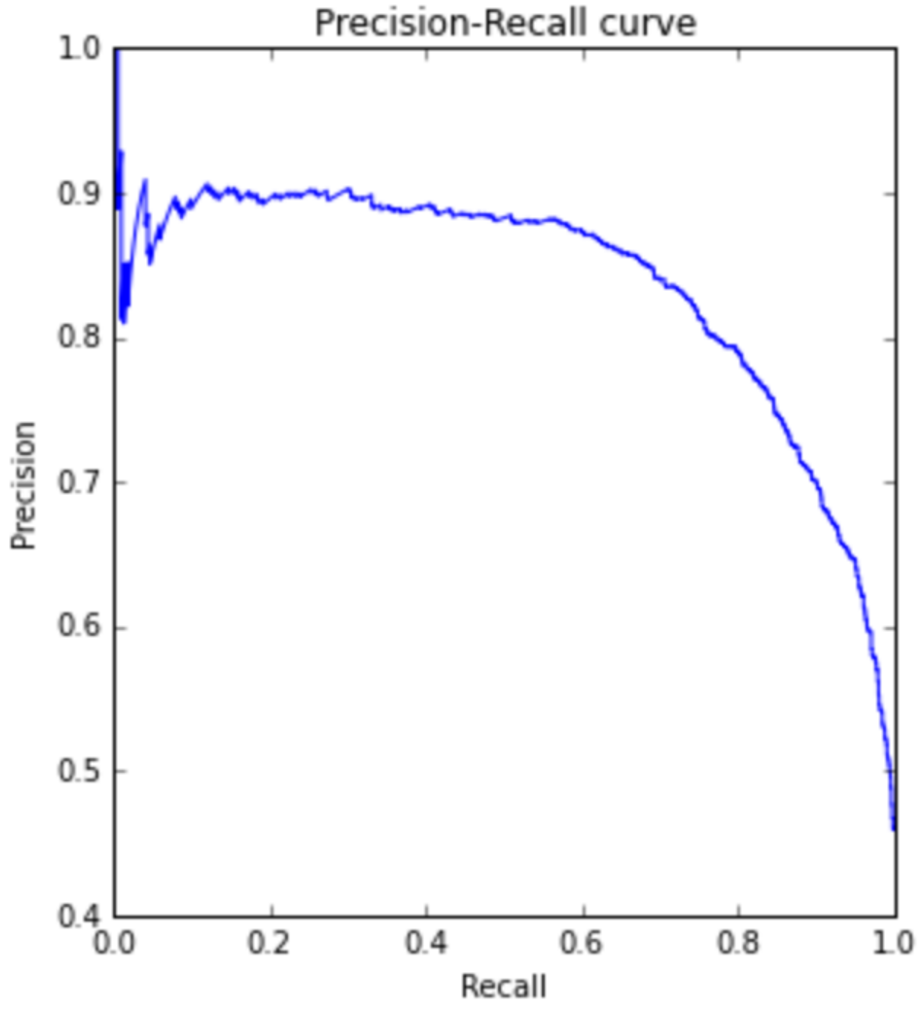


PR-кривая



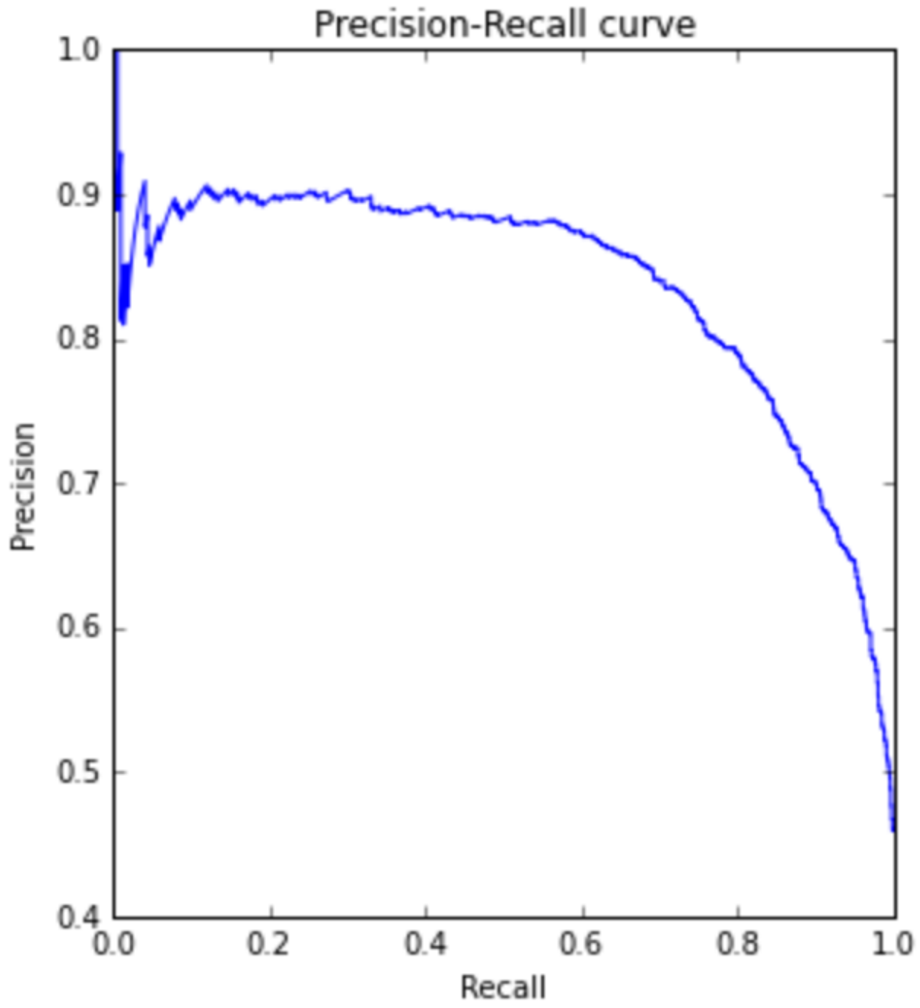
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

PR-кривая в реальности

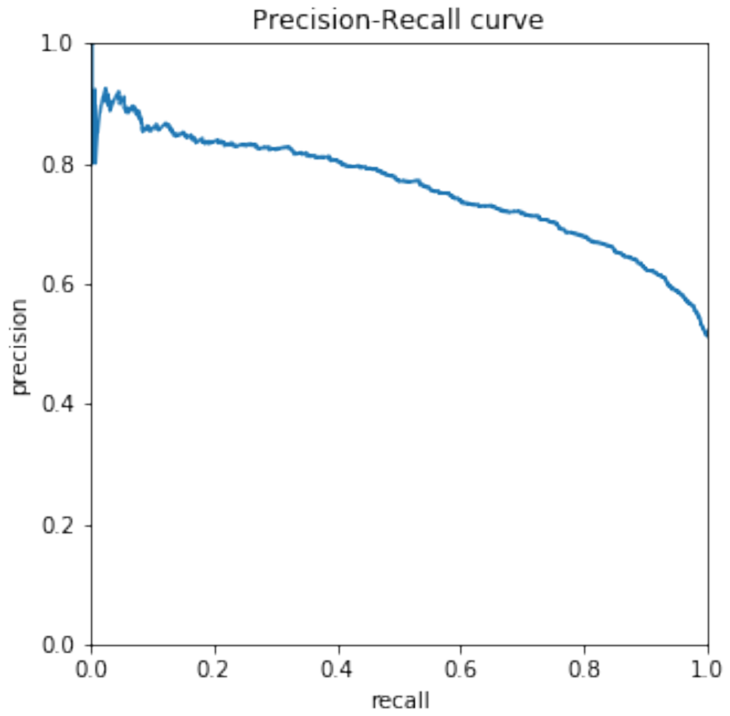


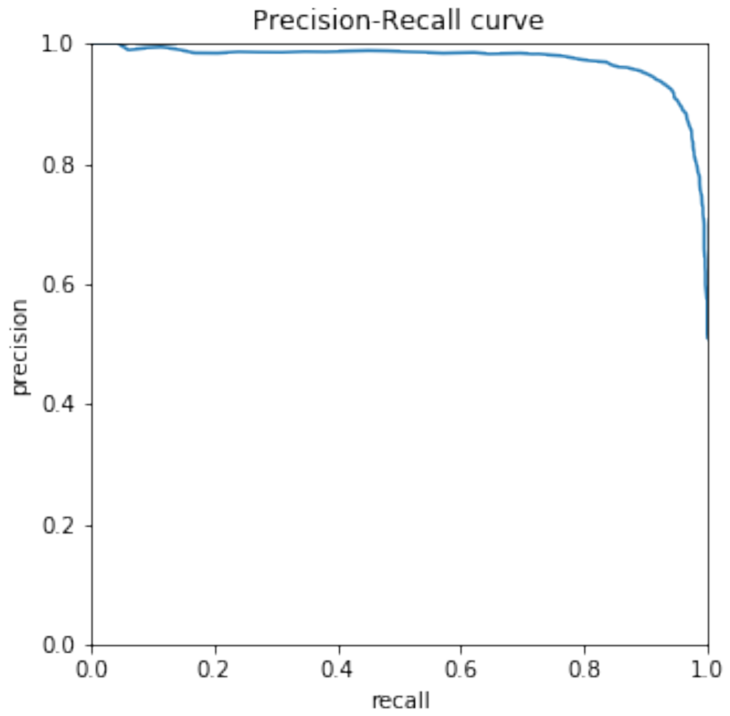
PR-кривая

- Левая точка: (0, 1)
- Правая точка: $(1, r)$, r — доля положительных объектов
- Для идеального классификатора проходит через (1, 1)
- AUC-PRC — площадь под PR-кривой



PR-кривая


Precision-Recall curve
precision
recall
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


Precision-Recall curve
precision
recall
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

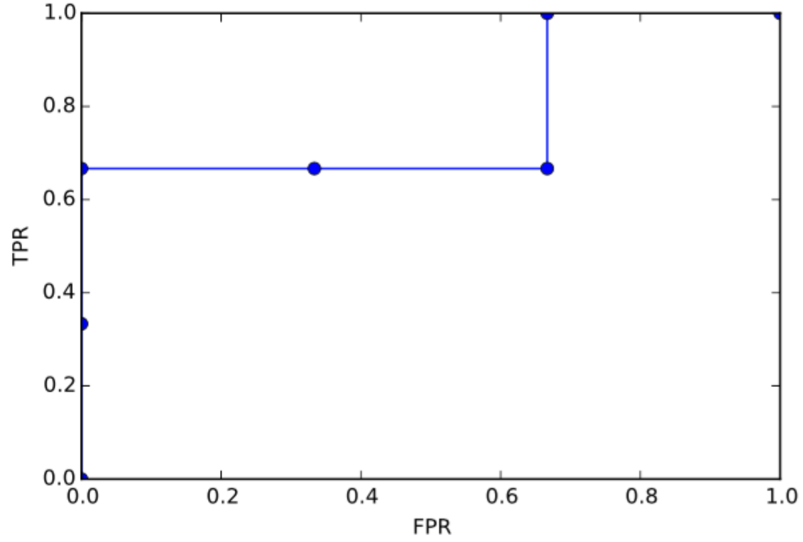
ROC-кривая

- Receiver Operating Characteristic
- Ось X — False Positive Rate

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

- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$



ROC-кривая

- Receiver Operating Characteristic
- Ось X — False Positive Rate

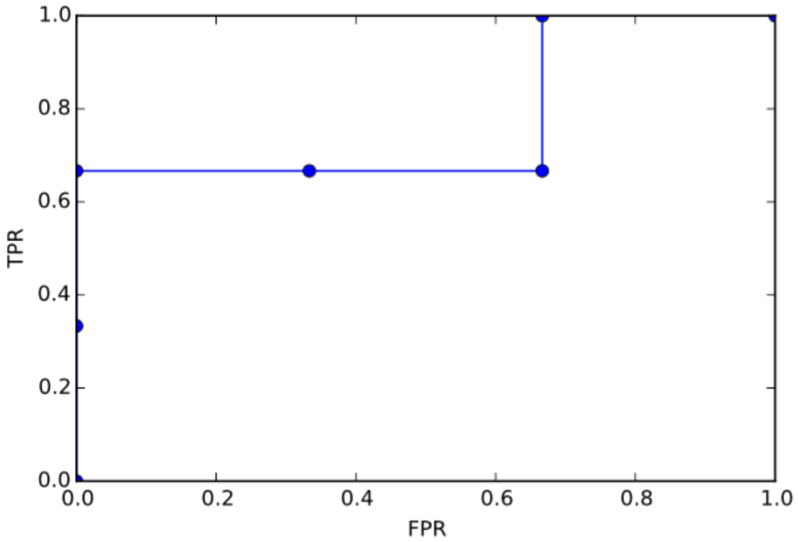
$$FPR = \frac{FP}{\boxed{FP + TN}}$$

Число отрицательных объектов

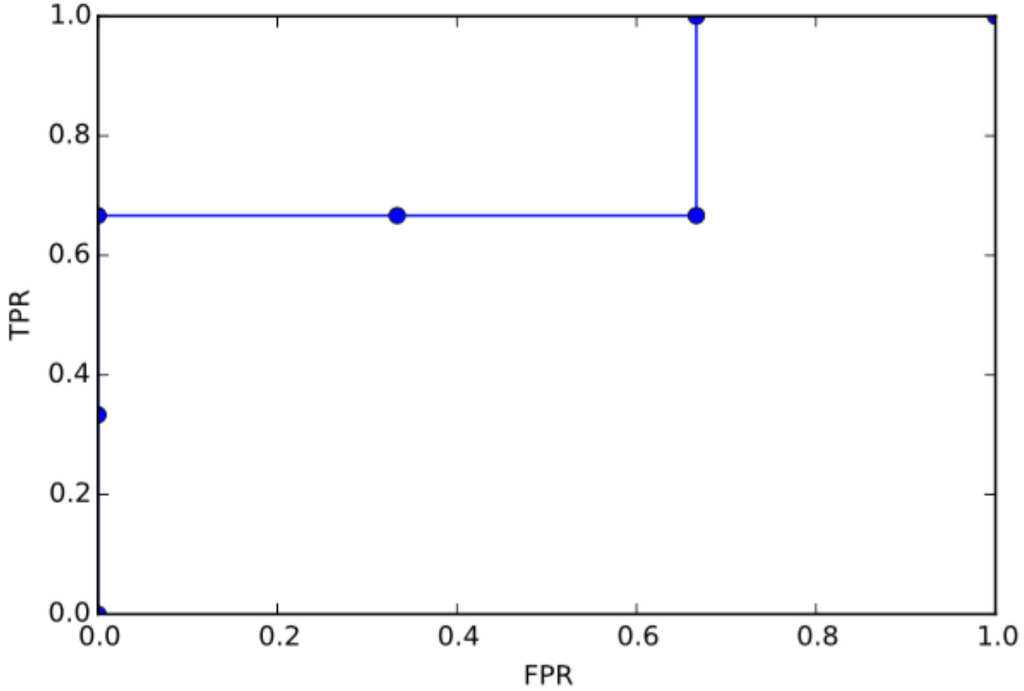
- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{\boxed{TP + FN}}$$

Число положительных объектов

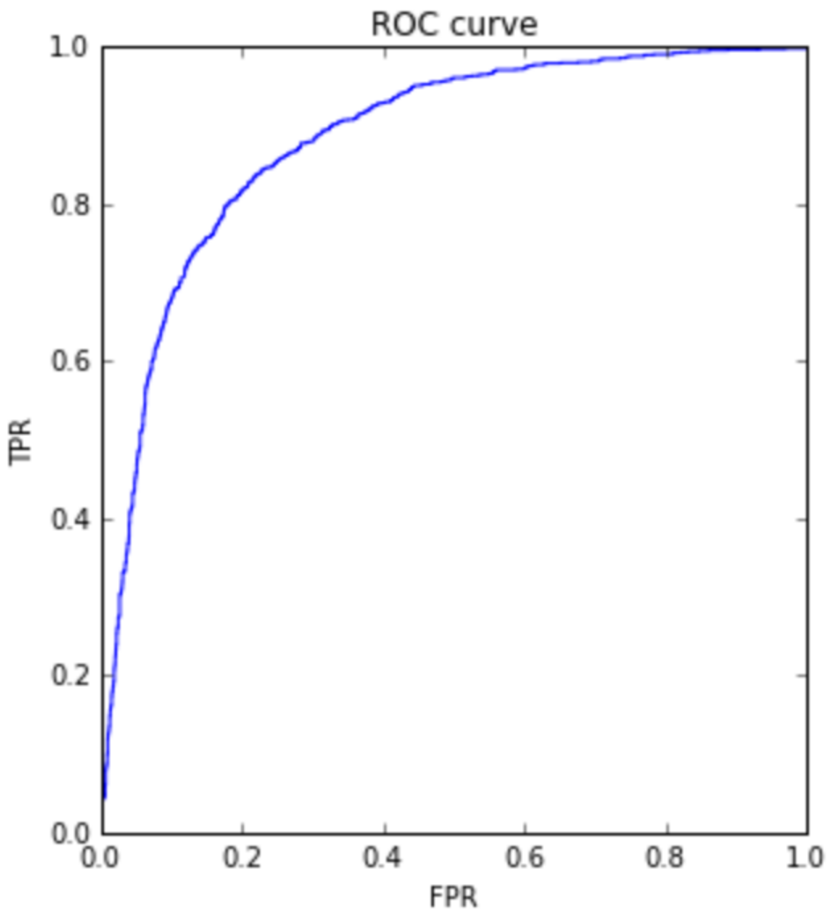


ROC-кривая



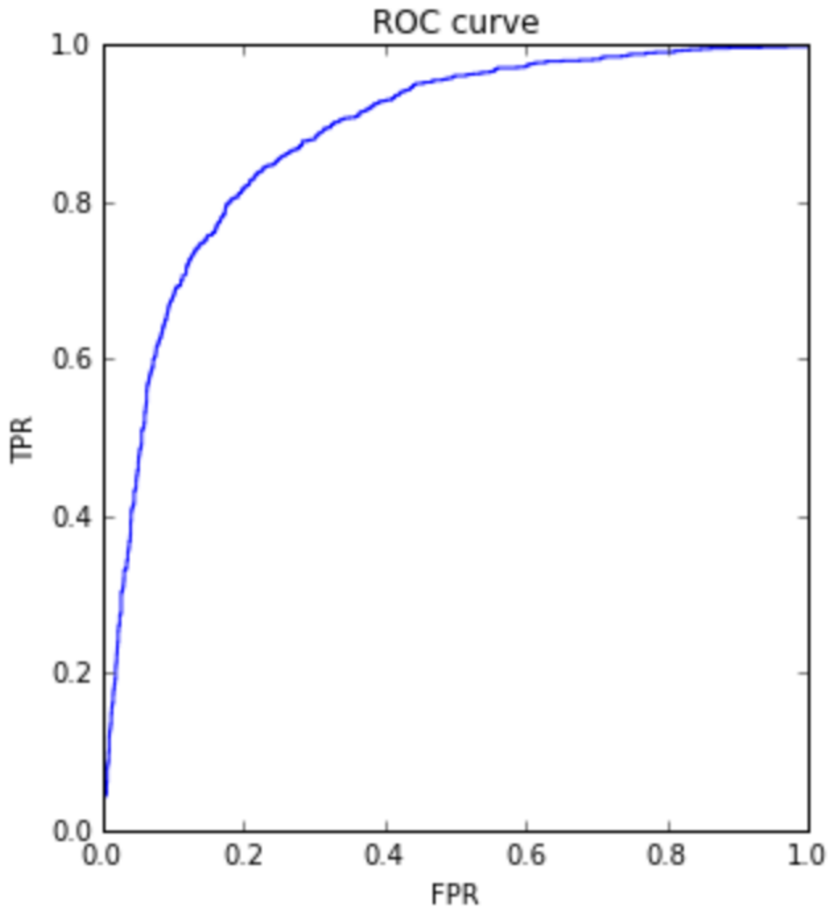
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

ROC-кривая в реальности

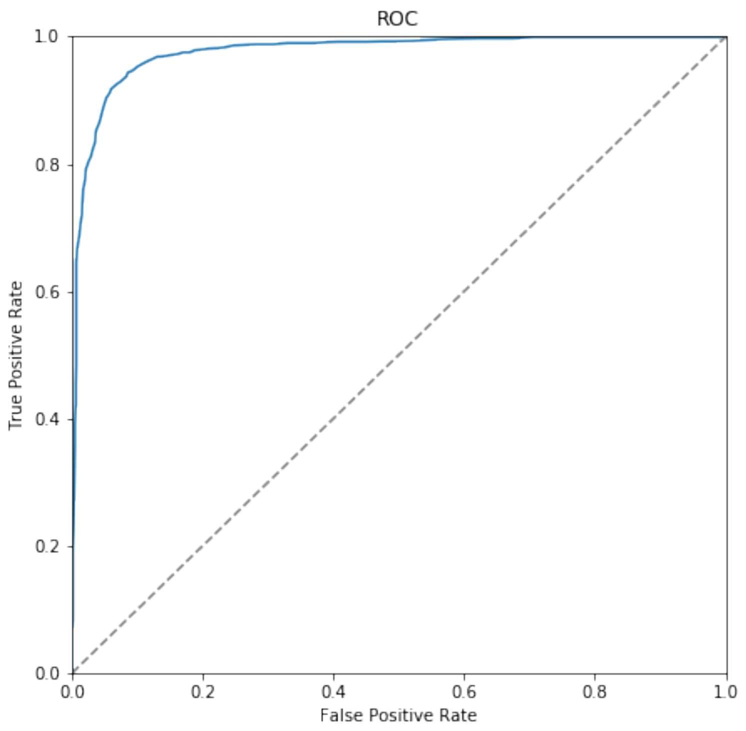


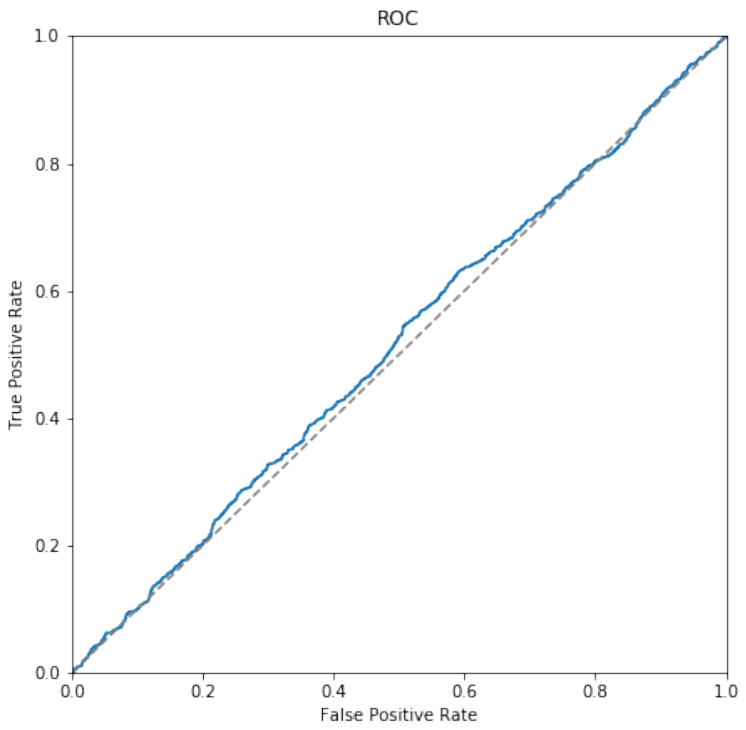
ROC-кривая

- Левая точка: (0, 0)
- Правая точка: $(1, 1)$
- Для идеального классификатора проходит через (0, 1)
- AUC-ROC — площадь под ROC-кривой



ROC-кривая


ROC
True Positive Rate
False Positive Rate
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


ROC
True Positive Rate
False Positive Rate
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

AUC-ROC

$$FPR = \frac{FP}{FP+TN}; \qquad\qquad TPR = \frac{TP}{TP+FN}$$

- FPR и TPR нормируются на размеры классов
- AUC-ROC не поменяется при изменении баланса классов
- Идеальный алгоритм: $\mathrm{AUC{-}ROC} = 1$
- Худший алгоритм: $\mathrm{AUC{-}ROC} \approx 0.5$
- Интересные интерпретации: например, это примерно доля пар правильно упорядоченных объектов

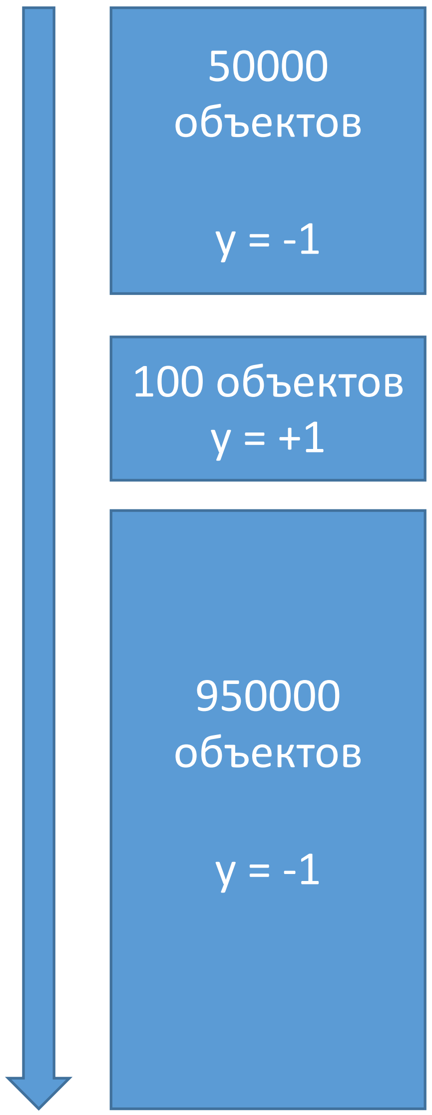
AUC-PRC

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP+FP}; \qquad \text{recall} = \frac{TP}{TP+FN}$$

- Точность поменяется при изменении баланса классов
- AUC-PRC идеального алгоритма зависит от баланса классов
- Проще интерпретировать, если выборка несбалансированная
- Лучше, если задачу надо решать в терминах точности и полноты

Пример

- AUC-ROC = 0.95
- AUC-PRC = 0.001



Пример

- Выберем конкретный классификатор
- $a(x) = 1$ — 50095 объектов
- Из них FP = 50000, TP = 95
- TPR = 0.95, FPR = 0.05
- precision = 0.0019, recall = 0.95