Машинное обучение в экономике Логистическая регрессия и метод опорных векторов

Потанин Богдан Станиславович

доцент, научный сотрудник, кандидат экономических наук

2023-2024

Введение

Основные рассматриваемые темы

- Методы классификации:
 - Логистическая регрессия.
 - Метод опорных векторов.
- Базовые понятия:
 - Численная оптимизация: методы лкоальной и глобальной оптимизации, градиентный спуск, скорость обучения, условия остановки, линейный поиск с возвратом.
 - Модели и функция потерь.
 - Градиентный бустинг.
 - Опорные вектора и отступ.

Логистическая регрессия

Основная идея

• Предположим, что условные вероятности могут быть оценены как функции от линейных комбинаций признаков:

$$P(Y_i = 1 | X_i = x_i) = g(X_i \beta)$$

- Коэффициенты β часто называют **весами**, а функция g() принимает значения от 0 до 1, то есть трансформирует **линейный индекс** $X_i\beta$ в условные вероятности.
- В качестве функции g() удобно взять функцию распределения некоторого распределения с носителем на R. Наиболее популярным в машинном обучении является логистическое распределение, при котором мы получаем логит модель:

$$g(t) = \frac{1}{1 + e^{-t}}$$

• В эконометрике не менее популярной является функция распределения стандартного нормального распределения $g(t) = \Phi(t)$, при которой мы получаем пробит модель.

Логистическая регрессия

Обучение

• Для оценивания условных вероятностей достаточно оценить параметры β методом максимального правдоподобия:

$$L(\beta; X, Y) = \prod_{i:y_{i=1}} P(Y_i = 1 | X_i) \prod_{i:y_{i=0}} P(Y_i = 0 | X_i) = \prod_{i:y_{i=1}} g(X_i \beta) \prod_{i:y_{i=0}} 1 - g(X_i \beta) =$$

$$= \prod_{i:y_{i=1}} \frac{1}{1 + e^{-X_i \beta}} \prod_{i:y_i = 0} 1 - \frac{1}{1 + e^{-X_i \beta}}$$

$$\ln L(\beta; X, Y) = \sum_{i=1}^{n} -\ln(1 + e^{-X_i \beta}) - (1 - Y_i)X_i \beta$$

- Можно показать, что логарифм функции правдоподобия является вогнутой функцией по β при (почти) любых X_i , а значит ее максимум является единственным.
- В отличие от линейного МНК, в данном случае не существует аналитического выражения для $\hat{\beta}$, что мотивирует максимизацию численными методами.

Численная оптимизация

Мотивация и классификация

Численная оптимизация позволяет находить приблизительный максимум или минимум функции без необходимости искать аналитическое решение.

- Методы локальной оптимизации (BFGS, градиентный спуск) как правило работают достаточно быстро, но позволяют находить лишь локальные экстремумы. Методы глобальной оптимизации (генетический алгоритм, метод отжига – SA) позволяют найти несколько экстремумов, один из которых может оказаться глобальным.
 Однако, глобальная оптимизация обычно крайне затратна по времени.
- Методы локальной оптимизации часто опираются на Градиент (градиентный спуск, ADAM) или Гессиан функции (BFGS, BHHH). В последнем случае число итераций алгоритма, как правило, оказывается меньше, но время каждой итерации больше, особенно, при значительном числе оцениваемых параметров.

Поскольку число оцениваемых параметров в эконометрических моделях, как правило, относительно невелико (в сравнении с моделями машинного обучения), то в них чаще применяются алгоритмы, использующие информацию о Гессиане (BFGS, BHHH).

Численная оптимизация

Пример с использованием градиентного спуска

Алгоритм **градиентного спуска** является одним из простейших численных методов нахождения минимума функции.

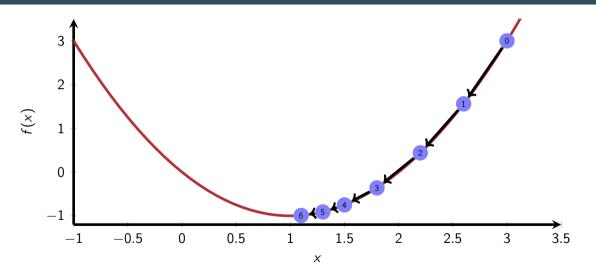
- Выбираем произвольную начальную точку x_0 .
- Считаем градиент функции в этой точке $\nabla f(x_0)$.
- Переходим в новую точку $x_1 = x_0 \alpha \nabla f(x_0)$, где α малая положительная константа, регулирующая **скорость обучения** (learning rate).
- Повторяем процедуру до тех пор, пока не будут соблюдены условия остановки (termination conditions), например, о том, что $|\nabla f(x_0)| < \varepsilon$, где ε маленькое положительное число.

Нетрудно показать аналитически, что функция $f(x)=x^2-2x$ достигает минимума в точке $x^*=1$. В качестве альтернативы аналитическому решению попробуем приблизиться к минимуму с помощью 10 итераций описанного алгоритма, произвольным образом полагая $x_0=3$ и $\alpha=0.2$.

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Xi	3	2.20	1.72	1.43	1.26	1.16	1.09	1.06	1.03	1.02	1.01
$\nabla f(x_i)$	4	2.40	1.44	0.86	0.52	0.31	0.19	0.11	0.07	0.04	0.02
$f(x_i)$	3	0.44	-0.48	-0.81	-0.93	-0.98	-0.99	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00

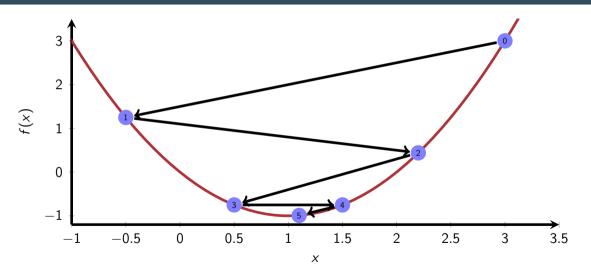
<u>Численная оптимизация</u>

Графическая иллюстрация одномерной локальной численной оптимизации



Численная оптимизация

Графическая иллюстрация градиентного спуска с большой скоростью обучения



Численная оптимизация

Линейный поиск с возвратом

- Рассмотрим функцию f(x) в точке x^* .
- Алгоритм градиентного спуска возможет благодаря тому, что при соблюдении некоторых условий регулярности, включая $\nabla f(x^*) \neq 0$, существует такая константа $\tau > 0$ (для удобства предположим, что существует наибольшая из таких констант и будем рассматривать ее), что для любой положительной константы τ^* , такой, что $0 < \tau^* \leq \tau$, соблюдается:

$$f(x^* - \tau^* \nabla f(x^*)) < f(x^*)$$

- Проблема величина au зависит от точки x^* , поэтому, при фиксированной скорости обучения lpha если при некотором x^* окажется, что lpha > au, то вследствие очередной итерации градиенного спуска значение функции может не уменьшиться, а увеличиться.
- Популярное решение воспользоваться линейным поиском с возвратом, при котором каждую итерацию градиентного спуска:
 - **1** Полагается $\alpha = \alpha_0$, где $\alpha_0 > 0$ отвечает за начальную скорость обучения.
 - ② До тех пор, пока не соблюдены некоторые условия, в том числе гарантиерующие $\alpha_j \le \tau$, скорость обучения снижается в некоторое число раз $\alpha_i = \gamma \alpha_{i-1}$, где $\gamma \in (0,1)$.
 - ③ Полученная скорость обучения используется для нахождения очередной точки $x_{n+1} = x_n \alpha_j \nabla f(x_n)$.

Логистическая регрессия

Прогнозирование

- ullet Оценки \hat{eta} находятся с помощью максимизации функции правдоподобия по eta одним из методов численной оптимизации.
- ullet Важно для перехода от численной минимизации к максимизации достаточно умножить функцию на -1.
- ullet Условные вероятности оцениваются за счет подстановки \hat{eta} в формулу:

$$\hat{p}_{x} = \hat{P}(Y_{i} = 1 | X_{i} = x) = g\left(x\hat{\beta}\right)$$

• В случае логистической модели получаем:

$$\hat{\rho}_{x} = \hat{P}(Y_{i} = 1 | X_{i} = x) = \frac{1}{1 + e^{-x\hat{\beta}}}$$

• Прогнозирование осуществляется классическим образом:

$$\hat{y}(x) = egin{cases} 1$$
, если $\hat{p}_x \geq c \ 0$, в противном случае

Логистическая регрессия

Нелинейная спецификация

- **Проблема** на первый взгляд линейная форма условных вероятностей $X_i\beta$ снижает гибкость модели.
- Решение можно добавить нелинейность в модель, например, взяв не только сами признаки, но и некоторые нелинейные функции от них.
- Пример 1 вместо возраста age_i можно взять его полином третьей степени просто добавив в число признаков age_i^2 и age_i^3 .
- Пример 2 чтобы учесть взаимодействие между возрастом age_i и доходом $income_i$ можно добавить в число признаков их произведение $age_i \times income_i$.
- Оптимальная спецификация логистической регрессии может быть подобрана, например, с помощью кросс-валидации.

Основная идея

• Одиним из общих подходов к спецификации моделей в машинном обучении является использование функций потерь, обозначаемых по аналогии с функцией правдоподобия (важно их не путать):

$$L(Y, F(X)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} L(Y_i, F(X_i))$$

- Функции F(x) обычно именуют **моделями** и они отражают либо прогноз целевой переменной Y_i , либо оценку ее некоторой характерстики, например, условной вероятности $P(Y_i=1|X_i=x)$.
- Исследователь стремится найти модель F(x) в классе K_F (например, все случайные леса), минимизирующую функцию потерь.
- Часто для удобства модели обозначают как $F(x;\theta)$, где θ отражает вектор параметров. В таком случае класс определяется всеми допустимыми значениями θ .

Квадратичная функция потерь

• Рассмотрим линейную модель $F(x; \theta) = x\theta$, непрерывную целевую переменную Y_i и квадратичную функцию потерь:

$$L(Y, F(X; \theta)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - F(X_i; \theta))^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - X_i \theta)^2$$

• Очевидно, что в данном случае мы получаем линейную регрессию и функция потерь минимизируется при $\theta = \hat{\theta}$, где $\hat{\theta}$ – MHK оценка, то есть:

$$\hat{\theta} = \left(X^T X \right)^{-1} X^T Y$$

• Таким образом, функция потерь минимизируется при использовании модели:

$$F(x; \hat{\theta}) = x\hat{\theta} = x\underbrace{\left(X^{T}X\right)^{-1}X^{T}Y}_{\hat{\theta}}$$

Логистическая функция потерь

• Рассмотрим модель $F(X_i;\theta) = 1/\left(1+e^{-X_i\theta}\right)$, бинарную целевую переменную Y_i и **логистическую функцию потерь**:

$$L(Y, F(X_i; \theta)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} -Y_i \ln (F(X_i; \theta)) - (1 - Y_i) \ln (1 - F(X_i; \theta)) =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} -Y_i \ln (1/(1 + e^{-X_i \theta})) - (1 - Y_i) \ln (1 - 1/(1 + e^{-X_i \theta})) =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i:y_i=1}^{n} \ln(1 + e^{-X_i \theta}) + \frac{1}{n} \sum_{i:y_i=0}^{n} X_i \theta + \ln(1 + e^{-X_i \theta}) =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln(1 + e^{-X_i \theta}) + (1 - Y_i) X_i \beta$$

• Вывод – мы получили логистическую регрессию, поскольку логистическая функция потерь при данной модели совпадает, с противоположным знаком, с логарифмом функции правдополобия логистической регрессии.

Альтернативные спецификации функций потерь

- Одну и ту же модель машинного обучения можно получить при различных спецификациях функции потерь L(Y, F(X)) и модели F(x).
- Например, логистическую регрессию можно получить и с помощью нередко встречающегося в литературе альтернативного определения логистической функции потерь (проверьте самостоятельно):

$$L(Y, F(X_i; \theta)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ln \left(1 + e^{(2Y_i - 1)F(X_i; \theta)} \right)$$

$$F(x; \theta) = \ln \left(\frac{P(Y_i = 1 | X_i = x)}{1 - P(Y_i = 1 | X_i = x)} \right)$$

$$P(Y_i = 1 | X_i = x) = \frac{1}{1 + e^{-x\theta}}$$

Подбор гиперпараметров

- Обычно параметры модели оцениваются с использованием дифференцируемой по параметрам функции потерь.
- Гиперпараметры подбираются с помощью этой же или другой функции потерь, либо исходя из некоторых критериев качества, таких как, например, AUC или F1-метрика.
- При умножении на -1 различные критерии качества, включая AUC или F1-метрику, можно рассматривать как функции потерь, однако, поскольку они не дифференцируемы по параметрам, их неудобно использовать для обучения основных параметров (не гиперпараметров) модели.
- Оптимальная функция потерь подбирается исходя из двух ключевых соображений:
 - Удобство численной оптимизации: дифференцируемость, выпуклость и т.д.
 - Связь с показателем, непосредственно интересующим исследователя или бизнес.
- Например, в задаче классификации поиск весов (коэффициентов) признаков часто удобно осуществлять с помощью логистической функции потерь. Однако, подбор гиперпараметров, таких как оптимальная спецификация регрессоров или порог прогнозирования, можно осуществить ориентируясь на максимизацию прибыли или F1-метрику.

Предварительные обозначения

ullet Обратим внимание, что F(X) обозначает вектор значений модели:

$$F(X) = \begin{bmatrix} F(X_1) & F(X_1) & \dots & F(X_m) \end{bmatrix}^T$$

• Рассмотрим градиент функции потерь (скаляр) по значениям модели F(X):

$$\frac{dL(Y,z)}{dt}|_{t=F(X)} = \begin{bmatrix} \frac{dL(Y_1,t_1)}{dt_1}|_{t=F(X_1)} & \frac{dL(Y_2,t_2)}{dt_2}|_{t_2=F(X_2)} & \dots & \frac{dL(Y_m,t_m)}{dt_m}|_{t_m=F(X_m)} \end{bmatrix}^T$$

• Для краткости обозначим его как:

$$\frac{d\mathsf{L}(Y,F(X))}{dF(X)} = \begin{bmatrix} \frac{d\mathsf{L}(Y_1,F(X_1))}{dF(X_1)} & \frac{d\mathsf{L}(Y_2,F(X_2))}{dF(X_2)} & \dots & \frac{d\mathsf{L}(Y_m,F(X_m))}{dF(X_m)} \end{bmatrix}^T$$

ullet Обозначение X будет использоваться для матрицы признаков обучающей выборки, а x – для вектора признаков проивзольного наблюдения из обучающей или тестовой выборки.

Постановка проблемы

• Представим, что у нас уже есть модель $F_M(x)$ и мы хотим ее улучшить (boost) за счет добавления модели $h_{M+1}(x)$ из класса H_{M+1} (например, все регрессионные деревья) с весом γ_{M+1} . В результате получаем:

$$F_{M+1}(x) = F_M(x) + \gamma_{M+1}h_{M+1}(x)$$

• В **идеальном случае** мы хотели бы найти функцию и вес, минимизирующие функцию потерь:

$$(h_{M+1}(X), \gamma_{M+1}) = \operatorname*{argmin}_{(h_{M+1}^*(X) \in H_{M+1}, \gamma_{M+1}^* \in R)} \mathsf{L}(Y, F_M(X) + \gamma_{M+1}^* h_{M+1}^*(X))$$

- **Проблема** решение данной оптимизационной задачи крайне затруднительно на практике.
- Решение вместо того, чтобы полностью решать данную задачу, можно, по аналогии с градиентным спуском, попытаться найти $h_{M+1}(X)$ и γ_{M+1} , которые пусть и не минимизируют, но по крайней мере уменьшают функцию потерь.

Оценивание градиента

• Предполагая некоторые условия регулярности по поводу функции потерь (по аналогии с градиентным спуском) можно гарантировать существование такой γ_{M+1} , что:

$$L\left(Y, F_M(X) - \gamma_{M+1} \frac{dL(Y, F_M(X))}{dF_M(X)}\right) < L(Y, F_M(X))$$

- Идея чтобы улучшить качество модели $F_M(X)$, можно взять любую γ_{M+1} , при которой соблюдается соответствующее неравенство, и в качестве модели $h_{M+1}(X)$ положить $-\frac{d\mathsf{L}(Y,F_M(X))}{dF_M(X)}$. Однако, воплощению этой идеи препятствует серьезная проблема.
- **Проблема** отрицательный градиент не является моделью, принадлежащей к классу H_{M+1} , и зависит не только от X, но и от Y. Также, из-за этого модель $h_{M+1}(X)$, а значит и модель $F_{M+1}(X)$, нельзя применять для прогнозирования на новых данных, в которых значения целевой переменной Y неизвестны.
- Решение получить $h_{M+1}(X)$, обучив модель из класса H_{M+1} прогнозировать отрицательный градиент $-\frac{dL(Y,F_M(X))}{dF_M(X)}$ с помощью X. Тогда значения Y обучающей выборки будут использованы лишь для оценивания функции $h_{M+1}(X)$.

Алгоритм

• Выбирается базовая функция, обычно в форме константы:

$$F_0(x) = \underset{c \in R}{\operatorname{argmin}} \ \mathsf{L}(Y,c)$$

Как правило решением этой задачи является выборочное среднее $c=\overline{Y}.$

- ullet Для каждого наблюдения рассчитывается **остаток** $r_{1i} = -rac{d\mathsf{L}(Y_i, F_1(X_i))}{dF_1(X_i)}$.
- Определяется класс рассматриваемых моделей H_1 . В качестве модели $h_1(X)$ выбирается регрессионная модель из класса H_1 (обычно регрессионные деревья небольшой глубины), обученная прогнозировать остатки r_{1i} с помощью признаков X_i .
- Формируется новая модель:

$$F_1(x) = F_0(x) + \gamma_1 h_1(x)$$

- Алгоритм повторяется до выполнения критерия остановки, например, фиксированное число раз.
- ullet Параметры γ_M и классы моделей H_M обычно одинаковы на всех итерациях.

Особенности применения

- В качестве базовой функции можно взять и достаточно сложную модель, которую вы намереваетесь улучшить.
- Базовая модель $F_0(X)$ не обязательно должна быть быть похожа на модели для аппроксимации градиента $h_M(X)$
- При слишком большом числе итераций алгоритма модель склонна к переобучению. Поэтому желательно проверять, например, графически, нельзя ли повысить точность модели на тестовой выборке за счет уменьшения числа итераций алгоритма. На практике можно взять большое число итераций алгоритма и затем оценить качество прогнозов на тестовой выборке поочередно каждый раз исключая последнюю из оцененных моделей.

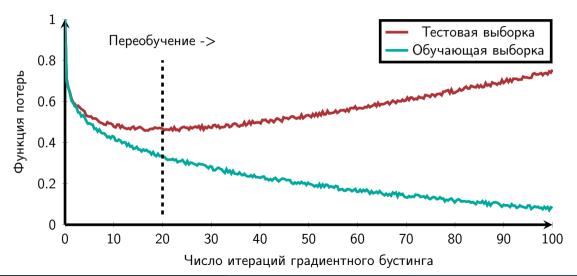
Пример первого шага алгоритма

X_i	1	2	5	7	8
$\overline{Y_i}$	6	9	12	15	21
$F_0(x)$	9	9	12	16	(12+15+21) / 3 = 16
-∇L	-6	0	0	-2	-2(16-21) = 10
$h_1(x)$	-3	-3	-1	4	(-2+10) / 2 = 4

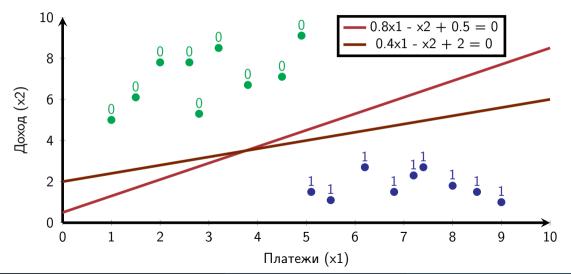
- Предполагается квадратическая функция потерь $L(y,F(x))=(F(x)-y)^2$, откуда $\nabla L=2(F(x)-y)$.
- В качестве базовой модели $F_0(x)$, прогнозирующей Y_i с помощью X_i , используется метод ближайших соседей с 3-мя соседями и расстоянием Манхэттен.
- В качестве модели $h_1(x)$, прогнозирующей остаток $r_1 = -\nabla \mathsf{L}(Y_i, F_0(X_i))$ с помощью X_i , используется метод ближайших соседей с 2-мя соседями и Евклидовым расстоянием.
- Посчитаем прогноз в точке x = 6:

$$F_1(6) = F_0(6) + 0.1h_1(6) = \frac{12 + 15 + 21}{3} + 0.1 \times \frac{0 - 2}{2} = 15.9$$

Графическая иллюстрация проблемы переобучения



Графическая иллюстрация идеи на примере дефолта



Случай с наличием разделяющей гиперплоскости

- **Предположение** существуют линии, которые можгут полностью разграничить два класса в зависимости от значений признаков.
- Проблема какую из линий выбрать, если их бесконечно много?
- Решение выбираем линию таким образом, чтобы максимизировать перпендикулярное расстояние от нее до ближайшего наблюдения. Этой расстояние именуется отступом (margin).
- После того, как мы выбрали линию, наблюдения, имеющие наименьшее перпендикулярное расстояние до этой линии, именуются опорными векторами.
- Разделяющая линия задается уравнением $\beta_0 + x\beta = 0$, где β и β_0 подбираются из соображений минимизации отступа.
- ullet Следуя традиции и для удобства класс 0 будем обозначать как -1.

Определение классификатора

- Рассмотрим eta_0 и eta такие, что $eta_0 + X_i eta = 0$ задает разделяющую линию с максимальным отступом.
- Определим классификатор следующим образом:

$$\hat{y}(x) = egin{cases} 1$$
, если $eta_0 + X_i eta \geq c_1$ (точки над отступом разделяющей линии) -1 , если $eta_0 + X_i eta \leq -(c_{-1})$ (точки под отступом разделяющей линии)

- Если $c_1>c_{-1}$, то геометрически очевидно, что отступ не является максимальным, поскольку сдвинув линию вниз мы сможем его увеличить. По аналогии невозможен случай $c_1< c_{-1}$, а значит $c_1=c_{-1}$.
- Поскольку умножении равенства $\beta_0 + X_i \beta = 0$ на константу его не изменяет, то без потери общности можно положить $c_1 = c_{-1} = 1$, откуда получаем классификатор:

$$\hat{y}(x) = egin{cases} 1$$
, если $eta_0 + X_ieta \geq 1 \ -1$, если $eta_0 + X_ieta \leq -1$

Оптимизационная задача

• Определим перпендикулярное расстояние от наблюдения X_i до линии $\beta_0 + X_i \beta = 0$:

$$d(X_i; \beta_0, \beta) = \frac{|\beta_0 + X_i\beta|}{\sqrt{\beta_1^2 + \ldots + \beta_m^2}} = \frac{|\beta_0 + X_i\beta|}{||\beta||}$$

- Обозначим через q произвольный опорный вектор, то есть наблюдение, находящееся на расстоянии отступа от разграничивающей линии $\beta_0 + X_i \beta = 0$.
- Из введенного ранее определения классификатора следует, что $|\beta_0+\beta q|=1$, а значит $d(q,\beta_0,\beta_1)=1/||\beta||$.
- Поскольку отступ определяется через опорный вектор q, то задача максимизации отступа может быть сведена к задаче максимизации $d(q, \beta_0, \beta_1)$, что эквивалентно минимизации $||\beta||$.
- При решении этой задачи важно гарантировать, что найденные β_0 и β соответствуют линии, являющейся разграничивающей линией, то есть наблюдения различных классов должны лежать по разные стороны от нее:

$$egin{cases} eta_0+X_ieta\geq 1$$
, если $Y_i=1\ eta_0+X_ieta\leq -1$, если $Y_i=-1 \end{cases} \iff Y_i\left(eta_0+X_ieta
ight)\geq 1$

Подведение итогов

• Таким образом, для удобства избавляясь от квадратного корня (строго возрастающая функция) задачу максимизации отступа можно сформулировать как следующую задачу условной минимизации (квадратичное программировнаие):

$$(\hat{eta}_0,\hat{eta})=\mathop{\mathsf{argmin}}_{(eta_0,eta)}eta_1^2+...+eta_m^2$$
 при ограничении $Y_i\left(eta_0+X_ieta
ight)\geq 1$

- Эта оптимизационная задача не имеет аналитического решения, однако минимум может быть найден численными методами.
- Напомним, что при этом классификатор определяется следующим образом:

$$\hat{y}(x) = egin{cases} 1$$
, если $eta_0 + X_ieta \geq 1 \ -1$, если $eta_0 + X_ieta \leq -1$

Мягкая граница

- Очевидно, что на практике разделяющая линия существует очень редко, а значит имеется такое наблюдение X_i , что при любых β_0 и β_1 неравенство Y_i ($\beta_0 + X_i\beta$) ≥ 1 не соблюдается.
- В таком случае необхоидмо допустить возможность нарушения абсолютного разграничения, то есть наблюдения из класса 1 могут попадать в область наблюдений -1 и наоборот.
- Тогда оптимизационную задачу можно привести к виду:

$$\operatorname*{argmin}_{(eta_0,eta,\xi_1,\ldots,\xi_n)} \sum_{j=1}^m eta_j^2 + C \sum_{i=1}^n \xi_i$$
, при ограничении $Y_i\left(eta_0 + X_ieta
ight) \geq 1 - \xi_i$

• Константа C является гиперпараметром, который определяет вес штрафов ξ_i в оптимизационной задаче и подбирается с помощью кросс-валидации.