КЛАССИФИКАЦИЯ И АЛГОРИТМЫ

Линейная классификация. Бинарная классификация

БИНАРНАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ

как задача

Напоминание про регрессию

- У нас есть обучающая выборка из n объектов, у каждого из которых есть признаки $(x_1, x_2, \dots x_m)$, а y – ответы для наших объектов.
- Модель линейной регрессии:

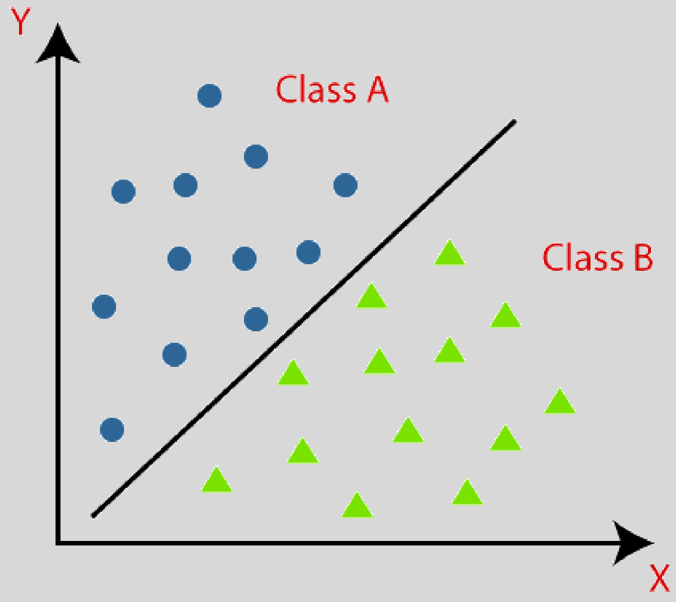
$$a(x, w) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i$$

- Метод обучения – метод наименьших квадратов (минимизируем разность между предсказанием и правильным ответом):

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{n} (a(x, w) - y_i)^2 \rightarrow \min_w$$

Бинарная классификация

- Строим линию таким образом, чтобы она не ложилась на наши объекты, а разделяла их
- *y* у нас может быть -1 или 1 (отрицательный или положительный класс)
- Как нам модифицировать нашу функцию для зависимости y от X, если мы предсказываем не рандомное число, а -1 или 1?

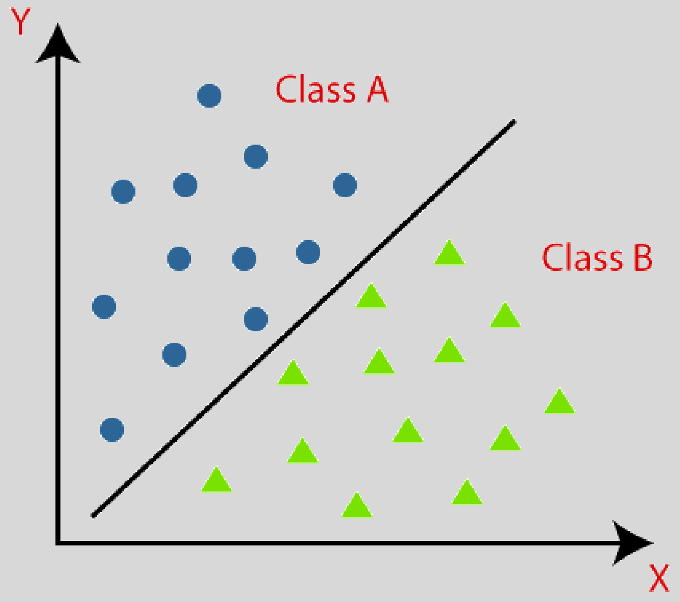


Бинарная классификация

- Строим линию таким образом, чтобы она не ложилась на наши объекты, а разделяла их
- y у нас может быть -1 или 1 (отрицательный или положительный класс)
- Модель линейного классификатора:

$$a(w,x) = sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i)$$

- Если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i > 0$, то $sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i) = +1$, то есть, объект отнесен к положительному классу
- Если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i < 0$, то $sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i) = -1$, то есть, объект отнесен к отрицательному классу
- А если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i = 0$?

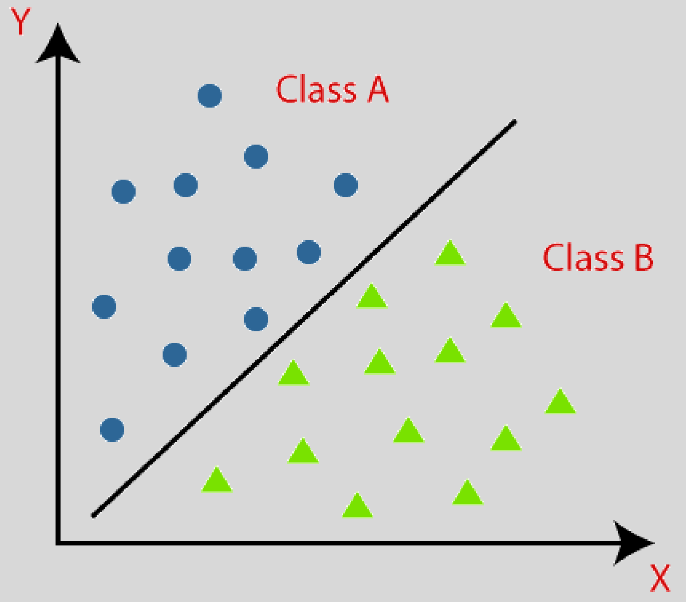


Бинарная классификация

- Строим линию таким образом, чтобы она не ложилась на наши объекты, а разделяла их
- *y* у нас может быть -1 или 1 (отрицательный или положительный класс)
- Модель линейного классификатора:

$$a(w,x) = sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i)$$

- Если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i > 0$, то $sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i) = +1$, то есть, объект отнесен к положительному классу
- Если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i < 0$, то $sign(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i) = -1$, то есть, объект отнесен к отрицательному классу
- Если $\sum_{i=1}^{n} w_i x_i = 0$, то перед нами уравнение разделяющей границы между классами. Это уравнение плоскости (или прямой в двумерном случае), поэтому *классификатор является линейным*.



КАК ОБУЧИТЬ КЛАССИФИКАТОР?

Обучение классификатора

- Минимизируем функцию ошибок, но какая она для этой задачи?
- Функция ошибок для бинарного классификатора вроде бы простая:

$$Q(w) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[a(x_i) \neq y_i] \to min$$

- где $[a(x_i) \neq y_i] = 1$, если предсказание на объекте неверное, иначе 0.
- Обозначим $M_i = y_i \cdot (w, x)_i$ – **отступ** на i-м объекте.
- Если у нас класс положительный, а мы предсказали отрицательный, или наоборот, то $M_i < 0$ $(-1 \cdot +1)$.
- Следовательно, мы можем переписать функцию ошибок:

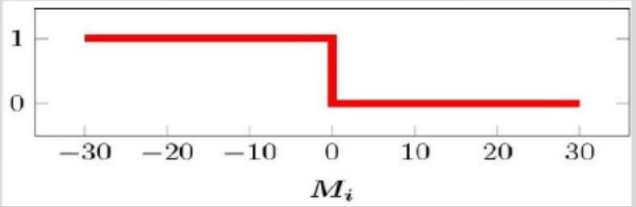
$$Q(w) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[M_i < 0] \to min$$

Обучение классификатора

- Наша функция ошибок еще называется пороговой функцией потерь:

$$Q(w) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[M_i < 0] \to min$$

- Пороговая функция потерь **разрывна**, и этот факт сильно затрудняет процесс минимизации.



- Для решения этой проблемы обычно используют другие функции потерь – непрерывные или гладкие, являющиеся аппроксимациями пороговой функции. После замены функции потерь минимизируется не сама пороговая функция, а ее верхняя оценка:

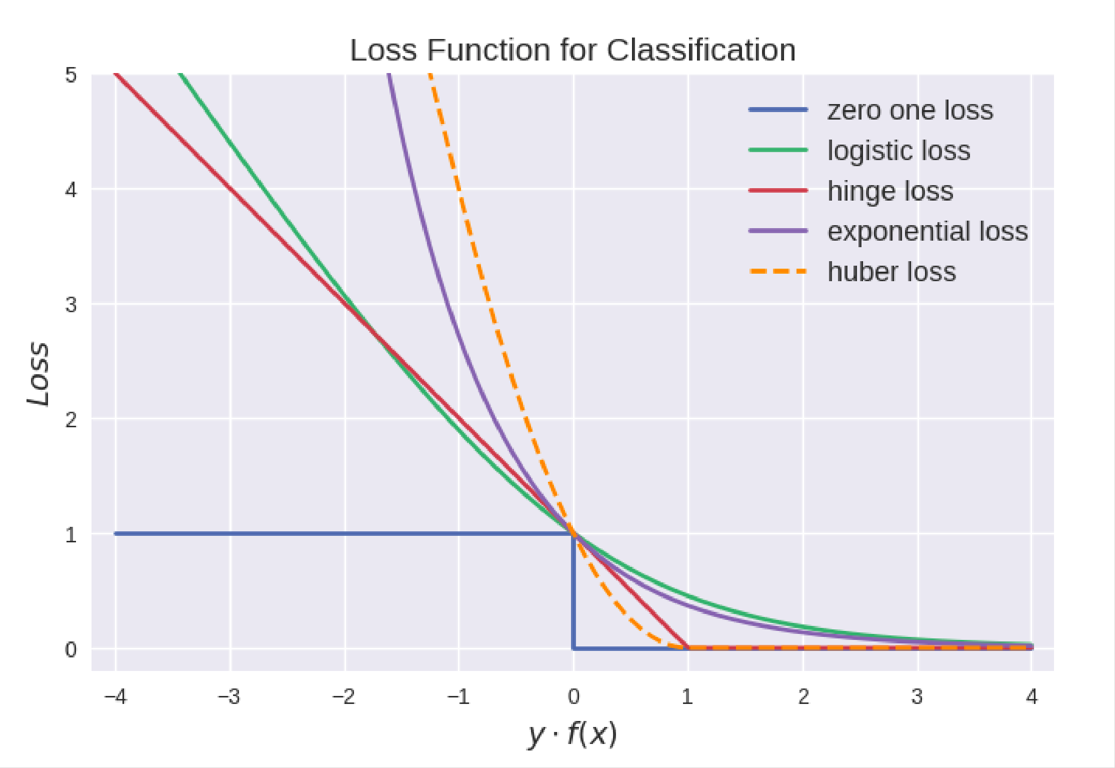
$$Q(w) \leq \tilde{Q}(w) = \sum_{i=1}^{n} L(M(x_i))$$

- Аппроксимации способны улучшать обобщающую способность классификатора + с ними работает градиентный спуск.

Обучение классификатора

- Задача минимизации некоторой функции потерь называется **минимизация эмпирического риска** (сама функция потерь – эмпирический риск).
- Какую аппроксимацию выберем, такой и алгоритм!
- Наши варианты:
  - $L(M) = \log(1 + e^{-M})$ – логистическая функция потерь
  - $V(M) = (1 - M)_{+} = \max(0{,}1 - M)$ – кусочно-линейная функция потерь (метод опорных векторов)
  - $H(M) = (-M)_{+} = \max(0, -M)$ – кусочно-линейная функция потерь (перцептрон)
  - $E(M) = e^{-M}$ - экспоненциальная функция потерь
  - $S(M) = \frac{2}{1+e\hat{}(-M)}$ - сигмоидная функция потерь
- Теперь, когда определились с функцией потерь, можем использовать градиентный спуск:

$$\mathrm{w}^{(\mathrm{k})} = w^{(k-1)} - \eta \cdot Q\left(w^{(k-1)}\right)$$



Метрики качества

Метрики качества

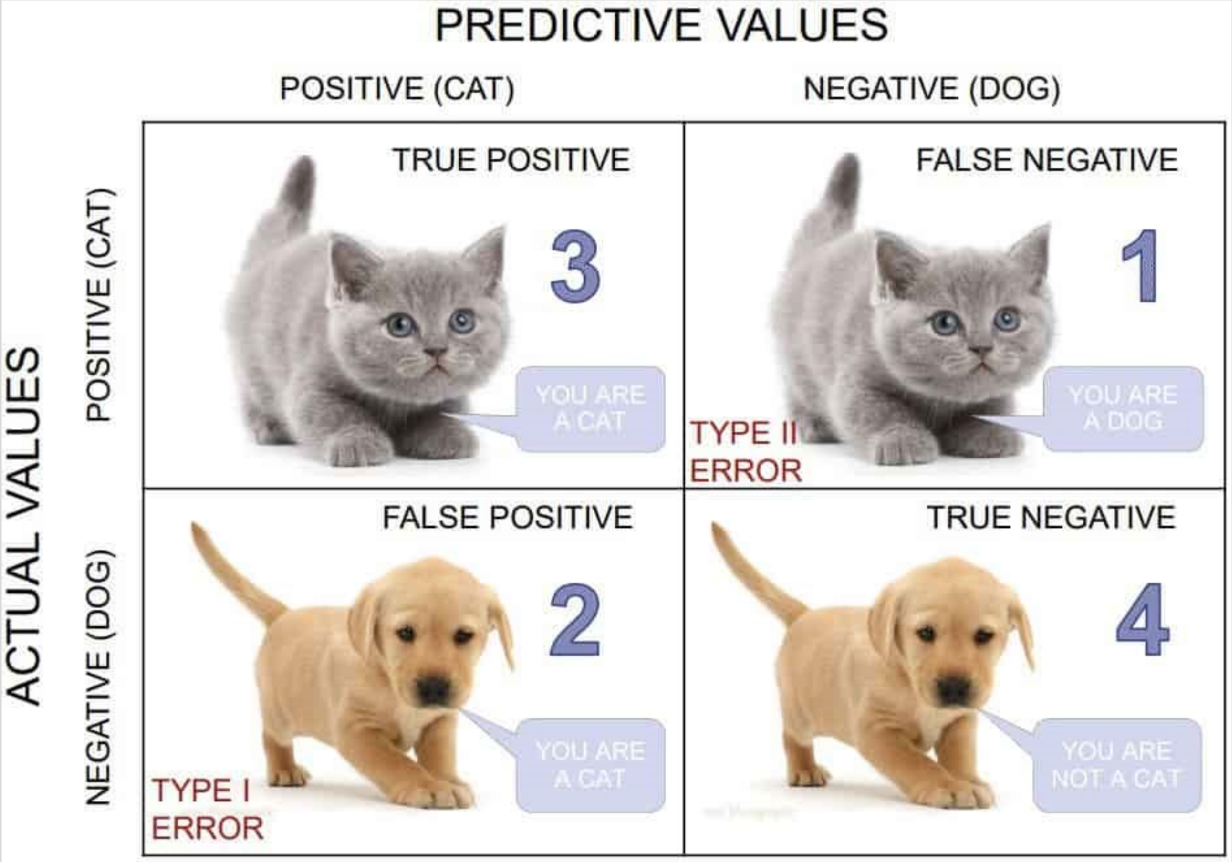
- Accuracy – доля правильных ответов:

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

- Недостаток: при сильно несбалансированной выборке не отражает качество работы алгоритма
- Пример: одобряем кредиты. У нас есть тестовая выборка, где всего 200 человек, из них 100 действительно вернули кредит, а 100 не вернули. То есть, выборка сбалансированная.
  - Модель 1: одобрила кредит 100 людям, из них 80 вернули, 20 – нет.
  - Модель 2: одобрила кредит 50 людям, из них 48 вернули, 2 – нет.
- Пример 2: в нашей тестовой выборке 200 человек, но из них 180 кредиты не вернули и только 20 – вернули.
  - Модель взяла и всем отказала. Выгодно ли ей так делать? (А нафиг ей учиться тогда вообще?)

Матрица ошибок

Confusion matrix



Метрики качества

Посчитайте метрики:

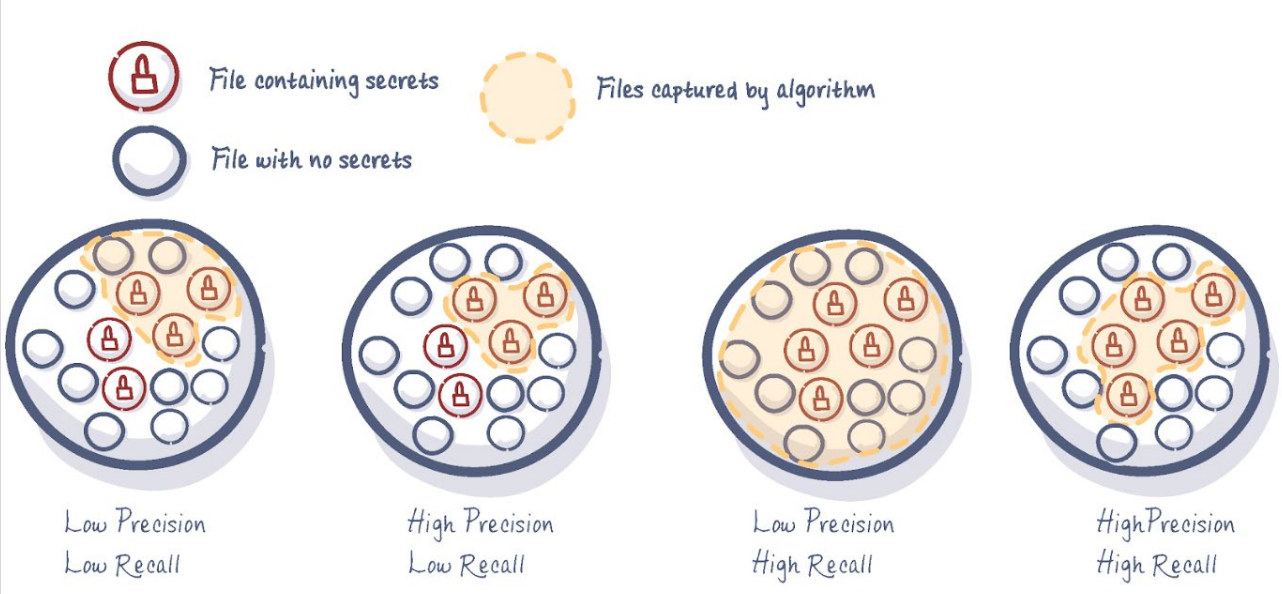
- Precision: $precision(a, x) = \frac{TP}{TP+FP}$
- Recall: $recall(a, x) = \frac{TP}{TP+FN}$
- F-score: $\frac{2 \times precision \times recall}{precision + recall}$

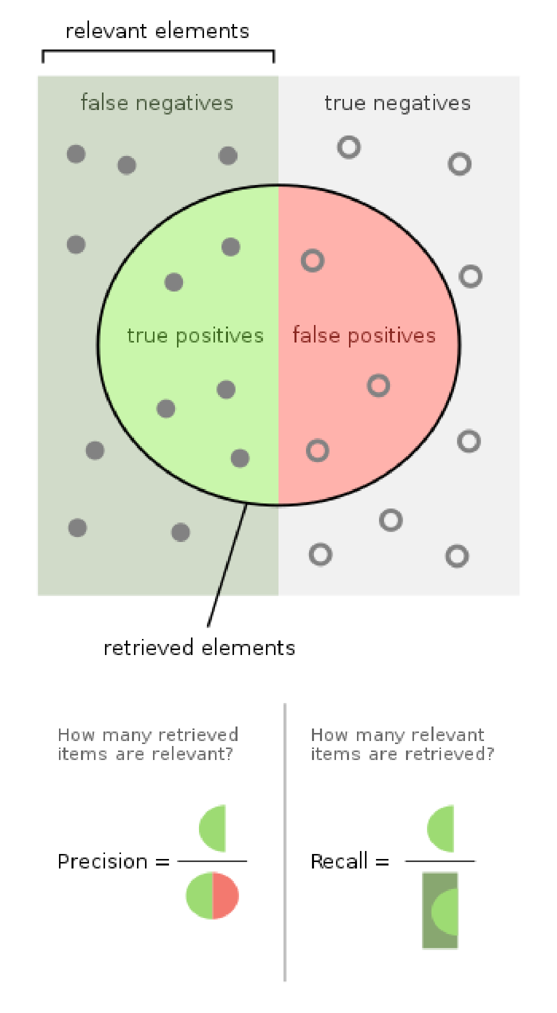
	$y = 1$ Могут вернуть	$y = -1$ Не могут вернуть
$a(x) = 1$ Получили кредит	80	20
$a(x) = -1$ Не получили кредит	20	80

	$y = 1$ Могут вернуть	$y = -1$ Не могут вернуть
$a(x) = 1$ Получили кредит	48	2
$a(x) = -1$ Не получили кредит	52	98

Метрики качества

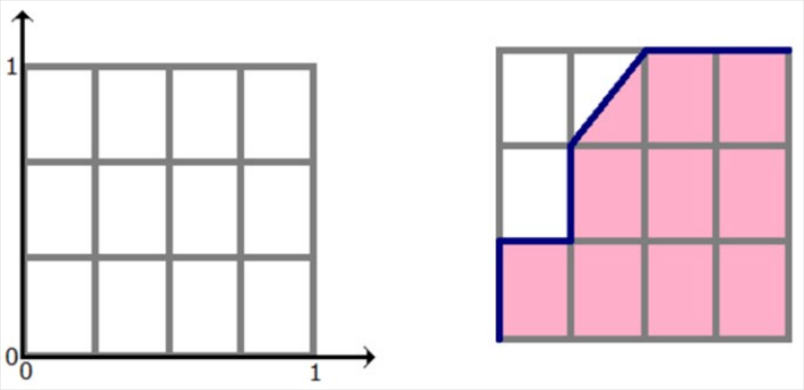
- Что показывают точность и полнота?

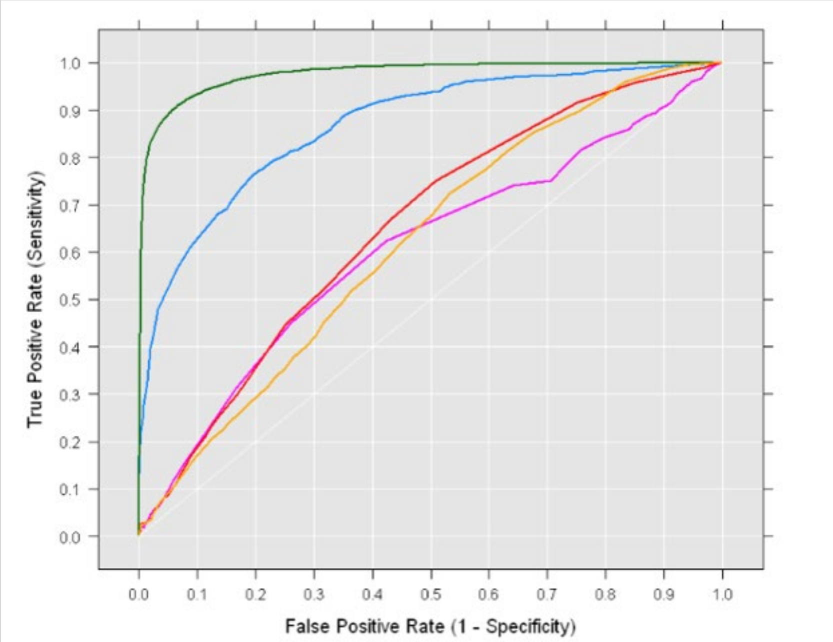




Интегральная метрика: ROC-AUC

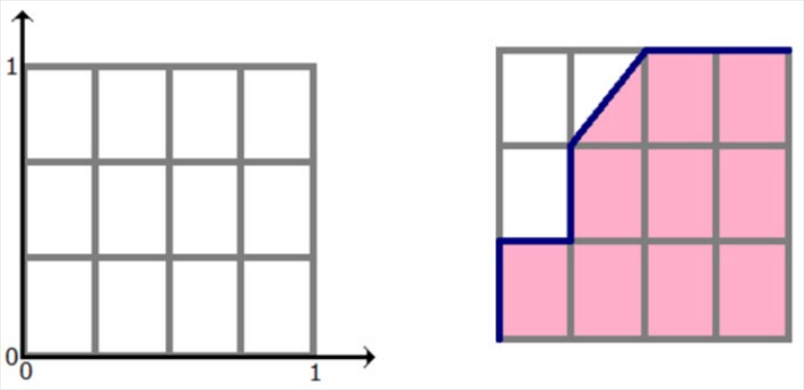
- Берем квадрат и делим его на m рядов и n колонок: m – это число наших правильных y_true, n – число неправильных.
- Чертим линию: если наша модель правильно предсказала, идем вверх, если нет – направо. Таким образом придем к правому верхнему углу.
- Видимо, чем чаще мы идем вверх, тем лучше работает модель.
- А значит, чем выгнутее кривая в левый верхний угол, тем лучше!





Интегральная метрика: ROC-AUC

- Берем квадрат и делим его на m рядов и n колонок: m – это число наших правильных y_true, n – число неправильных.
- Чертим линию: если наша модель правильно предсказала, идем вверх, если нет – направо. Таким образом придем к правому верхнему углу.



Посчитаем на примерах.
Здесь класс – это истинный ответ, а оценка – это вероятность, с которой модель относит наш объект к положительному классу (в правой табличке уже сразу ответ).

id	оценка	класс
1	0.5	0
2	0.1	0
3	0.2	0
4	0.6	1
5	0.2	1
6	0.3	1
7	0.0	0

id	оценка	класс
4	0.6	1
1	0.5	0
6	0.3	1
3	0.2	0
5	0.2	1
2	0.1	0
7	0.0	0

id	> 0.25	класс
4	1	1
1	1	0
6	1	1
3	0	0
5	0	1
2	0	0
7	0	0

Интегральная метрика: ROC-AUC

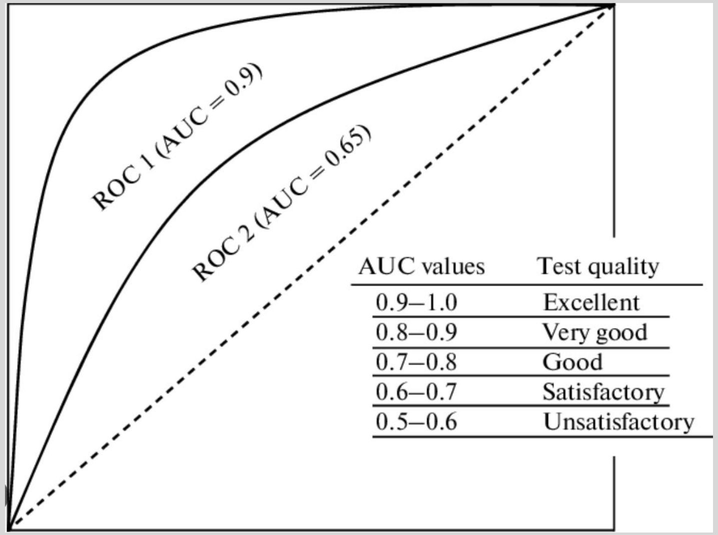
- Посчитаем в формулках. Нам понадобятся:
- False Positive Rate (доля неверно принятых объектов отрицательного класса):

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN} = \frac{\sum_i [y_i = -1][a(x_i) = +1]}{\sum_i [y_i = -1]}$$

- True Positive Rate (доля верно принятых объектов положительного класса):

$$FPR = \frac{TP}{TP + FN} = \frac{\sum_i [y_i = +1][a(x_i) = +1]}{\sum_i [y_i = +1]}$$

- На нашем графике FPR и TPR – координаты, и мы вычисляем их для каждого объекта выборки.
- AUC (area under curve) – **площадь под** ROC-**кривой**, ROC (receiver operating characteristic) - **кривая ошибок**
  - AUC = 0.5 – случайная классификация;
  - AUC = 1 – идеальная классификация.

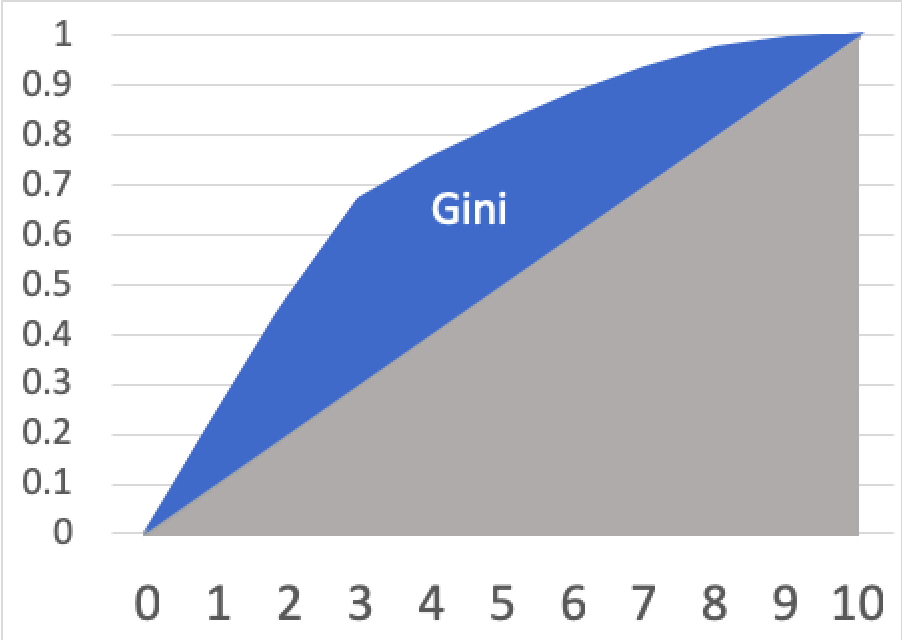


хорошая статья на тему

Индекс Джини

- Индекс Джини – это удвоенная площадь между кривой ROC и диагональной прямой.

$$Gini = 2 \cdot AUC - 1$$



AUC	Gini	Description
0.9 - 1.0	0.8 - 1.0	Excellent
0.8 - 0.9	0.6 - 0.8	Good
0.7 - 0.8	0.4 - 0.6	Fair
0.6 - 0.5	0.2 - 0.4	Poor

ВИДЫ КЛАССИФИКАТОРОВ

Линейные

Линейные vs нелинейные

Линейные

- Логистическая регрессия
- Метод опорных векторов
  (SVM – support vector machine)

Нелинейные

- Наивный Байес
- Метод K ближайших соседей (KNN)
- Деревья решений

Логистическая регрессия

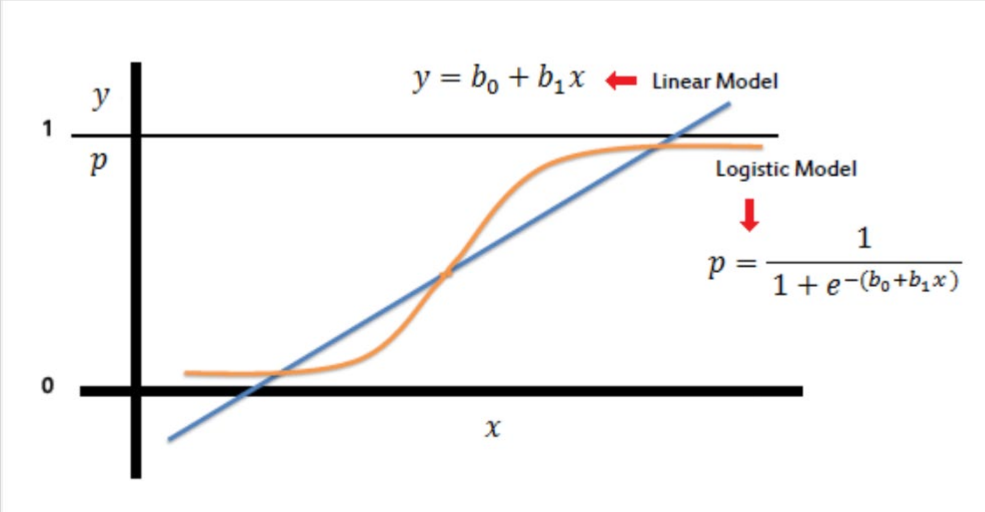
- Хотим предсказывать не классы, а вероятности классов.
- Линейная регрессия:

$$a(w, x) = (w, x) \in R$$

- Логистическая регрессия:

$$a(w, x) = g\big((w, x)\big)$$

- где $g(w, x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ - сигмоида (логистическая функция)
- Значения y будут от 0 до 1; g(w, x) = вероятность того, что класс нашего объекта – положительный.
- Можно установить предел, например, 0.5: все объекты, у которых вероятность выше предела, относим к классу +1.
- Это и будет наша разделяющая граница.

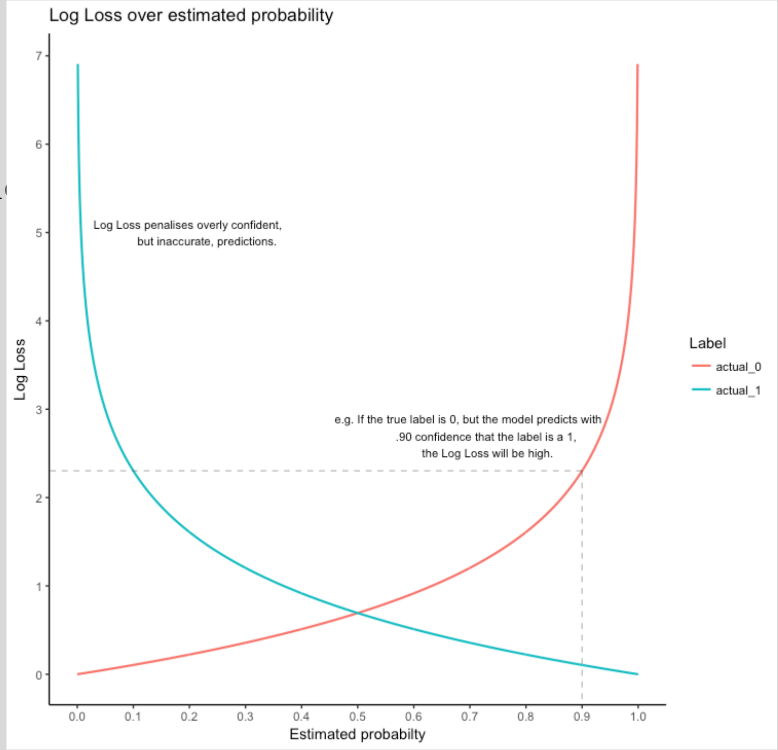


Логистическая регрессия: функция потерь

- Если взять MSE, то возникнут проблемы:
  $Q(a, X) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\frac{1}{1+e^{(-x,w)}} - y)^2$ - не выпуклая функция (можем не попасть в глобальный минимум при оптимизации)
- На совсем неправильном предсказании маленький штраф: допустим, предсказали вероятность 0% на объекте класса +1, тогда штраф всего $(1 \ - 0)^2 = 1$
- Возьмем логистическую функцию потерь:

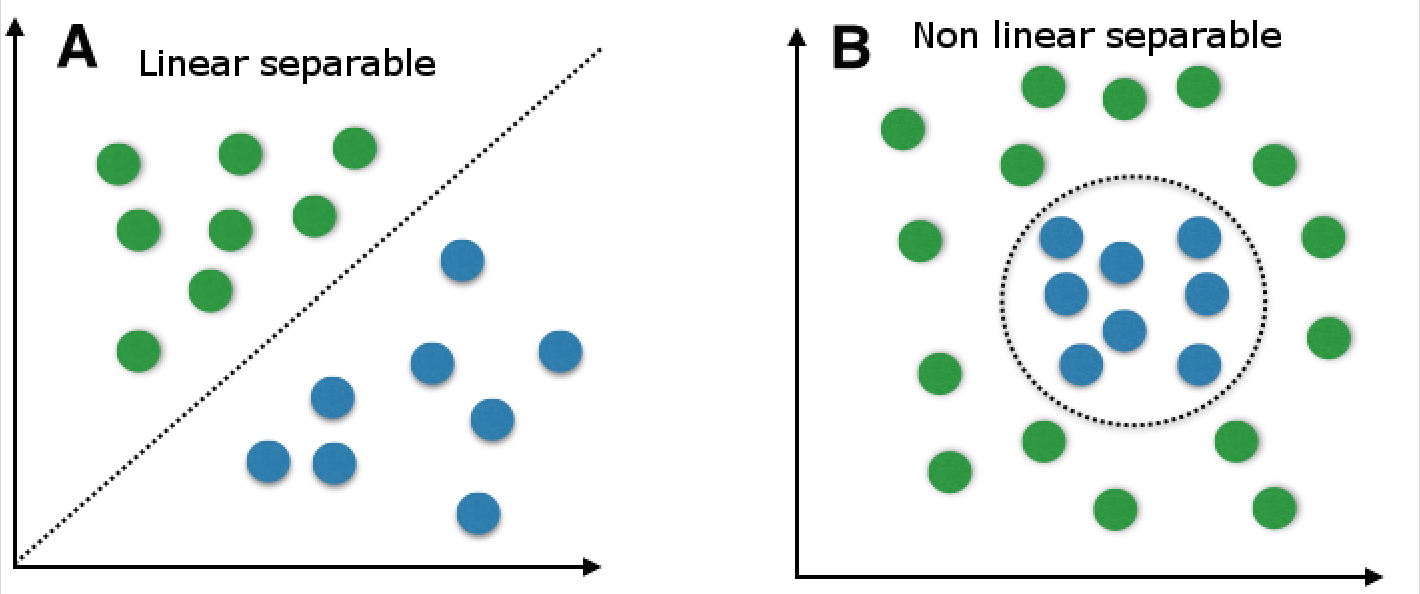
$$Q(w) = -\sum_{i=1}^{n}([y_i = \ +1] \cdot \log\big(a(x_i, w)\big)) + [y_i = -1] \cdot \mathrm{l}$$

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

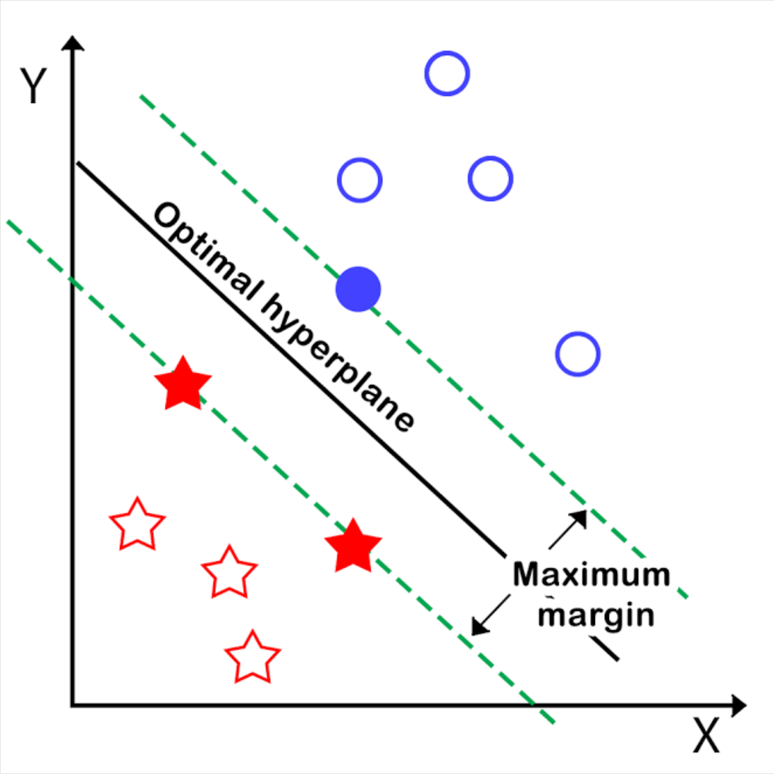


Метод опорных векторов

◦ Выборка может быть линейно разделимой и нет.



SVM и линейно разделимая выборка

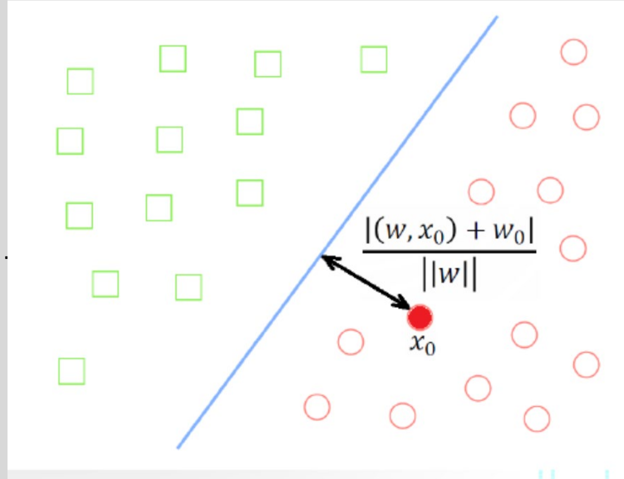


- Цель SVM – максимизировать ширину разделяющей полосы.
- Расстояние от точки x_0 до разделяющей гиперплоскости, задаваемой классификатором:

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

- *($\|w\|$ - сумма квадратов коэффициентов плоскости)*
- Будем оптимизировать так, что $\min\limits_{x \in X} |(w, x) + w_0| = 1.$
- Тогда расстояние до ближайшего объекта $x \ \in X$:

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



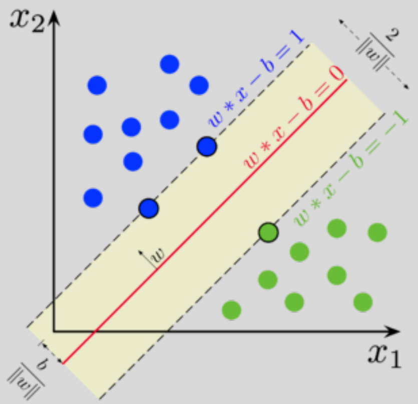
Оптимизационная задача SVM для линейно разделимой выборки

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

Данная оптимизационная задача имеет единственное решение (доказывать не будем...)

$\frac{1}{2}\|w\|^2 \to min$ – *максимизируем ширину разделяющей полосы (квадрат – чтобы удобнее было считать производную);*

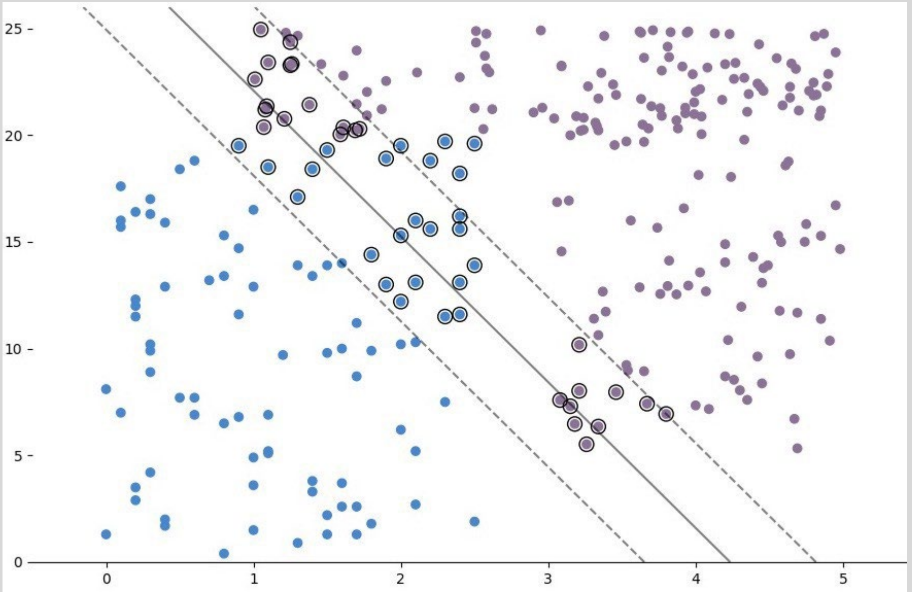
$y_i\big((w, x_i) + \ w_0\big)$ - *отступ (margin), который >0, если правильная классификация; минимальное расстояние – 1, значит, все расстояния от точек до плоскости д.б. 1 и больше.*



SVM и линейно неразделимая выборка

- Существует хотя бы один объект $x \in X$ такой, что
$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) < 1.$$
- Смягчим ограничения, введя штрафы $\xi_i \geq 0$:
$$y_i\big((w, x_i) + w_0\big) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l$$
- Хотим:

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



Оптимизационная задача SVM для линейно неразделимой выборки

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

Является выпуклой и тоже имеет единственное решение. Доказывать опять не будем. Более простой (ну кому как, конечно) вид этой задачи:

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

SVM: задача оптимизации

- Итак, наша задача:

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

- Ничего не напоминает?

SVM: задача оптимизации

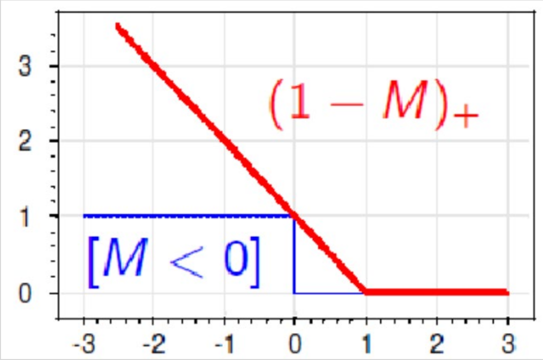
- Итак, наша задача:

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

- Можно рассматривать как оптимизацию функции потерь с регуляризацией:

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

$$L(w) = \sum_{i=1} \underbrace{max(0, 1 - y_i[w^T x_i + b])}_{\text{Loss function}} + \underbrace{\lambda||w||_2^2}_{\text{regularization}}$$



Значение константы C

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

Что за C?

Это положительная константа, которая является управляющим параметром метода и позволяет находить компромисс между максимизацией разделяющей полосы и минимизацией суммарной ошибки.