Предметно-экспертные ограничения для штрафной функции elastic-net в случае логистической регрессии

Митяшов А. А.

Московский физико-технический институт
Факультет управления и прикладной математики
Кафедра интеллектуальных систем

Научный руководитель к.ф.-м.н., н.с. ВЦ РАН В. В. Стрижов

Москва,
2014 г.

Задача

Задача

В работе рассматривается построение модели логистической регрессии для банковского и менеджмент-скоринга. Предлагается построить модель, которая отбирает признаки, учитывает экспертное мнение и повышает интерпретируемость полученных результатов.

Предложения по решению задачи

1. Для учета экспертных оценок предлагается ввести *предметно-экспертные* ограничения.
2. Для отбора признаков предлагается использовать штрафную функцию elastic-net.

Логистическая регрессия

Имеется матрица "объект-признак" $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, а также вектор ответов $\mathbf{y}$. Стандартизируем данные, т.е.

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} = 0, \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_{ij}^2 = 1.$$

Затем решается задача классификации с помощью логистической регрессии.

$$y_i = \pi(\mathbf{x}_i) + \varepsilon, \text{ где } \pi(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{1 + e^{-\beta_0 - x_i^T \boldsymbol{\beta}}}.$$

Здесь $\boldsymbol{\beta}$-вектор коэффициентов признаков, определяемый по обучающей выборке с помощью принципа максимума правдоподобия.

Постановка задачи

Для отбора признаков предлагается использовать штраф elastic-net:

$$P_\alpha(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1-\alpha}{2}||\boldsymbol{\beta}||_2^2 + \alpha||\boldsymbol{\beta}||_1 = \sum_{j=1}^{p}(\frac{1}{2}(1-\alpha)\beta_j^2 + \alpha|\beta_j|),$$

$$[\beta_0, \boldsymbol{\beta}] = \arg\min_{\beta_0\in\mathbb{R}, \boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^p}(-L + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta})).$$

Здесь функция лог-правдоподобия:

$$L = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i(\beta_0 + x_i^T\boldsymbol{\beta}) - \log(1 + e^{\beta_0 + x_i^T\boldsymbol{\beta}}).$$

Решается задача поиска условного минимума с ограничениями типа

$$\beta_j \geq 0, \text{ или} \beta_{j+1} \geq \beta_j, \text{ или}$$

$$||\boldsymbol{\beta}_\mathcal{A}|| \leq t, \text{ где } \boldsymbol{\beta}_\mathcal{A} \text{ – подвектор } \boldsymbol{\beta}.$$

Практические примеры

Здесь и далее коэффициенты признаков обозначаются как β

Ограничение	Пример использования
$\beta_j \geq 0$	Экспертно предполагается, что с увеличением признака (количественного) увеличиваются риски.
$\beta_{j+1} \geq \beta j$	Аналогично предыдущему ограничению, если количественный признак градуировать.
$\lvert\lvert \boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}} \rvert\rvert \leq t$, $\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}}$– это подвектор $\boldsymbol{\beta}$.	Позволяет снизить эффект переобучения, ограничив веса определенных признаков.
$C\boldsymbol{\beta} = \mathbf{b}$ $C \in \mathbb{R}^{n \times p}$ $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$	Позволяет ввести линейные ограничения на коэффициенты признаков. Если заменить знак $=$ в ограничении на $\leq$, то является обобщением предыдущих ограничений.

Базовый алгоритм

В базовом алгоритме, не учитывающем предметно-экспертные ограничения, для упрощения задачи предлагается использовать квадратичную аппроксимацию функции правдоподобия, получаемую по формуле Тейлора:

$$L_Q(\beta_0, \boldsymbol{\beta}) = -\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i(z_i - \beta_0 - \mathbf{x}_i^T\boldsymbol{\beta})^2 + C,$$

$$\text{где } z_i = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}_i^T\hat{\boldsymbol{\beta}} + \frac{y_i - \hat{\pi}(\mathbf{x}_i)}{\hat{\pi}(\mathbf{x}_i)(1-\hat{\pi}(\mathbf{x}_i))} \text{ и } w_i = \hat{\pi}(\mathbf{x}_i)(1-\hat{\pi}(\mathbf{x}_i)).$$

Для того, чтобы найти выражение для β_j, используем необходимое и достаточное условие глобального экстремума для выпуклой функции.

Теорема

Пусть решается задача

$$[\beta_0, \boldsymbol{\beta}] = \arg \min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} (-L_Q + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta}))$$

без предметно-экспертных ограничений, тогда оценка оптимальных параметров:

$$\hat{\beta}_j = \frac{S(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n w_i x_{ij}(z_i - \hat{y}_i^{(j)}), \lambda\alpha)}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n w_i x_{ij}^2 + \lambda(1-\alpha)}.$$

Здесь S – оператор сжатия, $S(a,b) = sign(a)(|a| - b)_+$, а

$$\hat{y}_i^{(j)} = \hat{\beta}_0 + \sum_{l \neq j} x_{il}\hat{\beta}_l.$$

Модификация алгоритма

Для модификации алгоритма воспользуемся методом внешних штрафных функций.
Рассмотрим, например, ограничение типа

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) \leq 0,$$

где $\varphi(\boldsymbol{\beta})$ – выпуклая функция.
Предлагается вместо исходной задачи решать следующие задачи:

$$\min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} (-L + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta})) + \delta_k(\boldsymbol{\beta}),$$

$$\text{где } \delta_k(\boldsymbol{\beta}) = r_k(\varphi(\boldsymbol{\beta}))_+^2, \;\; k = 1, 2, \ldots.$$

Функция $\delta_k(\boldsymbol{\beta})$ удовлетворяет свойствам внешней штрафной функции, если $r_{k+1} > r_k$.

Для упрощения расчетов предлагается, как и в базовом алгоритме, воспользоваться разложением по формуле Тейлора и решать следующие задачи:

$$[\beta_0, \boldsymbol{\beta}] = \arg \min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} (-L_Q + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta})) + r_k(\varphi(\boldsymbol{\beta}))_+^2,$$

$$r_{k+1} > r_k, \ , k = 1, 2, ...$$

Если найденные в $(k+1)$-й задачи коэффициенты отличаются по норме от найденных в k-й не более, чем на ε, то алгоритм останавливается.
Воспользуемся необходимым и достаточным условием минимума для выпуклой функции.

Теорема

Пусть решается задача

$$[\beta_0, \boldsymbol{\beta}] = \arg \min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} (-L_Q + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta})), \text{ при условии}$$

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) \leq 0, \varphi(\boldsymbol{\beta}) \text{ – выпуклая функция,}$$

тогда вместо данной задачи можно решать следующие:

$$[\beta_0, \boldsymbol{\beta}] = \arg \min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} (-L_Q + \lambda P_\alpha(\boldsymbol{\beta})) + r_k(\varphi(\boldsymbol{\beta}))_+^2, \ r_{k+1} > r_k,$$

и для каждого из $\beta_j, j = 1, ..., p$ выполняется условие:

$$0 \in -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} w_i x_{ij}(z_i - \beta_0 - x_i^T \boldsymbol{\beta}) + \lambda(1-\alpha)\beta_j +$$

$$+\lambda\alpha\partial|\beta_j| + 2r_k(\varphi(\boldsymbol{\beta}))_+ \partial\varphi(\boldsymbol{\beta}).$$

Пример использования теоремы

Рассмотрим, например, ограничение типа $\beta_{j+1} \geq \beta_j$, тогда, используя данную теорему, можно получить выражения для β_l:

$$\beta_l = \frac{S(\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{il}(z_i - \hat{y}_i^{(k)}), \lambda\alpha)}{\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{il}^2 + \lambda(1-\alpha)}, \; l \neq j,$$

$$\beta_j = \frac{S(\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{ij}(z_i - \hat{y}_i^{(j)}) + r_k \beta_{j+1}[\beta_j > \beta_{j+1}], \lambda\alpha)}{\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{ij}^2 + \lambda(1-\alpha) + r_k[\beta_j > \beta_{j+1}]},$$

$$\beta_{j+1} = \frac{S(\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{ij}(z_i - \hat{y}_i^{(j)}) + r_k \beta_j[\beta_j > \beta_{j+1}], \lambda\alpha)}{\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} w_i x_{ij}^2 + \lambda(1-\alpha) + r_k[\beta_j > \beta_{j+1}]}.$$

Аналогичным образом можно выписать выражения, которые получаются для остальных ограничений.

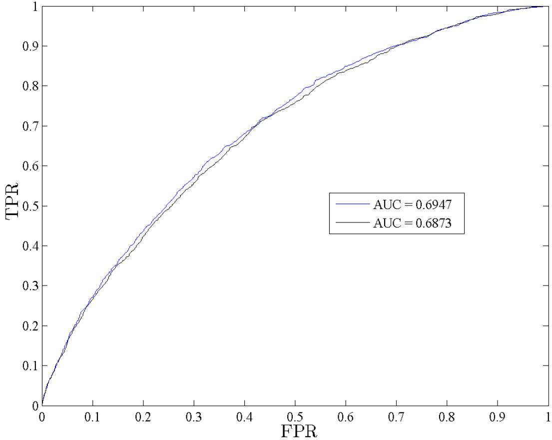
Вычислительный эксперимент

Вычислительный эксперимент проводился на конкурсных данных, предоставленных ОТП банком в рамках конференции ММРО-15. Данные представляли собой обучающую и контрольную выборки с известными ответами. Имелись как количественные, так и номинальные признаки (всего 50 признаков, после градуирования – 101).

Размер исходной обучающей выборки – 15 223 объекта, контрольной – 14 910.

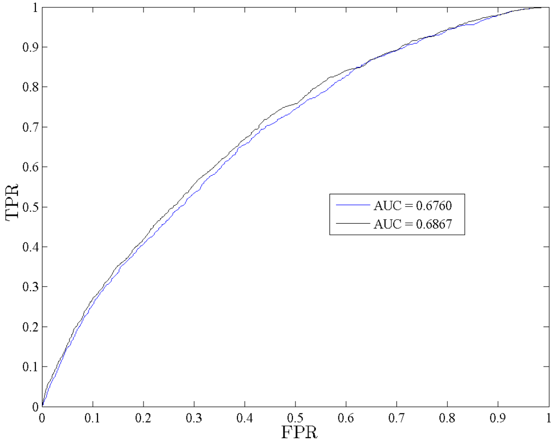
Были проверены предположения о том, что данные ограничения улучшают качество модели, если обучающая выборка некорректна. Составлялись соответствующие обучающие выборки и на них строились модели с предметно-экспертными ограничениями и без них.

Общий случай



Здесь показано, что на исходной выборке AUC не увеличивается, так как мы ищем условный минимум.

Некорректные выборки



Здесь показан случай, когда обучающая выборка составлена некорректно, и введение дополнительных ограничений улучшает качество.

Заключение

В работе был предложен метод, позволяющий эксперту-аналитику внести дополнительные ограничения на признаки, используемые в модели. Это позволяет улучшить интерпретируемость полученных результатов, а также повысить качество классификации, в случае, если обучающая выборка составлена некорректно. Кроме того, данный метод позволяет отбирать наиболее информативные признаки.