Линейные методы классификации

К. В. Воронцов, А.В. Зухба
vokov@forecsys.ru
a__l@mail.ru

март 2015

Содержание

Обучение регрессии — это оптимизация

Обучающая выборка: $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell, \quad x_i \in \mathbb{R}^n, \quad y_i \in \mathbb{R}$

1. Модель регрессии — *линейная*:
$$a(x, w) = \langle x, w \rangle = \sum_{j=1}^n f_j(x) w_j, \qquad w \in \mathbb{R}^n$$
2. Функция потерь — *квадратичная*:
$$\mathscr{L}(a, y) = (a - y)^2$$
3. Метод обучения — *метод наименьших квадратов*:
$$Q(w) = \sum_{i=1}^\ell \big(a(x_i, w) - y_i\big)^2 \to \min_w$$
4. Проверка по тестовой выборке $X^k = (\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)_{i=1}^k$:
$$\bar{Q}(w) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \big(a(\tilde{x}_i, w) - \tilde{y}_i\big)^2$$

Обучение классификации — тоже оптимизация

Обучающая выборка: $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell, \quad x_i \in \mathbb{R}^n, \quad y_i \in \{-1, +1\}$

1. Модель классификации — *линейная*:
$$a(x, w) = \text{sign}\langle x, w\rangle$$
2. Функция потерь — бинарная или её аппроксимация:
$$\mathscr{L}(a, y) = \big[\langle x_i, w\rangle y_i < 0\big] \leqslant \mathscr{L}\big(\langle x_i, w\rangle y_i\big)$$
3. Метод обучения — *минимизация эмпирического риска*:
$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \big[a(x_i, w) y_i < 0\big] \leqslant \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\langle x_i, w\rangle y_i\big) \to \min_w$$
4. Проверка по тестовой выборке $X^k = (\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)_{i=1}^k$:
$$\bar{Q}(w) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \big[\langle \tilde{x}_i, w\rangle \tilde{y}_i < 0\big]$$

Понятие отступа для разделяющих классификаторов

Задача классификации с двумя классами: $y_i \in \{-1, +1\}$

Разделяющий классификатор: $a(x, w) = \operatorname{sign} g(x, w)$,
$g(x, w)$ — *разделяющая (дискриминантная) функция*,
w — вектор параметров,
$g(x, w) = 0$ — разделяющая поверхность

Определение

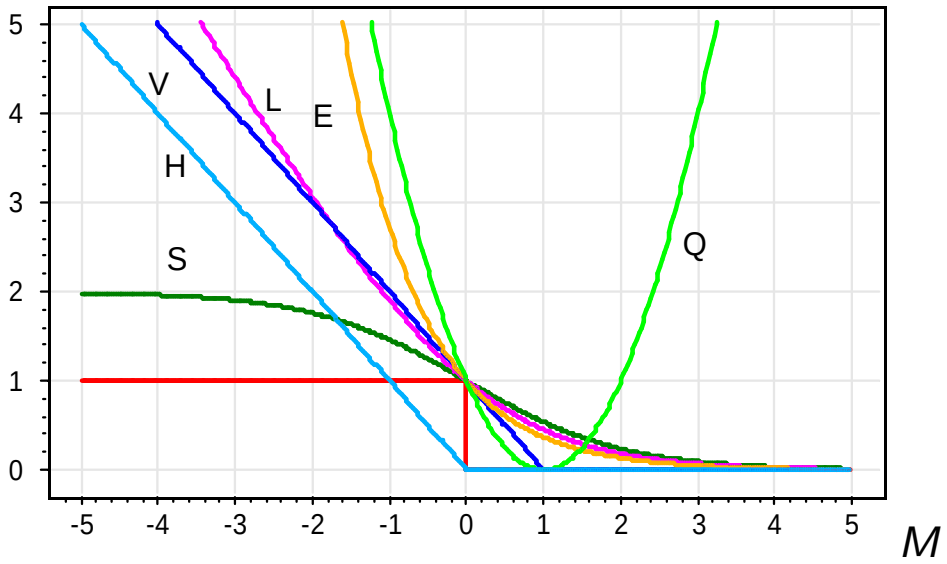
$M_i(w) = g(x_i, w)y_i$ — *отступ* (margin) объекта x_i

$M_i(w) < 0 \iff$ алгоритм $a(x, w)$ ошибается на x_i

Линейный классификатор: $a(x, w) = \operatorname{sign}\langle x, w\rangle$:
$\langle x, w\rangle = 0$ — разделяющая гиперплоскость,
$M_i(w) = \langle w, x_i\rangle y_i$ — отступ объекта x_i.

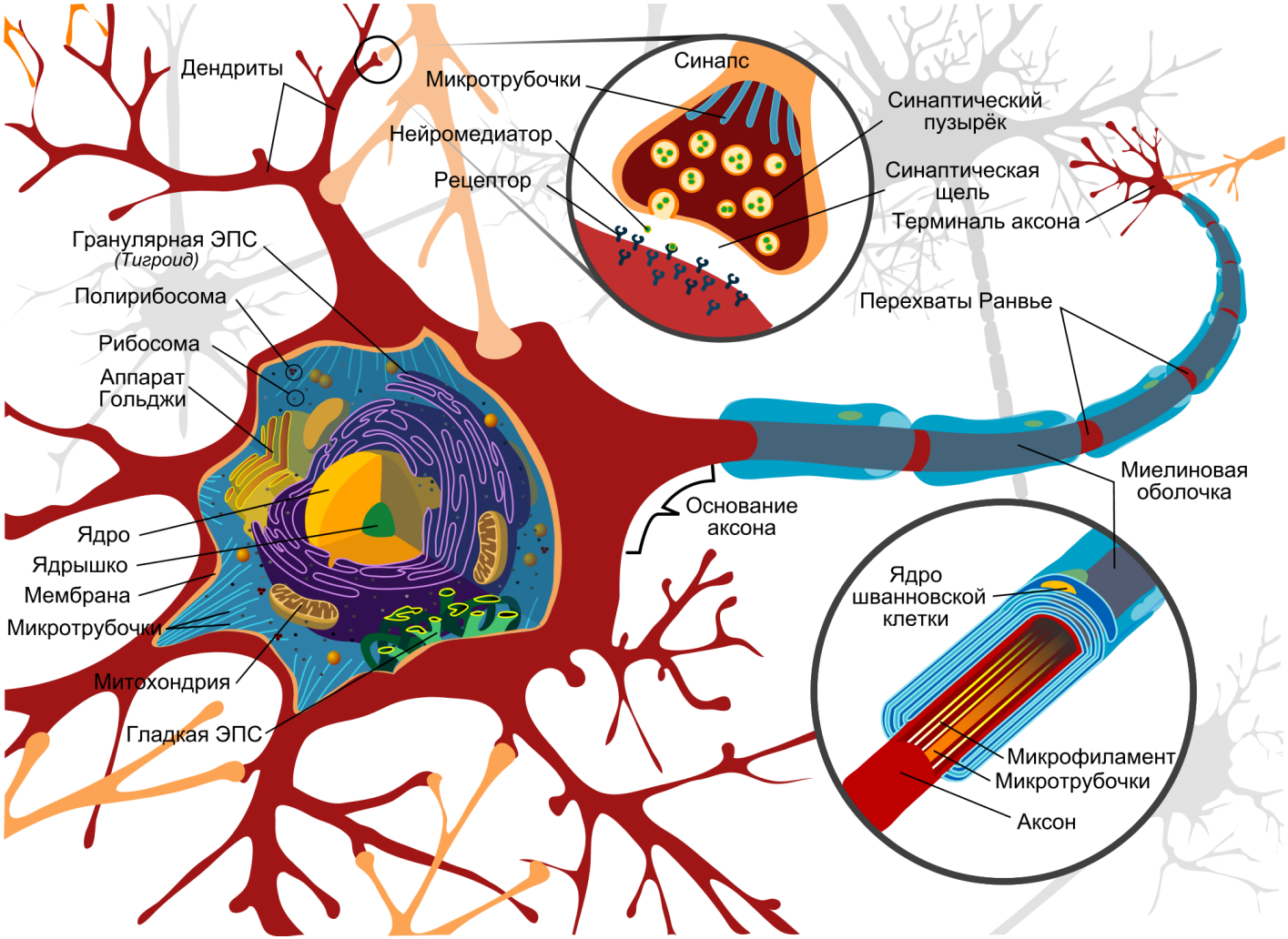
Непрерывные аппроксимации пороговой функции потерь

Часто используемые непрерывные функции потерь $\mathscr{L}(M)$:



$V(M) = (1 - M)_+$ — кусочно-линейная (SVM);
$H(M) = (-M)_+$ — кусочно-линейная (Hebb's rule);
$L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ — логарифмическая (LR);
$Q(M) = (1 - M)^2$ — квадратичная (FLD);
$S(M) = 2(1 + e^{M})^{-1}$ — сигмоидная (ANN);
$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная (AdaBoost);
$[M < 0]$ — пороговая функция потерь.

Линейный классификатор — математическая модель нейрона

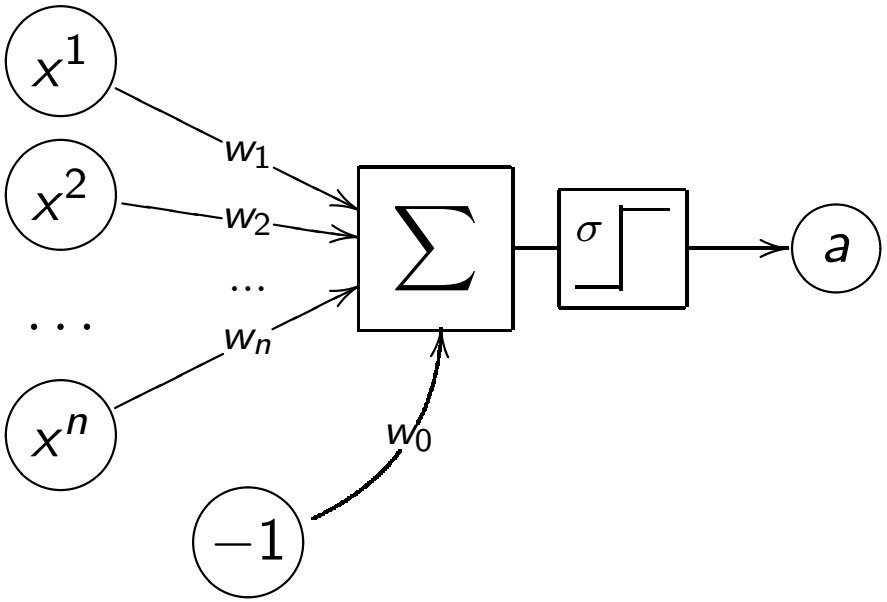


Математическая модель нейрона

Линейная модель нейрона МакКаллока-Питтса [1943]:

$$a(x, w) = \sigma\big(\langle w, x\rangle\big) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0\right),$$

где $\sigma(s)$ — функция активации (в частности, sign).



Градиентный метод численной минимизации

Минимизация аппроксимированного эмпирического риска:

$$Q(w; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\langle w, x_i\rangle y_i\big) \to \min_w .$$

Численная минимизация методом *градиентного спуска*:

$$w^{(0)} := \text{начальное приближение;}$$

$$w^{(t+1)} := w^{(t)} - \eta \cdot \nabla Q(w^{(t)}), \qquad \nabla Q(w) = \left(\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j}\right)_{j=0}^{n},$$

где η — *градиентный шаг*, называемый также *темпом обучения*.

$$w^{(t+1)} := w^{(t)} - \eta \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}'\big(\langle w^{(t)}, x_i\rangle y_i\big)\, x_i\, y_i.$$

Идея ускорения сходимости:
брать (x_i, y_i) по одному и сразу обновлять вектор весов.

Алгоритм SG (Stochastic Gradient)

Вход: выборка X^ℓ, темп обучения h, темп забывания λ;
Выход: вектор весов w;

1 инициализировать веса w_j, $j = 0, \ldots, n$;
2 инициализировать оценку функционала: $\bar{Q} := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}_i(w)$;
3 **повторять**
4 выбрать объект x_i из X^ℓ случайным образом;
5 вычислить потерю: $\varepsilon_i := \mathscr{L}_i(w)$;
6 сделать градиентный шаг: $w := w - h\nabla\mathscr{L}_i(w)$;
7 оценить функционал: $\bar{Q} := (1 - \lambda)\bar{Q} + \lambda\varepsilon_i$;
8 **пока** значение $\bar{Q}$ и/или веса w не сойдутся;

Robbins, H., Monro S. A stochastic approximation method // Annals of Mathematical Statistics, 1951, 22 (3), p. 400–407.

Откуда взялась такая оценка функционала?

Проблема: после каждого шага w по одному объекту x_i, не хотелось бы оценивать Q по всей выборке $x_1, \ldots, x_\ell$.

Решение: использовать рекуррентную формулу.

Среднее арифметическое $\bar{Q}_m = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\varepsilon_i$:

$$\bar{Q}_m = (1 - \tfrac{1}{m})\bar{Q}_{m-1} + \tfrac{1}{m}\varepsilon_m.$$

Экспоненциальное скользящее среднее

$$\bar{Q}_m = \lambda\varepsilon_m + \lambda(1-\lambda)\varepsilon_{m-1} + \lambda(1-\lambda)^2\varepsilon_{m-2} + \lambda(1-\lambda)^3\varepsilon_{m-3} + \ldots$$

$$\bar{Q}_m := (1 - \lambda)\bar{Q}_{m-1} + \lambda\varepsilon_m.$$

Чем больше λ, тем быстрее забывается предыстория ряда.
Параметр λ называется *темпом забывания*.

Алгоритм SAG (Stochastic Average Gradient)

Вход: выборка X^ℓ, темп обучения h, темп забывания λ;
Выход: вектор весов w;

инициализировать веса w_j, $j = 0, \ldots, n$;
инициализировать градиенты: $G_i := \nabla \mathscr{L}_i(w)$, $i = 1, \ldots, \ell$;
инициализировать оценку функционала: $\bar{Q} := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}_i(w)$;
повторять
    выбрать объект x_i из X^ℓ случайным образом;
    вычислить потерю: $\varepsilon_i := \mathscr{L}_i(w)$;
    вычислить градиент: $G_i := \nabla \mathscr{L}_i(w)$;
    сделать градиентный шаг: $w := w - h \sum_{i=1}^{\ell} G_i$;
    оценить функционал: $\bar{Q} := (1 - \lambda)\bar{Q} + \lambda \ell \varepsilon_i$;
пока значение $\bar{Q}$ и/или веса w не сойдутся;

Schmidt M., Le Roux N., Bach F. Minimizing finite sums with the stochastic average gradient // arXiv.org, 2013.

Частный случай №1: дельта-правило ADALINE

Задача регрессии: $X = \mathbb{R}^{n+1}$, $Y \subseteq \mathbb{R}$,

$$\mathscr{L}(a, y) = (a - y)^2.$$

Адаптивный линейный элемент ADALINE [Видроу и Хофф, 1960]:

$$a(x, w) = \langle w, x \rangle$$

Градиентный шаг — дельта-правило (delta-rule):

$$w := w - \eta \underbrace{\big(\langle w, x_i \rangle - y_i\big)}_{\Delta_i} x_i$$

Δ_i — ошибка алгоритма $a(x, w)$ на объекте x_i.

Частный случай №2: правило Хэбба

Задача классификации: $X = \mathbb{R}^{n+1}$, $Y = \{-1, +1\}$,

$$\mathscr{L}(a, y) = (-\langle w, x\rangle y)_+.$$

Линейный классификатор:

$$a(x, w) = \text{sign}\langle w, x\rangle.$$

Градиентный шаг — правило Хэбба [1949]:

$$\textbf{если } \langle w, x_i\rangle y_i < 0 \textbf{ то } w := w + \eta x_i y_i,$$

Если $X = \{0, 1\}^n$, $Y = \{0, +1\}$, то правило Хэбба переходит в правило перцептрона Розенблатта [1957]:

$$w := w - \eta\big(a(x_i, w) - y_i\big)x_i.$$

Обоснование Алгоритма SG с правилом Хэбба

Задача классификации: $X = \mathbb{R}^{n+1}$, $Y = \{-1, 1\}$.

Теорема (Новиков, 1962)

Пусть выборка X^ℓ линейно разделима:

$$\exists \tilde{w},\ \exists \delta > 0\colon \langle \tilde{w}, x_i \rangle y_i > \delta \ \text{ для всех } \ i = 1, \ldots, \ell.$$

Тогда Алгоритм SG с правилом Хэбба находит вектор весов w,

- разделяющий обучающую выборку без ошибок;
- при любом начальном положении $w^{(0)}$;
- при любом темпе обучения $\eta > 0$;
- независимо от порядка предъявления объектов x_i;
- за конечное число исправлений вектора w;
- если $w^{(0)} = 0$, то число исправлений $t_{\max} \leqslant \frac{1}{\delta^2} \max \|x_i\|$.

Инициализация весов

Возможны варианты:

1. $w_j := 0$ для всех $j = 0, \ldots, n$;
2. небольшие случайные значения:
   $w_j := \text{random}\left(-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}\right)$;
3. $w_j := \frac{\langle y, f_j \rangle}{\langle f_j, f_j \rangle}$, $f_j = \left(f_j(x_i)\right)_{i=1}^{\ell}$ — вектор значений признака.
4. обучение по небольшой случайной подвыборке объектов;
5. многократные запуски из разных случайных начальных приближений и выбор лучшего решения.

Порядок предъявления объектов

Возможны варианты:

1. *перетасовка объектов* (shuffling):
   попеременно брать объекты из разных классов;
2. чаще брать те объекты, на которых была допущена бóльшая ошибка
   (чем меньше M_i, тем больше вероятность взять объект)
   (чем меньше $|M_i|$, тем больше вероятность взять объект);
3. вообще не брать «хорошие» объекты, у которых $M_i > \mu_+$
   (при этом немного ускоряется сходимость);
4. вообще не брать объекты-«выбросы», у которых $M_i < \mu_-$
   (при этом может улучшиться качество классификации);

Параметры μ_+, μ_- придётся подбирать.

Выбор величины градиентного шага

Возможны варианты:

1. сходимость гарантируется (для выпуклых функций) при
$$\eta_t \to 0, \quad \sum_{t=1}^{\infty} \eta_t = \infty, \quad \sum_{t=1}^{\infty} \eta_t^2 < \infty,$$
в частности можно положить $\eta_t = 1/t$;

2. *метод скорейшего градиентного спуска*:
$$Q\big(w - \eta \nabla Q(w)\big) \to \min_{\eta},$$
позволяет найти *адаптивный шаг* η^*;

3. пробные случайные шаги
— для «выбивания» из локальных минимумов;

SG: Достоинства и недостатки

Достоинства:

1. легко реализуется;
2. легко обобщается на любые f, $\mathscr{L}$;
3. возможно динамическое (потоковое) обучение;
4. на сверхбольших выборках не обязательно брать все x_i;

Недостатки:

1. возможна расходимость или медленная сходимость;
2. застревание в локальных минимумах;
3. подбор комплекса эвристик является искусством;
4. проблема переобучения;

Проблема переобучения

Возможные причины переобучения:

1. слишком мало объектов; слишком много признаков;
2. линейная зависимость (мультиколлинеарность) признаков:

   пусть построен классификатор: $a(x, w) = \text{sign}\langle w, x\rangle$;
   мультиколлинеарность: $\exists u \in \mathbb{R}^{n+1}$: $\forall x \quad \langle u, x\rangle \equiv 0$;
   тогда $\forall \gamma \in \mathbb{R} \quad a(x, w) = \text{sign}\langle w + \gamma u, x\rangle$

Симптоматика:

1. слишком большие веса $\|w\|$;
2. неустойчивость $a(x, w)$;
3. $Q(X^\ell) \ll Q(X^k)$;

Терапия:

1. сокращение весов (weight decay);
2. ранний останов (early stopping);

Сокращение весов

Штраф за увеличение нормы вектора весов:

$$Q_\tau(w; X^\ell) = Q(w; X^\ell) + \frac{\tau}{2}\|w\|^2 \to \min_w.$$

Градиент:

$$\nabla Q_\tau(w) = \nabla Q(w) + \tau w.$$

Модификация градиентного шага:

$$w := w(1 - \eta\tau) - \eta\nabla Q(w).$$

Подбор параметра регуляризации τ:

1. скользящий контроль;
2. стохастическая адаптация;

Регуляризация в линейных классификаторах

- В случае мультиколлинеарности
  — решение $Q(w) \to \min\limits_{w}$ неединственно или неустойчиво;
  — классификатор $a(x; w)$ неустойчив;
  — переобучение: $Q(X^\ell) \ll Q(X^k)$.
- Регуляризация — это выбор наиболее устойчивого решения
  — Гаусс — без отбора признаков;
  — Лаплас — с отбором признаков;
  — возможны комбинации (ElasticNet) и другие варианты...
- Выбор параметра регуляризации τ:
  — с помощью скользящего контроля;
  — с помощью оценок обобщающей способности;
  — стохастическая адаптация;

Зоопарк методов

- Вид разделяющей поверхности $f(x, w)$:
  — линейная $f(x, w) = \langle x, w \rangle$;
  — нелинейная;
- Вид непрерывной аппроксимации функции потерь $\mathscr{L}(M)$:
  — логарифмическая $\mathscr{L}(M) = \log(1 + e^{-M})$ ... LR;
  — кусочно-линейная $\mathscr{L}(M) = (1 - M)_+$ ... SVM;
  — экспоненциальная $\mathscr{L}(M) = e^{-M}$ ... AdaBoost;
- Вид регуляризатора $-\log p(w; \gamma)$:
  — равномерный ... персептроны, LR;
  — гауссовский с равными дисперсиями ... SVM, RLR;
  — гауссовский с неравными дисперсиями ... RVM;
  — лапласовский ... приводит к отбору признаков;
- Вид численного метода оптимизации $Q(w) \to \min$.

Балансировка ошибок I и II рода. Постановка задачи

Задача классификации на два класса, $Y = \{-1, +1\}$;
λ_y — штраф за ошибку на объекте класса y;
модель классификации: $a(x, w, w_0) = \text{sign}\big(f(x, w) - w_0\big)$.

На практике штрафы $\{\lambda_y\}$ могут многократно пересматриваться.

Постановка задачи

- Нужен удобный способ выбора w_0 в зависимости от $\{\lambda_y\}$, не требующий построения w заново.
- Нужна характеристика качества классификатора, инвариантная относительно выбора $\{\lambda_y\}$.

Определение ROC-кривой

ROC — «receiver operating characteristic».

- Каждая точка кривой соответствует некоторому $a(x; w, w_0)$.
- по оси X: доля *ошибочных положительных классификаций* (FPR — false positive rate):

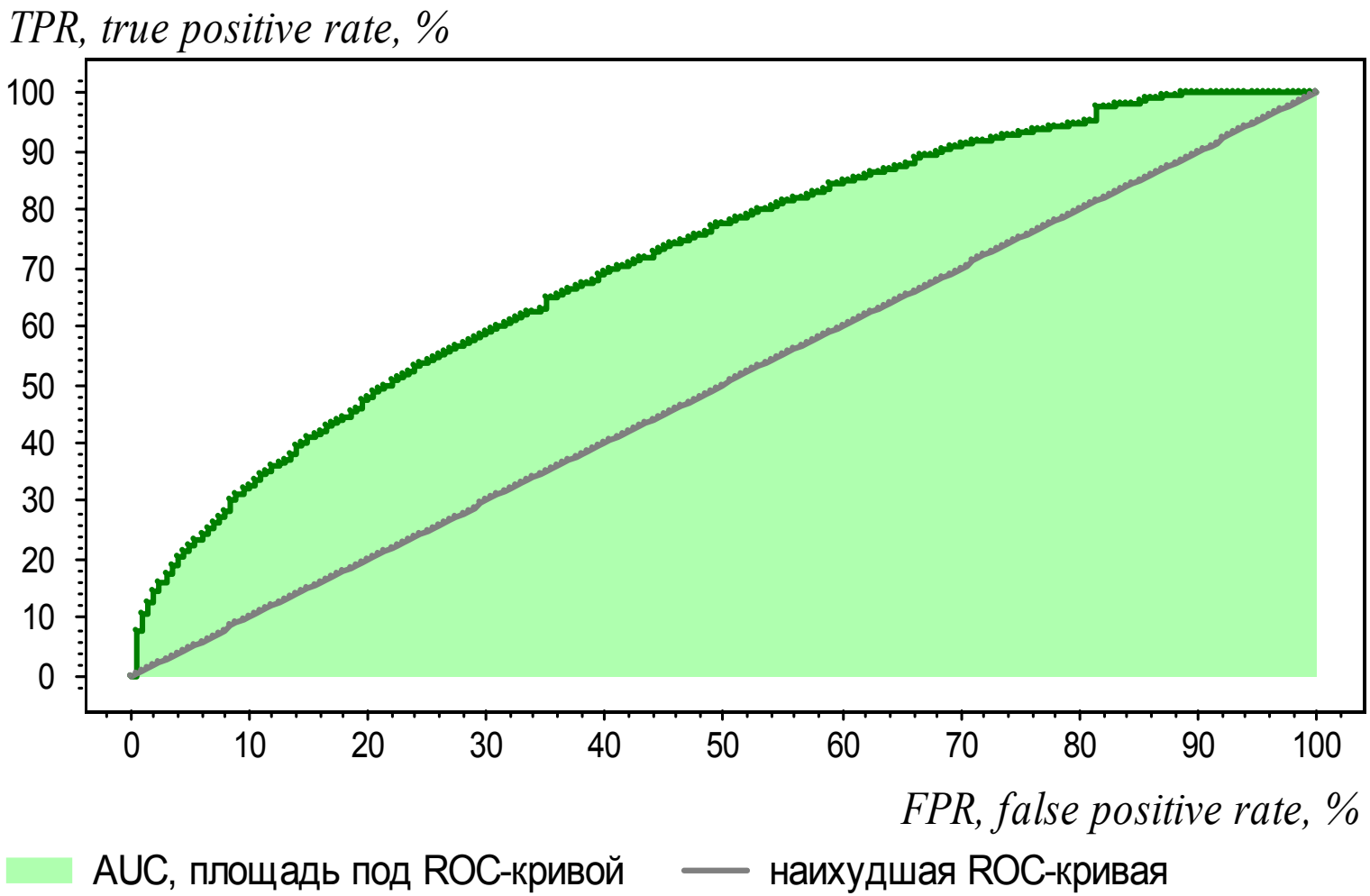
$$\text{FPR}(a, X^\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a(x_i; w, w_0) = +1]}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1]};$$

  $1 - \text{FPR}(a)$ называется *специфичностью* алгоритма a.
- по оси Y: доля *правильных положительных классификаций* (TPR — true positive rate):

$$\text{TPR}(a, X^\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a(x_i; w, w_0) = +1]}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1]};$$

  $\text{TPR}(a)$ называется также *чувствительностью* алгоритма a.

Пример ROC-кривой



Алгоритм эффективного построения ROC-кривой

Вход: выборка X^ℓ; дискриминантная функция $f(x, w)$;

Выход: $\{(\mathrm{FPR}_i, \mathrm{TPR}_i)\}_{i=0}^{\ell}$, AUC — площадь под ROC-кривой.

$\ell_y := \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]$, для всех $y \in Y$;
упорядочить выборку X^ℓ по убыванию значений $f(x_i, w)$;
$(\mathrm{FPR}_0, \mathrm{TPR}_0) := (0, 0)$; AUC $:= 0$;
для $i := 1, \ldots, \ell$
  если $y_i = -1$ **то**
    $\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_-}$; $\mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1}$;
    $\mathrm{AUC} := \mathrm{AUC} + \frac{1}{\ell_-}\mathrm{TPR}_i$;
  иначе
    $\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1}$; $\mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_+}$;

Градиентная максимизация AUC

Модель: $a(x_i, w, w_0) = \text{sign}\big(f(x_i, w) - w_0\big)$.

AUC — это доля правильно упорядоченных пар (x_i, x_j):

$$\text{AUC} = \frac{1}{\ell_-}\sum_{i=1}^{\ell}\big[y_i = -1\big]\,\text{TPR}_i = $$

$$= \frac{1}{\ell_-\ell_+}\sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}\big[y_i < y_j\big]\big[f(x_i, w) < f(x_j, w)\big] \to \max_w.$$

Явная максимизация аппроксимированного AUC:

$$Q(w) = \sum_{i,j:\ y_i<y_j} \mathscr{L}\Big(\underbrace{f(x_j, w) - f(x_i, w)}_{M_{ij}(w)}\Big) \to \min_w,$$

где $\mathscr{L}(M)$ — гладкая убывающая функция отступа,
$M_{ij}(w)$ — новое понятие отступа для пар объектов.

Алгоритм SG для максимизации AUC

Возьмём для простоты линейный классификатор:

$$g(x, w) = \langle x, w \rangle, \qquad M_{ij}(w) = \langle x_j - x_i, w \rangle.$$

Вход: выборка X^ℓ, темп обучения h, темп забывания λ;
Выход: вектор весов w;

инициализировать веса w_j, $j = 0, \ldots, n$;
инициализировать оценку: $\bar{Q} := \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i,j:\, y_i < y_j} \mathscr{L}(M_{ij}(w))$;
повторять
    выбрать пару объектов (i, j): $y_i < y_j$, случайным образом;
    вычислить потерю: $\varepsilon_{ij} := \mathscr{L}(M_{ij}(w))$;
    сделать градиентный шаг: $w := w - h\mathscr{L}'(M_{ij}(w))(x_j - x_i)$;
    оценить функционал: $\bar{Q} := (1 - \lambda)\bar{Q} + \lambda\varepsilon_{ij}$;
пока значение $\bar{Q}$ и/или веса w не сойдутся;

Резюме в конце лекции

- Методы обучения линейных классификаторов отличаются
  — видом функции потерь;
  — видом регуляризатора;
  — численным методом оптимизации.
- *Аппроксимация пороговой функции потерь* гладкой убывающей функцией отступа $\mathscr{L}(M)$ повышает качество классификации (за счёт увеличения зазора)
  и облегчает оптимизацию.
- *Регуляризация* решает проблему мультиколлинеарности и также снижает переобучение.
- *Максимизация AUC* не зависит от соотношения штрафов за ошибки I и II рода.