Лекция 3

Линейные модели

Машинное обучение

Сергей Муравьёв / Андрей Фильченков

18.09.2020

План лекции

- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

- В презентации используются материалы курса «Машинное обучение» К.В. Воронцова
- Слайды доступны: **shorturl.at/hjyAX**
- Видео доступны: **shorturl.at/ltVZ3**

План лекции

- Рекламная интеграция
- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

Партнер курса

Стипендии от Huawei

- Для третьекурсников:
  - взять курсовую по ML и защитить ее в июне
  - хорошо сдать курс
  - стипендия в 7-м семестре
- Для четверокурсников:
  - взять диплом по ML и защитить промежуточные результаты в январе
  - хорошо сдать курс
  - стипендия в 8-м семестре

План лекции

- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

Формулировка задачи

Условия: $Y = \{-1, +1\}$

Дано $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{|\mathcal{D}|}$

Требуется найти $a_w(x, \mathcal{D})$ в виде $\text{sign}\big(f(x, w)\big)$,

где $f(x, w)$ — функция распознавания,

w — вектор параметров

Ключевая гипотеза: объекты (хорошо) разделимы.

Основная идея: поиск среди разделяющих поверхностей, описываемых уравнением $f(x, w) = 0$.

Понятие отступа

Функция отступа (margin) для объекта x_i:

$$M_i(w) = y_i f(x_i, w),$$

$M_i(w) < 0$ — свидетельство того, что объект классифицирован некорректно.

Сглаживание функции ошибки

Эмпирический риск:

$$\mathcal{L}(a_w, \mathcal{D}) = \mathcal{L}(w) = \sum_i^{|\mathcal{D}|} [M_i(w) < 0]$$

отражает количество объектов, на которых классификатор a_w допускает ошибки.

Функция не является гладкой → невозможен поиск экстремумов

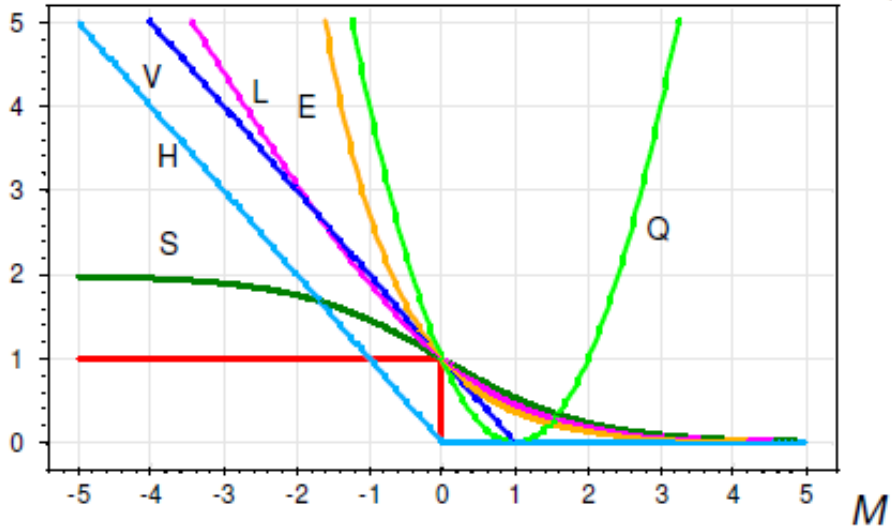
Аппроксимация:

$$\tilde{\mathcal{L}}(w) = \sum_i^{|\mathcal{D}|} \mathcal{L}(M_i(w)),$$

где $\mathcal{L}\big(M_i(w)\big) = \mathcal{L}(a_w(x_i, \mathcal{D}), x_i)$ – функция потерь.

Гладкие функции ошибки

Требуется, чтобы $\mathcal{L}$ была неотрицательной, невозрастающей и гладкой:



$H(M) = (-M)_+$ — кусочно-линейная (правило Хебба)

$V(M) = (1 - M)_+$ — кусочно-линейная (SVM)

$L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ — логарифмическая

$Q(M) = (1 - M)^2$ — квадратичная

$S(M) = 2(1 + e^M)^{-1}$ — сигмоидная

$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная

10

Линейный классификатор

$f_j: X \to \mathbb{R}, j = 1, \ldots, n$ — численные признаки

Линейный классификатор:

$$a_w(x, \mathcal{D}) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{n} w_i f_i(x) - w_0\right).$$

$w_1, \ldots w_n \in \mathbb{R}$ — **веса** признаков.

Эквивалентная запись:

$$a_w(x, \mathcal{D}) = \text{sign}(\langle w, x \rangle),$$

если добавить признак $f_0(x) = -1$.

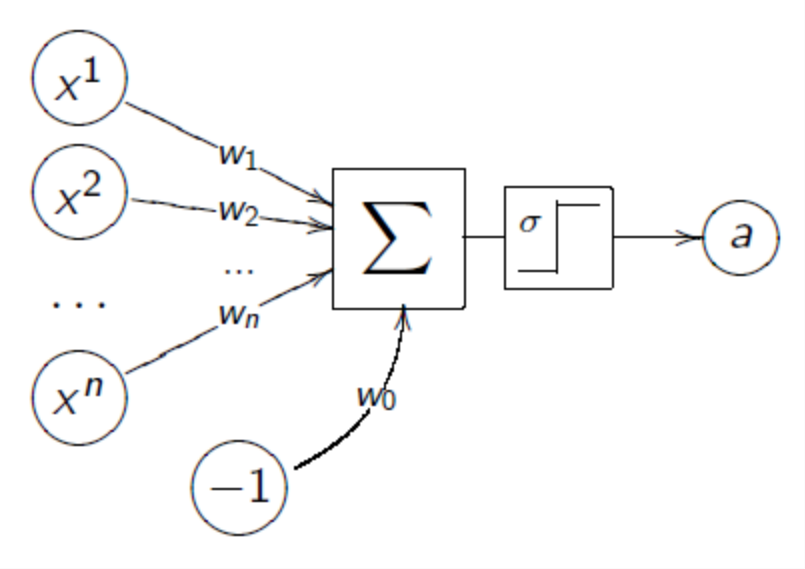
11

Нейрон

Нейрон МакКаллока-Питтса:

$$a_w(x, \mathcal{D}) = \sigma\left(\sum_{i=1}^{n} w_i f_i(x) - w_0\right),$$

где σ — функция активации



Семейство алгоритмов

Предположение о том, как должен выглядеть классификатор, задаёт семейство алгоритмов A_{linear}, из которого требуется выбрать конкретный алгоритм.

Как выглядит такое семейство алгоритмов?

Семейство алгоритмов

Предположение о том, как должен выглядеть классификатор, задаёт семейство алгоритмов A_{linear}, из которого требуется выбрать конкретный алгоритм.

Как выглядит такое семейство алгоритмов?

$$A_{\text{linear}} = \{a_w(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle) | w \in \mathbb{R}^n\}$$

Как обучать классификатор?

Требуется найти вектор параметров w.

Мы можем использовать практически любой алгоритм оптимизации, способный оптимизировать эмпирический риск в соответствующем пространстве.

Эмпирический риск не является функцией «чёрного ящика»

Более того, известно, что эта функция гладкая.

15

План лекции

- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

Задача оптимизации

Дано: $\boldsymbol{X} \subset \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$ — допустимое множество

Целевая функция $f: \boldsymbol{X} \to R$

Критерий поиска: **минимум** или **максимум**

Классификация методов оптимизации (методы поиска):

- детерминированные;
- случайные (стохастические);
- комбинированные

Классификация методов по критерию размерности $\boldsymbol{X}$:

- многомерные методы
- одномерные методы

17

Классификация с точки зрения X

- задачи **дискретного программирования** — X конечно или счётно;
- задачи **целочисленного программирования** — $X \subset \mathbb{Z}$;
- задачи **нелинейного программирования**, если f — нелинейная функция, $X \subset K^n, |K^n| < \infty$.
- задачи **линейного программирования,** если f — линейная функция.

18

Классификация с точки зрения гладкости f

- **Прямые** методы — вычисления целевой функции в точках приближений

  Метод перебора, метод золотого сечения.

- Методы **первого порядка** — вычисления первых частных производных

  Градиентный спуск, метод Коши

- Методы **второго порядка** — вычисления вторых частных производных, то есть *гессиана* целевой функции

  Метод Ньютона

Градиентный спуск

Задача минимизация эмпирического риска

$$\tilde{\mathcal{L}}(w) = \sum_i^{|\mathcal{D}|} \mathcal{L}\big(M_i(w)\big) = \sum_i^{|\mathcal{D}|} \mathcal{L}(\langle w, x_i\rangle y_i) \to \min_w.$$

Градиентный спуск (классический):

$w_{(0)}$ — **некоторое начальное значение**;

$w_{(k+1)} = w_{(k)} - \mu\nabla\mathcal{L}\big(w_{(k)}\big)$,

где μ — **шаг градиента** или **скорость сходимости**.

$$w_{(k+1)} = w_{(k)} - \mu \sum_i^{|\mathcal{D}|} \mathcal{L}'(\langle w, x_i\rangle y_i)\, x_i y_i.$$

Стохастический градиентный спуск

Проблема: существует слишком много объектов, функции которых необходимо переоценивать на каждом шаге.

Стохастический градиентный спуск:

$w_{(0)}$ — **некоторое начальное значение**;

$x_{(1)}, \ldots, x_{(|\mathcal{D}|)}$ — **некоторый порядок объектов**;

$$w_{(k+1)} = w_{(k)} - \mu \mathcal{L}'\big(\langle w_{(k)}, x_{(k)}\rangle y_{(k)}\big),$$

$$\mathcal{L}_{(k+1)} = (1-\alpha)\mathcal{L}_{(k)} + \alpha \mathcal{L}\big(\langle w_{(k)}, x_{(k)}\rangle y_{(k)}\big).$$

Критерий останова: когда значения $\mathcal{L}$ и/или w почти не меняются

Пакетный градиентный спуск

Проблема: стохастический градиентный спуск слишком случайный, поскольку зависит только от одного объекта.

Пакетный градиентный спуск (mini-batch):

$w_{(0)}$ — **некоторое начальное значение**; b — **размер пакета (батча)**

$x_{(1)}, \dots, x_{(|\mathcal{D}|)}$ — **некоторый порядок объектов**;

$$w_{(K+1)} = w_{(K)} - \mu \sum_{k=Kb}^{k=(K+1)b} \mathcal{L}'\big(\langle w_{(K)}, x_{(k)}\rangle y_{(k)}\big),$$

$$\mathcal{L}_{(K+1)} = (1-\alpha)\mathcal{L}_{(K)} + \alpha \sum_{k=Kb}^{k=(K+1)b} \mathcal{L}\big(\langle w_{(K)}, x_{(k)}\rangle y_{(k)}\big).$$

Критерий останова: когда значения $\mathcal{L}$ и/или w почти не меняются

Сравнение подходов

- Классический градиентный спуск
- Пакетный градиентный спуск
- Стохастический градиентный спуск

Правило Розенблатта и правило Хебба

Правило Розенблатта для классификации на множестве $\{1; 0\}$, служащее для настройки весов: для каждого $x_{(k)}$ изменяем вектор весов:

$$w_{(k+1)} := w_{(k)} - \eta(a_w(x_{(k)}) - y_{(k)}).$$

Правило Хебба для классификации на множестве $\{1; -1\}$, служащее для настройки весов: для каждого $x_{(k)}$ изменяем вектор весов:

если $\langle w_{(k)} x_{(k)} \rangle y_{(k)} < 0$ то $w_{(k+1)} := w_{(k)} + \eta x_{(k)} y_{(k)}$.

Теорема Новикова

Теорема (Алекс Новиков)

Пусть выборка $\mathcal{D}$ линейно разделима: $\exists \tilde{w}, \exists \delta > 0$:

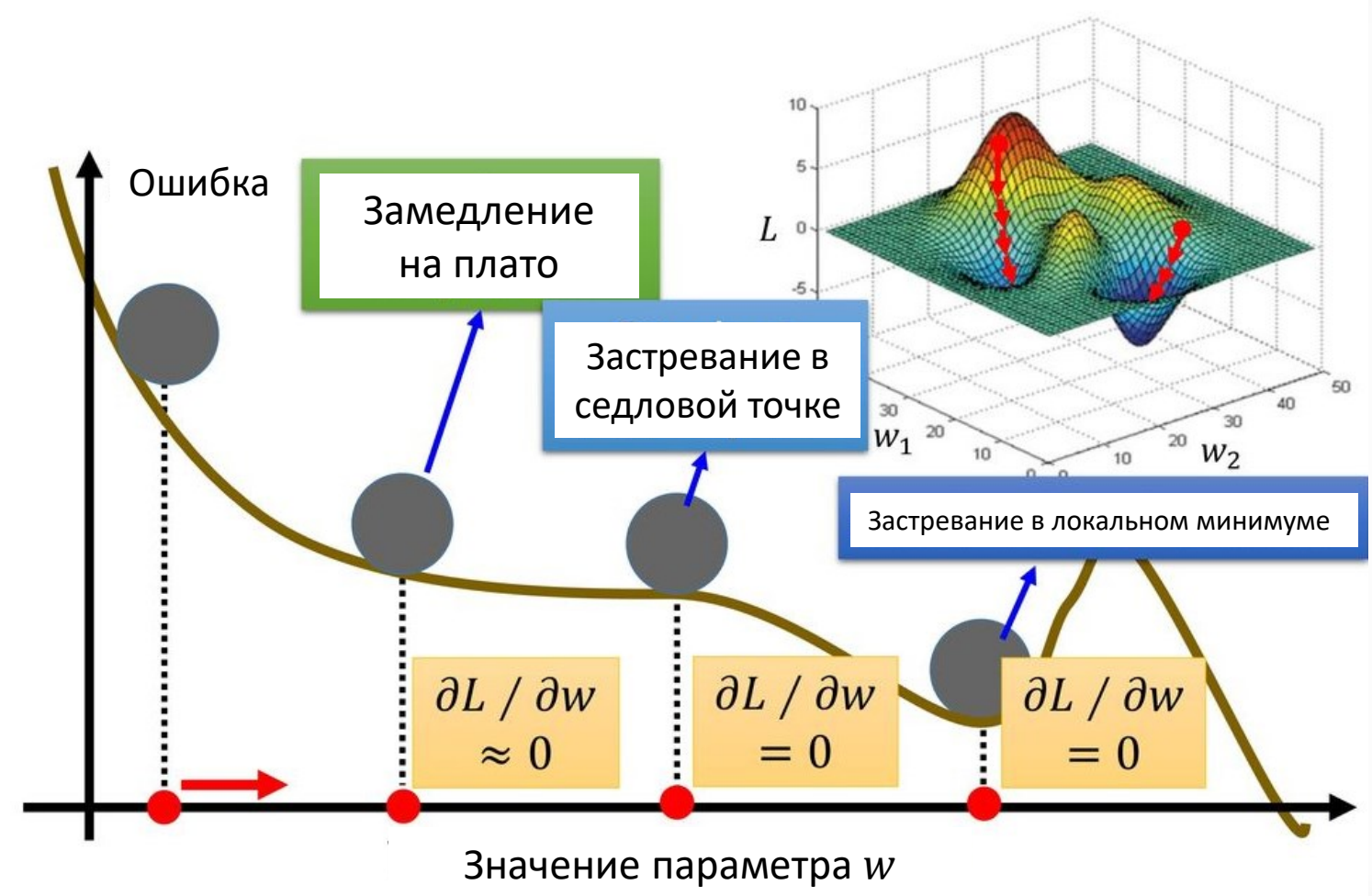
$\langle \tilde{w}, x_i \rangle y_i > \delta$ для всех $i = 1, \ldots, |\mathcal{D}|$.

Тогда стохастический градиентный спуск с правилом Хебба находит вектор весов w, который:

- разделяет выборку безошибочно;
- при любом начальном значения $w_{(0)}$;
- при любом $\mu > 0$;
- независимо от порядка объектов $x_{(i)}$;
- за конечное количество изменений вектора w;
- если $w_{(0)} = 0$, тогда количество изменений вектора w:

$t_{\max} \leq \frac{1}{\delta^2} \max ||x_j||$.

Проблемы сходимости



26

Эвристики для начальных значений

Важно для невыпуклых функций:

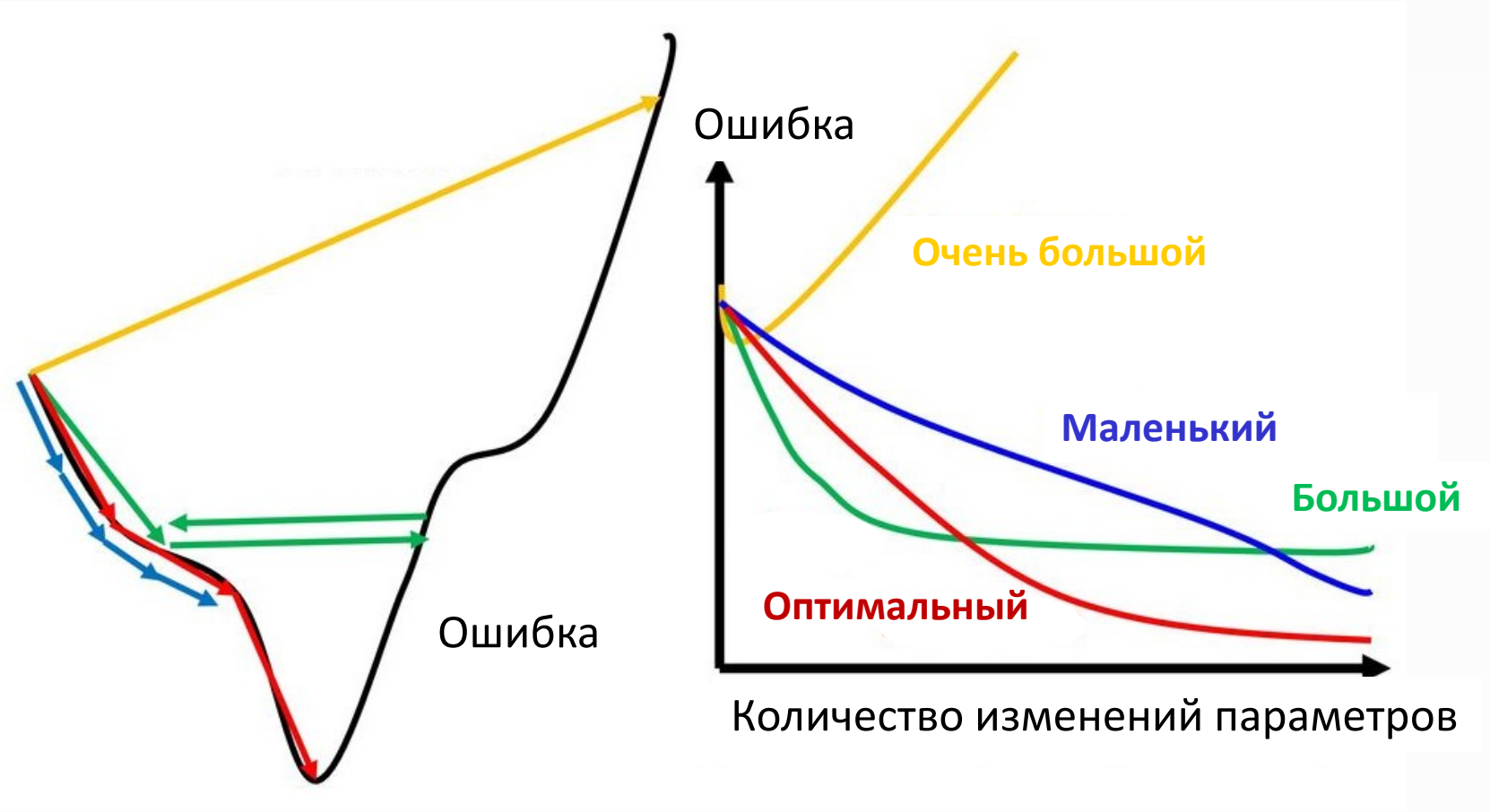
- $w_j = 0$ для всех $j = 0, \ldots, n$;
- маленькие случайные значения:

$$w_j \in \left[-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}\right];$$

- $w_j = \frac{\langle y, f_j \rangle}{\langle f_j, f_j \rangle}$;
- обучение по небольшой случайной подвыборке объектов;
- многократные запуски из разных начальных приближений и выбор лучшего решения.

27

Сравнение скоростей сходимости



Эвристики на скорость сходимости

- Сходимость достигается для выпуклых функций, когда

$$\mu_{(k)} \to 0, \sum \mu_{(k)} = \infty, \sum \left(\mu_{(k)}\right)^2 < \infty$$

- **Наискорейший спуск**:

$$\mathcal{L}\left(w_{(k)} - \mu_{(k)} \nabla \mathcal{L}\left(w_{(k)}\right)\right) \to \min_{\mu_{(k)}}$$

- Шаги для «выпрыгивания» из локальных минимумов
- Методы второго порядка
- Использование среднего вектора недавних шагов

Эвристики на порядок предъявления объектов

- на каждом шаге брать предметы из разных классов;
- чаще брать неверно классифицированные объекты (маленькие M_i);
- чаще не брать «хорошие» объекты, у которых $M_i > \kappa_+$;
- чаще не брать объекты-«шумы», у которых $M_i < \kappa_-$;

Анализ алгоритма градиентного спуска

Преимущества:

- простота реализации;
- легко обобщается для любых f и $\mathcal{L}$;
- возможность динамического обучения;
- поддерживает сверхмалые выборки.

Недостатки:

- медленная сходимость, возможна расходимость;
- застревание в локальных минимумах и седловых точках;
- очень важен правильный подбор эвристик;
- переобучение.

План лекции

- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

Линейная регрессия

Модель многомерной линейной регрессии:

$$f(x, \theta) = \sum_{j=1}^{n} \theta_j f_j(x), \quad \theta \in \mathbb{R}^n.$$

Матричные обозначения:

$$F = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_{|\mathcal{D}|}) & \dots & f_n(x_{|\mathcal{D}|}) \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_{|\mathcal{D}|} \end{pmatrix}, \theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \dots \\ \theta_n \end{pmatrix}.$$

Эмпирический риск в матричной записи:

$$\mathcal{L}(\theta, \mathcal{D}) = \sum_{i=1}^{|\mathcal{D}|} (f(x_i, \theta) - y_i)^2 = ||F\theta - y||^2 \to \min_{\theta \in \mathbb{R}}.$$

Матричное разложение

Существует много способов решения такой задачи.

Один из наиболее популярных — применение метода **матричного разложения** (или **матричной факторизации**).

Система нормальных уравнений

Условие минимума:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \theta} = 2F^\top(F\theta - y) = 0.$$

$$\theta^* = (F^\top F)^{-1} F^\top y$$

$F^+ = (F^\top F)^{-1} F^\top$ — **псевдообратная матрица (обратное преобразование Мура-Пенроуза)**

$P_F = FF^+$ — **проекционная матрица**

Решение:

$$\theta^* = F^+ y.$$

Минимальное приближение:

$$\mathcal{L}(\theta^*) = ||P_F y - y||^2.$$

Сингулярное разложение

Теорема: любая матрица F размера $|\mathcal{D}| \times n$ может быть представлена в виде сингулярного разложения

$$F = VDU^{\top}.$$

- $V = (v_1, \dots, v_n)$ размера $|\mathcal{D}| \times n$, являющаяся ортогональной: $V^{\top}V = I_n$, столбцы v_j — собственные вектора матрицы $FF^{\top}$;
- $U = (u_1, \dots, u_n)$ размера of $n \times n$, являющаяся ортогональной: $U^{\top}U = I_n$, строки u_j —собственные вектора матрица $F^{\top}F$;
- $D = \mathrm{diag}\left(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n}\right)$ размера of $n \times n$, $\sqrt{\lambda_j}$ — **сингулярные числа**, квадраты собственных значений $F^{\top}F$.

Интерпретация метода

Представим какое-то скрытое пространство, в которое мы хотим проецировать данные.

D представляет важность каждого базисного вектора

V представляет, как объекты соответствуют базисным векторам

U показывает, как признаки соответствуют базисным векторам

Метод наименьших квадратов при помощи сингулярного разложения

$$F^+ = (UDV^\top VDU^\top)^{-1}UDV^\top = UD^{-1}V^\top = \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}u_j v_j^\top;$$

$$\theta^* = F^+ y = UD^{-1}V^\top y = \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}u_j(v_j^\top y);$$

$$F\theta^* = P_F y = (VDU^\top)UD^{-1}V^\top y = VV^\top y = \sum_{j=1}^{n} v_j(v_j^\top y);$$

$$||\theta^*||^2 = ||D^{-1}V^\top y||^2 = \sum_{j=1}^{n}\frac{1}{\lambda_j}\left(v_j^\top y\right)^2.$$

38

Анализ

- Когда мы можем вычислить сингулярное разложение, мы можем легко найти решение для МНК.
- Сингулярное разложение вычисляется за $O(|\mathcal{D}|^2 n + n^3)$

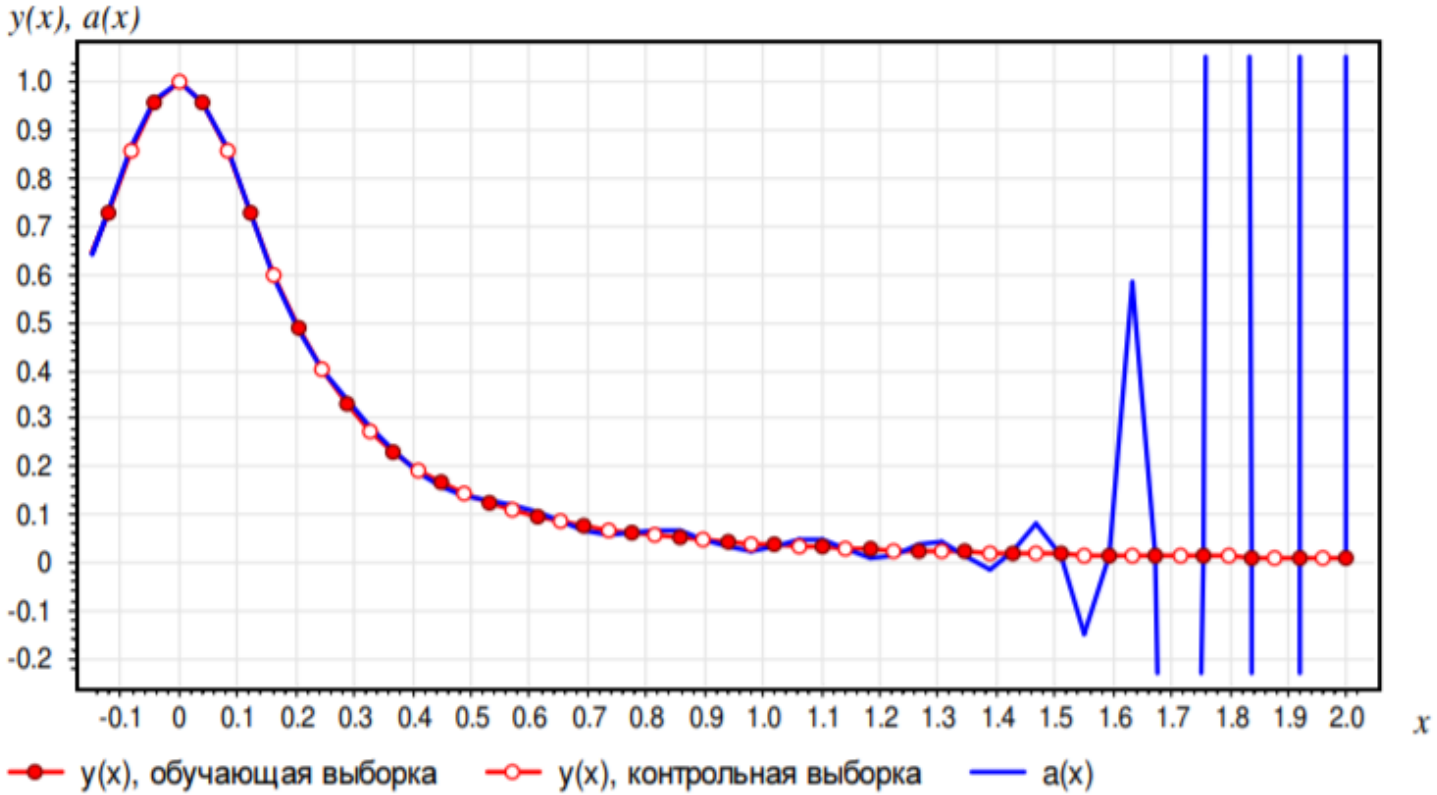
- Сингулярное разложение — важный инструмент во многих других задачах машинного обучения, в первую очередь, в снижении размерности.

План лекции

- Линейная классификация
- Градиентный спуск
- Линейная регрессия и матричное разложение
- Регуляризация

Переобученный алгоритм (напоминание)

$y(x) = \dfrac{1}{1 + 25x^2}$; $a(x)$ — многочлен степени $n = 38$



Регуляризация

Ключевая гипотеза: w «скачет», что и вызывает переобучение

Основная идея: ограничим норму w.

Добавим штраф регуляризации для нормы весов:

$$\mathcal{L}_\tau(a_w, \mathcal{D}) = \mathcal{L}(a_w, \mathcal{D}) + \frac{\tau}{2}\|w\|^2 \to \min_w.$$

τ — коэффициент регуляризации, отражает баланс между качеством и обобщаемостью.

Гребневая регуляризация

Предположение: значения вектора θ имеют распределение Гаусса с ковариационной матрицей σI_n:

$$\mathcal{L}_\tau(\theta) = ||F\theta - y||^2 + \frac{1}{2\sigma}||\theta||^2 \to \min_\theta,$$

где $\tau = 1/\sigma$ — коэффициент регуляризации.

Внедрим такую регуляризацию в решение задачи МНК:

$$\theta_\tau^* = (F^\top F + \tau I_n)^{-1} F^\tau y.$$

МНК

$$\theta_\tau^* = U(D^2 + \tau I_n)^{-1} D V^\top y = \sum_{j=1}^{n} \frac{\sqrt{\lambda_j}}{\lambda_j + \tau} u_j (v_j^\top y);$$

$$F\theta_\tau^* = (VDU^\top)\theta_\tau^* = V \operatorname{diag}\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau}\right) V^\top y =$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau} v_j (v_j^\top y);$$

$$||\theta^*||^2 = ||D^2(D^2 + \tau I_n)^{-1} D^{-1} V^\top y||^2 = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{\lambda_j + \tau} \left(v_j^\top y\right)^2.$$

Лассо Тибширани

Предположение: значения вектора θ имеют распределение Лапласа:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_\tau(\theta) = ||F\theta - y||^2 \to \min\limits_{\theta}; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} |\theta_i| \leq \text{к}. \end{cases}$$

LASSO (least absolute shrinkage and selection operator).

МНК с регуляризацией LASSO

Результирующая задача оптимизации

$$\mathcal{L}_\tau(\theta) = ||F\theta - y||^2 + \tau\|\theta\|_1 \to \min_\theta,$$

где $\|\theta\|_1$ – l_1-норма:$\|\theta\|_1 = \sum|\theta_i|$.

Хорошего аналитического решения не существует.

Однако хорошее вычислительное решение существует.

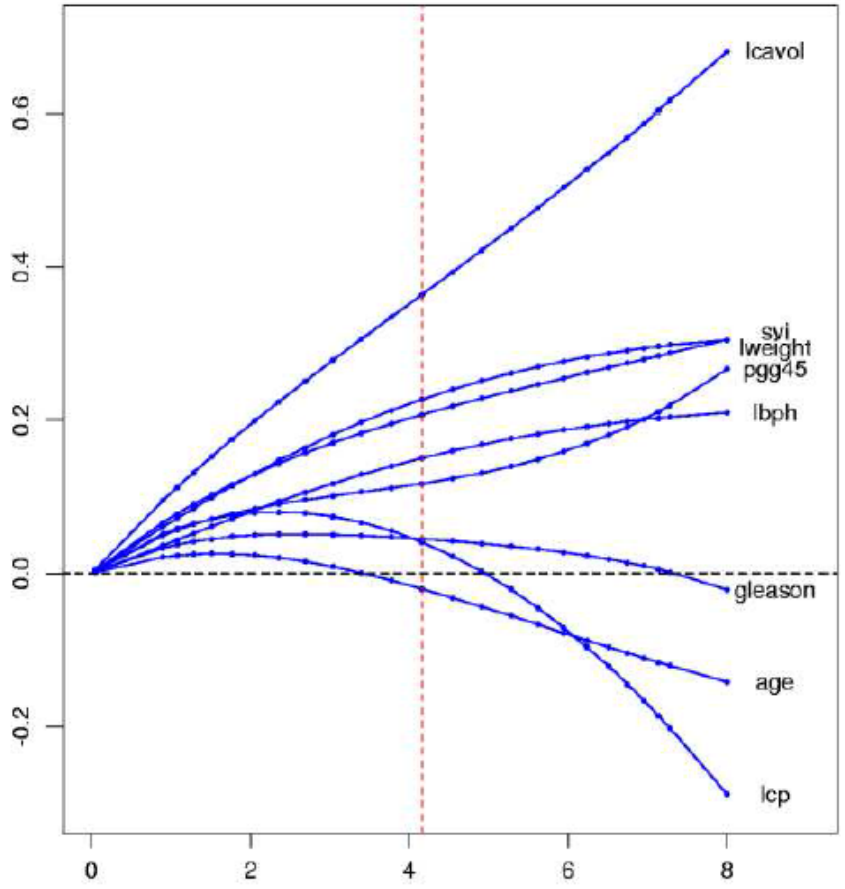
Регуляризация для градиентного спуска

Регуляризация может быть легко использована для градиентного спуска:

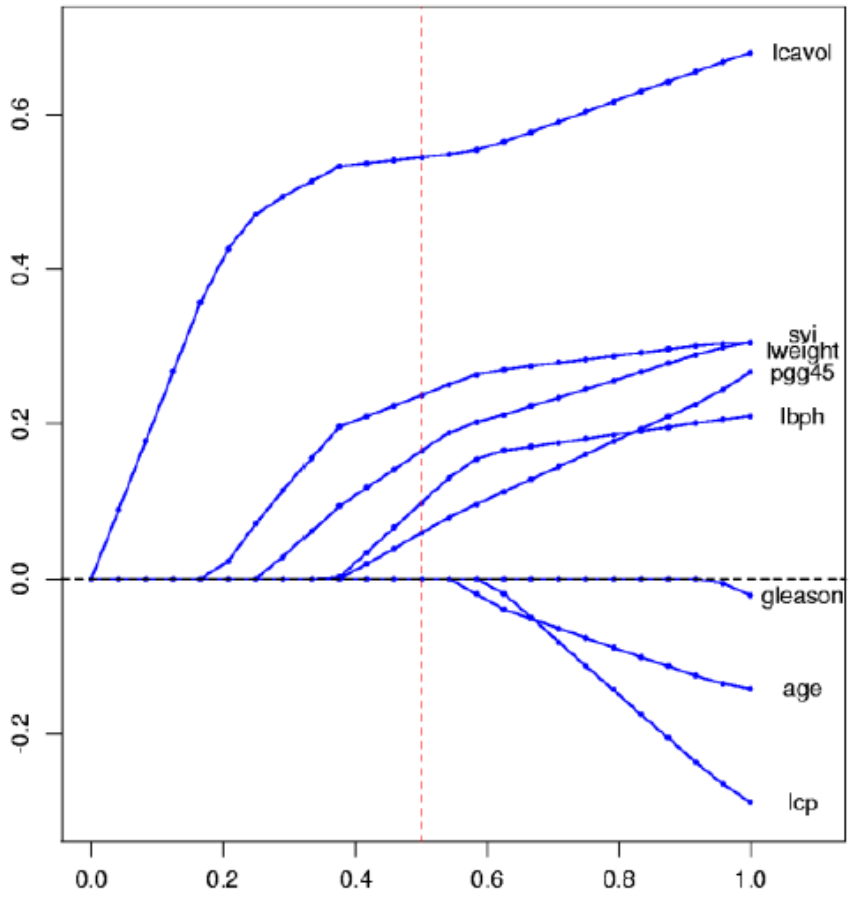
$$\nabla \mathcal{L}_\tau(w) = \nabla \mathcal{L}(w) + \tau w,$$
$$w_{k+1} = w_k(1 - \mu\tau) - \mu \nabla \mathcal{L}(w).$$

Сравнение методов регуляризации

Гребневая



LASSO



Регуляризация в целом

Предположим, мы решаем задачу

$$\theta = \arg\min_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\theta)$$

Регуляризация — это некоторые ограничения, которые мы накладываем на θ, которые представляют сложность или вероятность модели и могут быть формализованы с помощью некоторой функции $c(\theta)$:

$$\theta_{\text{reg}} = \arg\min_{\theta \in \Theta} \mathcal{L}(\theta) + \alpha c(\theta)$$

Анализ понятия регуляризации (1/2)

- Регуляризаторы, использующие l_1-норму или l_2-норму, наиболее популярные
- **ElasticNet**, являющийся суммой двух предыдущих также популярен.
- Многие другие могут быть использованы в отношении исходных предположений.
- Некоторые техники де-факто являются регуляризацией или могут быть интерпретированы подобным образом.

Анализ понятия регуляризации (2/2)

- Один из двух общих подходов к борьбе с переобучением
- Требуется для решения плохо поставленных задач
- Регуляризаторы могут быть добавлены для представления определённых специфических свойств модели

- Коэффициент регуляризации необходимо настраивать
- Не всегда понятно, какой регуляризатор выбирать