Основы машинного обучения

Лекция 11

Метод опорных векторов. Многоклассовая классификация.

Решающие деревья.

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2023

Метод опорных векторов

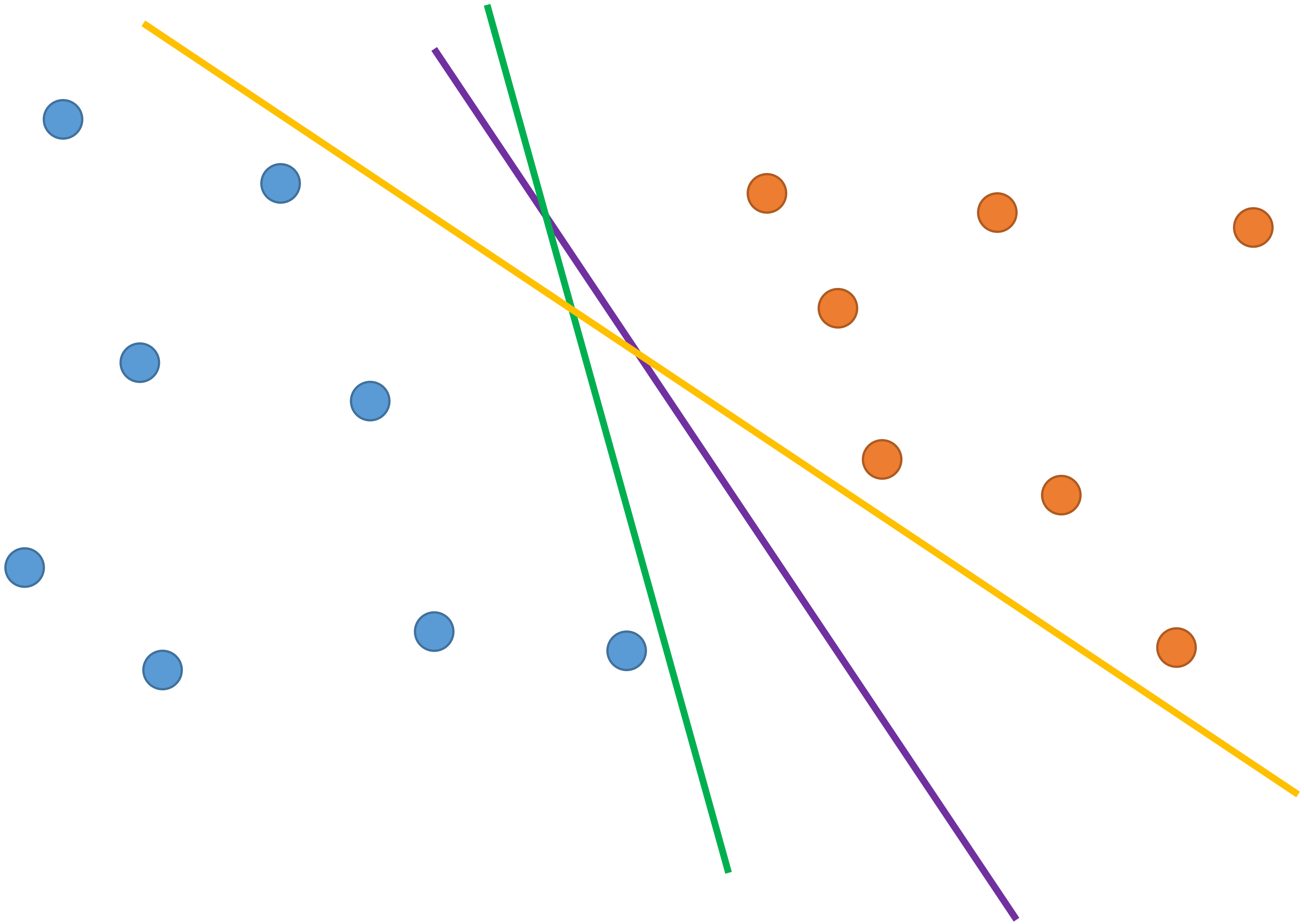
Hinge loss

- Решаем задачу бинарной классификации: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$

- Минимизация верхней оценки:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} \max(0, 1 - y_i\langle w, x_i\rangle) \to \min_w$$

Какой классификатор лучше?



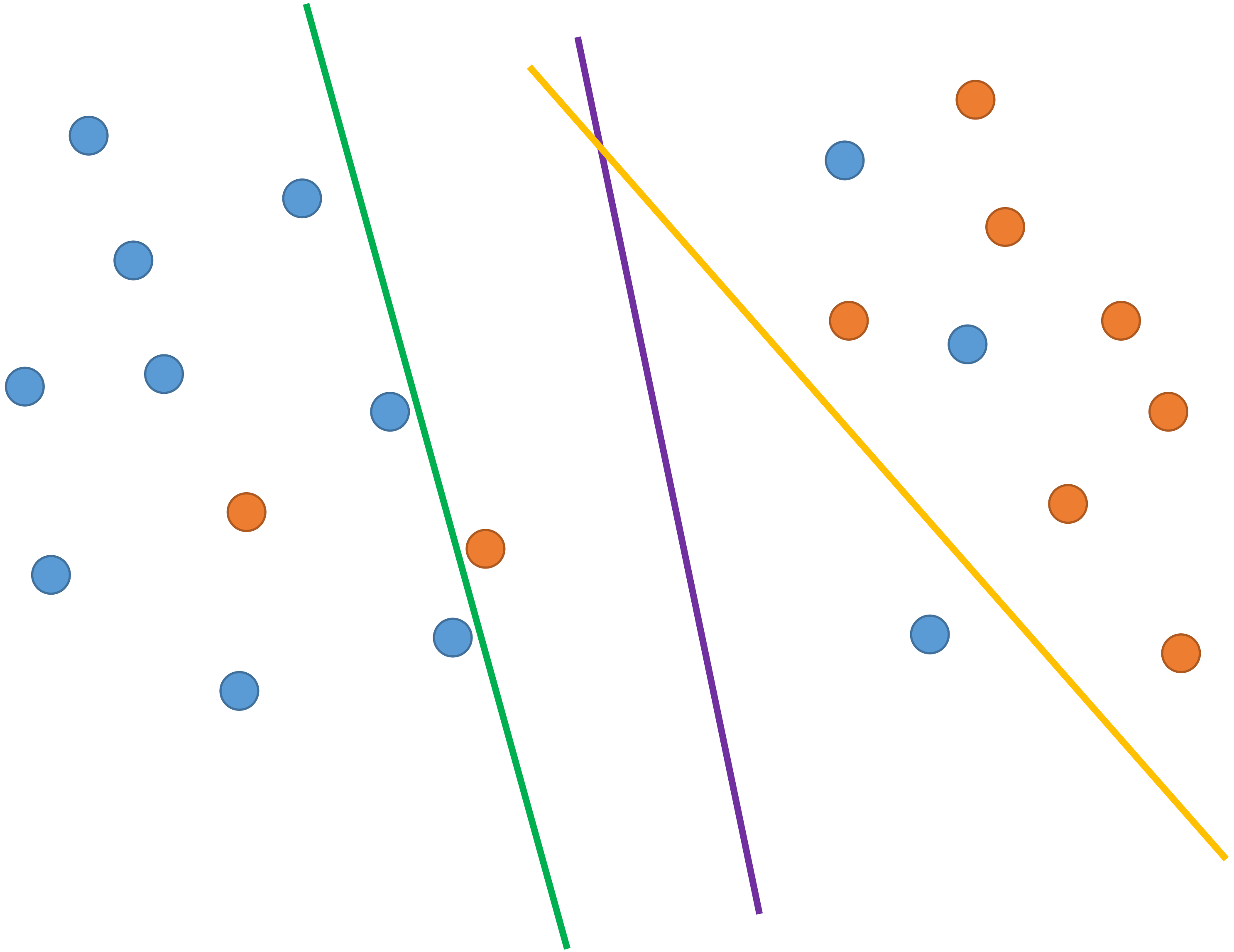
Отступ классификатора

- Будем максимизировать отступ классификатора — расстояние от гиперплоскости до ближайшего объекта

Метод опорных векторов (SVM)

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w, w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай



Линейно неразделимый случай

- Любой линейный классификатор допускает хотя бы одну ошибку

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w, w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 \end{cases}$$

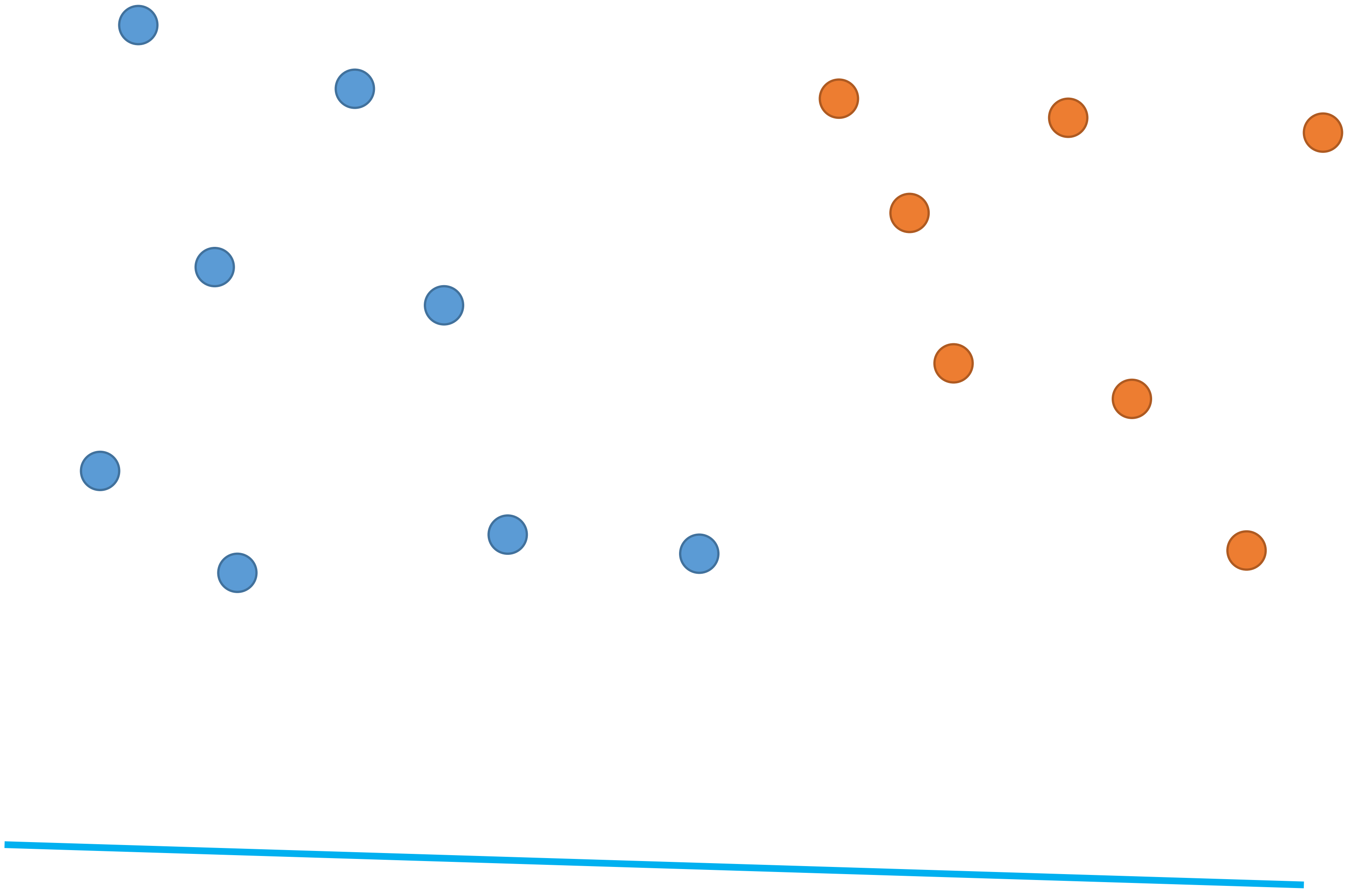
Линейно неразделимый случай

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w,w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай

$$\begin{cases} \|w\|^2 \to \min\limits_{w, w_0} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - 10^{1000} \end{cases}$$

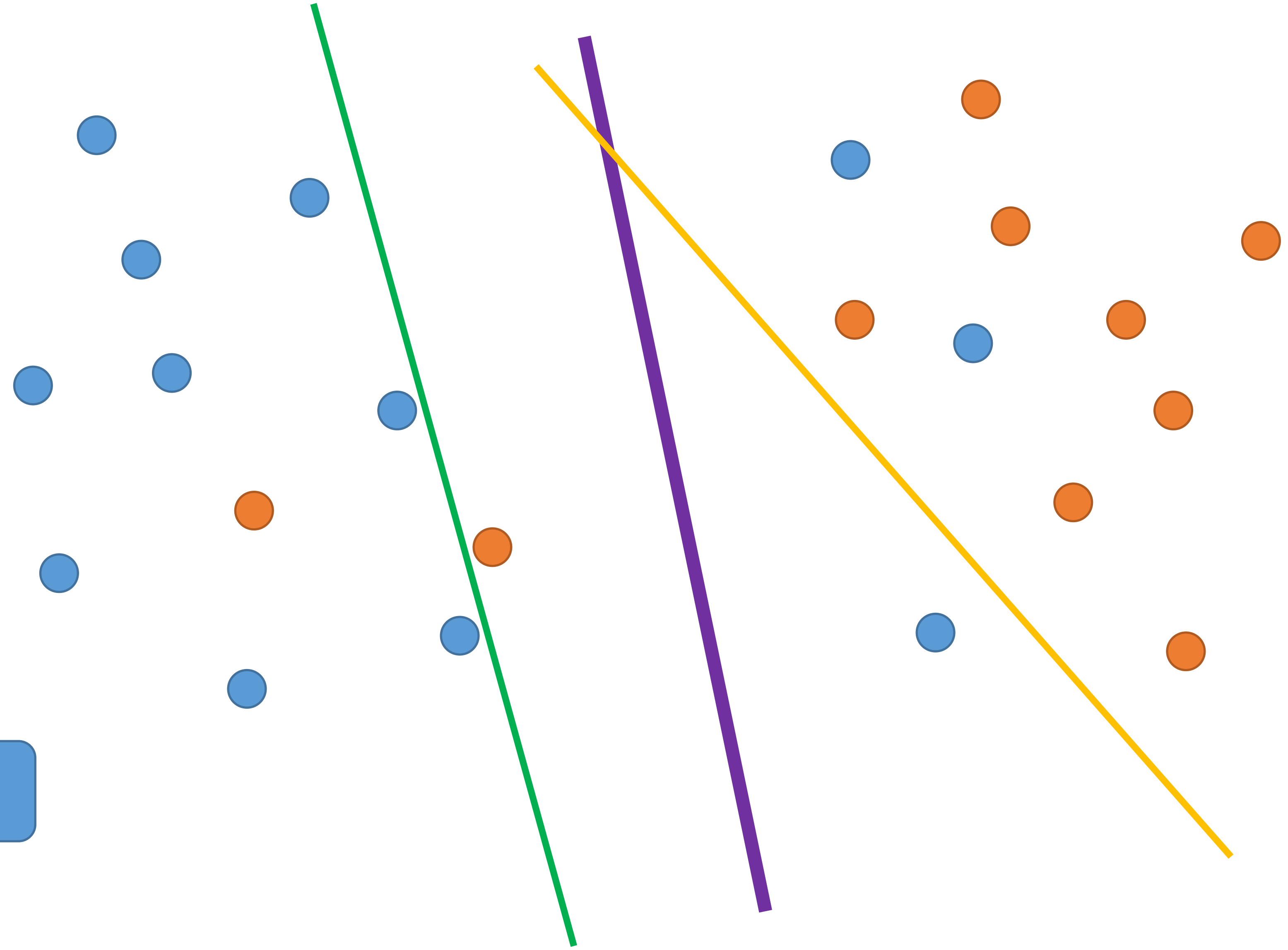
Отступ классификатора



Метод опорных векторов

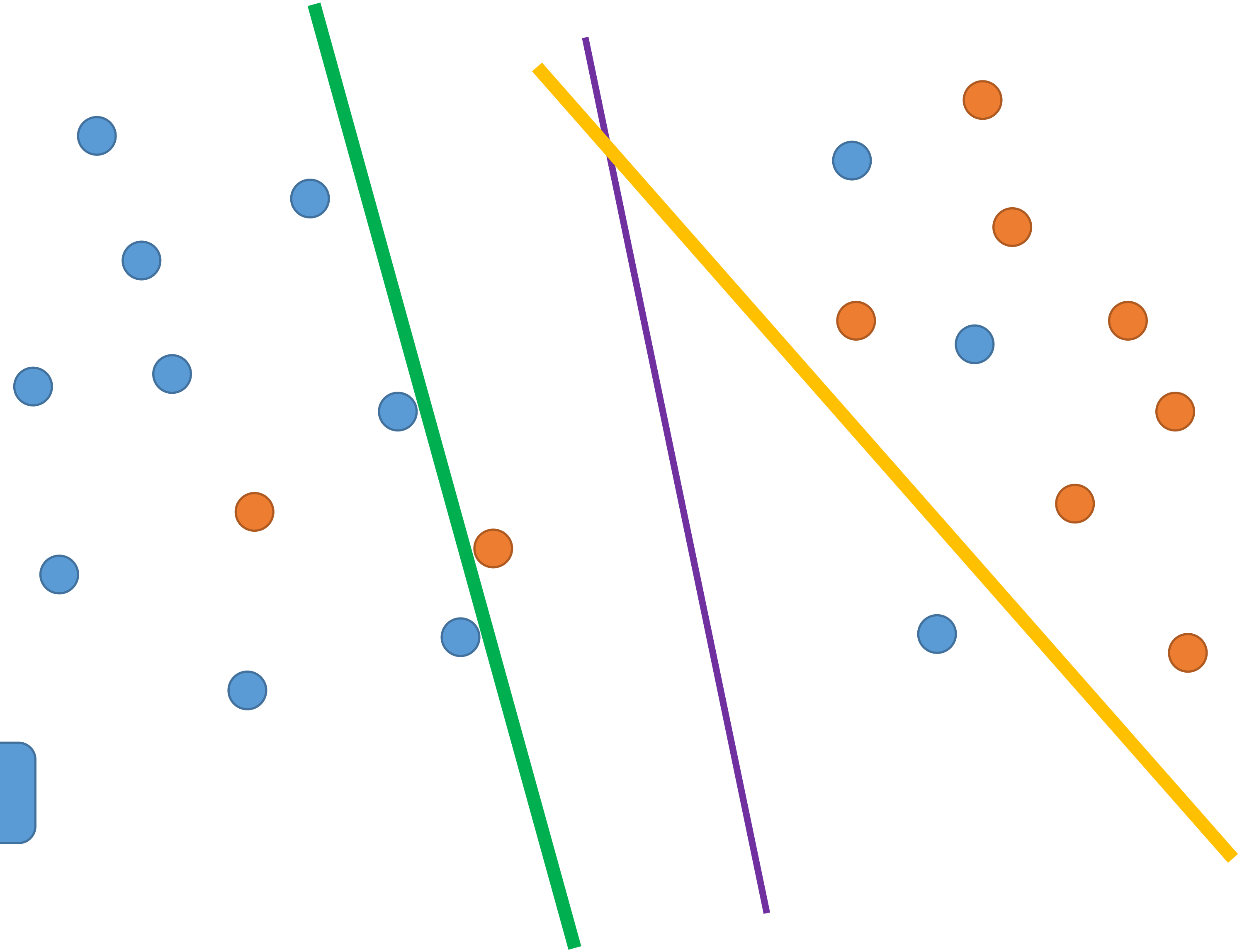
$$\begin{cases} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min\limits_{w, w_0, \xi_i} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0) \geq 1 - \xi_i \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Линейно неразделимый случай



Маленькое C

Линейно неразделимый случай



Большое C

Метод опорных векторов

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

- Объединим ограничения:

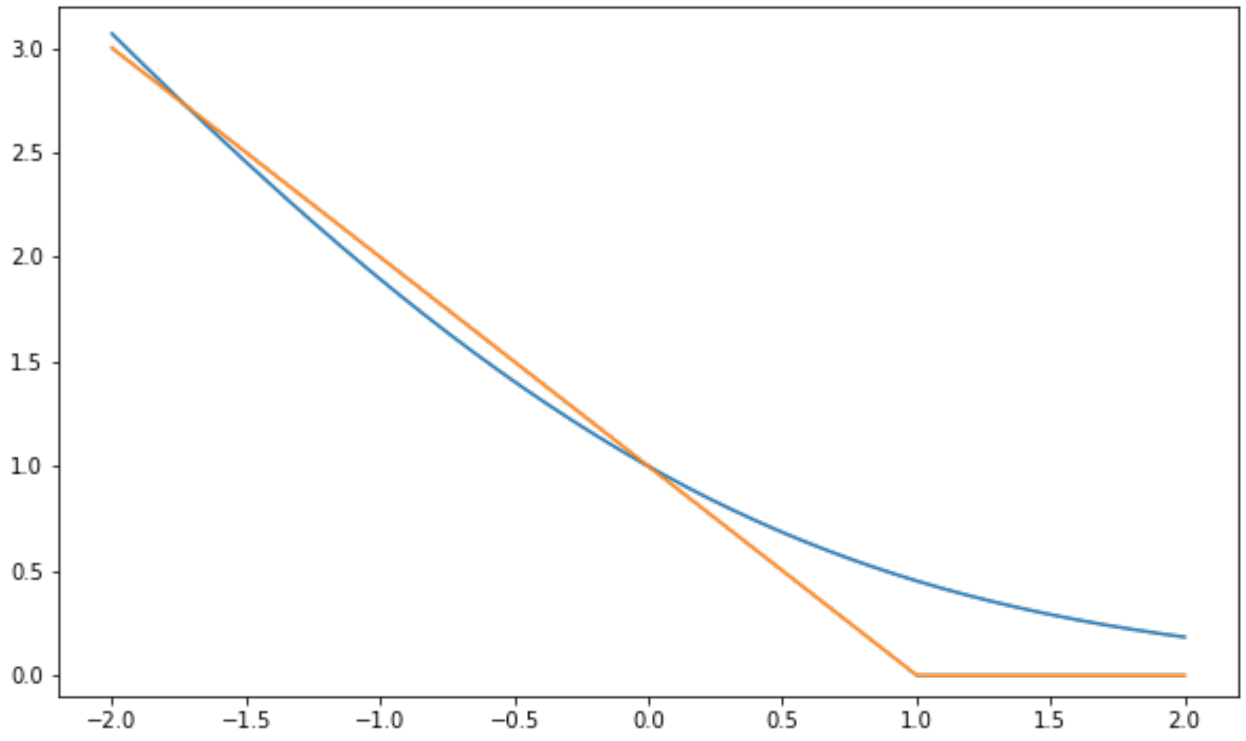
$$\xi_i \geq \max\big(0, 1 - y_i(\langle w, x_i\rangle + w_0)\big)$$

Метод опорных векторов

$$C \sum_{i=1}^{\ell} \max\bigl(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + w_0)\bigr) \;\; + \|w\|^2 \to \min_{w, w_0}$$

- Функция потерь (hinge loss) + регуляризация

Сравнение логистической регрессии и SVM



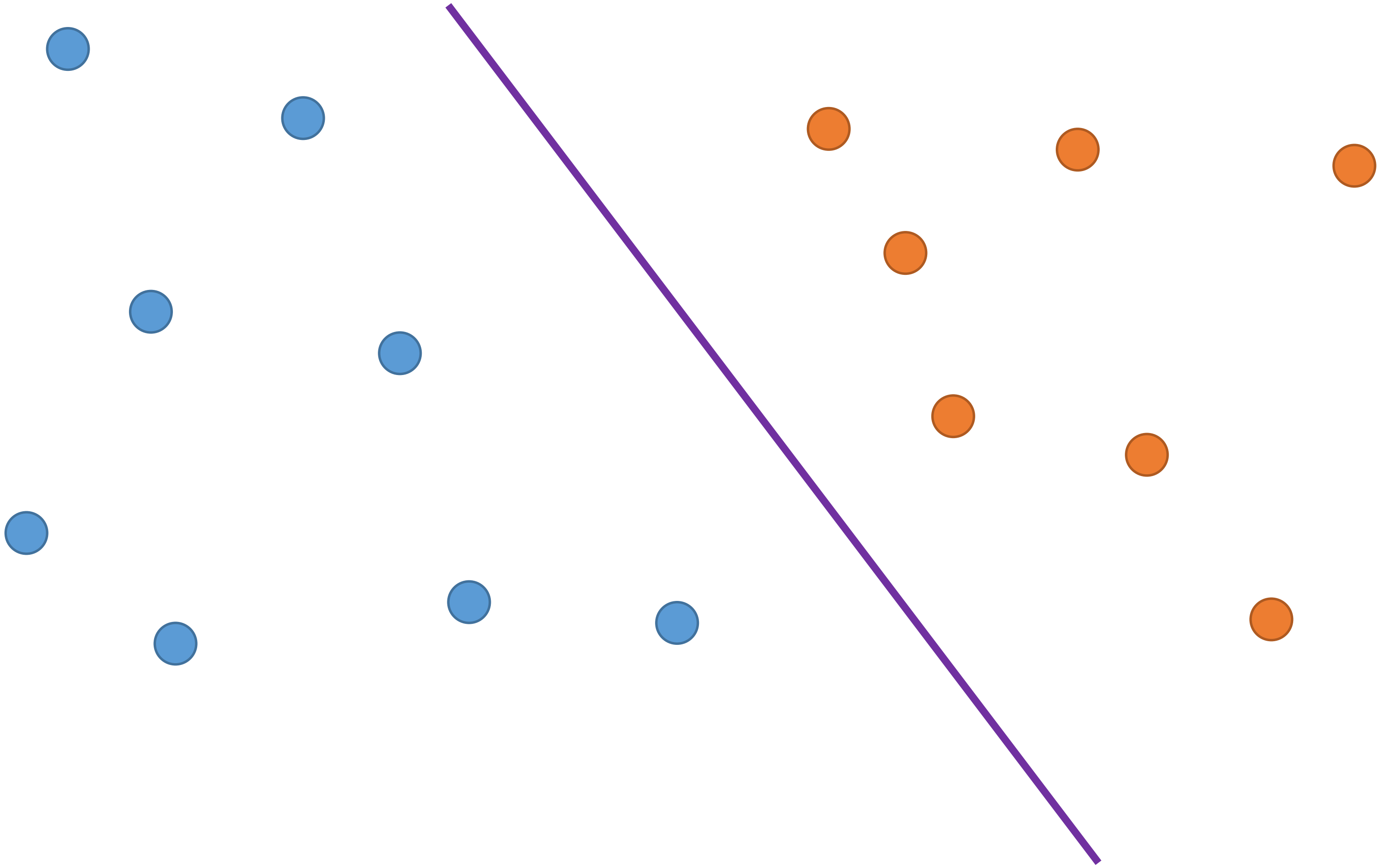
Резюме

- Логистическая регрессия — обучение модели так, что на объектах с близкими прогнозами эти прогнозы стремятся к доле положительных объектов

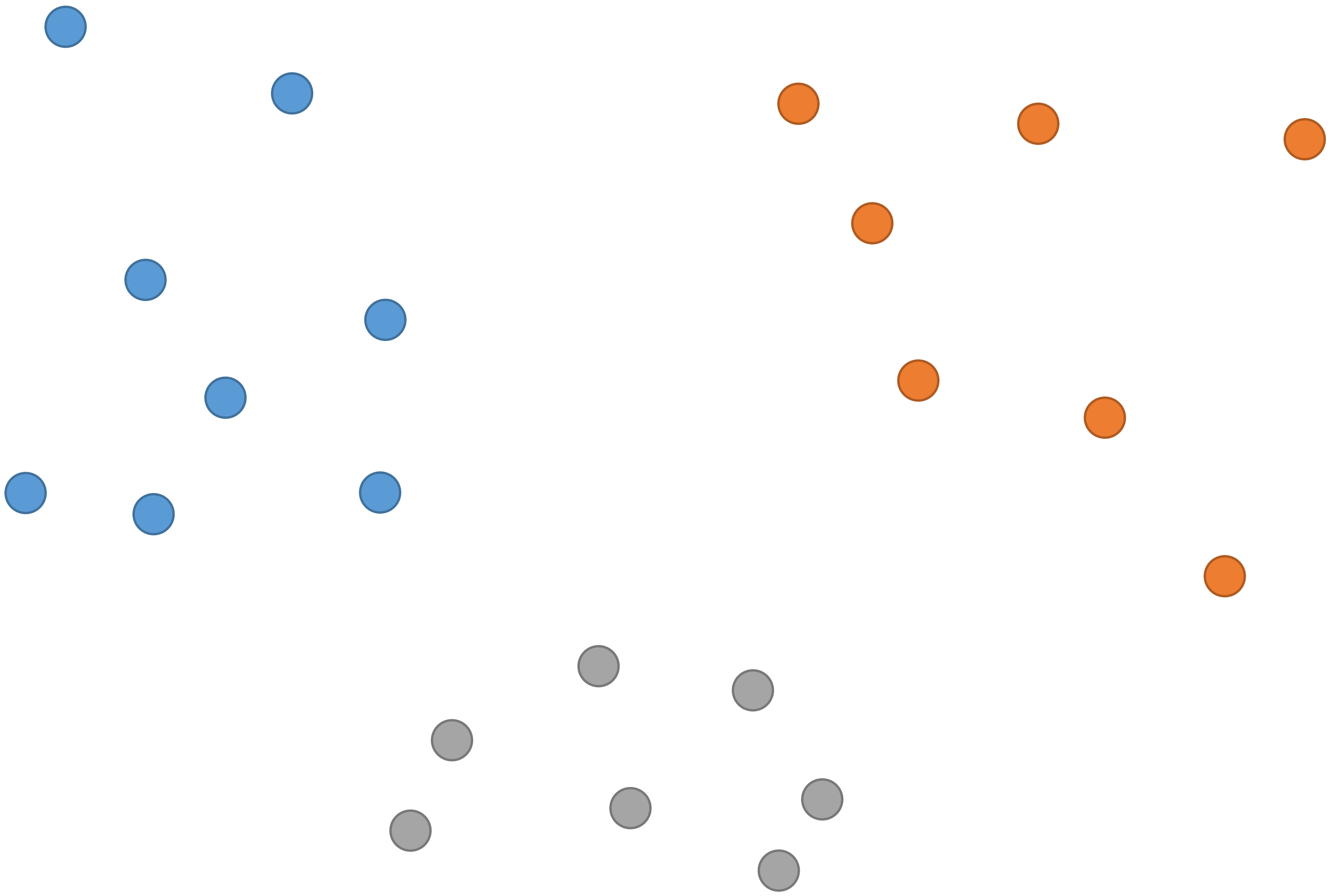
- Метод опорных векторов основан на идее максимизации отступа классификатора

Многоклассовая классификация

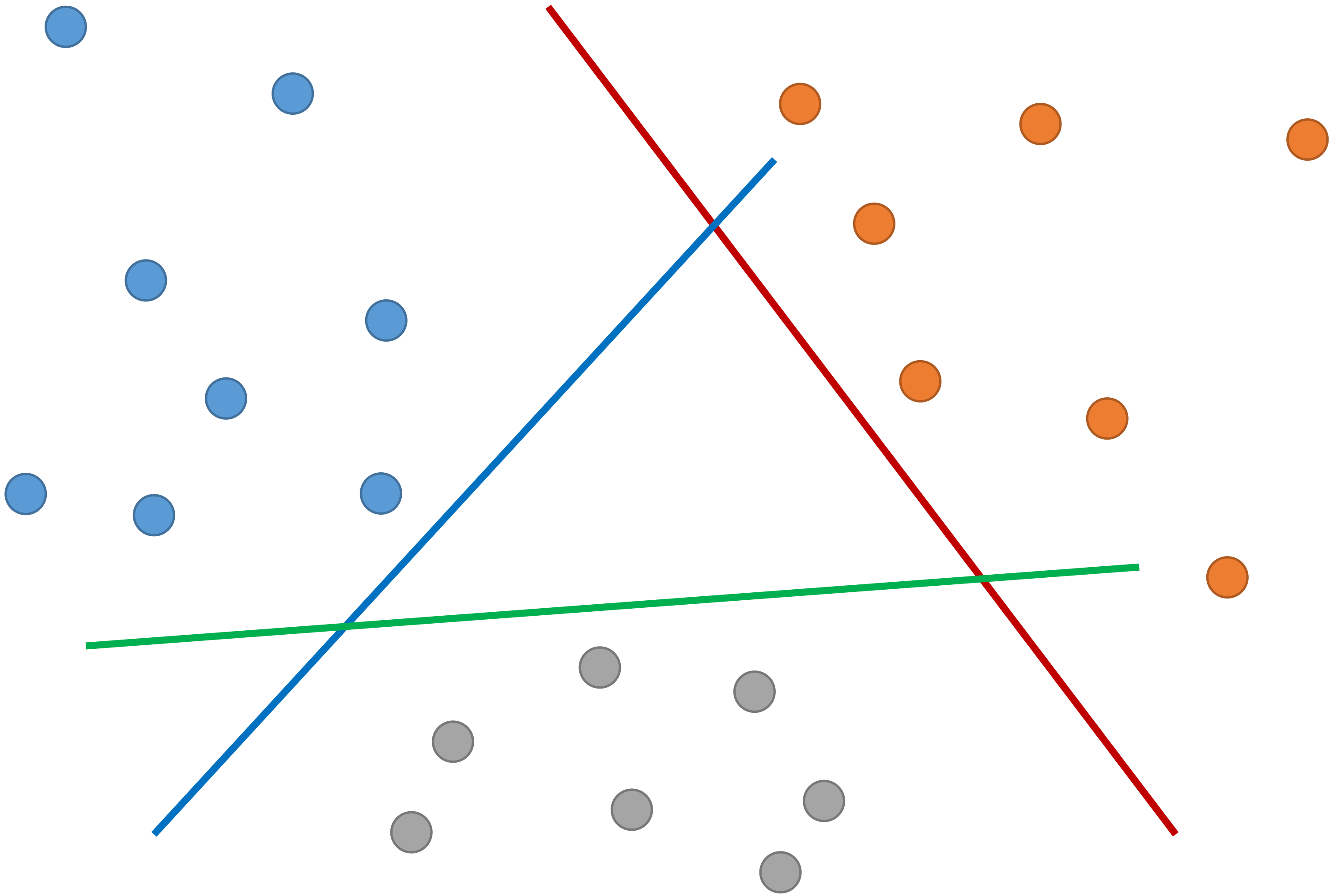
Бинарная классификация



Многоклассовая классификация



Многоклассовая классификация



One-vs-all

- K классов: $\mathbb{Y} = \{1, \dots, K\}$
- $X_k = (x_i, [y_i = k])_{i=1}^{\ell}$
- Обучаем $a_k(x)$ на X_k, $k = 1, \dots, K$
- $a_k(x)$ должен выдавать оценки принадлежности классу (например, $\langle w, x \rangle$ или $\sigma(\langle w, x \rangle)$)
- Итоговая модель:

$$a(x) = \arg \max_{\mathrm{k=1,\dots K}} a_k(x)$$

One-vs-all

- Модель $a_k(x)$ при обучении не знает, что её выходы будут сравнивать с выходами других моделей

- Нужно обучать K моделей

All-vs-all

- $X_{km} = \{(x_i, y_i) \in X \mid y_i = k \text{ или } y_i = m\}$
- Обучаем $a_{km}(x)$ на X_{km}
- Итоговая модель:

$$a(x) = \arg\max_{k \in \{1,\dots,K\}} \sum_{m=1}^{K} [a_{km}(x) = k]$$

All-vs-all

- Нужно обучать порядка K^2 моделей
- Зато каждую обучаем на небольшой выборке

Доля ошибок

- Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

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

- Подходит для многоклассового случая!

Общие подходы

Микро-усреднение	Макро-усреднение
Вычисляем $\mathrm{TP}_k, \mathrm{FP}_k, \mathrm{FN}_k, \mathrm{TN}_k$ для каждого класса	Вычисляем нужную метрику для каждого класса (например, $\mathrm{precision}_1, \dots, \mathrm{precision}_K$)
Суммируем по всем классам, получаем $\mathrm{TP}, \mathrm{FP}, \mathrm{FN}, \mathrm{TN}$	Усредняем по всем классам
Подставляем их в формулу для precision/recall/…	
Крупные классы вносят больший вклад	Игнорирует размеры классов

Как делать нелинейные модели

Предсказание стоимости квартиры

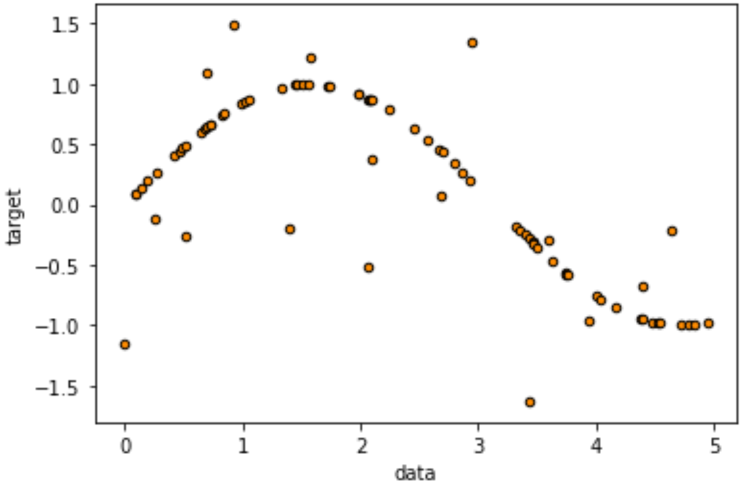
- Признаки: площадь, этаж, расстояние до метро и т.д.
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \cdots$$

- Вряд ли признаки линейно связаны с целевой переменной



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+w_3 * (\text{расстояние до метро}) + \cdots$$

- Вряд ли признаки не связаны между собой

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2$$
$$+ w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2$$
$$+ w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \cdots$$

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2$$
$$+ w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2$$
$$+ w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \cdots$$

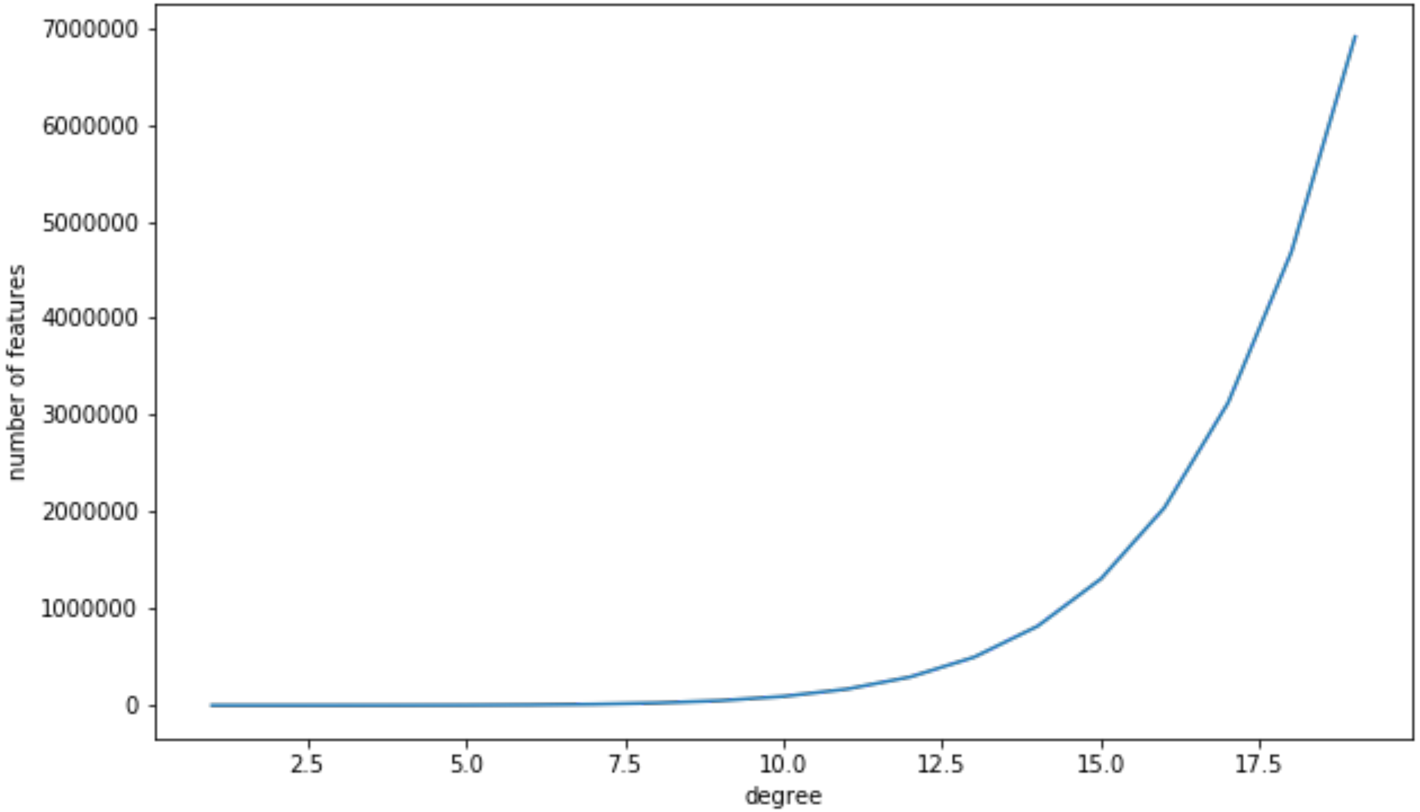
- Может быть сложно интерпретировать модель
- Что такое $(\text{расстояние до метро}) * (\text{этаж})^2$?

Предсказание стоимости квартиры

- Допустим, изначально имеем 10 признаков
- Полиномиальных степени 2: 55
- Полиномиальных степени 3: 220
- Полиномиальных степени 4: 715

Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными признаками:



Предсказание стоимости квартиры

- Линейная модель с полиномиальными бинаризованными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * [30 < \text{площадь} < 50]$$

$$+w_2 * [50 < \text{площадь} < 80] + \cdots$$

$$+w_{20} * [2 < \text{этаж} < 5] + \cdots$$

$$+w_{100} * [30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5] + \cdots$$

- Признаки интерпретируются куда лучше: $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][100 < \text{расстояние до метро} < 500]$
- Но их станет ещё больше!

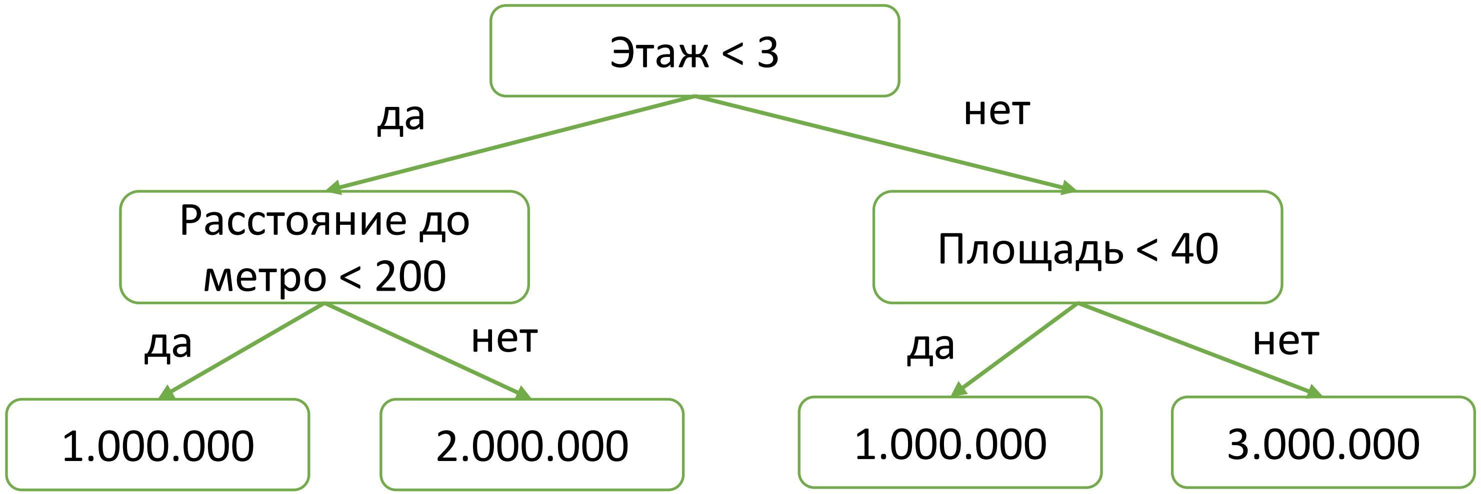
Решающие деревья

Логические правила

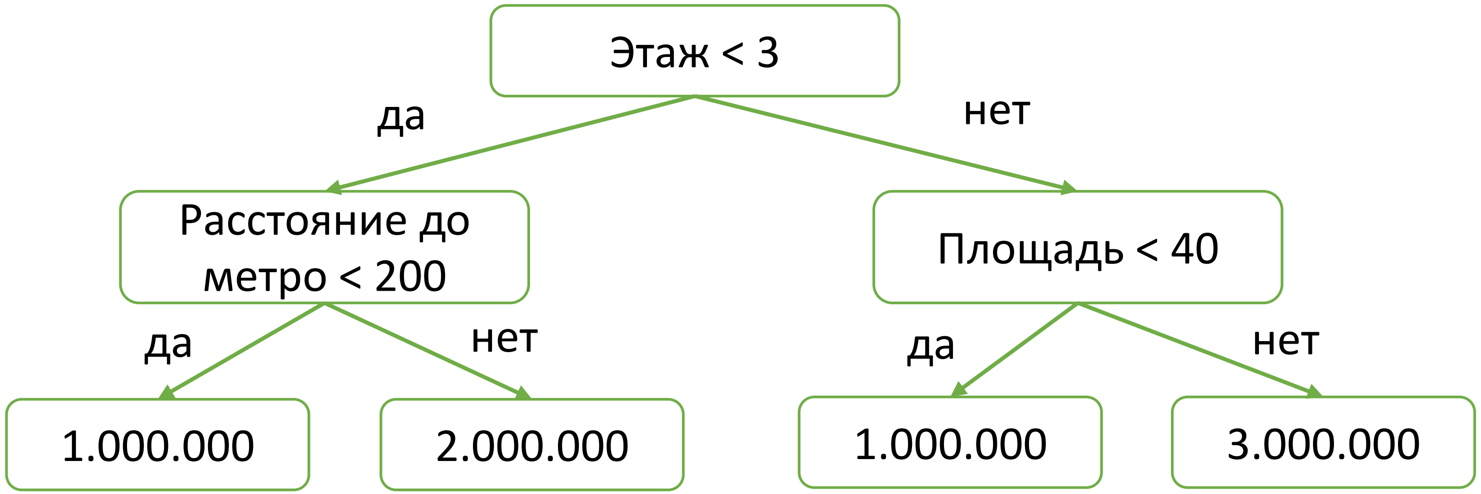
- $[30 < \text{площадь} < 50][2 < \text{этаж} < 5][500 < \text{расстояние до метро} < 1000]$
- Легко объяснить, как работают
- Находят нелинейные закономерности

- Нужно как-то искать хорошие логические правила
- Нужно уметь составлять модели из логических правил

Решающее дерево

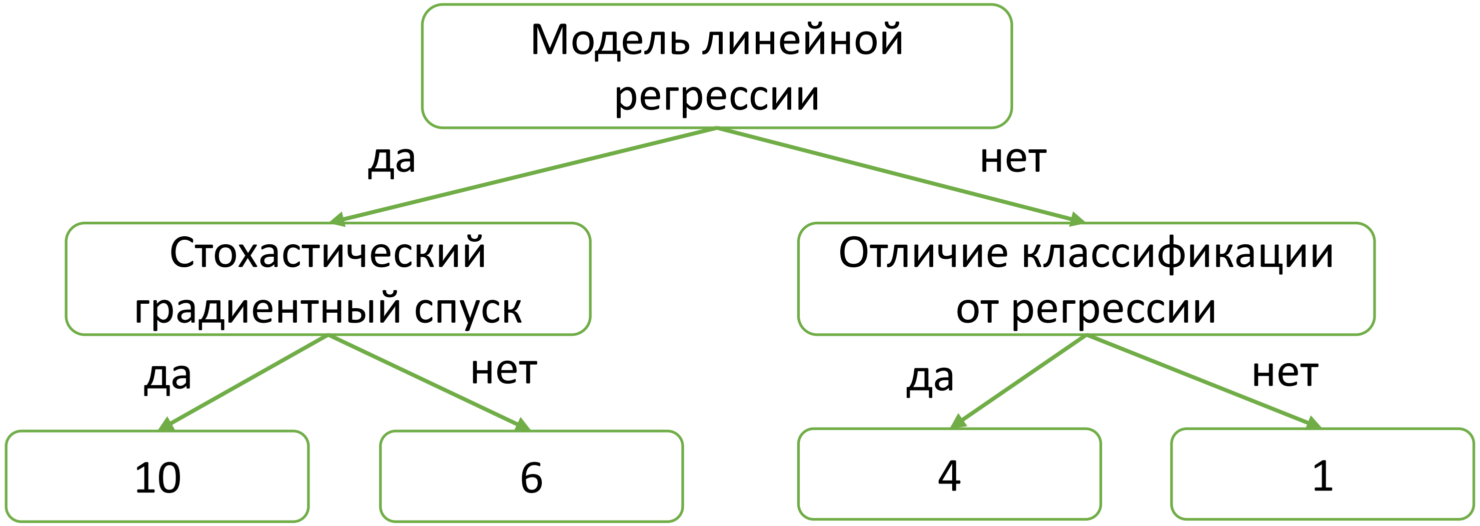


Решающее дерево

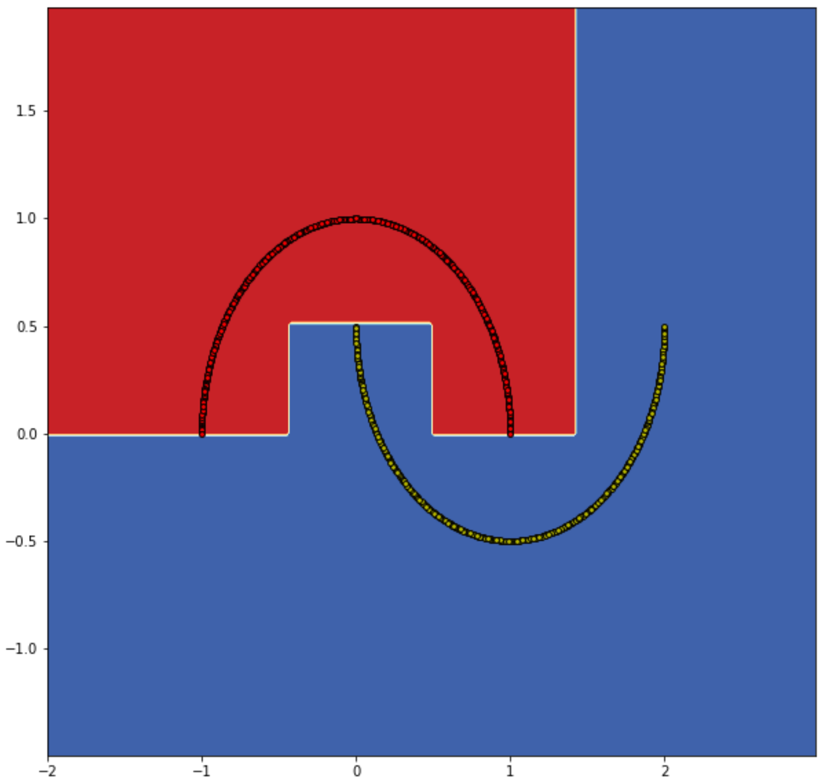


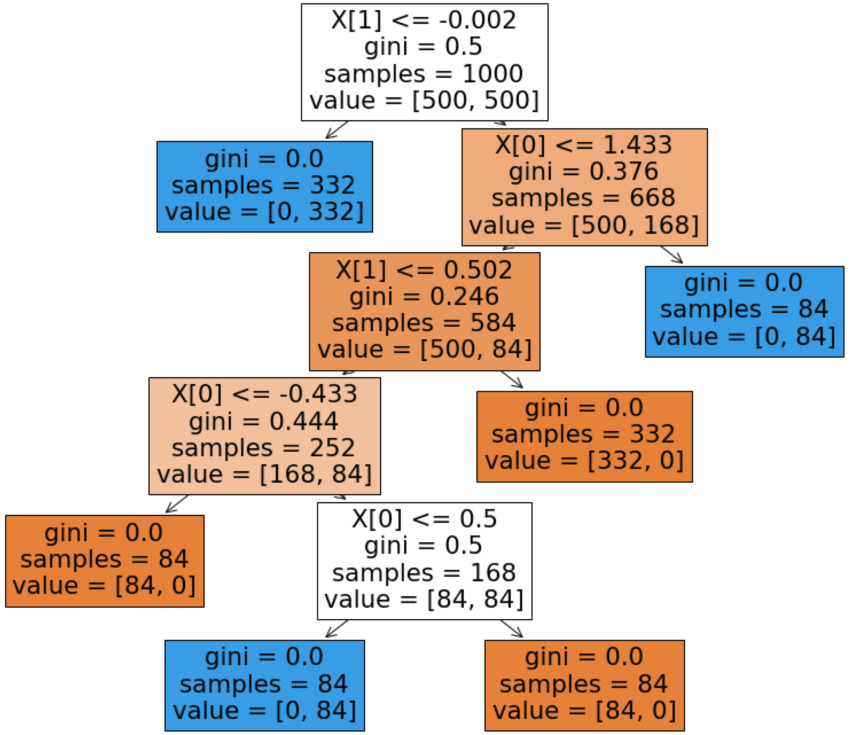
- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $c \in \mathbb{Y}$

Решающее дерево

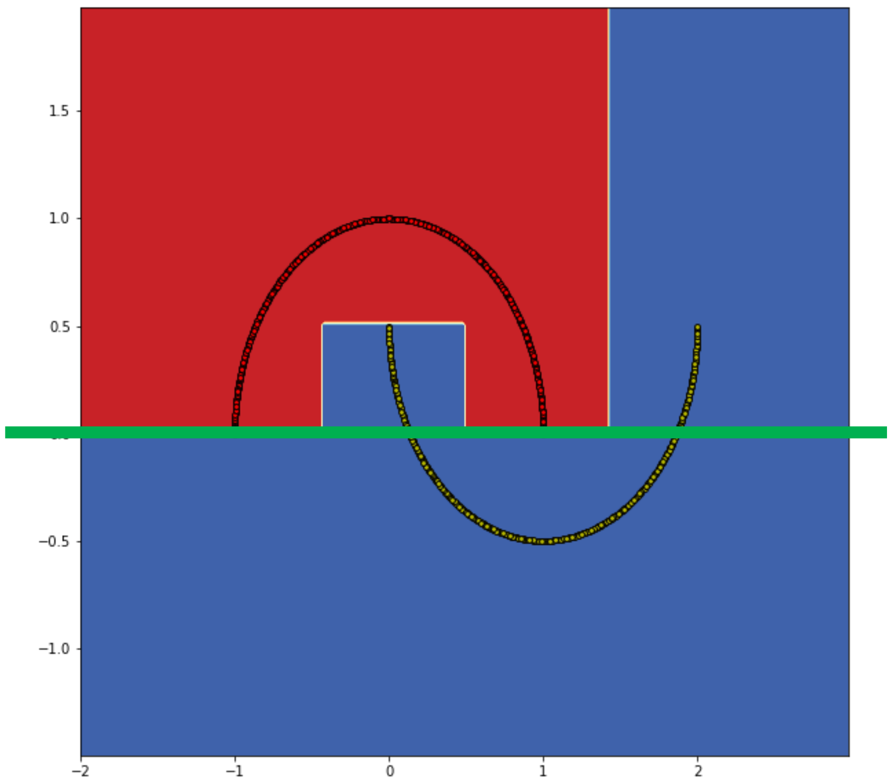


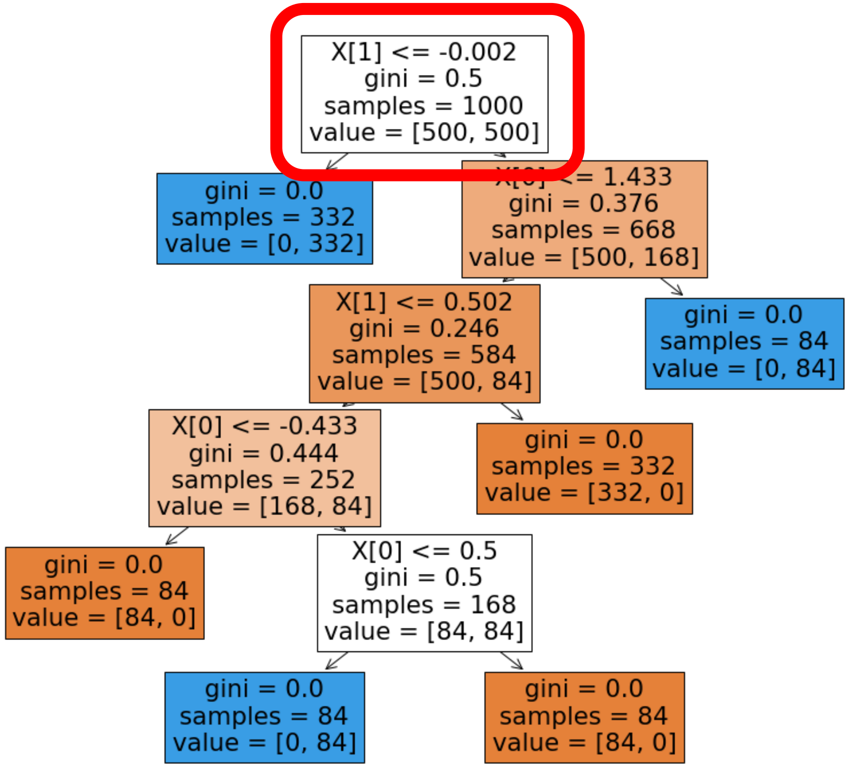
Решающее дерево



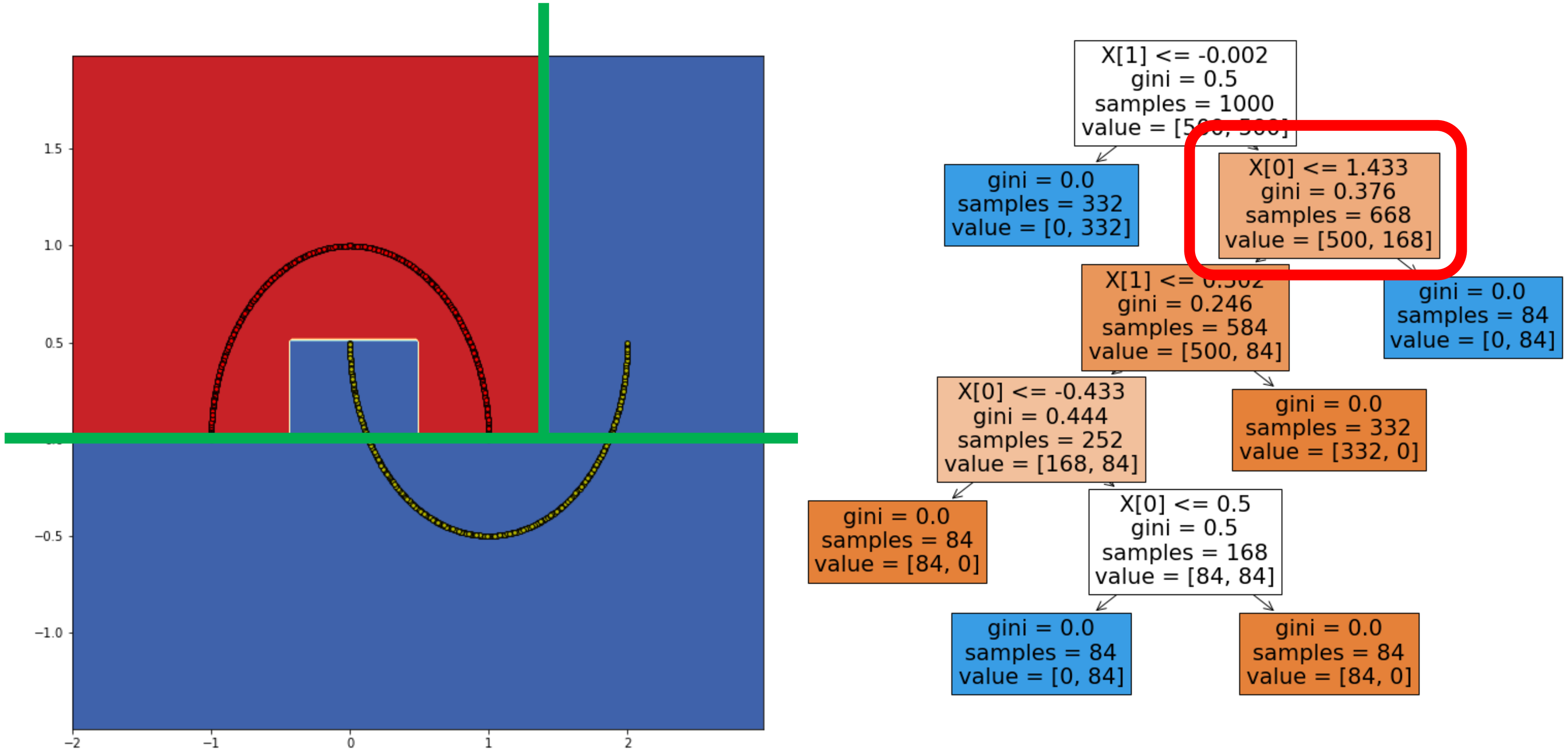


Решающее дерево

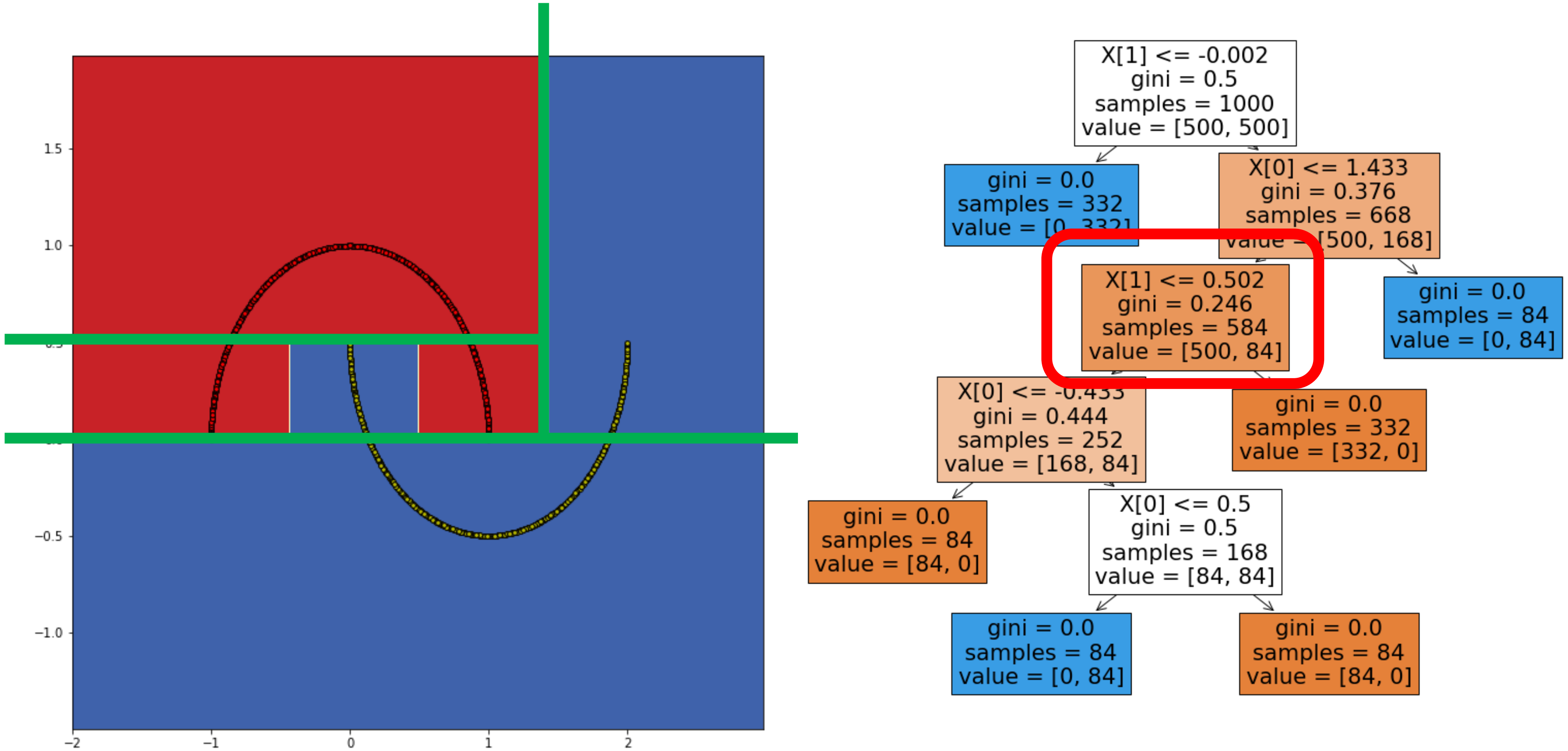




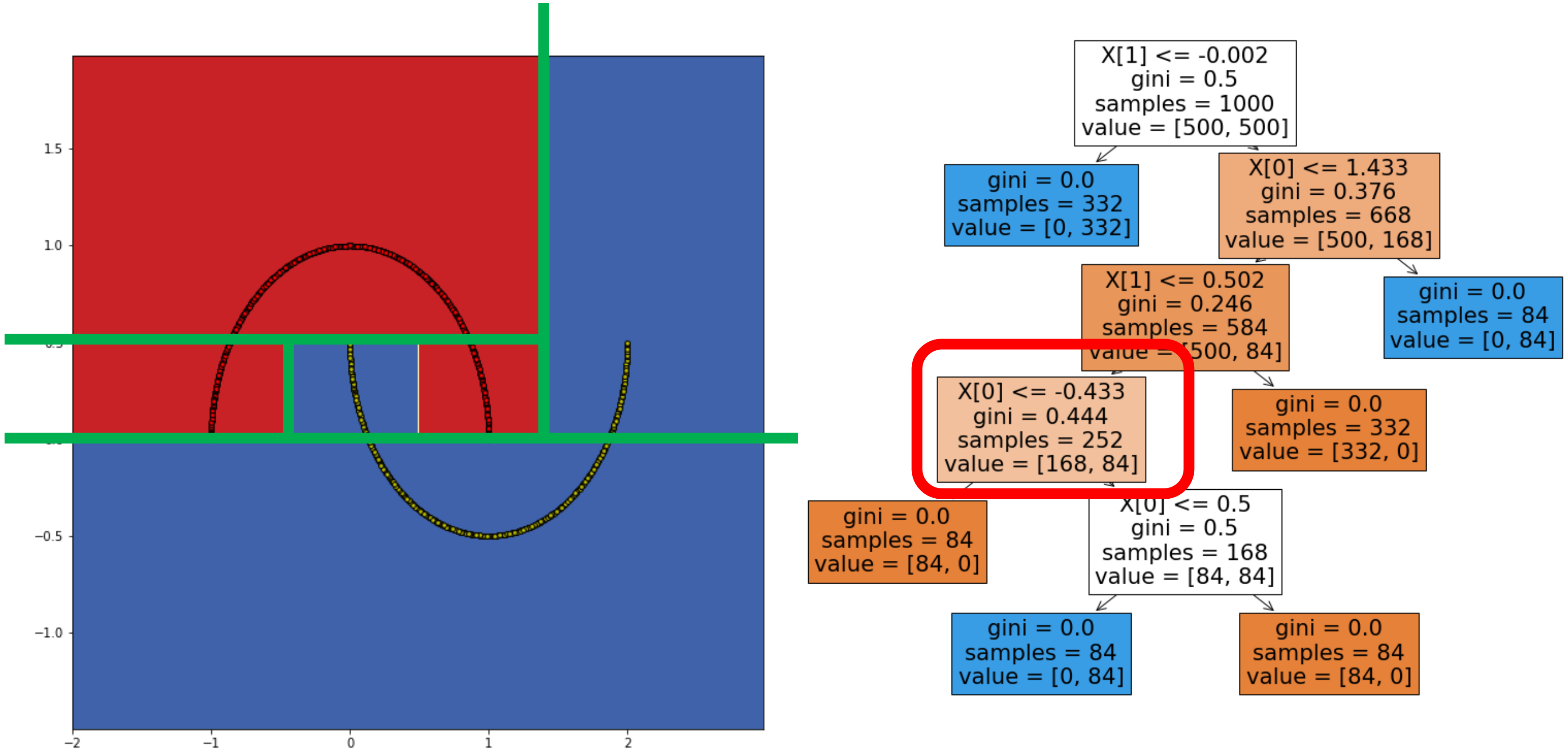
Решающее дерево



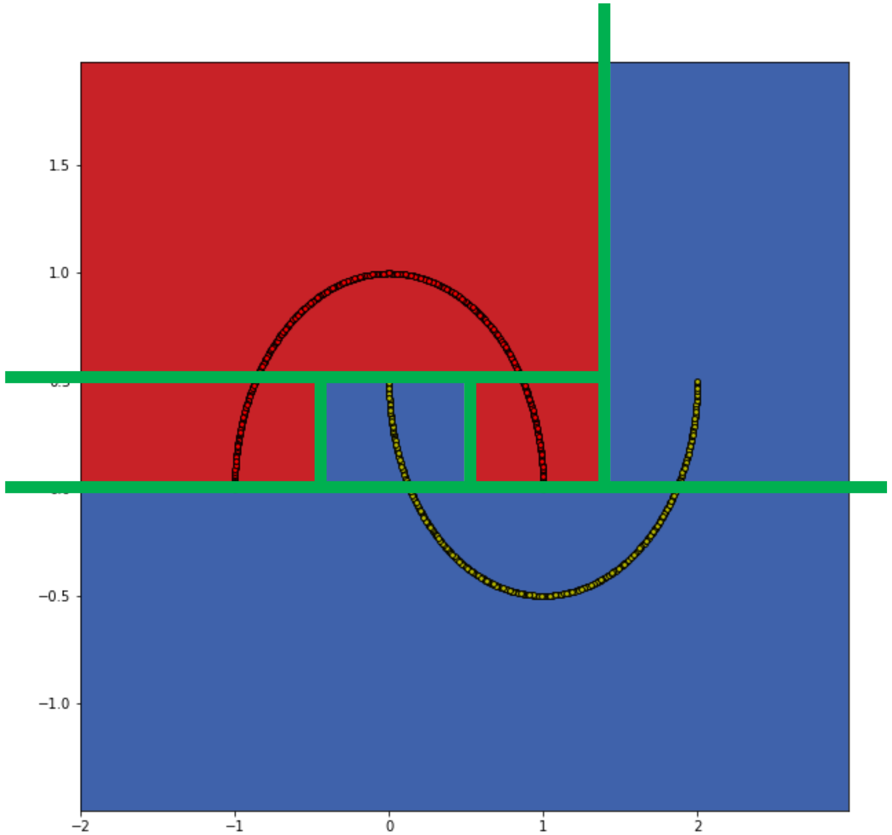
Решающее дерево

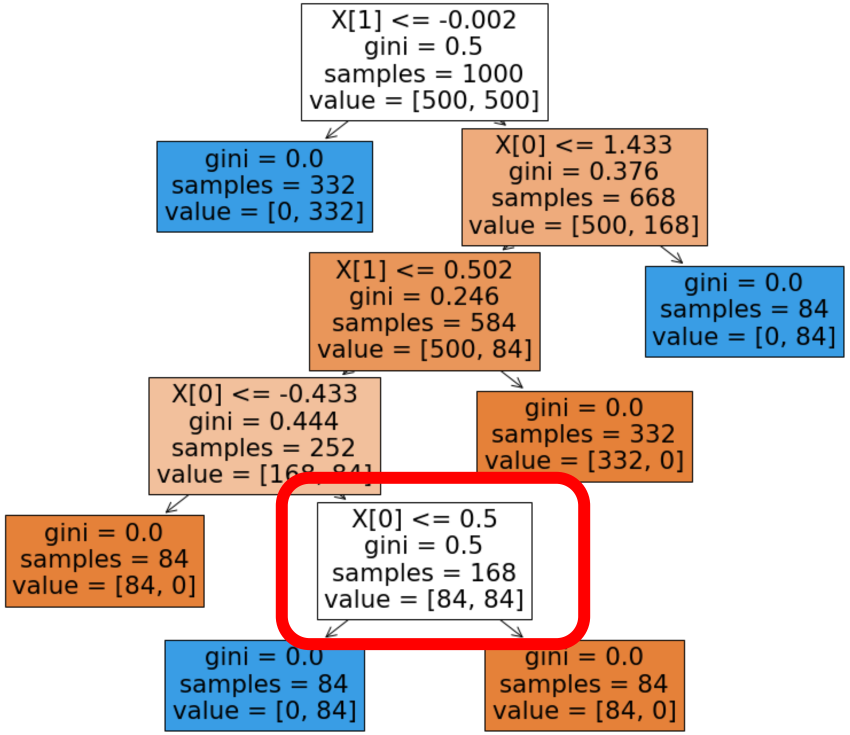


Решающее дерево

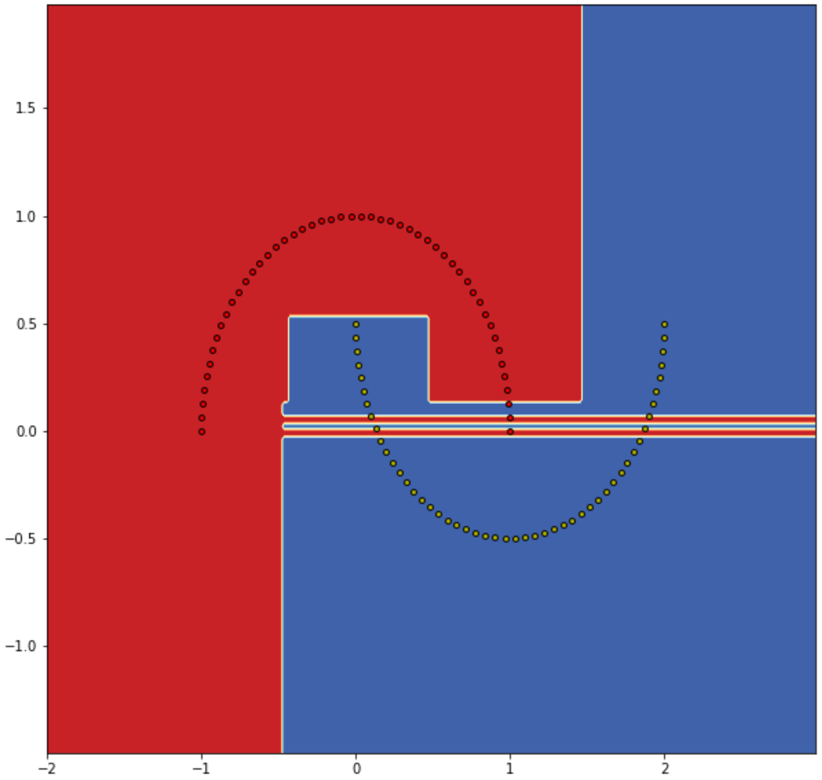


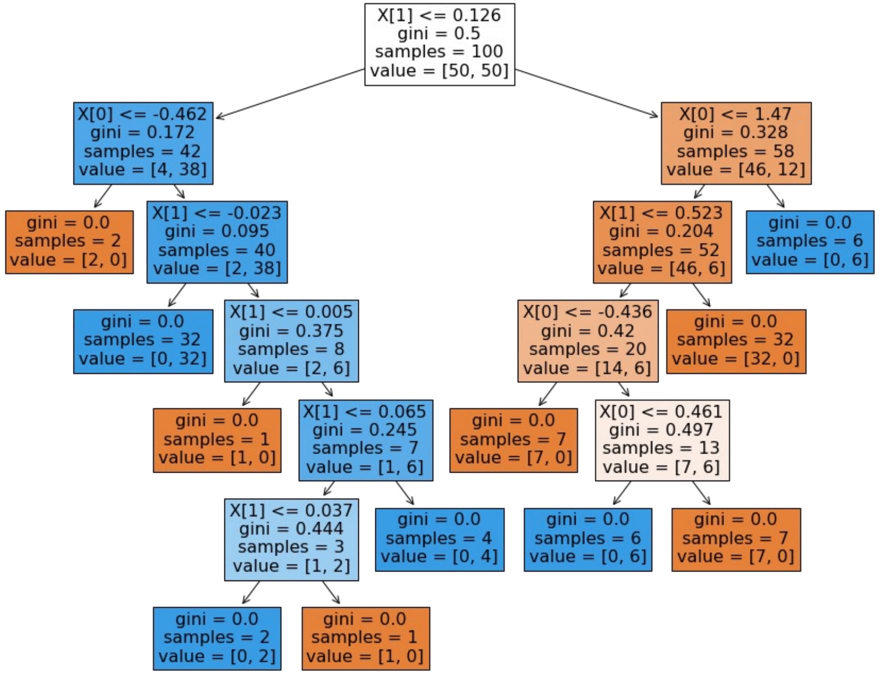
Решающее дерево





Решающее дерево

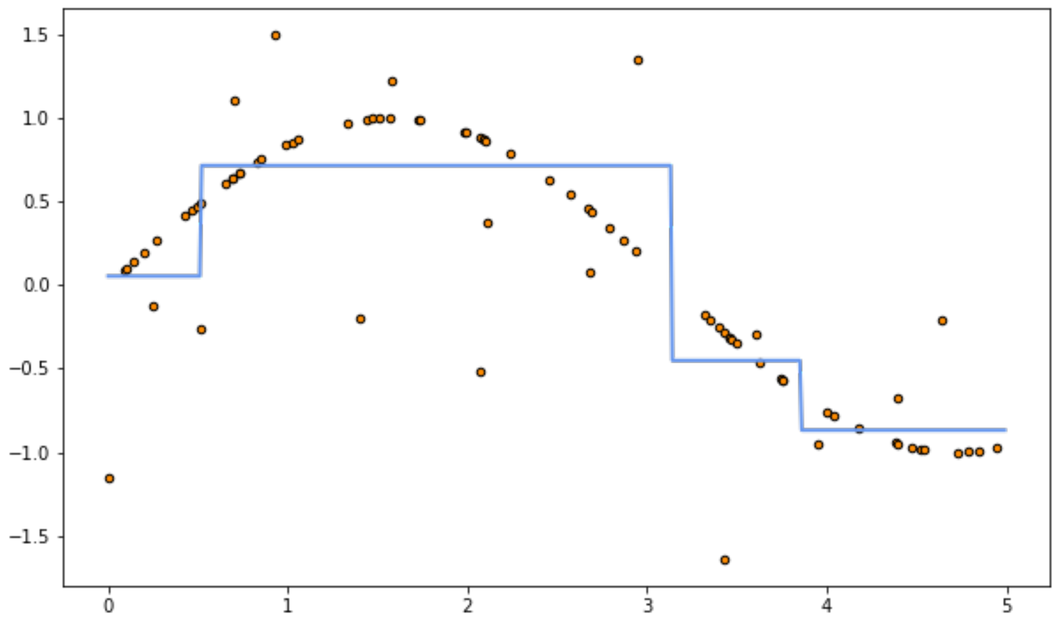


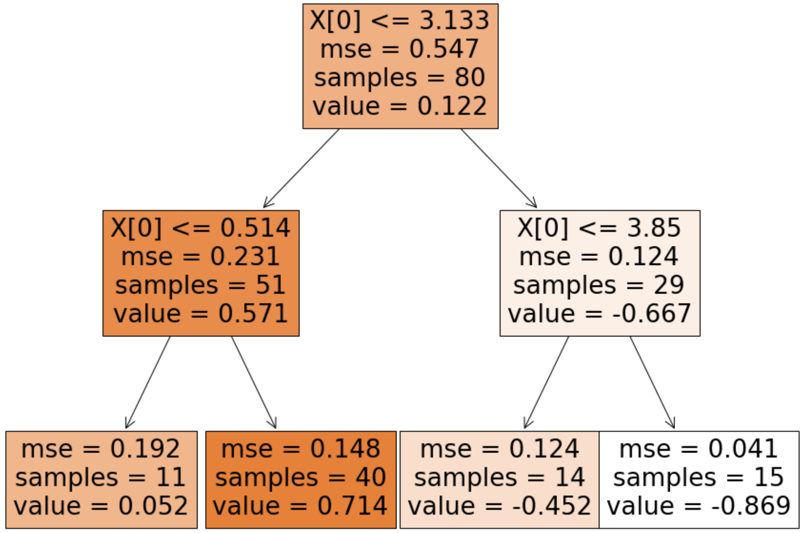


Сложность дерева

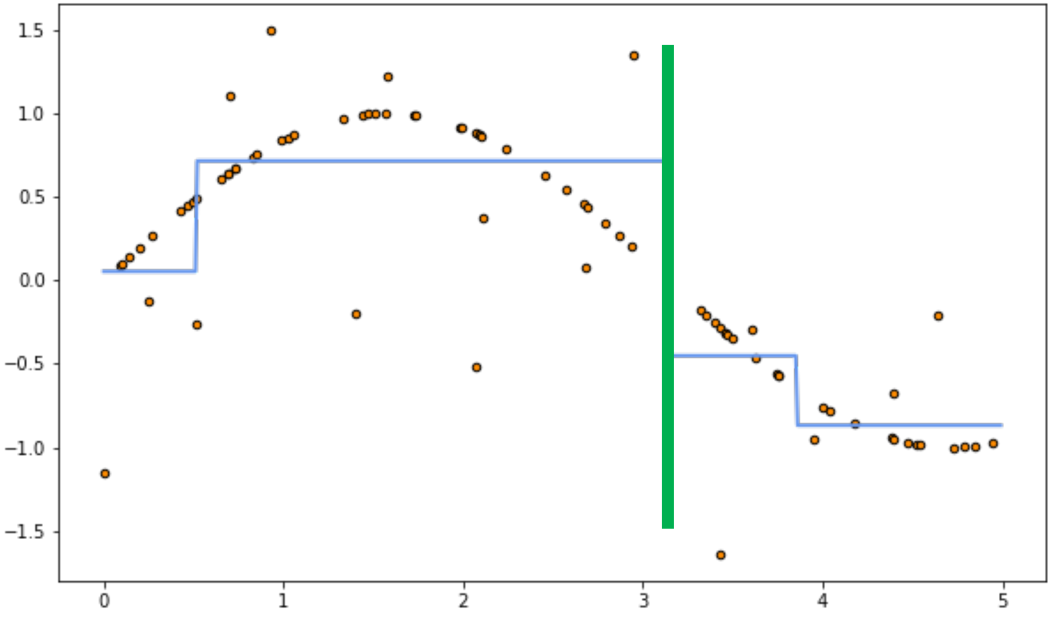
- Решающее дерево можно строить до тех пор, пока каждый лист не будет соответствовать ровно одному объекту
- Деревом можно идеально разделить любую выборку!
- Если только нет объектов с одинаковыми признаками, но разными ответами

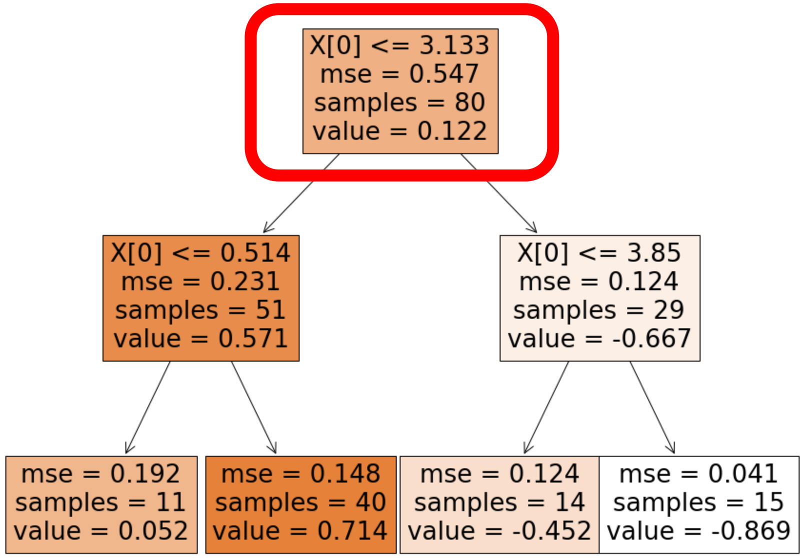
Решающее дерево для регрессии



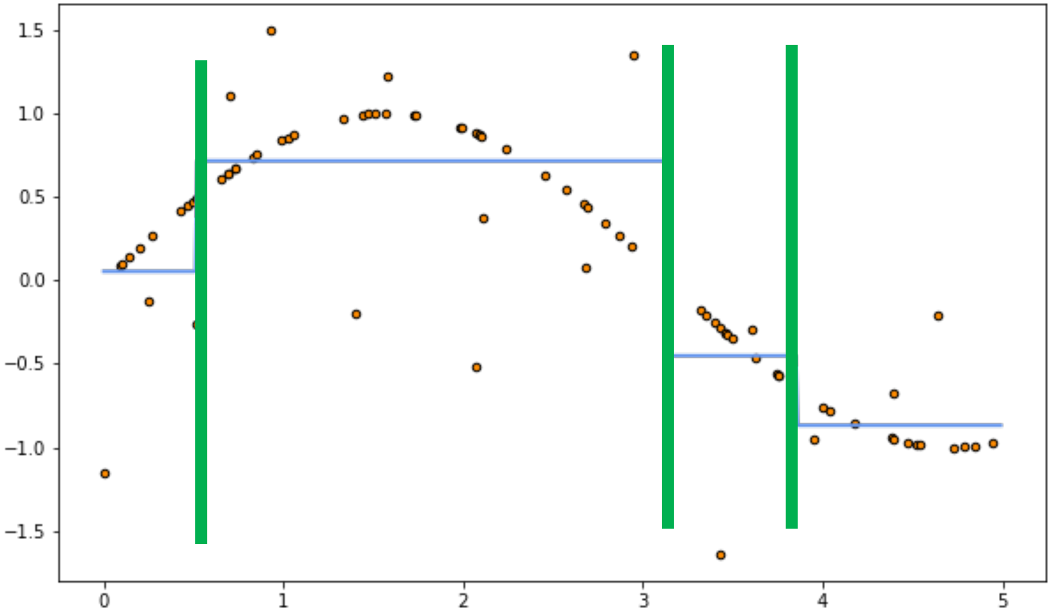


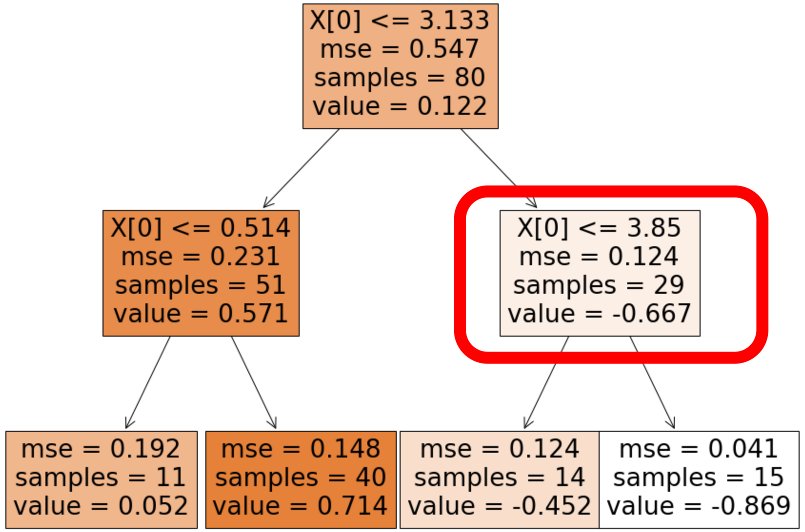
Решающее дерево для регрессии



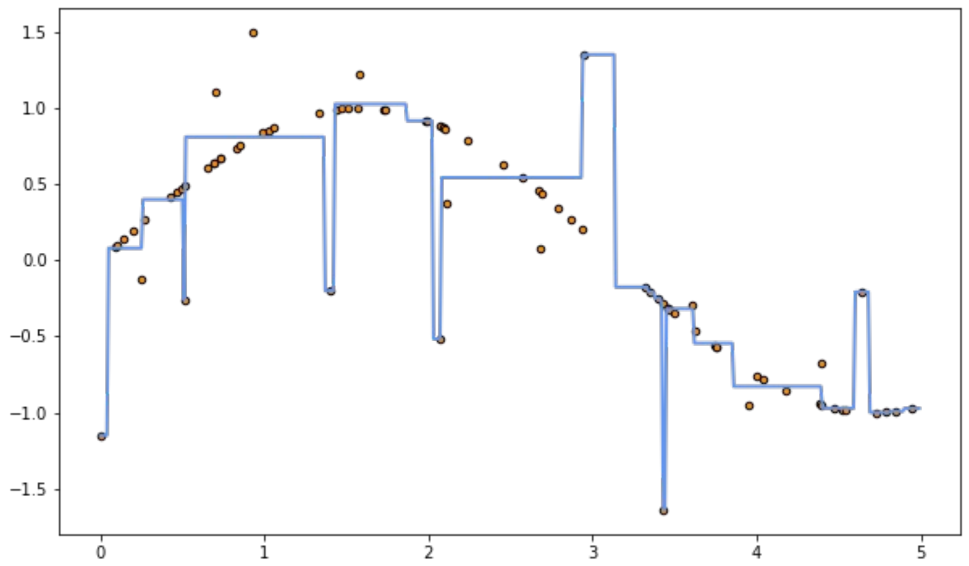


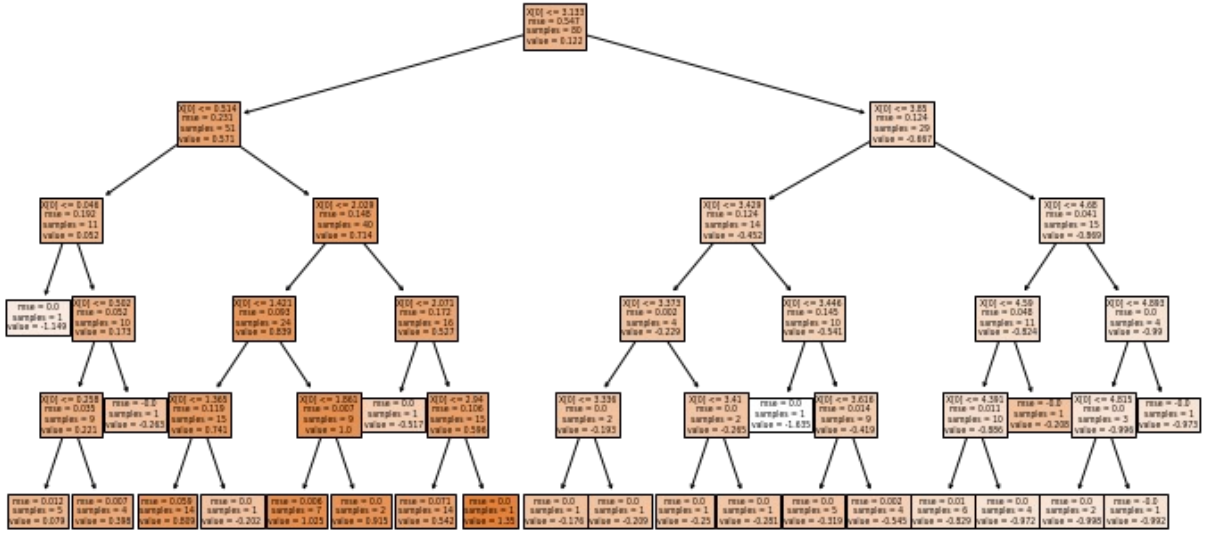
Решающее дерево для регрессии



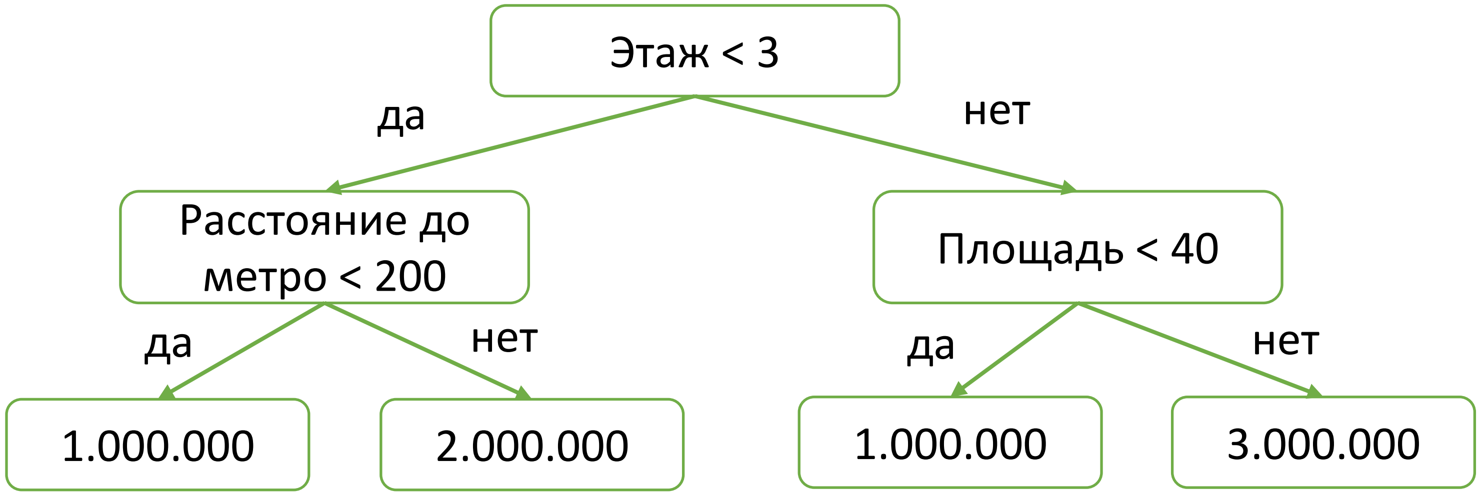


Решающее дерево для регрессии





Решающее дерево



- Внутренние вершины: предикаты $[x_j < t]$
- Листья: прогнозы $c \in \mathbb{Y}$

Предикаты

- Порог на признак $[x_j < t]$ — не единственный вариант
- Предикат с линейной моделью: $[\langle w, x \rangle < t]$
- Предикат с метрикой: $[\rho(x, x_0) < t]$
- И много других вариантов
- Но даже с простейшим предикатом можно строить очень сложные модели

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Регрессия:

$$c_v = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} y_i$$

- Классификация:

$$c_v = \arg\max_{k \in \mathbb{Y}} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

Прогнозы в листьях

- Наш выбор: константные прогнозы $c_v \in \mathbb{Y}$
- Классификация и вероятности классов:

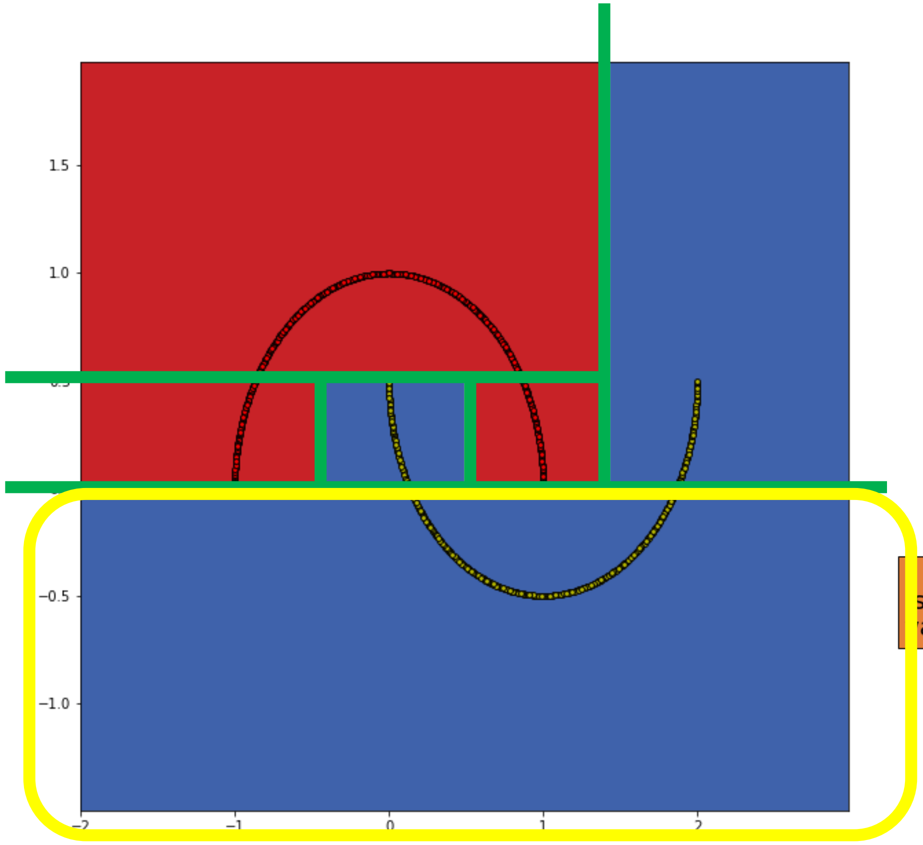
$$c_{vk} = \frac{1}{|R_v|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_v} [y_i = k]$$

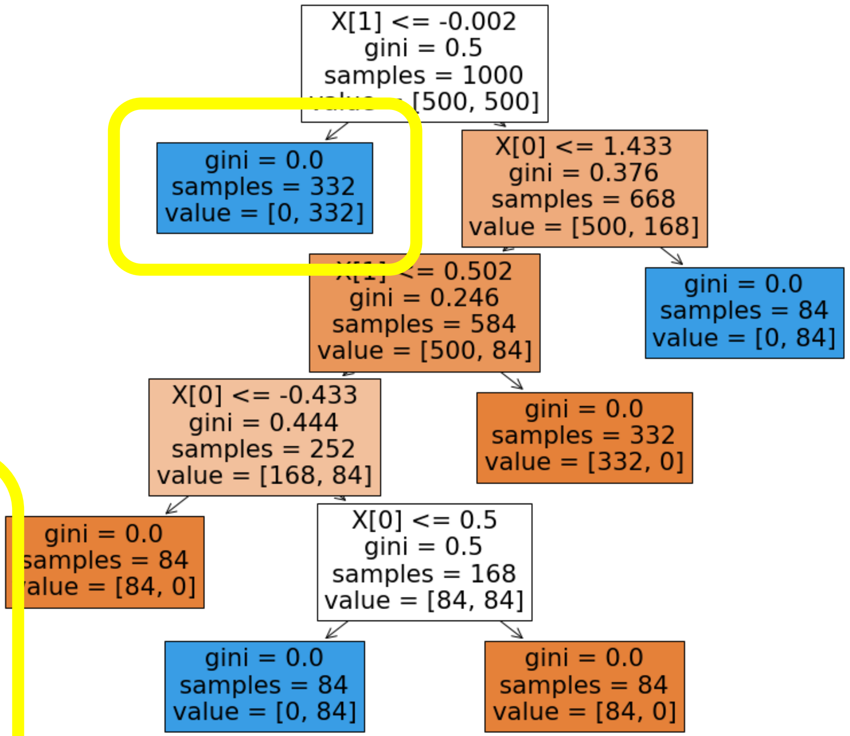
Прогнозы в листьях

- Можно усложнять листья
- Например:

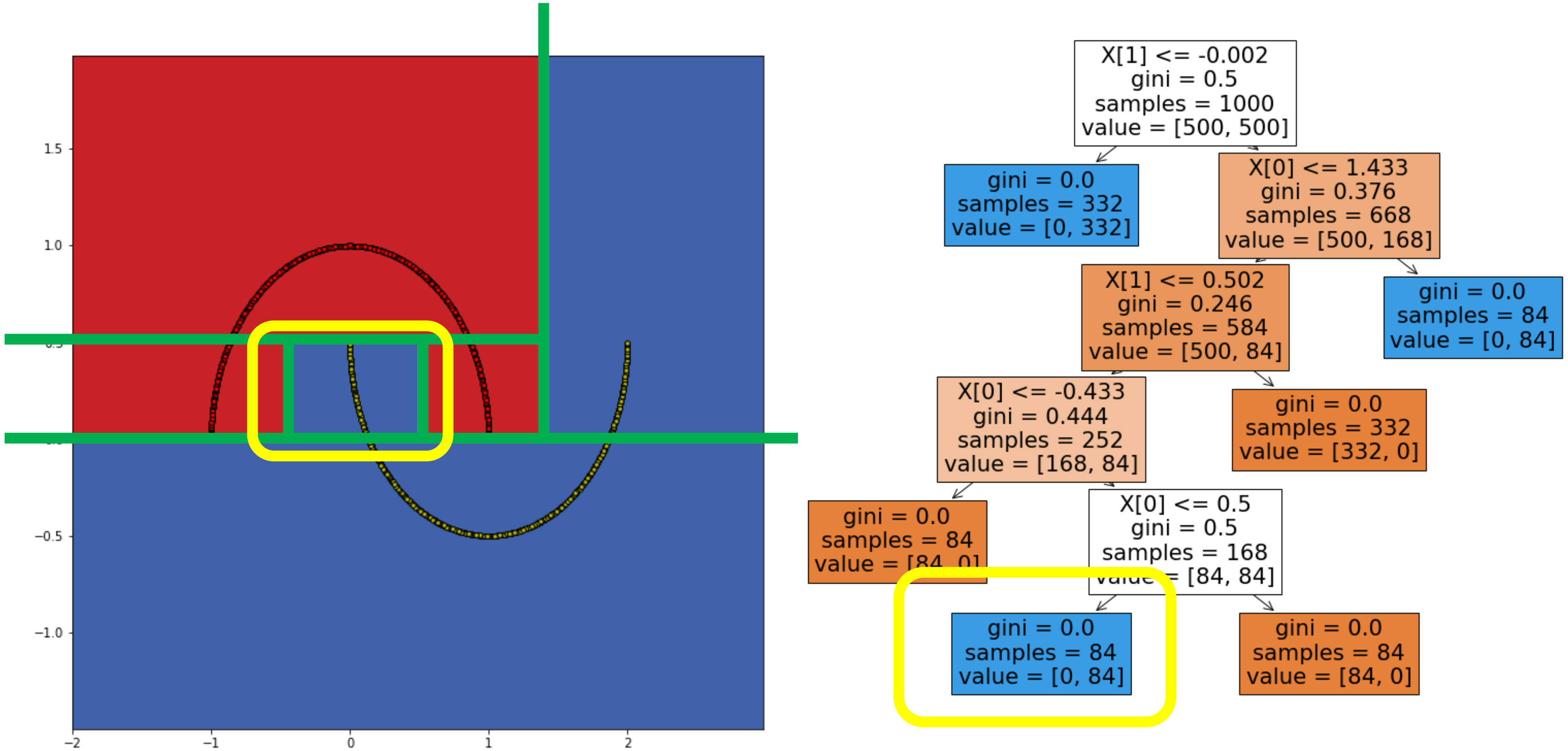
$$c_v(x) = \langle w_v, x \rangle$$

Решающее дерево





Решающее дерево



Формула для дерева

- Дерево разбивает признаковое пространство на области $R_1, \dots, R_J$
- Каждая область R_j соответствует листу
- В области R_j прогноз c_j константный

$$a(x) = \sum_{j=1}^{J} c_j \left[x \in R_j\right]$$

Формула для дерева

$$a(x) = \sum_{j=1}^{J} c_j \left[x \in R_j\right]$$

- Решающее дерево находит хорошие новые признаки

- Над этими признаками подбирает линейную модель