

Линейные методы классификации и регрессии: метод стохастического градиента

Воронцов Константин Вячеславович
vokov@forecsys.ru

<http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov>

Этот курс доступен на странице вики-ресурса

<http://www.MachineLearning.ru/wiki>
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: <http://shad.yandex.ru/lectures>

- 1 Метод стохастического градиента
 - Минимизация эмпирического риска
 - Линейный классификатор
 - Метод стохастического градиента
- 2 Эвристики для метода стохастического градиента
 - Инициализация весов и порядок объектов
 - Выбор величины градиентного шага
 - Проблема переобучения, метод сокращения весов
- 3 Вероятностные функции потерь
 - Вероятностная модель классификации
 - Логистическая регрессия
 - Пример. Задача кредитного scoringа

Обучение регрессии — это оптимизация

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

- 1 Модель регрессии — линейная:

$$a(x, w) = \langle x, w \rangle = \sum_{j=1}^n w_j f_j(x), \quad w \in \mathbb{R}^n$$

- 2 Функция потерь — квадратичная:

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

- 3 Метод обучения — метод наименьших квадратов:

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

- 4 Проверка по тестовой выборке $X^k = (\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)_{i=1}^k$:

$$\bar{Q}(w) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (a(\tilde{x}_i, w) - \tilde{y}_i)^2$$

Обучение классификации — тоже оптимизация

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

- 1 Модель классификации — линейная:

$$a(x, w) = \text{sign}\langle x, w \rangle = \text{sign} \sum_{j=1}^n w_j f_j(x)$$

- 2 Функция потерь — бинарная или её аппроксимация:

$$\mathcal{L}(a, y) = [ay < 0] = [\langle x, w \rangle y < 0] \leq \mathcal{L}(\langle x, w \rangle y)$$

- 3 Метод обучения — минимизация эмпирического риска:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^\ell [\langle x_i, w \rangle y_i < 0] \leq \sum_{i=1}^\ell \mathcal{L}(\langle x_i, w \rangle y_i) \rightarrow \min_w$$

- 4 Проверка по тестовой выборке $X^k = (\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)_{i=1}^k$:

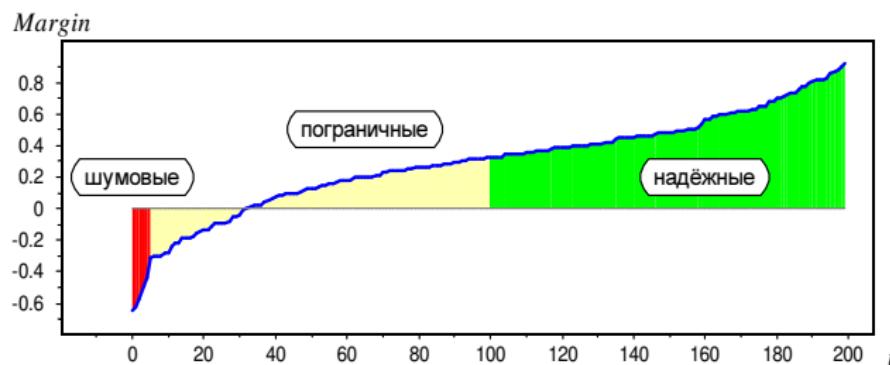
$$\bar{Q}(w) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k [\langle \tilde{x}_i, w \rangle \tilde{y}_i < 0]$$

Понятие отступа для разделяющих классификаторов

Разделяющий классификатор: $a(x, w) = \text{sign } g(x, w)$
 $g(x, w)$ — разделяющая (дискриминантная) функция
 $g(x, w) = 0$ — уравнение разделяющей поверхности

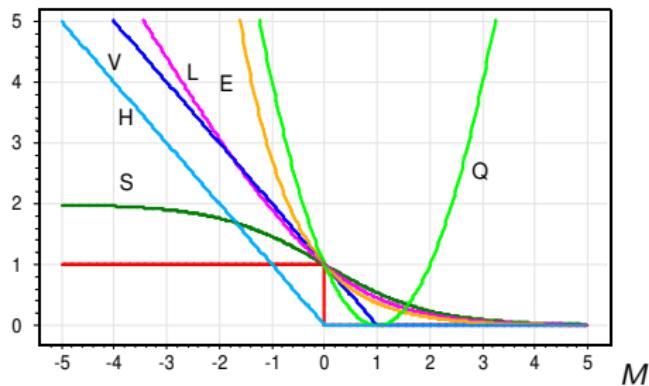
$M_i(w) = g(x_i, w)y_i$ — отступ (margin) объекта x_i ;
 $M_i(w) < 0 \iff$ алгоритм $a(x, w)$ ошибается на x_i

Ранжирование объектов по возрастанию отступов $M_i(w)$:



Непрерывные аппроксимации пороговой функции потерь

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



- | | |
|-----------------------------|-----------------------------------|
| $V(M) = (1 - M)_+$ | — 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

Линейная модель нейрона МакКаллока-Питтса [1943]:

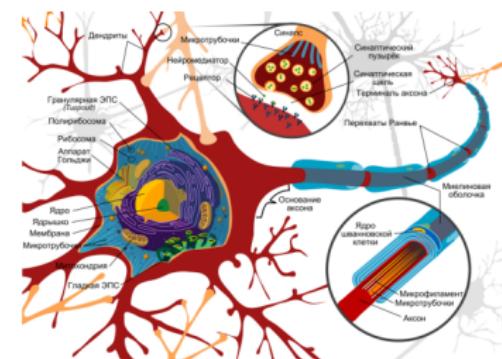
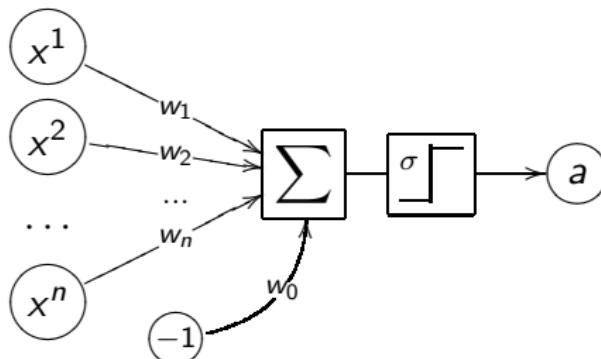
$$a(x, w) = \sigma(\langle w, x \rangle) = \sigma\left(\sum_{j=1}^n w_j f_j(x) - w_0\right),$$

$\sigma(z)$ — функция активации (например, sign),

w_j — весовые коэффициенты синаптических связей,

w_0 — порог активации,

$w, x \in \mathbb{R}^{n+1}$, если ввести константный признак $f_0(x) \equiv -1$



Градиентный метод численной минимизации

Минимизация эмпирического риска (регрессия, классификация):

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}_i(w) \rightarrow \min_w.$$

Численная минимизация методом *градиентного спуска*:

$w^{(0)}$:= начальное приближение;

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

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

$$w^{(t+1)} := w^{(t)} - h \sum_{i=1}^{\ell} \nabla \mathcal{L}_i(w^{(t)}).$$

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 , $j = 0, \dots, n$;

2 инициализировать оценку функционала:

$$\bar{Q} := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}_i(w);$$

3 **повторять**

4 выбрать объект x_i из X^ℓ случайным образом;

5 вычислить потерю: $\varepsilon_i := \mathcal{L}_i(w)$;

6 сделать градиентный шаг: $w := w - h \nabla \mathcal{L}_i(w)$;

7 оценить функционал: $\bar{Q} := \lambda \varepsilon_i + (1 - \lambda) \bar{Q}$;

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 рекуррентная оценка функционала?

Проблема: вычисление оценки Q по всей выборке x_1, \dots, x_ℓ намного больше градиентного шага по одному объекту x_i .

Решение: использовать приближённую рекуррентную формулу.

Среднее арифметическое:

$$\bar{Q}_m = \frac{1}{m}\varepsilon_m + \frac{1}{m}\varepsilon_{m-1} + \frac{1}{m}\varepsilon_{m-2} + \dots$$

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

Экспоненциальное скользящее среднее:

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

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

Параметр λ — темп забывания предыстории ряда.

Алгоритм SAG (Stochastic Average Gradient)

Вход: выборка X^ℓ , темп обучения h , темп забывания λ ;

Выход: вектор весов w ;

- 1 инициализировать веса w_j , $j = 0, \dots, n$;
- 2 инициализировать градиенты: $G_i := \nabla \mathcal{L}_i(w)$, $i = 1, \dots, \ell$;
- 3 инициализировать оценку функционала: $\bar{Q} := \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}_i(w)$;
- 4 **повторять**
- 5 выбрать объект x_i из X^ℓ случайным образом;
- 6 вычислить потерю: $\varepsilon_i := \mathcal{L}_i(w)$;
- 7 вычислить градиент: $G_i := \nabla \mathcal{L}_i(w)$;
- 8 сделать градиентный шаг: $w := w - h \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} G_i$;
- 9 оценить функционал: $\bar{Q} := \lambda \varepsilon_i + (1 - \lambda) \bar{Q}$;
- 10 **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. 2013.

Варианты инициализации весов

- 1 $w_j := 0$ для всех $j = 0, \dots, n$;
- 2 небольшие случайные значения:
 $w_j := \text{random}\left(-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n}\right)$;
- 3 $w_j := \frac{\langle y, f_j \rangle}{\langle f_j, f_j \rangle}$, $f_j = (f_j(x_i))_{i=1}^\ell$ — вектор значений признака.

Эта оценка w оптимальна, если

- 1) функция потерь квадратична и
- 2) признаки некоррелированы, $\langle f_j, f_k \rangle = 0$, $j \neq k$.

- 4 обучение по небольшой случайной подвыборке объектов;
- 5 мультистарт: многократные запуски из разных случайных начальных приближений и выбор лучшего решения.

Варианты порядка предъявления объектов

Возможны варианты:

- ❶ перетасовка объектов (*shuffling*):
попеременно брать объекты из разных классов;
- ❷ чаще брать объекты, на которых ошибка больше:
чем меньше M_i , тем больше вероятность взять объект;
- ❸ чаще брать объекты, на которых уверенность меньше:
чем меньше $|M_i|$, тем больше вероятность взять объект;
- ❹ вообще не брать «хорошие» объекты, у которых $M_i > \mu_+$
(при этом немного ускоряется сходимость);
- ❺ вообще не брать объекты-«выбросы», у которых $M_i < \mu_-$
(при этом может улучшиться качество классификации);

Параметры μ_+ , μ_- придётся подбирать.

Варианты выбора градиентного шага

- ❶ сходимость гарантируется (для выпуклых функций) при

$$h_t \rightarrow 0, \quad \sum_{t=1}^{\infty} h_t = \infty, \quad \sum_{t=1}^{\infty} h_t^2 < \infty,$$

в частности можно положить $h_t = 1/t$;

- ❷ метод скорейшего градиентного спуска:

$$\mathcal{L}_i(w - h \nabla \mathcal{L}_i(w)) \rightarrow \min_h$$

позволяет найти адаптивный шаг h^* ;

При квадратичной функции потерь $h^* = \|x_i\|^{-2}$.

- ❸ пробные случайные шаги для «выбивания» итерационного процесса из локальных минимумов;
- ❹ метод Левенберга-Марквардта (второго порядка)

Диагональный метод Левенберга-Марквардта

Метод Ньютона-Рафсона, $\mathcal{L}_i(w) \equiv \mathcal{L}(\langle w, x_i \rangle y_i)$:

$$w := w - h(\mathcal{L}_i''(w))^{-1} \nabla \mathcal{L}_i(w),$$

где $\mathcal{L}_i''(w) = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{L}_i(w)}{\partial w_j \partial w_{j'}} \right)$ — гессиан, $n \times n$ -матрица

Эвристика. Считаем, что гессиан диагонален:

$$w_j := w_j - h \left(\frac{\partial^2 \mathcal{L}_i(w)}{\partial w_j^2} + \mu \right)^{-1} \frac{\partial \mathcal{L}_i(w)}{\partial w_j},$$

h — темп обучения, можно полагать $h = 1$

μ — параметр, предотвращающий обнуление знаменателя.

Отношение h/μ есть темп обучения на ровных участках функционала $\mathcal{L}_i(w)$, где вторая производная обнуляется.

Проблема переобучения

Возможные причины переобучения:

- слишком мало объектов; слишком много признаков;
- линейная зависимость (мультиколлинеарность) признаков:
 - пусть построен классификатор: $a(x, w) = \text{sign}\langle w, x \rangle$;
 - мультиколлинеарность: $\exists u \in \mathbb{R}^{n+1}: \forall x_i \in X^\ell \quad \langle u, x_i \rangle = 0$;
 - неединственность решения: $\forall \gamma \in \mathbb{R} \quad a(x, w) = \text{sign}\langle w + \gamma u, x \rangle$.

Проявления переобучения:

- слишком большие веса $|w_j|$ разных знаков;
- неустойчивость дискриминантной функции $\langle w, x \rangle$;
- $Q(X^\ell) \ll Q(X^k)$;

Основной способ уменьшить переобучение:

- регуляризация (сокращение весов, weight decay);

Регуляризация (сокращение весов)

Штраф за увеличение нормы вектора весов:

$$\widetilde{\mathcal{L}}_i(w) = \mathcal{L}_i(w) + \frac{\tau}{2} \|w\|^2 = \mathcal{L}_i(w) + \frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^n w_j^2 \rightarrow \min_w.$$

Градиент:

$$\nabla \widetilde{\mathcal{L}}_i(w) = \nabla \mathcal{L}_i(w) + \tau w.$$

Модификация градиентного шага:

$$w := w(1 - h\tau) - h\nabla \mathcal{L}_i(w).$$

Методы подбора коэффициента регуляризации τ :

- ➊ скользящий контроль;
- ➋ стохастическая адаптация;
- ➌ двухуровневый байесовский вывод.

SG: Достоинства и недостатки

Достоинства:

- ❶ легко реализуется;
- ❷ легко обобщается на любые $g(x, w)$, $\mathcal{L}(a, y)$;
- ❸ легко добавить регуляризацию
- ❹ возможно динамическое (потоковое) обучение;
- ❺ на сверхбольших выборках можно получить неплохое решение, даже не обработав все (x_i, y_i) ;
- ❻ подходит для задач с большими данными

Недостатки:

- ❶ подбор комплекса эвристик является искусством
(не забыть про переобучение, застrevание, расходимость)

Принцип максимума правдоподобия

Пусть $X \times Y$ — в.п. с плотностью $p(x, y|w) = P(y|x, w)p(x)$.

Пусть X^ℓ — простая (i.i.d.) выборка: $(x_i, y_i)_{i=1}^\ell \sim p(x, y|w)$

Оценка максимального правдоподобия для w :

$$\prod_{i=1}^{\ell} p(x_i, y_i|w) = \prod_{i=1}^{\ell} P(y_i|x_i, w)p(x_i) \rightarrow \max_w$$

Логарифм правдоподобия (log-likelihood, log-loss):

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) \rightarrow \max_w.$$

В случае двух классов, $y_i \in Y = \{0, 1\}$, удобно записывать модель условной вероятности $\pi(x, w) = P(y=1|x, w)$:

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} y_i \log \pi(x_i, w) + (1-y_i) \log (1-\pi(x_i, w)) \rightarrow \max_w,$$

Связь правдоподобия и аппроксимации эмпирического риска

Пусть $X \times Y$ — в.п. с плотностью $p(x, y|w) = P(y|x, w)p(x)$.

Пусть X^ℓ — простая (i.i.d.) выборка: $(x_i, y_i)_{i=1}^\ell \sim p(x, y|w)$

- Максимизация правдоподобия (*Maximum Likelihood, ML*):

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) \rightarrow \max_w.$$

- Минимизация аппроксимированного эмпирического риска:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(y_i g(x_i, w)) \rightarrow \min_w;$$

Эти два принципа эквивалентны, если положить

$$-\log P(y_i|x_i, w) = \mathcal{L}(y_i g(x_i, w)).$$

$$\boxed{\text{модель } P(y|x, w)} \Leftrightarrow \boxed{\text{модель } g(x, w) \text{ и } \mathcal{L}(M)}.$$

Вероятностный смысл регуляризации

$P(y|x, w)$ — вероятностная модель данных;

$p(w; \gamma)$ — априорное распределение параметров модели;

γ — вектор гиперпараметров;

Теперь не только появление выборки X^ℓ ,

но и появление модели w также полагается стохастическим.

Совместное правдоподобие данных и модели:

$$p(X^\ell, w) = p(X^\ell|w) \color{red}{p(w; \gamma)}.$$

Принцип максимума апостериорной вероятности
(Maximum a Posteriori Probability, MAP):

$$L(w) = \ln p(X^\ell, w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) + \underbrace{\log p(w; \gamma)}_{\text{регуляризатор}} \rightarrow \max_w$$

Примеры: априорные распределения Гаусса и Лапласа

Пусть веса w_j независимы, $Ew_j = 0$, $Dw_j = C$.

Распределение Гаусса и квадратичный (L_2) регуляризатор:

$$p(w; C) = \frac{1}{(2\pi C)^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|w\|^2}{2C}\right), \quad \|w\|^2 = \sum_{j=1}^n w_j^2,$$

$$-\ln p(w; C) = \frac{1}{2C} \|w\|^2 + \text{const}$$

Распределение Лапласа и абсолютный (L_1) регуляризатор:

$$p(w; C) = \frac{1}{(2C)^n} \exp\left(-\frac{\|w\|}{C}\right), \quad \|w\| = \sum_{j=1}^n |w_j|,$$

$$-\ln p(w; C) = \frac{1}{C} \|w\| + \text{const}$$

C — гиперпараметр, $\tau = \frac{1}{C}$ — коэффициент регуляризации.

Двухклассовая логистическая регрессия

Линейная модель классификации для двух классов $Y = \{-1, 1\}$:

$$a(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle, \quad x, w \in \mathbb{R}^n.$$

Отступ $M = \langle w, x \rangle y$.

Логарифмическая функция потерь:

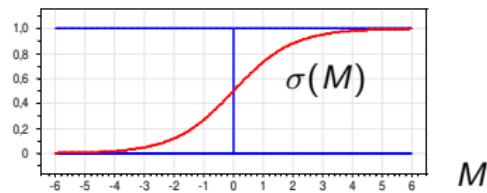
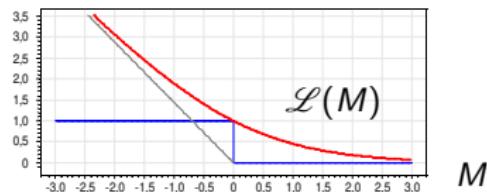
$$\mathcal{L}(M) = \log(1 + e^{-M}).$$

Модель условной вероятности:

$$P(y|x, w) = \sigma(M) = \frac{1}{1+e^{-M}},$$

где $\sigma(M)$ — сигмоидная функция,

важное свойство: $\sigma(M) + \sigma(-M) = 1$.



Максимизация правдоподобия (logistic loss) с регуляризацией:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log(1 + \exp(-\langle w, x_i \rangle y_i)) + \frac{\tau}{2} \|w\|^2 \rightarrow \min_w$$

Многоклассовая логистическая регрессия

Линейный классификатор при произвольном числе классов $|Y|$:

$$a(x) = \arg \max_{y \in Y} \langle w_y, x \rangle, \quad x, w_y \in \mathbb{R}^n.$$

Вероятность того, что объект x относится к классу y :

$$P(y|x, w) = \frac{\exp\langle w_y, x \rangle}{\sum_{z \in Y} \exp\langle w_z, x \rangle} = \text{SoftMax}\langle w_y, x \rangle,$$

функция SoftMax: $\mathbb{R}^Y \rightarrow \mathbb{R}^Y$ переводит произвольный вектор в нормированный вектор дискретного распределения.

Максимизация правдоподобия (log-loss) с регуляризацией:

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \log P(y_i|x_i, w) - \frac{\tau}{2} \sum_{y \in Y} \|w_y\|^2 \rightarrow \max_w.$$

Калибровка Платта (classifier with probabilistic output)

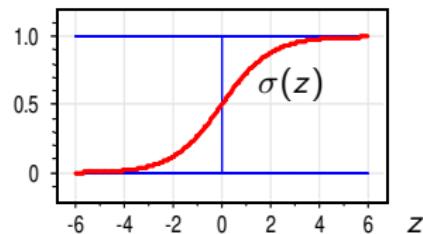
Пусть для простоты классов два, $Y = \{-1, +1\}$.

Задача. Для классификатора вида $a(x) = \text{sign } g(x, w)$ построить функцию оценки условной вероятности $P(y|x)$.

Модель условной вероятности:

$$\pi(x; a, b) = P(y=1|x) = \sigma(ag(x, w) + b)$$

где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ — сигмоидная функция



Калибровка коэффициентов a, b по контрольной выборке методом максимума правдоподобия (снова log-loss):

$$\sum_{y_i=-1} \log(1 - \pi(x_i; a, b)) + \sum_{y_i=+1} \log \pi(x_i; a, b) \rightarrow \max_{a, b}$$

Пример. Бинаризация признаков и scoringовая карта

Задача кредитного scoringа:

- x_i — заемщики
- $y_i = -1$ (bad), $+1$ (good)

Бинаризация признаков $f_j(x)$:

$$b_{jk}(x) = [f_j(x) \text{ из } k\text{-го интервала}]$$

Линейная модель классификации:

$$a(x, w) = \operatorname{sign} \sum_{j,k} w_{jk} b_{jk}(x).$$

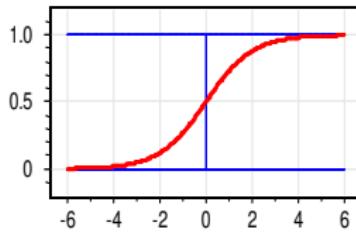
Вес признака w_{jk} равен его вкладу в общую сумму баллов (score).

признак j	интервал k	w_{jk}
Возраст	до 25	5
	25 - 40	10
	40 - 50	15
	50 и больше	10
Собственность	владелец	20
	совладелец	15
	съемщик	10
	другое	5
Работа	руководитель	15
	менеджер среднего звена	10
	служащий	5
	другое	0
Стаж	1/безработный	0
	1..3	5
	3..10	10
	10 и больше	15
Работа_мужа /жены	нет/домохозяйка	0
	руководитель	10
	менеджер среднего звена	5
	служащий	1

Оценивание рисков в scoringе

Логистическая регрессия не только определяет веса w , но и оценивает апостериорные вероятности классов

$$P(y|x) = \frac{1}{1 + e^{-\langle w, x \rangle y}}$$



Оценка риска (математического ожидания) потерь объекта x :

$$R(x) = \sum_{y \in Y} D_{xy} P(y|x),$$

где D_{xy} — величина потери для объекта x с исходом y .

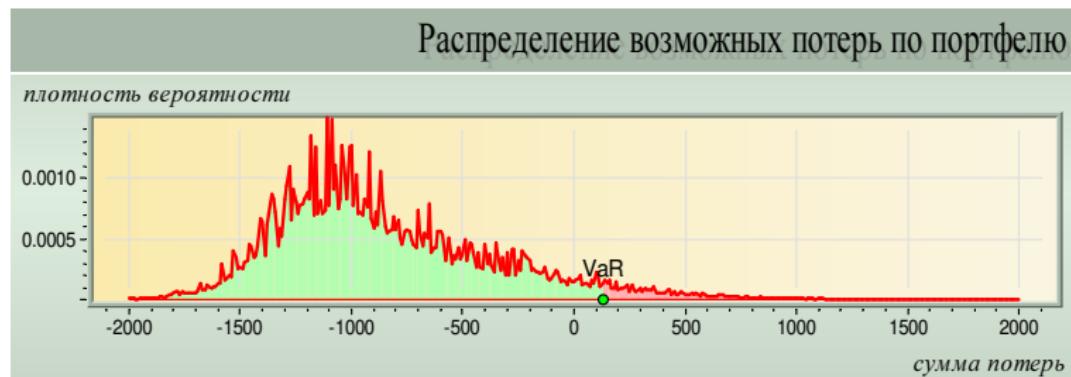
Оценка говорит о том, сколько мы потеряли в среднем.
Но сколько мы потеряли в худшем случае?

Методика VaR (Value at Risk)

Стохастическое моделирование: $N = 10^4$ раз

- для каждого x_i разыгрывается исход $y_i \sim P(y|x_i)$;
- вычисляется сумма потерь по портфелю $V = \sum_{i=1}^{\ell} D_{x_i y_i}$;

99%-квантиль эмпирического распределения потерь
определяет величину резервируемого капитала



Резюме в конце лекции

- Метод стохастического градиента (SG, SAG) подходит для любых моделей и функций потерь
- Хорошо подходит для обучения по большим данным
- Аппроксимация пороговой функции потерь $\mathcal{L}(M)$ позволяет использовать градиентную оптимизацию
- Функции $\mathcal{L}(M)$, штрафующие за приближение к границе классов, увеличивают зазор между классами, благодаря этому повышается надёжность классификации
- Регуляризация решает проблему мультиколлинеарности и также снижает переобучение
- Логистическая регрессия — метод классификации, оценивающий условные вероятности классов $P(y|x)$