ТЕХНОСФЕРА

Лекция 10
Линейные модели
алгоритмическая перспектива

Николай Анохин

23 ноября 2015 г.

План занятия

Линейные модели

SVM

Функции ядра

SGD

Постановка задачи

Дано. Признаковые описания N объектов $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_m) \in \mathcal{X}$, образующие тренировочный набор данных X, и значения целевой переменной $y = f(\mathbf{x}) \in \mathcal{Y}$ для каждого объекта из X.

Найти. Для семейства параметрических функций

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) = y : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathcal{Y}\},$$

найти значение вектора параметров θ^*, такое что $h^*(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta^*)$ наилучшим образом приближает целевую функцию.

$$\begin{aligned} Y &\in \{C_1, C_2, \ldots, C_K\} \text{ – задача классификации} \\ Y &\in [a, b] \subset \mathcal{R} \text{ – задача регрессии} \end{aligned}$$

Обобщенная линеная модель / GLM

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \sim pdf\left[f(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}))\right],$$

- $\phi_n(\mathbf{x})$ – базисные функции
- $f(a)$ – функция активации
- pdf – распределение из экспоненциального семейства

Обобщенные линейные модели

Линейные модели

Рассматривается случай 2 классов

Функция принятия решения

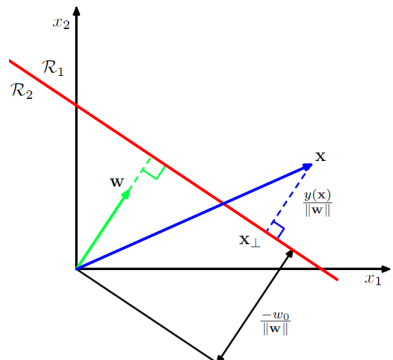
$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0$$

Регионы принятия решения

$$R_1 = \{\mathbf{x} : y(\mathbf{x}) > 0\}$$

$$R_2 = \{\mathbf{x} : y(\mathbf{x}) < 0\}$$

Задача
найти параметры модели $\mathbf{w}$, w_0



Линейные модели: наблюдения

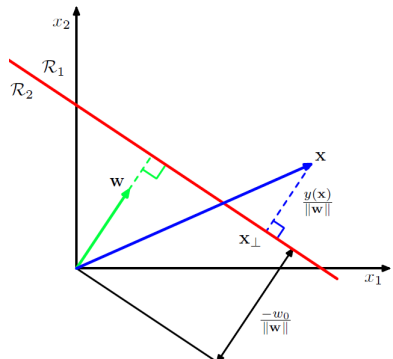
Разделяющая поверхность

$$\mathcal{D} = \{\mathbf{x} : \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0 = 0\}$$

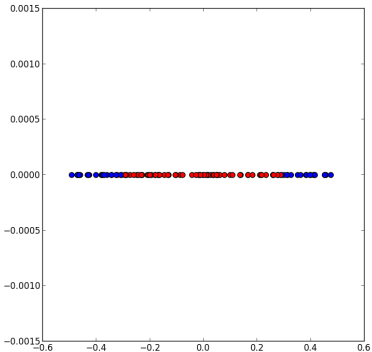
1. $\mathbf{w}$ – нормаль к $\mathcal{D}$
2. $d = -\frac{w_0}{\|\mathbf{w}\|}$ – расстояние от центра координат до $\mathcal{D}$
3. $r(\mathbf{x}) = \frac{y(x)}{\|\mathbf{w}\|}$ – расстояние от $\mathcal{D}$ до $\mathbf{x}$

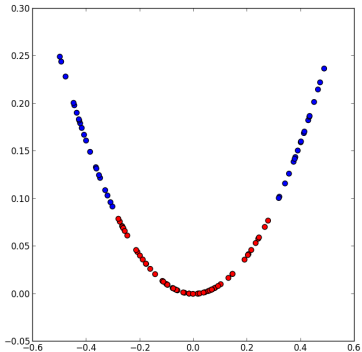
Положим $x_0 \equiv 1$, получим модель

$$y(\tilde{\mathbf{x}}) = \tilde{\mathbf{w}}^\top \tilde{\mathbf{x}}$$



Мотивация


0.0015
0.0010
0.0005
0.0000
−0.0005
−0.0010
−0.0015
−0.6
−0.4
−0.2
0.0
0.2
0.4
0.6


0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
−0.05
−0.6
−0.4
−0.2
0.0
0.2
0.4
0.6

Обобщенные линейные модели

Линейная модель

$$y(\mathbf{x}) = w_0 + \sum w_i x_i$$

Квадратичная модель

$$y(\mathbf{x}) = w_0 + \sum w_i x_i + \sum \sum w_{ij} x_i x_j$$

Обобщенная линейная модель

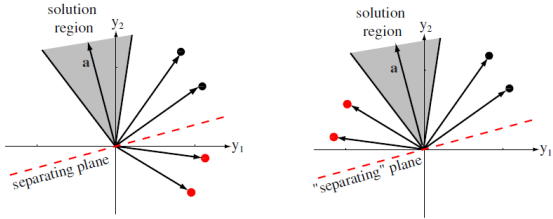
$$y(\mathbf{x}) = \sum w_i \phi_i(\mathbf{x})$$

Случай линейно разделимых классов

Обобщенная линейная модель (внимание: переобозначения!)

$$g(\mathbf{x}) = \sum w_i \phi_i(\mathbf{x}) \sim \mathbf{w}^T \mathbf{x}$$

Дана обучающая выборка $D = (X, Y)$



Идея

Преобразовать объекты второго класса в обратные им и решать задачу оптимизации в области $\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i > 0, \ \forall i$

Задача оптимизации

Задача

Минимизируем критерий $J(\mathbf{w})$ при условиях $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i > 0,\ \forall i$

Пусть $\mathcal{Y}$ – множество неправильно проклассифицированных объектов

- $J_e(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{H}} 1$
- $J_p(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{H}} -\mathbf{w}^\top\mathbf{x}$
- $J_q(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{H}} (\mathbf{w}^\top\mathbf{x})^2$
- $J_r(\mathbf{w}) = \sum_{\mathbf{x}\in\mathcal{H}} \frac{(\mathbf{w}^\top\mathbf{x}-b)^2}{\|\mathbf{x}\|}$

Улучшение: добавить отступы

Логистическая регрессия

функция правдоподобия (кросс-энтропия)

$$J_c(\mathbf{w}) = -\sum_{n=1}^{N} y_n \log \sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) + (1-y_n)\log(1-\sigma(\mathbf{w}^T\mathbf{x})) \to \min_{\mathbf{w}}$$

Градиент

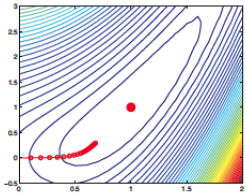
$$\nabla J_c(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N}(p(y=1|\phi_n) - y_n)\phi_n$$

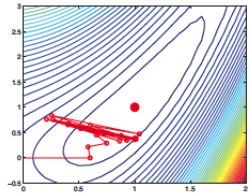
Гессиан

$$\nabla^2 J_c(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} p(y=1|\phi_n)(1-p(y=1|\phi_n))\phi_n\phi_n^T$$

Градиентный спуск

```
function gd(grad, a0, epsilon):
    initialise eta(k)
    k = 0
    a = a0
    do:
        k = k + 1
        a = a - eta(k) grad(a)
    until eta(k) grad(a) < epsilon
    return a
```





Метод Ньютона

$$J(\mathbf{a}) \approx J(\mathbf{a}_k) + \nabla J(\mathbf{a}_k)^T(\mathbf{a} - \mathbf{a}_k) + \frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{a}_k)^T \nabla^2 J(\mathbf{a}_k)(\mathbf{a} - \mathbf{a}_k) \to \min_{\mathbf{a}}$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_k - \nabla^2 J(\mathbf{a}_k)^{-1} \nabla J(\mathbf{a}_k)$$

```
1  function newton(grad, hessian, a0, epsilon):
2      initialise eta(k)
3      k = 0
4      a = a0
5      do:
6          k = k + 1
7          g = grad(a)
8          H = hessian(a)
9          d = solve(H * d = -g) # find d = - inv(H) * g
10         a = a + eta(k) d
11     until convergence
12     return a
```

BFGS – использовать приближение $\nabla^2 J(\mathbf{a}_k)$ или $\nabla^2 J(\mathbf{a}_k)^{-1}$

Iterative Reweighted Least Squares

Градиент и Гессиан логистической регрессии в матричной форме

$$\nabla J_c(\mathbf{w}) = X^T(\sigma - Y)$$

$$\nabla^2 J_c(\mathbf{w}) = X^T S X = X^T \text{diag}\{\sigma_n(1-\sigma_n)\}X$$

Обновление весов

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - (X^T S_k X)^{-1} X^T S_k \mathbf{z}_k,$$

$$\mathbf{z}_k = X\mathbf{w}_k + S_k^{-1}(Y - \sigma_k)$$

Минимизация

$$\sum_{n=1}^{N} S_{kn}(z_{kn} - \mathbf{w}^T x_n)^2$$

Случай линейно неразделимых классов

- Использовать $\eta(k) \to 0$ при $k \to \infty$
- Линейное программирование
- Подобрать хитрый критерий оптимизации

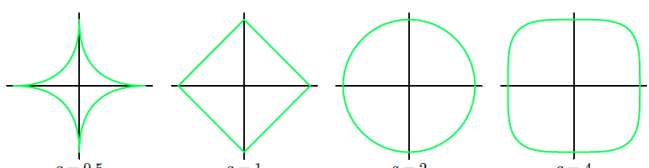
Снова переобучение

Оптимизируем критерий с регуляризацией

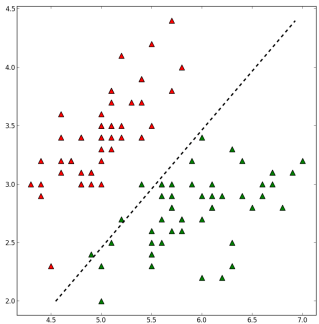
$$J_1(a) = J(a) + \lambda J_R(a)$$

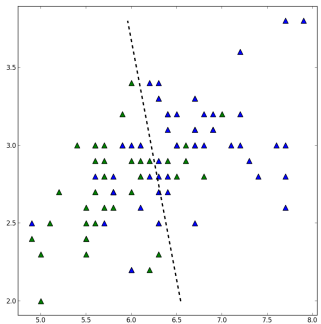
λ – коэффициент регуляризации

$$J_R(a) = \sum |a_j|^q$$



Перцептрон: результаты





SVM

Максимальный зазор

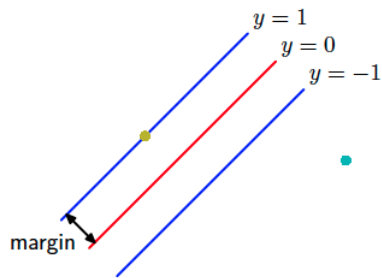
Margin – наименьшее расстояние между РП и обучающим объектом.

$$d_j = \frac{|y(\mathbf{x}_j)|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{t_j y(\mathbf{x}_j)}{\|\mathbf{w}\|} =$$

$$= \frac{t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b)}{\|\mathbf{w}\|}$$

Оптимальная РП

$$\arg\max_{\mathbf{w},b} \left[\frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \min_j t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) \right]$$



Задача оптимизации

Расстояние от точки x_j до РП

$$d_j = \frac{t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b)}{\|\mathbf{w}\|}$$

Для точки x_j, лежащей на минимальном расстоянии от РП положим

$$t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) = 1$$

Задача оптимизации

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w},b}$$

при условиях

$$t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) \geq 1, \quad \forall j \in 1, \ldots, N$$

Метод множителей Лагранжа $\mathbf{a} = (a_1, \ldots, a_N)^\top,\ a_i \geq 0.$

$$L(\mathbf{w}, b, \mathbf{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{j=1}^{N} a_j[t_j(\mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_j) + b) - 1]$$

Дифференцируем по $\mathbf{w}$ и b

$$\mathbf{w} = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j \phi(\mathbf{x}_j),\ \ 0 = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j$$

Подставляем $\mathbf{w}$ и b в лагранжиан

Сопряженная задача

Сорпяженная задача

$$\tilde{L}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N} a_j - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} a_i a_j t_i t_j \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j) \to \max_{\mathbf{a}}$$

при условиях

$$a_j \geq 0, \quad \forall j \in 1, \ldots, N$$

$$\sum_{j=1}^{N} a_j t_j = 0$$

Наблюдения

- $k(x_i, x_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j)$ – неотрицательно-определенная функция
- лагранжиан $\tilde{L}(\mathbf{a})$ – выпуклая и ограниченная сверху функция

Классификация

Функция принятия решения

$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}) + b = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j \phi(\mathbf{x}_j)^\top \phi(\mathbf{x}) + b = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) + b$$

Условия Karush-Kuhn-Tucker

$$\begin{aligned} a_j &\geq 0 \\ t_j y(\mathbf{x_j}) - 1 &\geq 0 \\ a_j\{t_j y(\mathbf{x_j}) - 1\} &= 0 \end{aligned}$$

Опорным векторам $\mathbf{x}_j \in S$ соответствуют $a_j > 0$

$$b = \frac{1}{N_s} \sum_{i \in S} \left(t_i - \sum_{j \in S} a_j t_j k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) \right)$$

Линейно-разделимый случай

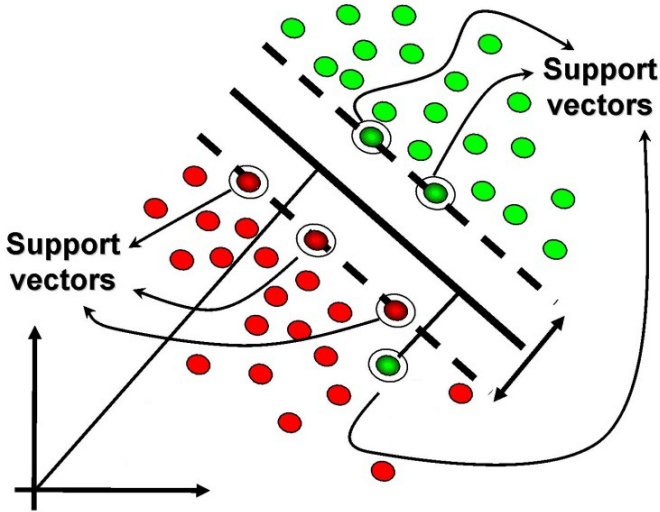
Задача

Дана обучающая выборка

	x_1	x_2	t
$\mathbf{x}_1$	1	-2	1
$\mathbf{x}_2$	1	2	-1

Найти оптимальную разделяющую плоскость, используя сопряженную задачу оптимизации

Линейно-неразделимый случай



Смягчение ограничений

Переменные $\xi_j \geq 0$ (slacks):

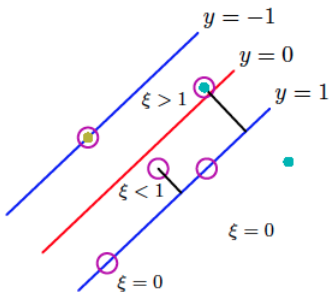
$$\xi_j = \begin{cases} 0, & \text{если } y(\mathbf{x_j})t_j \geq 1 \\ |t_j - y(\mathbf{x}_j)|, & \text{иначе} \end{cases}$$

Задача оптимизации

$$C\sum_{j=1}^{N}\xi_j + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w},b}$$

при условиях

$$t_j y(\mathbf{x}_j) \geq 1 - \xi_j, \quad \xi_j \geq 0$$



Сопряженная задача

Сорпяженная задача

$$\tilde{L}(\mathbf{a}) = \sum_{j=1}^{N} a_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} a_i a_j t_i t_j \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x}_j) \to \max_{\mathbf{a}}$$

при условиях

$$0 \leq a_j \leq C, \quad \forall j \in 1, \ldots, N$$

$$\sum_{j=1}^{N} a_j t_j = 0$$

Наблюдения

- $a_j = 0$ – правильно проклассифицированные объекты
- $a_j = C$ – опорные векторы внутри отступа
- $0 < a_i < C$ – опорные векторы на границе

Классификация

Функция принятия решения

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} a_j t_j k(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) + b$$

Константа b

$$b = \frac{1}{N_{\mathcal{M}}} \sum_{i \in \mathcal{M}} \left(t_i - \sum_{j \in S} a_j t_j k(\mathbf{x_i}, \mathbf{x_j}) \right)$$

Задача регрессии

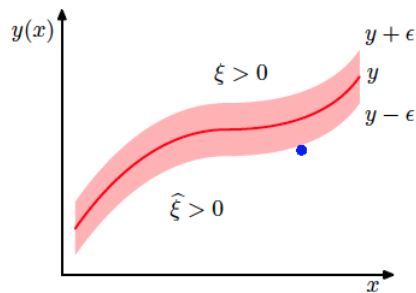
Переменные $\xi_j \geq 0$, $\hat{\xi}_j \geq 0$ (slacks):

$$t_j \leq y(\mathbf{x}_j) + \epsilon + \xi_n$$

$$t_j \geq y(\mathbf{x}_j) - \epsilon - \hat{\xi}_n$$

Задача оптимизации

$$C \sum_{j=1}^{N} (\hat{\xi}_j + \xi_j) + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min_{\mathbf{w},b}$$



Численные методы оптимизации

- Chunking (Vapnik, 1982)
- Decomposition (Osuna, 1996)
- Sequential Minimal Optimization (Platt, 1999)

Функции ядра

Функции ядра

$\phi(\mathbf{x})$ – функция преобразования $\mathbf{x}$ из исходного пространства в спрямляющее пространство

Проблема: количество признаков может быть очень велико

Идея Kernel Trick

В процессе тренировки и применения SVM исходные векторы $\mathbf{x}$ используются только как аргументы в скалярном произведении $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^\top \phi(\mathbf{x_j})$. Но в этом случае можно избежать вычисления $\varphi(\mathbf{x})$!

Теорема Мерсера

Теорема

Функция $k(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ является ядром тогда и только тогда, когда она

- симметрична

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = k(\mathbf{z}, \mathbf{x})$$

- неотрицательно определена

$$\int_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} \int_{\mathbf{z} \in \mathbf{X}} k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) g(\mathbf{x}) g(\mathbf{z}) d\mathbf{x} d\mathbf{z} \geqslant 0, \quad \forall g(\mathbf{x}) : \mathbf{X} \to R$$

Задача

Пусть $\mathbf{x} \in R^2$, а преобразование $\phi(\mathbf{x})$

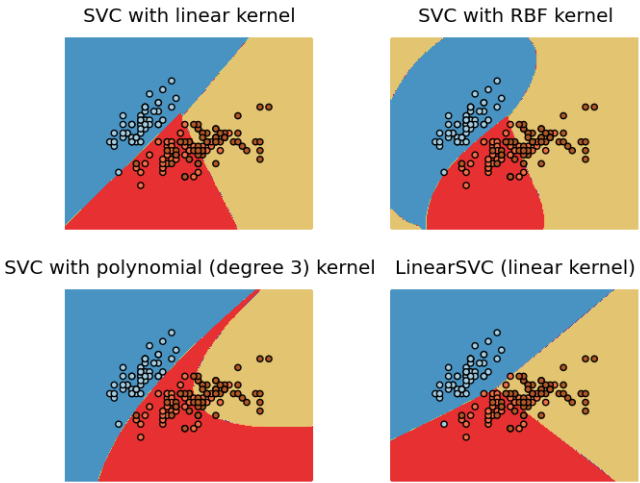
$$\phi(\mathbf{x}) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, \sqrt{2}x_1 x_2, x_2^2).$$

Проверить, что функция $k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = (1 + \mathbf{x}^\top \mathbf{z})^2$ является функцией ядра для данного преобразования.

Некоторые стандартные функции ядра

- Линейное ядро
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{z}$$
- Полиномиальное ядро степени d
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}^\top \mathbf{z} + r)^d$$
- Radial Basis Function
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = e^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{z}|^2}$$
- Sigmoid
$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \tanh(\gamma \mathbf{x}^\top \mathbf{z} + r)$$

Опять ирисы


SVC with linear kernel
SVC with RBF kernel
SVC with polynomial (degree 3) kernel
LinearSVC (linear kernel)

SGD

SGD

stands for

Stochastic Gradient Descent

...

by allacronyms.com

Связь с линейными моделями

Задача оптимизации

$$C\sum_{j=1}^{N}\xi_j + \frac{1}{2}\|w\|^2 \sim \sum_{j=1}^{N} E(y(\mathbf{x}_j), t_j) + \lambda\|w\|^2 \to \min_{\mathbf{w},b}$$

Hinge loss

$$E(y_j, t_j) = \begin{cases} 1 - y_j t_j, & \text{если } y_j t_j < 1 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

Stochastic Gradient Descent

Градиентный спуск

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_n}, \mathbf{w}, t_n)$$

Стохастический градиентный спуск

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_k}, \mathbf{w}, t_k)$$

Усредненный стохастический градиентный спуск $\bar{\mathbf{w}}_k = \frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}\mathbf{w}_j$

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{w}_k - \eta(k)\nabla_{\mathbf{w}} l(\mathbf{x_k}, \mathbf{w}, t_k), \quad \bar{\mathbf{w}}_{k+1} = \frac{k}{k+1}\bar{\mathbf{w}}_k + \frac{1}{k+1}\mathbf{w}_{k+1}$$

Сходимость: $\sum_k \eta_k^2 < \infty, \ \ \sum_k \eta_k = \infty$

SGD tips

- Использовать SGD, когда обучение модели занимает слишком много времени
- Перемешать тренировочную выборку
- Следить за training error и **validation error**
- Поверять, правильно ли вычисляется градиент

$$Q(z, w + \delta) \approx Q(z, w) + \delta g$$

- Подобрать η_0 на небольшой выборке

$$\eta_k = \eta_0 (1 + \eta_0 \lambda k)^{-1}, \quad \lambda - \text{параметр регуляризации}$$

SVM – итоги

+ Нелинейная разделяющая поверхность
+ Глобальая оптимизация
+ Разреженное решение
+ Хорошая обобщающая способность
- Не поддерживает $p(C_k|\mathbf{x})$
- Чувствительность к выбросам
- Нет алгоритма выбора ядра
- Медленное обучение

Вопросы