Лекция 9: линейные методы

Евгений Борисов

четверг, 15 ноября 2018 г.

Линейные методы

методы ML

- статистические -
  восстановить плотность, определить вероятность
- метрические -
  померять расстояния, определить ближайших
- логические -
  построить правило (комбинацию предикатов)
- линейные -
  построить разделяющую поверхность

Линейные методы: о задаче классификации

метки классов

$$Y = \{-1, 1\}$$

размеченные данные

$$X = (x, y)$$

Линейные методы: о задаче классификации

метки классов

$$Y=\{-1,1\}$$

размеченные данные

$$X=(x,\ y)$$

алгоритм классификации

$$a(x,w)=sign(f(x,w))$$

Линейные методы: о задаче классификации

метки классов

$$Y=\{-1,1\}$$

размеченные данные

$$X=(x,\ y)$$

алгоритм классификации

$$a(x,w)=sign(f(x,w))$$

дискриминантная функция

$$f(x,w)$$

вектор параметров

$$w$$

Линейные методы: о задаче классификации

метки классов

$$Y = \{-1, 1\}$$

размеченные данные

$$X = (x, y)$$

алгоритм классификации

$$a(x, w) = sign(f(x, w))$$

дискриминантная функция

$$f(x, w)$$

вектор параметров

$$w$$

разделяющая поверхность

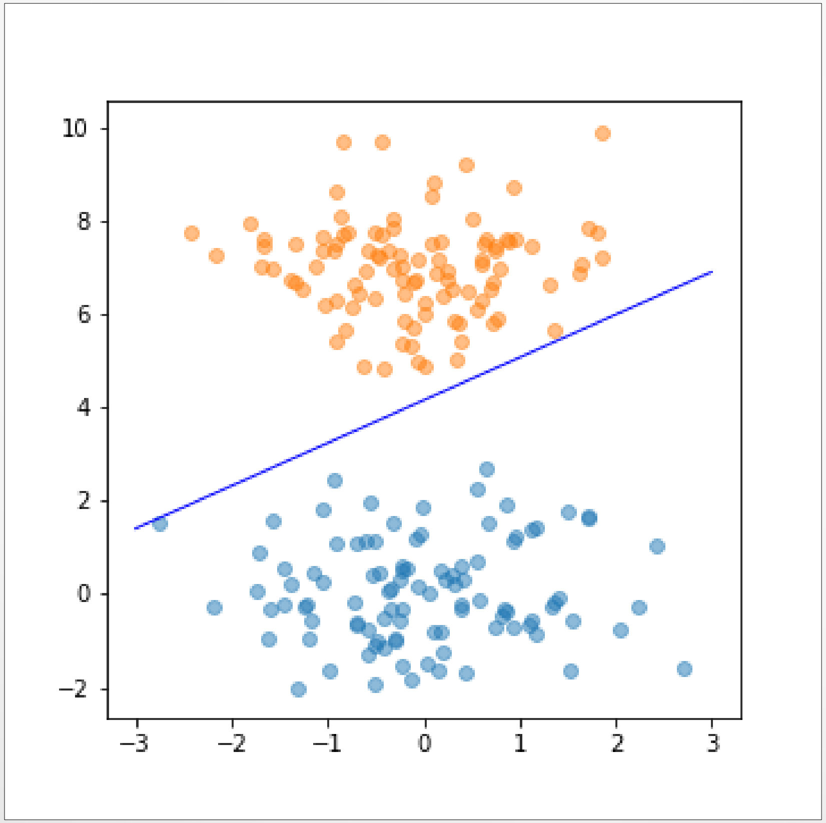
$$f(x, w) = 0$$

Линейные методы: разделяющая поверхность

<u>пример</u>: линейно разделимые данные

разделяющая поверхность - прямая

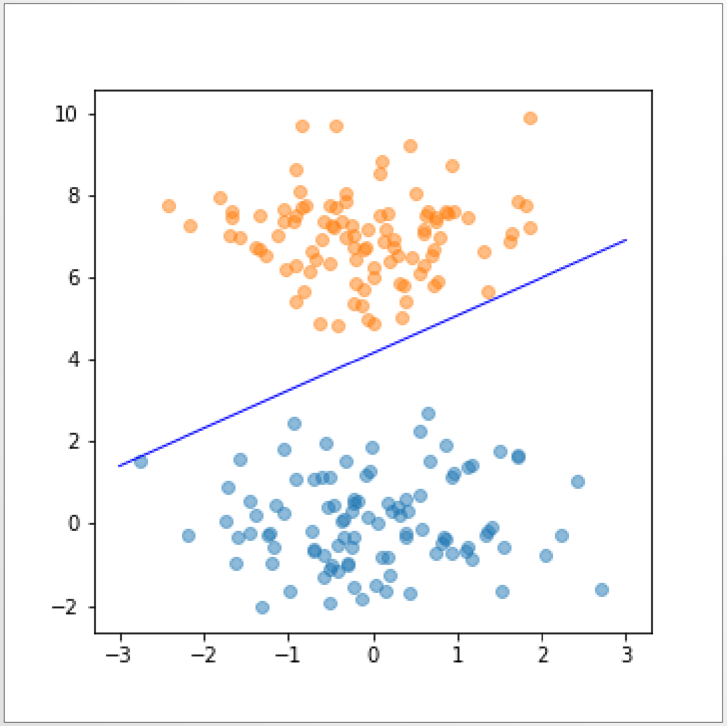
$$w_1 \cdot x + w_0 = 0$$



Линейные методы: отступы

отступ - насколько далеко объект **x** от разделяющей поверхности

$$M(x,w) = y \cdot f(x,w)$$



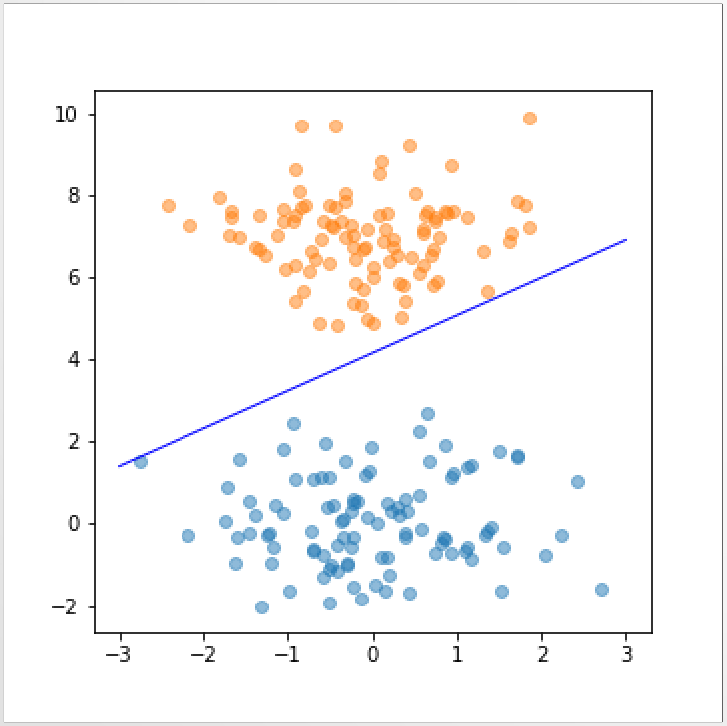
$y \in \{-1, 1\}$ - метка класса

$f(x,w)$ - дискриминантная функция

Линейные методы: отступы

отступ - насколько далеко объект **x** от разделяющей поверхности

$$M(x, w) = y \cdot f(x, w)$$



$y \in \{-1, 1\}$ - метка класса

$f(x, w)$ - дискриминантная функция

$M(x, w) < 0$ - алгоритм ошибается на **x**

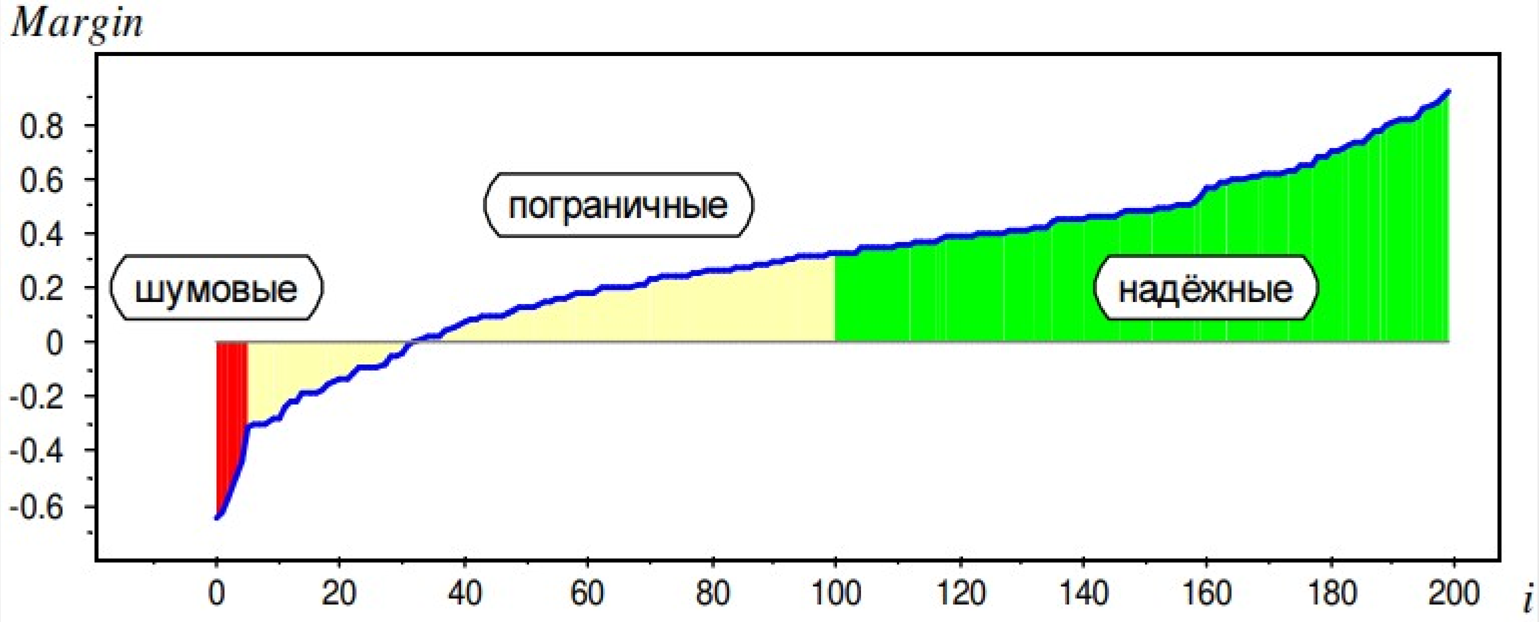
Линейные методы: отступы

отступ - насколько далеко объект от разделяющей поверхности

$$M(x, w) = y \cdot f(x, w)$$

$y \in \{-1, 1\}$ - метка класса

$f(x, w)$ - дискриминантная функция



$M(x, w) < 0$ - алгоритм ошибается на **x**

Линейные методы: эмпирический риск

функционал эмпирического риска, (число ошибок)

$$Q(x, w) = \sum_{x} [M(x, w) < 0]$$

$M(x, w) = f(x, w) \cdot y$ - отступ объекта **x**

$y \in \{-1, 1\}$ - метка класса

$f(x, w)$ - дискриминантная функция

$M(x, w) < 0$ - алгоритм ошибается на **x**

Линейные методы: функция потери

функционал эмпирического риска

$$Q(x, w) = \sum_x [M(x, w) < 0]$$

Линейные методы: функция потери

функционал эмпирического риска

$$Q(x, w) = \sum_{x} [M(x, w) < 0]$$

[M<0] это пороговая функция,

не учитываем значение отступа M,

оптимизировать не удобно,

заменим её...

Линейные методы: функция потери

функционал эмпирического риска

$$Q(x,w)=\sum_x [M(x,w)<0]$$

[M<0] это пороговая функция,

не учитываем значение отступа M,

оптимизировать не удобно,

заменим её...

построим аппроксимацию Q

введём **функцию потери L(M)**
(невозрастающая, неотрицательная)

$$\tilde{Q}(x,w)=\sum_x L\left(M(x,w)\right)\rightarrow min$$

$$Q(x,w)\leqslant\tilde{Q}(x,w)$$

Линейные методы

функционал эмпирического риска

$$Q(x,w)=\sum_x [M(x,w)<0]$$

[M<0] это пороговая функция, оптимизировать не удобно, заменим её...

варианты для замены [M<0]

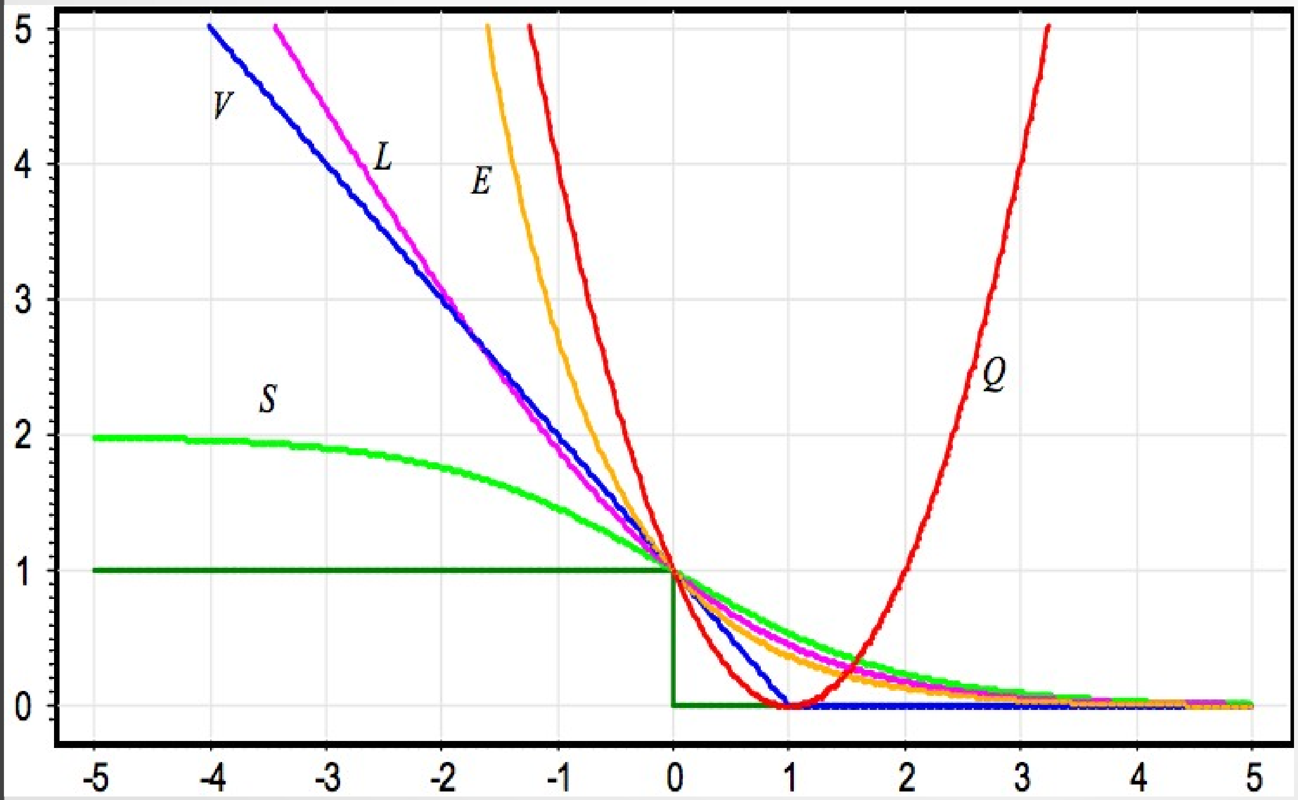
$$L(M)=\log_2\left(1+\frac{1}{\exp(M)}\right)$$ логарифмическая

$$V(M)=(1-M)_+$$ кусочно-линейная

$$Q(M)=(1-M)^2$$ квадратичная

$$E(M)=\frac{1}{\exp(M)}$$ экспоненциальная

$$S(M)=\frac{1}{2\cdot(1+\exp(M))}$$ сигмоид



Линейные методы: линейный классификатор

рассмотрим линейный классификатор,

дискриминантная функция f(x,w) это гиперплоскость

$$f(x,w)=\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot w_i - w_0$$ - дискриминантная функция

$$a(x,w)=sign(f(x,w))=sign\left(\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot w_i - w_0\right)=sign(\langle x,w\rangle)$$

$$M(x,w)=\langle x,w\rangle \cdot y$$ - отступ на объекте **x** класса **y**

$$sign(x)=\begin{cases} 1, & x>0 \\ 0, & x=0 \\ -1, & x<0 \end{cases}$$

Линейные методы

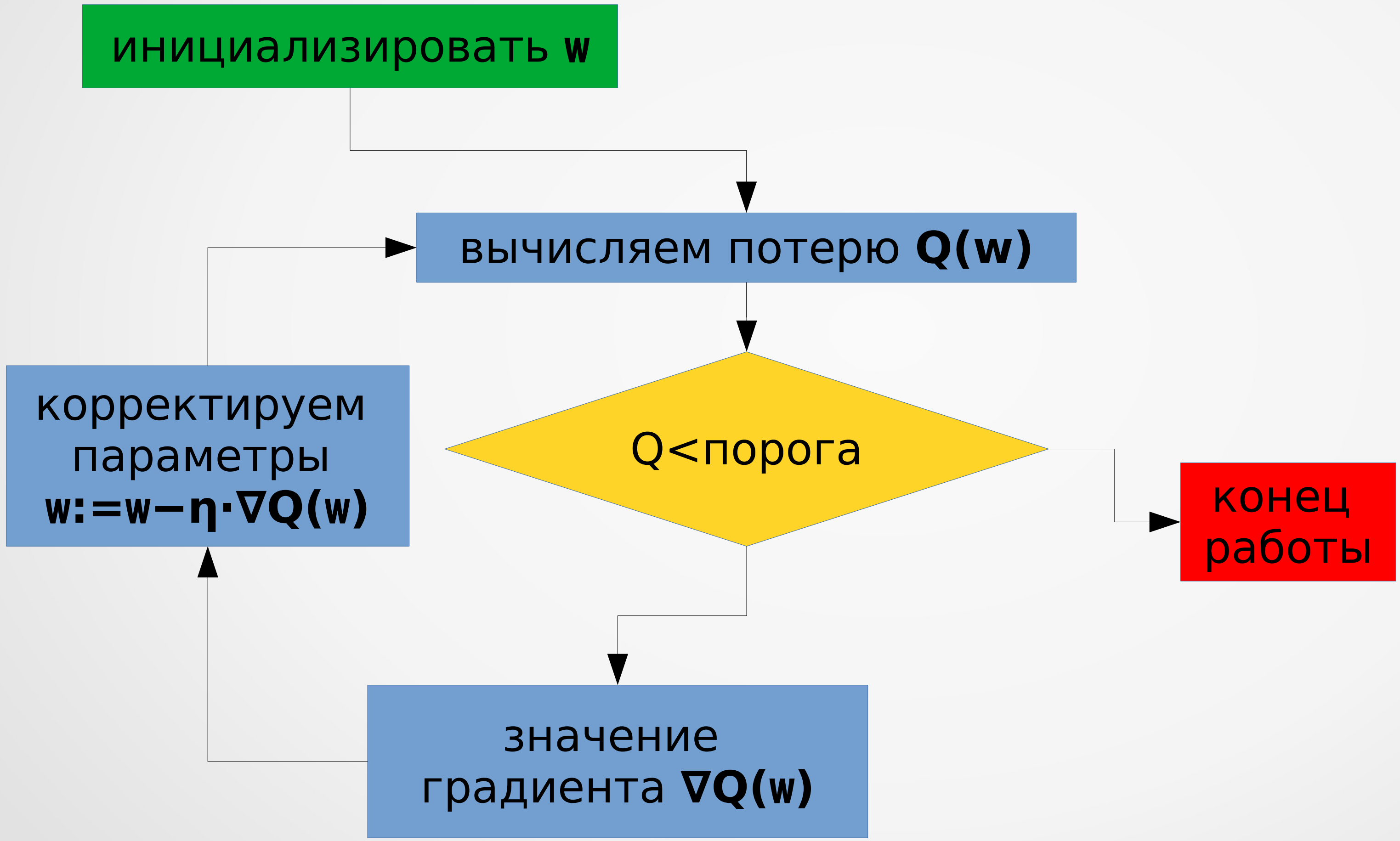
обучение классификатора как задача оптимизации

$$Q(w;X) = \sum_{x \in X} L(\langle x, w \rangle \cdot y) \rightarrow \min_{w}$$

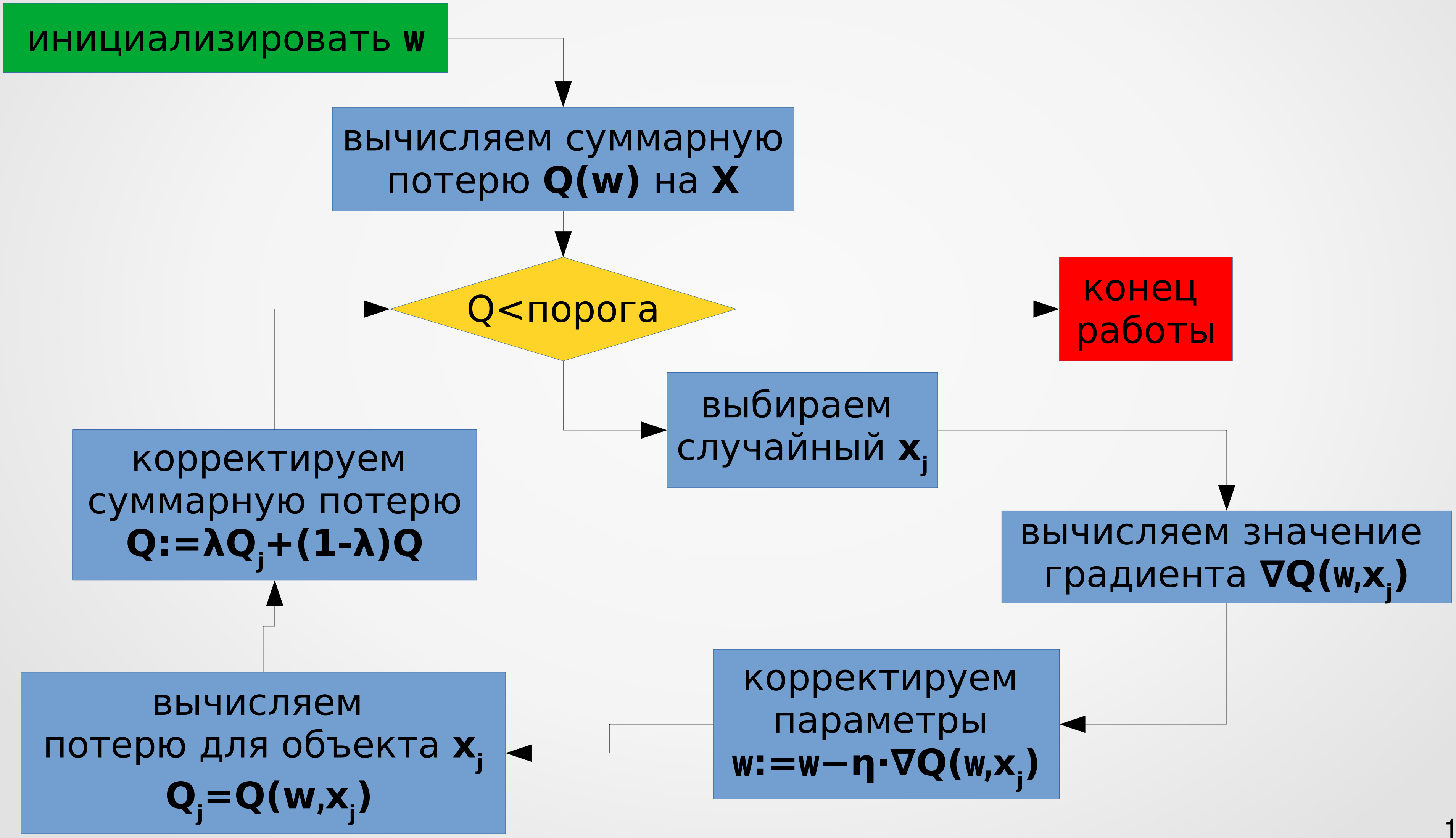
можно использовать градиентные методы

$$\nabla Q(w) = \left(\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} \right)_{j=0}^{n}$$ - вектор градиента ф-ции **Q**

Линейные методы: градиентный спуск (GD)



Линейные методы: стохастический градиентный спуск (SGD)



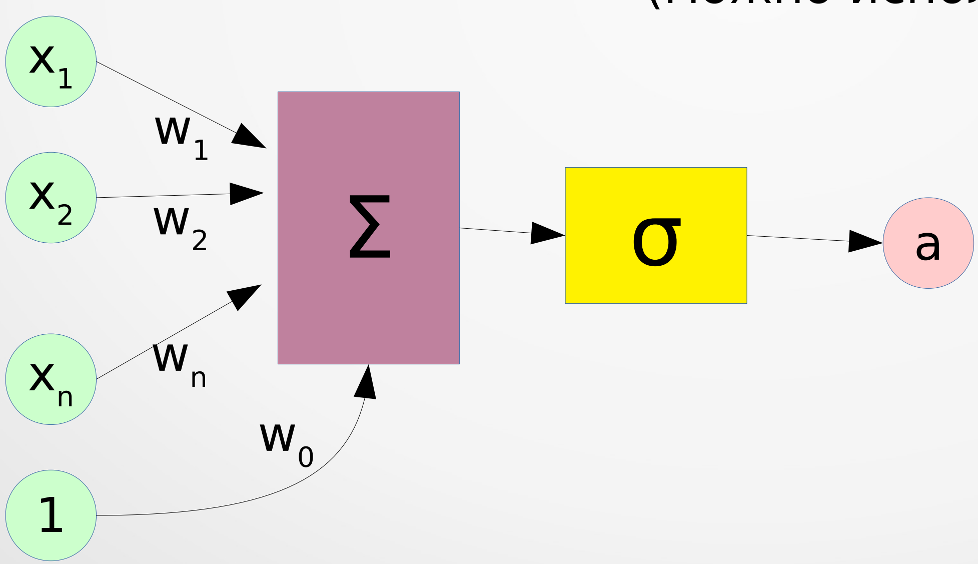
Линейные методы: линейный классификатор

линейная модель МакКаллока-Питтса (1943)

(формальный нейрон)

$$a(x,w)=\sigma\left(\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot w_i - w_0\right)=\sigma(\langle x,w\rangle)$$

σ - функция активации нейрона
(можно использовать **sign**)



Линейные методы

частный случай 1:
адаптивный линейный элемент ADALINE, Видроу,Хофф (1960)

<u>задача регрессии</u>

$X = \mathbb{R}^n$ $\quad y \in \mathbb{R}$ $\quad a(x, w) = \langle x, w \rangle$

Линейные методы

частный случай 1:

адаптивный линейный элемент ADALINE, Видроу,Хофф (1960)

<u>задача регрессии</u>

$X = \mathbb{R}^n$ $y \in \mathbb{R}$ $a(x, w) = \langle x, w \rangle$ $L(a, y) = \frac{1}{2} \cdot (a(x, w) - y)^2$

Линейные методы

частный случай 1:

адаптивный линейный элемент ADALINE, Видроу,Хофф (1960)

<u>задача регрессии</u>

$X = \mathbb{R}^n$ $\quad y \in \mathbb{R}$ $\quad a(x, w) = \langle x, w \rangle$ $\quad L(a, y) = \frac{1}{2} \cdot (a(x, w) - y)^2$

градиентный шаг - **дельта правило**

$$w := w - \eta (\langle x, w \rangle - y) \cdot x$$

$(\langle x, w \rangle - y)$ - ошибка на объекте **x**

Линейные методы

частный случай 2:
правило обучения Хебба (1949)

<u>задача классификации</u>

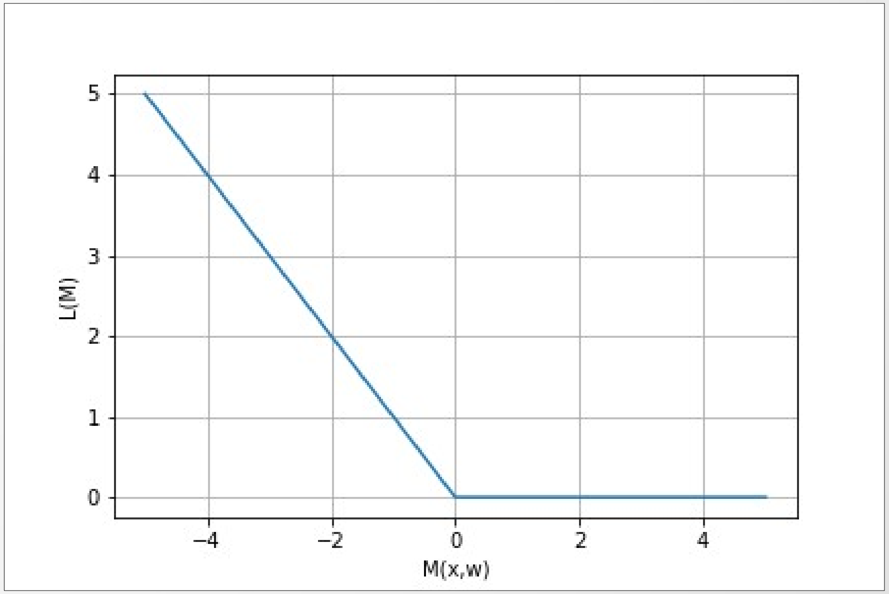
$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1, 1\} \quad a(x, w) = sign(\langle x, w \rangle)$

Линейные методы

частный случай 2:
правило обучения Хебба (1949)

<u>задача классификации</u>

$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1,1\} \quad a(x,w) = sign(\langle x,w \rangle) \qquad L(a,y) = (-\langle x,w \rangle \cdot y)_+$



Линейные методы

частный случай 2:
правило обучения Хебба (1949)

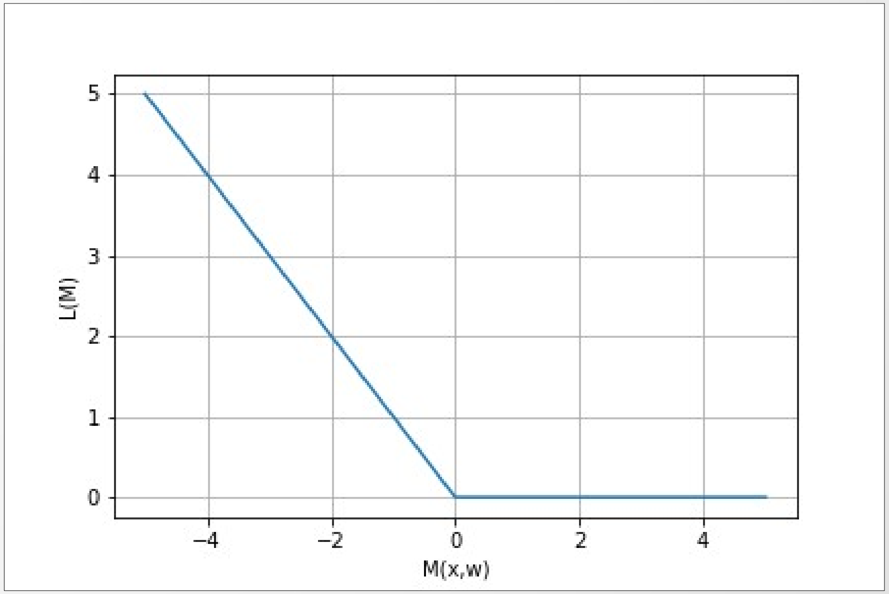
задача классификации

$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1, 1\} \quad a(x, w) = sign(\langle x, w \rangle) \quad L(a, y) = (-\langle x, w \rangle \cdot y)_+$

градиентный шаг

$$[\langle x, w \rangle \cdot y < 0] \Rightarrow w := w + \eta \cdot y \cdot x$$

параметры корректируем
только в случае ошибки



Линейные методы

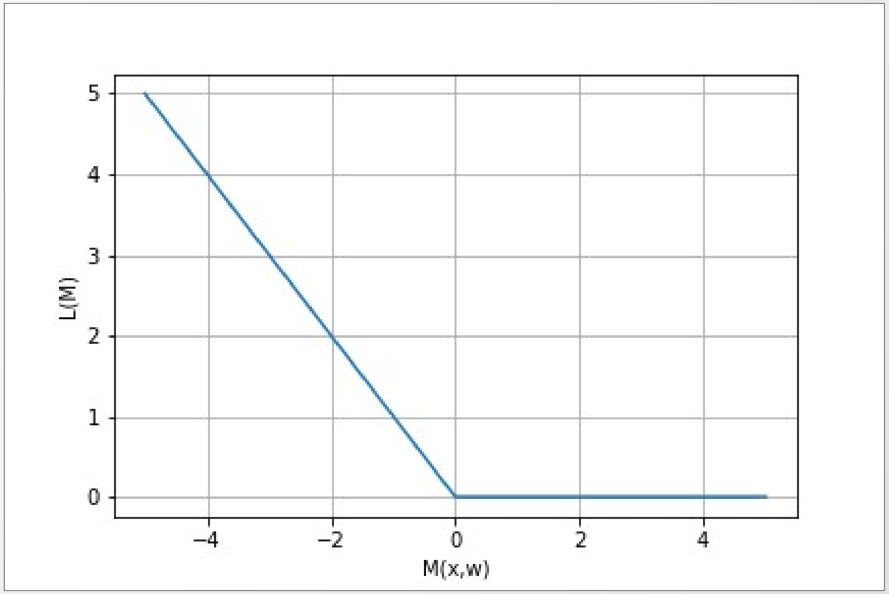
частный случай 3:
правило обучения Розенблатта (1957)

<u>задача классификации</u>

$x \in \{0,1\}^n \qquad y \in \{0,1\} \qquad a(x,w) = sign(\langle x,w \rangle) \qquad L(a,y) = (-\langle x,w \rangle \cdot y)_+$

градиентный шаг

$$w := w - \eta \cdot (a(x,w) - y) \cdot x$$



Линейные методы

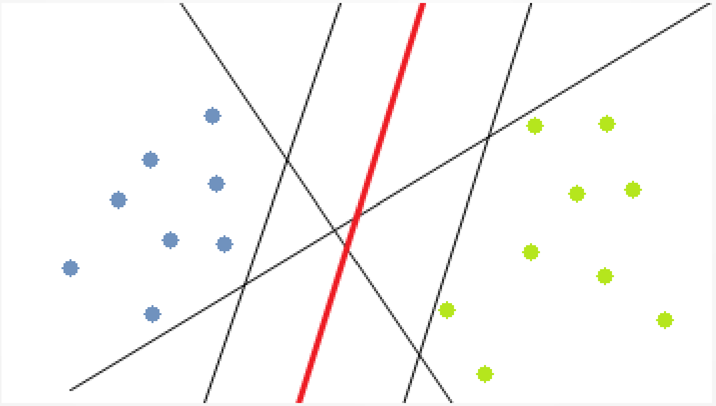
«зоопарк» методов

- вид разделяющей поверхности **f(x,w)** (линейная, нелинейная)
- вид функции потерь **L(M)**
- вид метода оптимизации **Q(w) → min**

Линейные методы: SVM

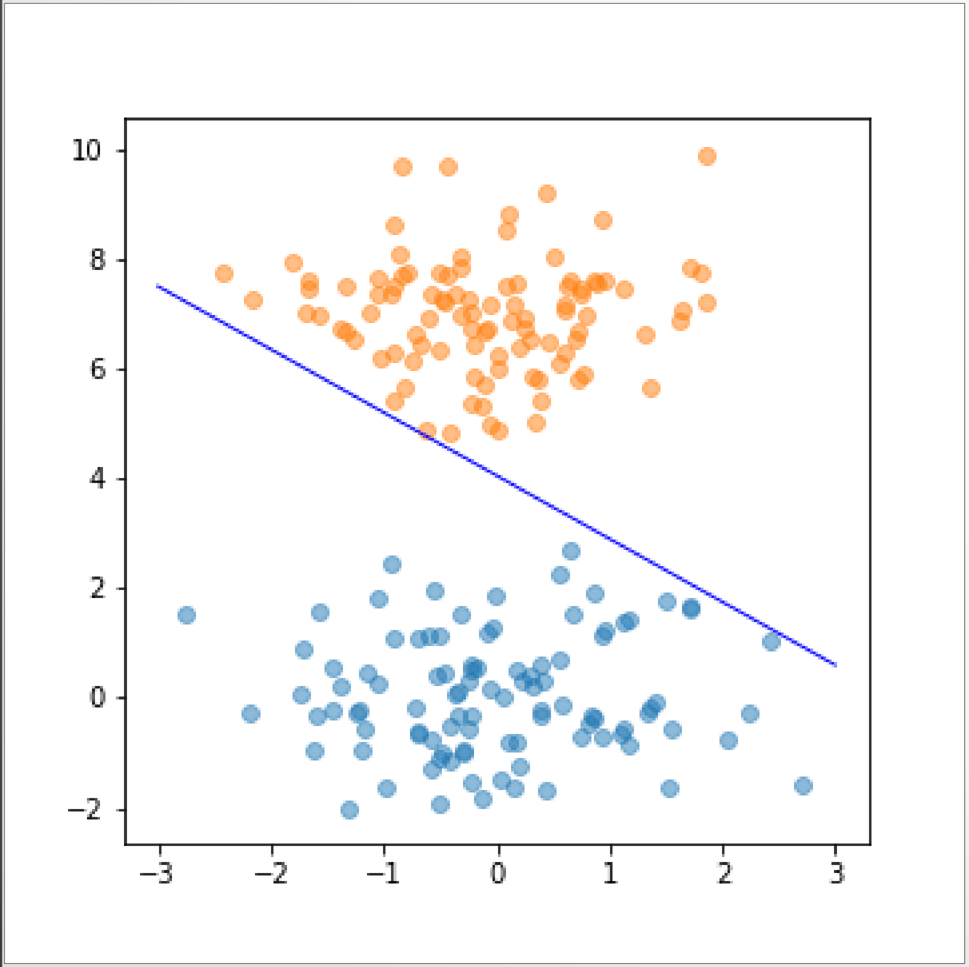
Метод опорных векторов (SVM, support vector machine)

В.Н.Вапник, А.Я.Червоненкис, (1963)



Линейные методы: SVM

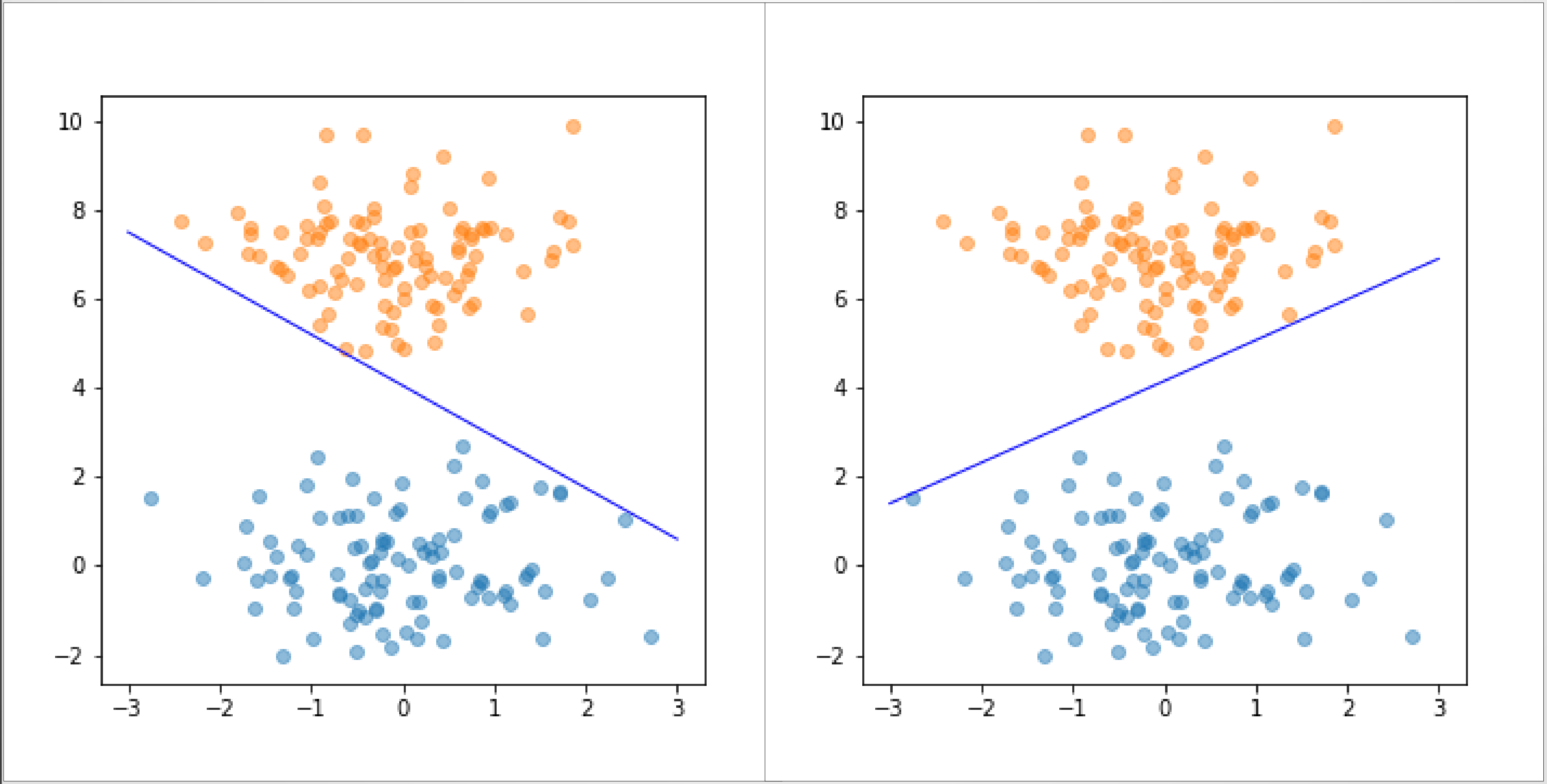
рассмотрим линейно разделимый набор



Линейные методы: SVM

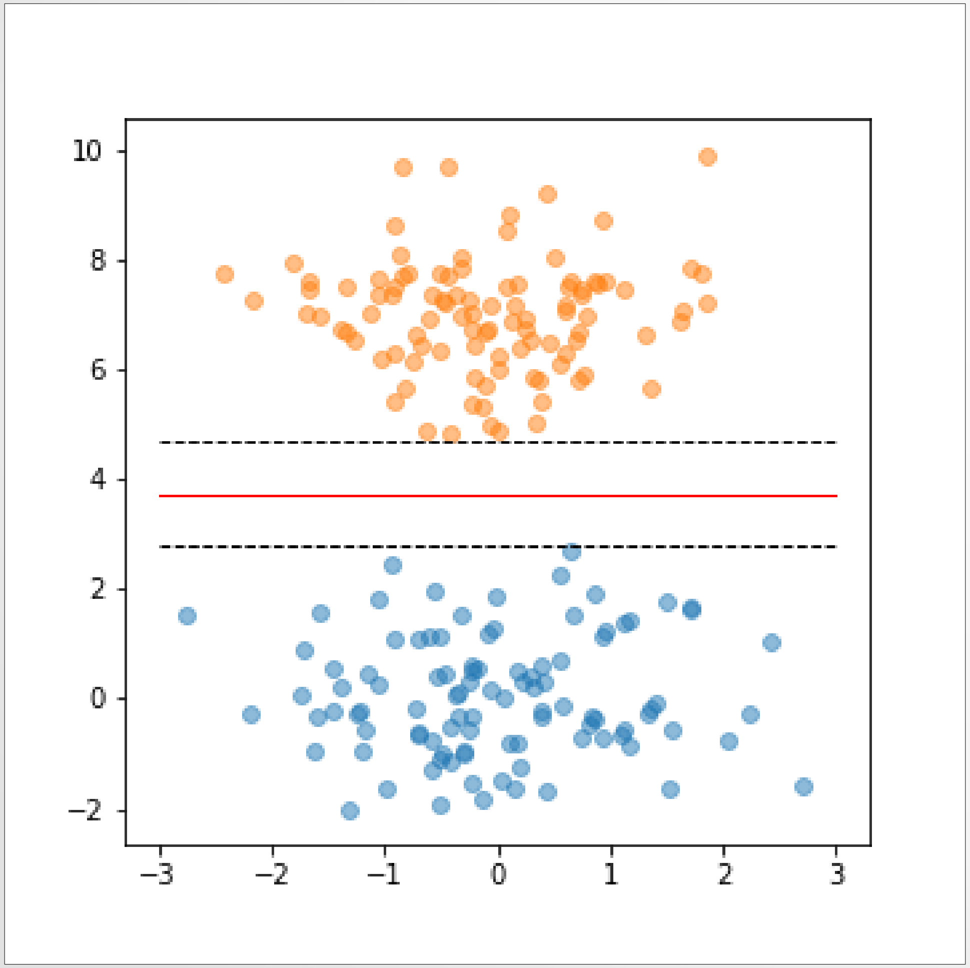
рассмотрим линейно разделимый набор

много разделяющих гиперплоскостей



Линейные методы: SVM

разделительная полоса



цель: увеличить отступы,
получить полосу максимальной ширины

Линейные методы: SVM

модель: машина опорных векторов (SVM)

$$a(x;w,w_0) = sign\left(\langle x, w\rangle - w_0\right)$$

задача классификации

$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1, +1\}$

Линейные методы: SVM

модель: машина опорных векторов (SVM)

$$a(x;w,w_0)=sign\left(\langle x,w\rangle-w_0\right)$$

задача классификации

$$x\in\mathbb{R}^n \quad y\in\{-1,+1\}$$

обучение классификатора
это задача оптимизации
функционала эмпирического риска

$$\sum_i [a(x_i;w,w_0)\neq y_i]=\sum_x [M(x,w,w_0)<0]\rightarrow \min_{w,w_0}$$

отступ на объекте **x** класса **y**

$$M(x,w,w_0)=(\langle x,w\rangle-w_0)\cdot y$$

Линейные методы: SVM

модель: машина опорных векторов (SVM)

задача классификации

$$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1, +1\}$$

$$a(x; w, w_0) = sign(\langle x, w \rangle - w_0)$$

обучение классификатора
это задача оптимизации
функционала эмпирического риска

$$\sum_i [a(x_i; w, w_0) \neq y_i] = \sum_x [M(x, w, w_0) < 0] \to \min_{w, w_0}$$

отступ на объекте **x** класса **y**

$$M(x, w, w_0) = (\langle x, w \rangle - w_0) \cdot y$$

замена пороговой ф-ции потери на кусочно линейную

$$\sum_x [M(x, w, w_0) < 0] \leqslant \sum_x (1 - M(x, w, w_0))_+ \to \min_{w, w_0}$$

Линейные методы: SVM

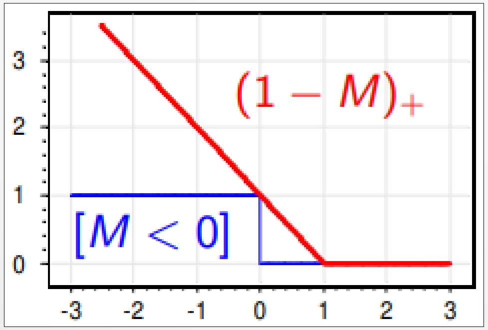
замена пороговой ф-ции потери на кусочно линейную

$$\sum_x \left(1 - M(x, w, w_0)\right)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 \rightarrow \min_{w, w_0}$$

аппроксимация штрафует за приближение к границе классов

регуляризация штрафует за неустойчивые решения

увеличиваем разделительную полосу (зазор между классами)



Линейные методы: SVM

$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$ - отступ на объекте $\mathbf{x_i}$

для линейно разделимого набора все отступы M > 0

Линейные методы: SVM

$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$ - отступ на объекте $\mathbf{x_i}$

для линейно разделимого набора все отступы M > 0

введём нормировку отступов

$$\min_i \left(M_i(w, w_0) \right) = 1$$

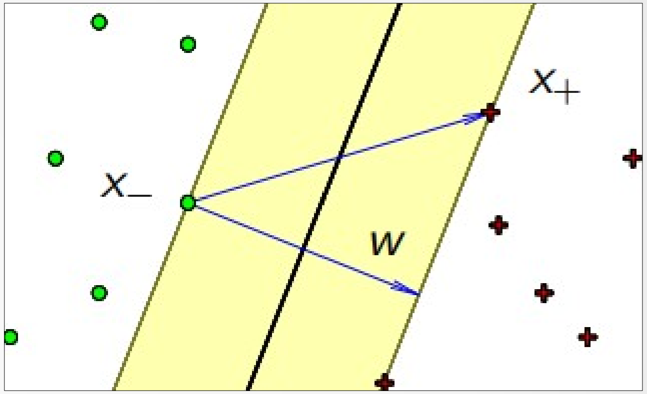
Линейные методы: SVM

$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$ - отступ на объекте $\mathbf{x_i}$

для линейно разделимого набора все отступы M > 0

введём нормировку отступов

$$\min_i \left(M_i(w, w_0) \right) = 1$$



крайние точки классов,
ограничивающие разделяющую полосу

$$\exists x_+ : \langle w, x_+ \rangle - w_0 = +1$$
$$\exists x_- : \langle w, x_- \rangle - w_0 = -1$$

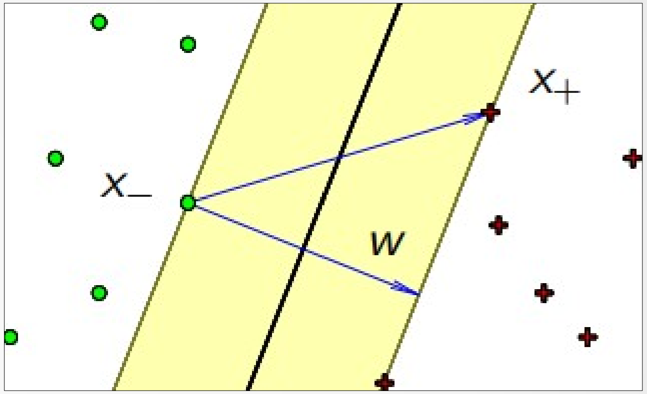
Линейные методы: SVM

$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$ - отступ на объекте $\mathbf{x_i}$

для линейно разделимого набора все отступы M > 0

введём нормировку отступов

$$\min_i \left(M_i(w, w_0) \right) = 1$$



крайние точки классов,
ограничивающие разделяющую полосу

$$\exists x_+ : \langle w, x_+ \rangle - w_0 = +1$$
$$\exists x_- : \langle w, x_- \rangle - w_0 = -1$$

разделяющая полоса

$$\{ x : -1 \leqslant (\langle x_i, w \rangle - w_0) \leqslant 1 \}$$

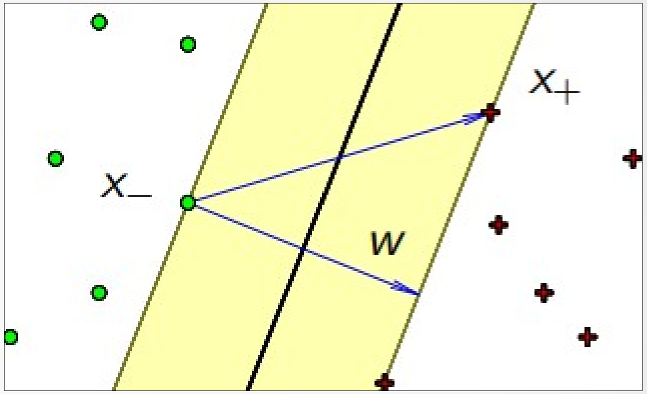
Линейные методы: SVM

$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$ - отступ на объекте $\mathbf{x_i}$

для линейно разделимого набора все отступы M > 0

введём нормировку отступов

$$\min_i \left(M_i(w, w_0) \right) = 1$$



крайние точки классов,
ограничивающие разделяющую полосу

$$\exists x_+ : \langle w, x_+ \rangle - w_0 = +1$$
$$\exists x_- : \langle w, x_- \rangle - w_0 = -1$$

разделяющая полоса

$$\{ x : -1 \leqslant (\langle x_i, w \rangle - w_0) \leqslant 1 \}$$

ширина разделяющей полосы

$$\frac{\langle x_+, w \rangle - \langle x_-, w \rangle}{\|w\|} = \frac{1 + w_0 - (-1 + w_0)}{\|w\|} = \frac{2}{\|w\|} \rightarrow max$$

добавка
регуляризации

$$\|w\| \rightarrow min$$

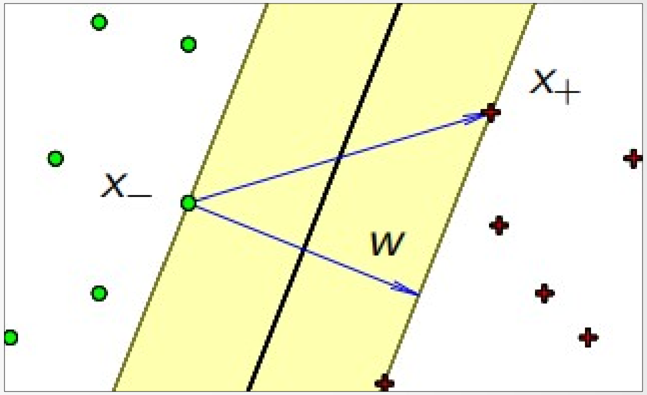
Линейные методы: SVM

постановка задачи

для линейно разделимого набора

$$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$$

$$\begin{cases} \|w\|^2 \rightarrow \min\limits_{w, w0} \\ M_i(w, w_0) \geqslant 1 \end{cases}$$



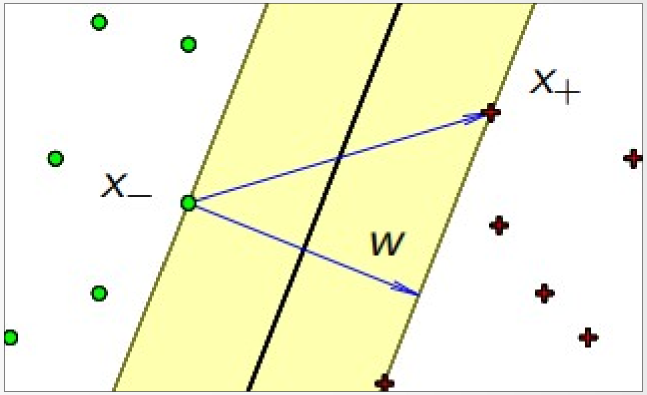
Линейные методы: SVM

постановка задачи

для линейно разделимого набора

$$M_i(w, w_0) = (\langle x_i, w \rangle - w_0) \cdot y_i$$

$$\begin{cases} \|w\|^2 \rightarrow \min\limits_{w, w0} \\ M_i(w, w_0) \geqslant 1 \end{cases}$$



для линейно НЕразделимого набора
система неравенств несовместна
решения нет

Линейные методы: SVM

эвристика для линейно НЕразделимого набора

ослабим ограничения

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_i \xi_i \to \min\limits_{w,w0,\xi} \\ M_i(w, w_0) \geqslant 1 - \xi_i \\ \xi_i \geqslant 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \xi_i \geqslant 1 - M_i \\ \xi_i \geqslant 0 \end{cases} \Rightarrow \xi_i = 1 - M_i$$

эквивалентная задача оптимизации

$$C \cdot \sum_i \left(1 - M_i(x, x_0)\right)_+ + \frac{1}{2}\|w\|^2 \to \min\limits_{w, w_0}$$

задача выпуклой квадратичной оптимизации

Линейные методы: SVM

решение задачи выпуклой квадратичной оптимизации

применение условий Каруша-Куна-Таккера

выписываем ф-цию Лагранжа и ищем её седловую точку
(приравниваем к нулю производную)

Функция Лагранжа: $\mathscr{L}(w, w_0, \xi; \lambda, \eta) =$

$$= \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i \big(M_i(w, w_0) - 1\big) - \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \big(\lambda_i + \eta_i - C\big)$$

Линейные методы: SVM

разбираем объекты $\mathbf{x}_i$ на три типа

1. $\lambda_i = 0;\ \ \eta_i = C;\ \ \xi_i = 0;\ \ M_i \geqslant 1.$
   — периферийные (неинформативные) объекты.
2. $0 < \lambda_i < C;\ \ 0 < \eta_i < C;\ \ \xi_i = 0;\ \ M_i = 1.$
   — опорные граничные объекты.
3. $\lambda_i = C;\ \ \eta_i = 0;\ \ \xi_i > 0;\ \ M_i < 1.$
   — опорные-нарушители.

опорным назовём объект $\mathbf{x}_i$, для которого $\lambda_i \neq 0$

$$a(x) = sign\left(\sum_i \lambda_i y_i \langle x_i, x\rangle - w_0\right)$$

Линейные методы: SVM

для решения задачи оптимизации и нахождения опорных объектов применяется алгоритм SMO (sequential minimal optimization)

после нахождения опорных объектов

классификатор приобретает следующий вид

$$a(x) = sign\left(\sum_i \lambda_i y_i \langle x_i, x\rangle - w_0\right)$$

$$\begin{cases} w = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i; \\ w_0 = \langle w, x_i \rangle - y_i, \end{cases}$$

Линейные методы: SVM

нелинейное обобщение - kernel trick

вместо скалярного произведения

будем использовать функцию-ядро

$$a(x) = sign\left(\sum_i \lambda_i y_i K(x_i, x) - w_0\right)$$

функция K - ядро
если для него существует отображение,
удовлетворяющее условиям скалярного произведения

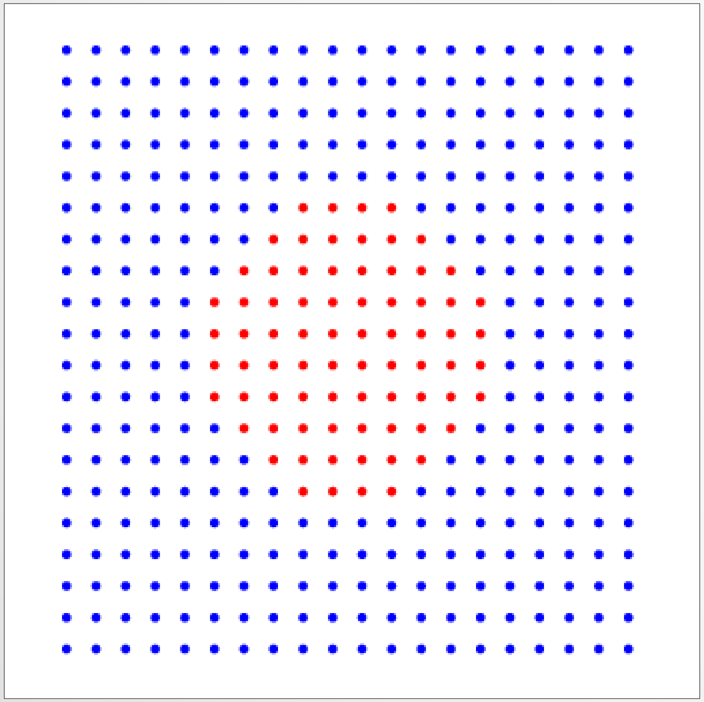
$$\exists\, \psi : K(x, x') = \langle \psi(x), \psi(x') \rangle$$

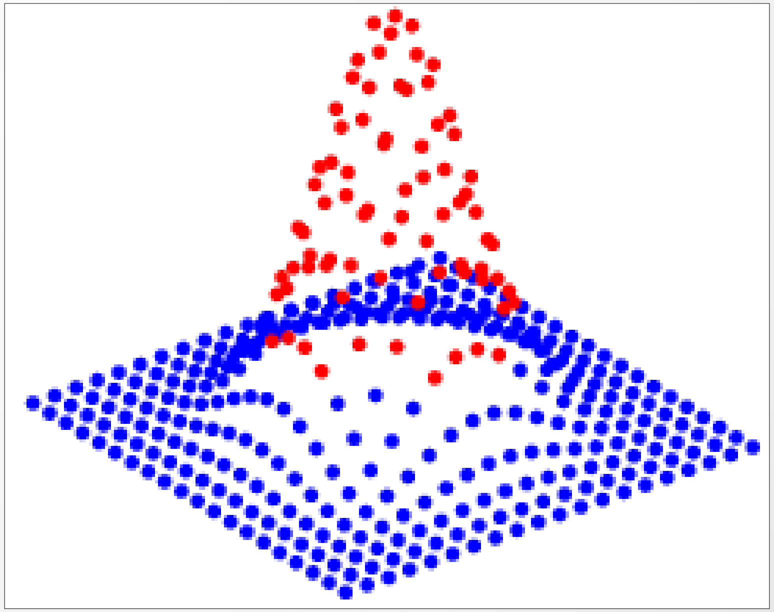
функция K симметрична и неотрицательно определена

Линейные методы: SVM

kernel trick

с помощью ядра отображаем данные
в пространство большей размерности
линейно неразделимая задача
превращается в линейно разделимую

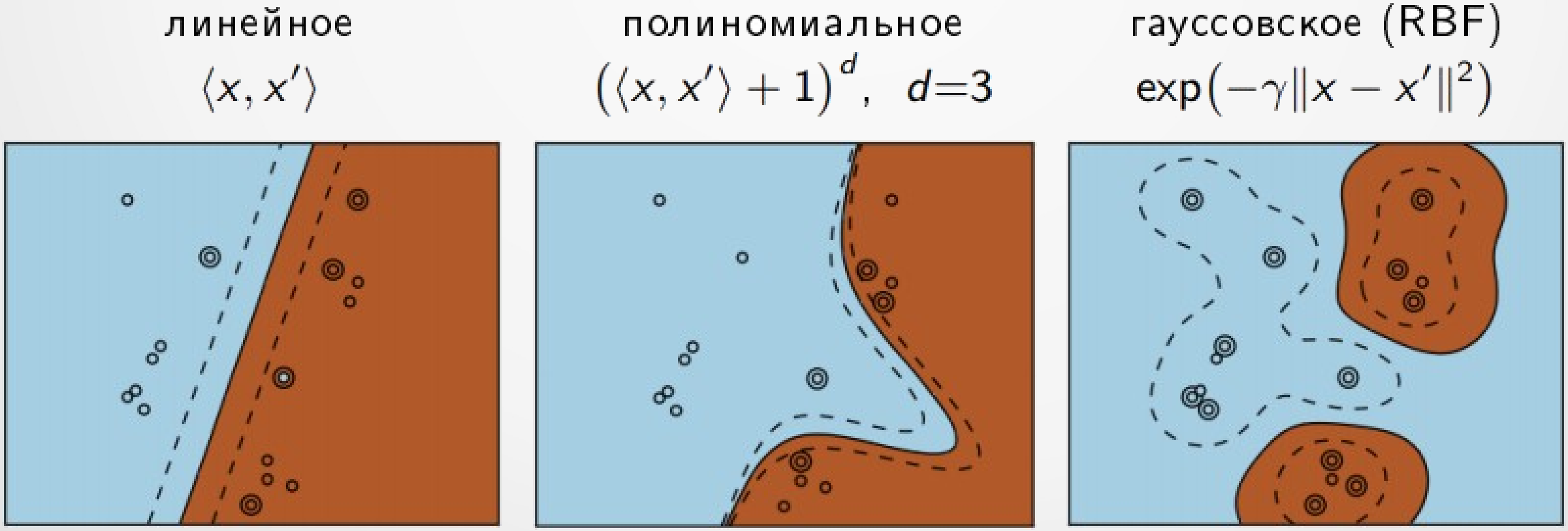




Линейные методы: SVM

kernel trick
с помощью ядра отображаем данные
в пространство большей размерности
линейно неразделимая задача
превращается в линейно разделимую

Примеры с различными ядрами $K(x, x')$



Линейные методы: итог

- линейные методы строят разделяющие поверхности в пространстве признаков
- использования нелинейных поверхностей позволяет разделять линейно неразделимые наборы
- аппроксимация пороговой ф-ции потерь позволяет использовать градиентные методы оптимизации
- метод стохастического градиента SGD хорошо подходит для обучения на больших данных
- метод обучения SVM как задача выпуклой квадратичной оптимизации имее единственное решение
- для обучения SVM применяется алгоритм SMO (sequential minimal optimization)
- применение ядер позволяет SVM разделять линейно неразделимые наборы, общих подходов для выбора ядер нет

Линейные методы: литература

git clone https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git

- Борисов Е.С. Классификатор на основе машины опорных векторов. http://mechanoid.kiev.ua/ml-svm.html
- К.В. Воронцов Линейные методы классификации: метод стохастического градиента.
- К.В. Воронцов Линейные методы классификации: метод опорных векторов.

Линейные методы

Вопросы ?

Линейные методы: практика

источники данных для экспериментов

sklearn.datasets
UCI Repository
kaggle

практика

- разделить данные на train/test (sklearn.train_test_split)
- посчитать метрики качества (confusion matrix, precision,recall, ROC/AUC)
- классифицировать набор с использованием sklearn.SVM