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

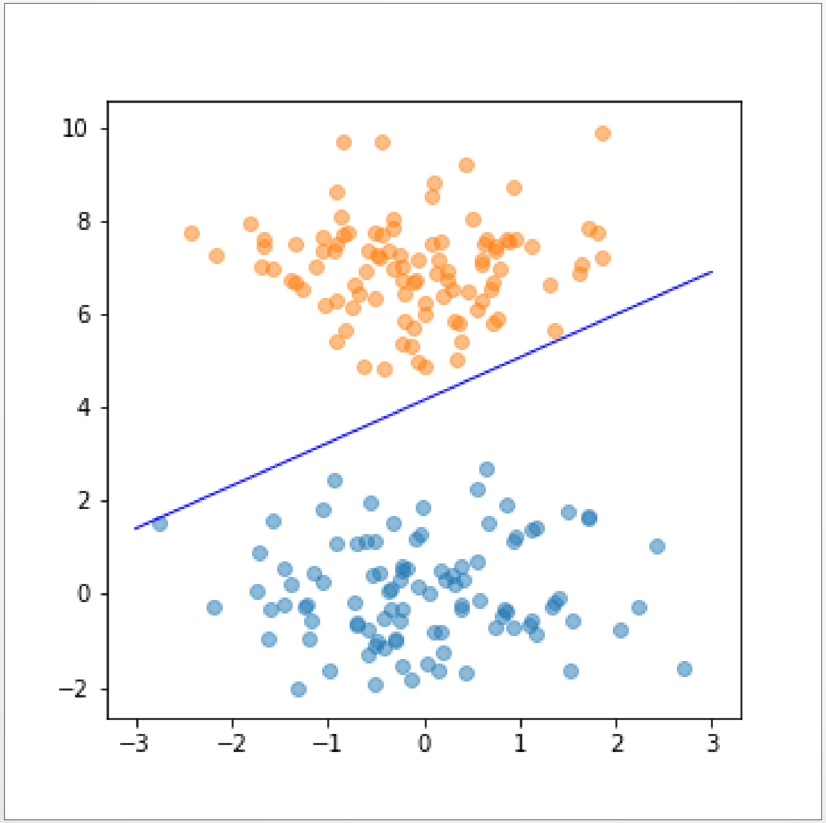
$$f(x,w)=0$$

Линейные методы: разделяющая поверхность

пример: линейно разделимые данные

разделяющая поверхность - прямая

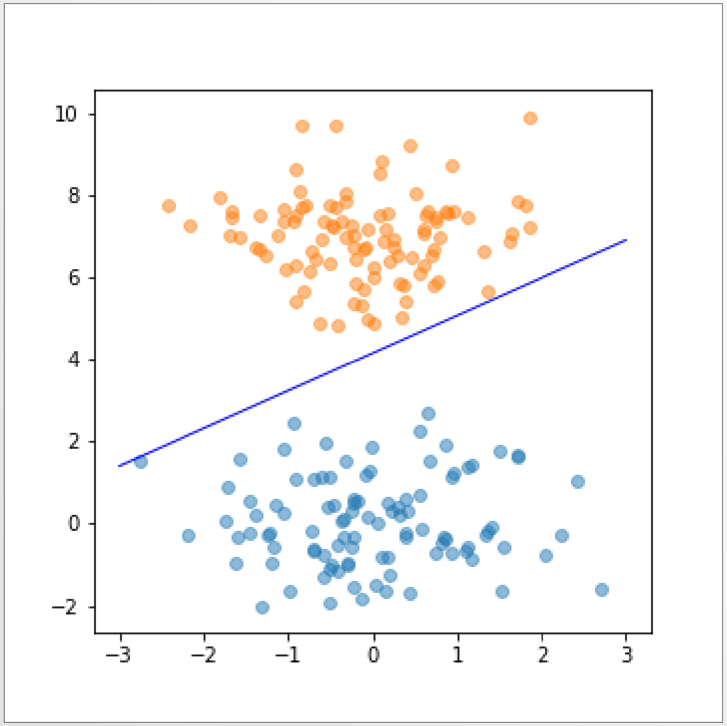
$$w_1 \cdot x + w_0 = 0$$



Линейные методы: отступы

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

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



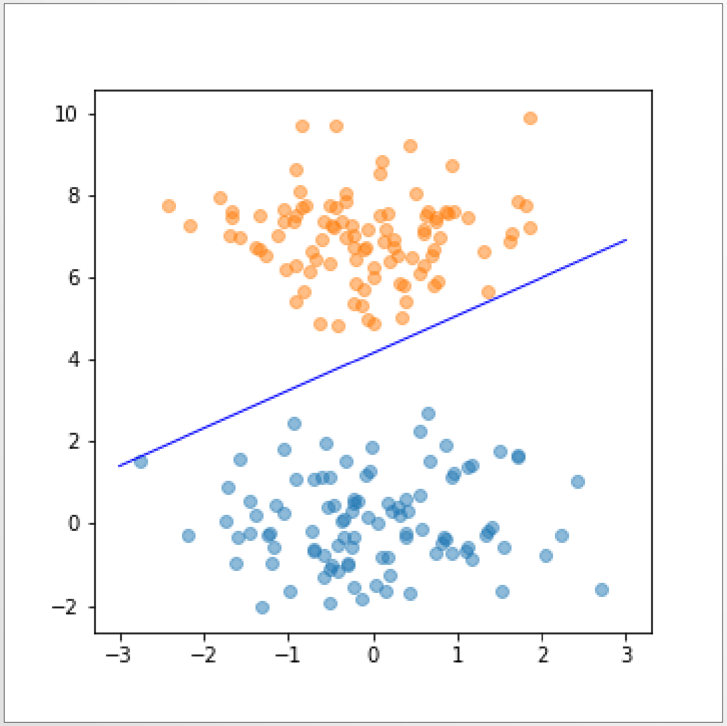
$y \in \{-1, 1\}$ - метка класса

$f(x, w)$ - 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**

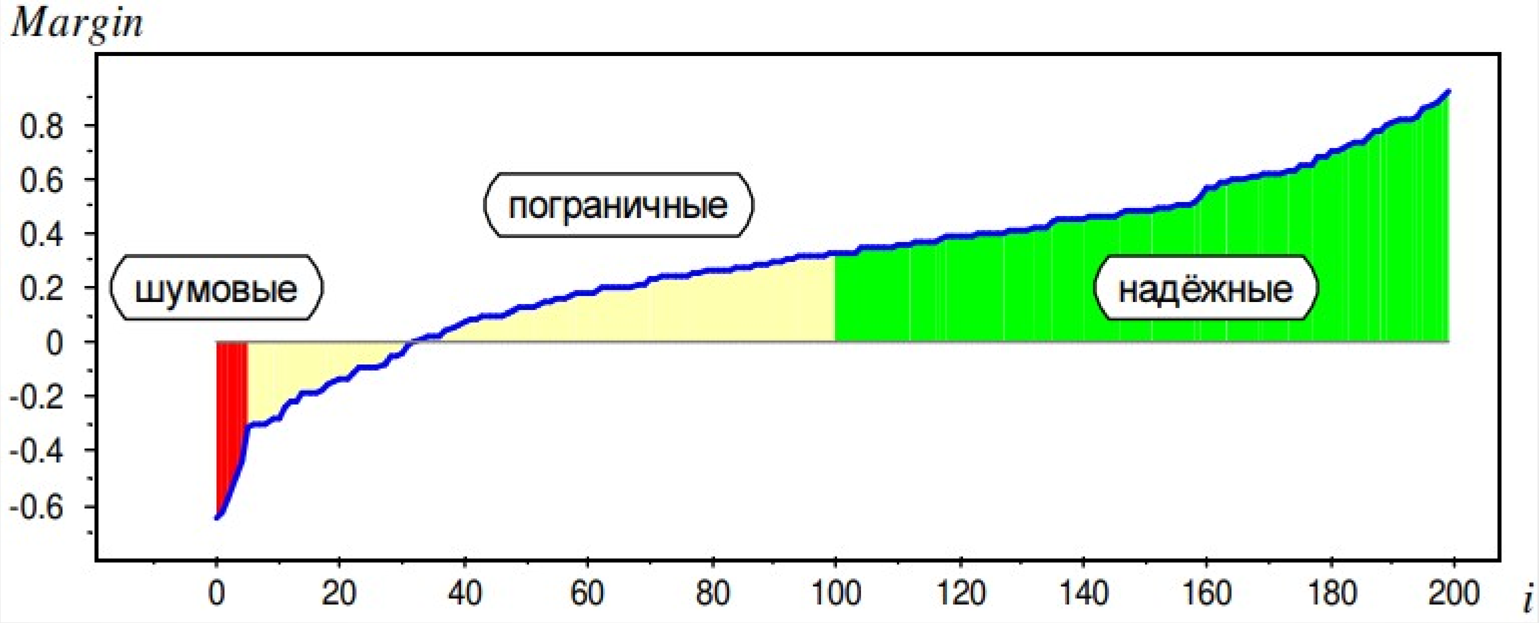
Линейные методы: отступы

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)

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

$M(x,w)=y\cdot f(x,w)$ - 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 М,

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)

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

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

Линейные методы

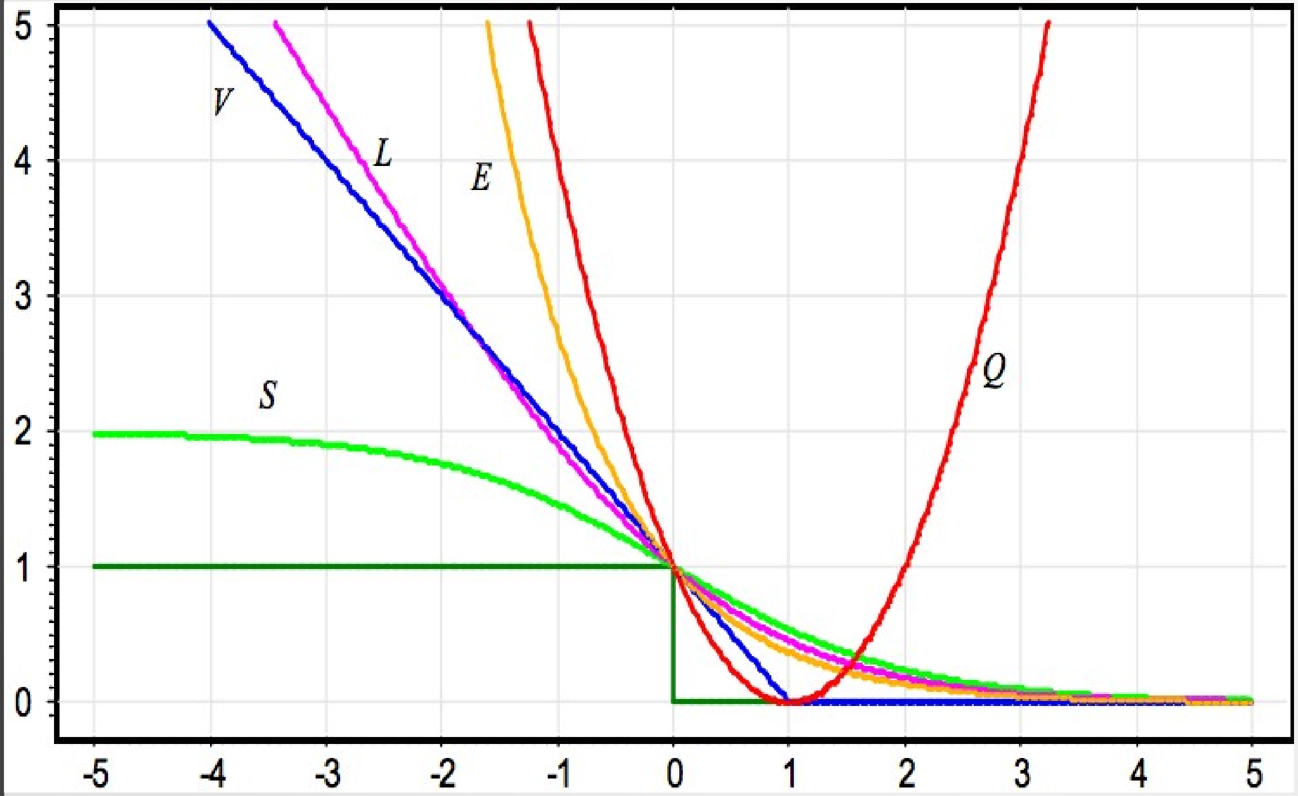
функционал эмпирического риска

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

[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

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

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

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

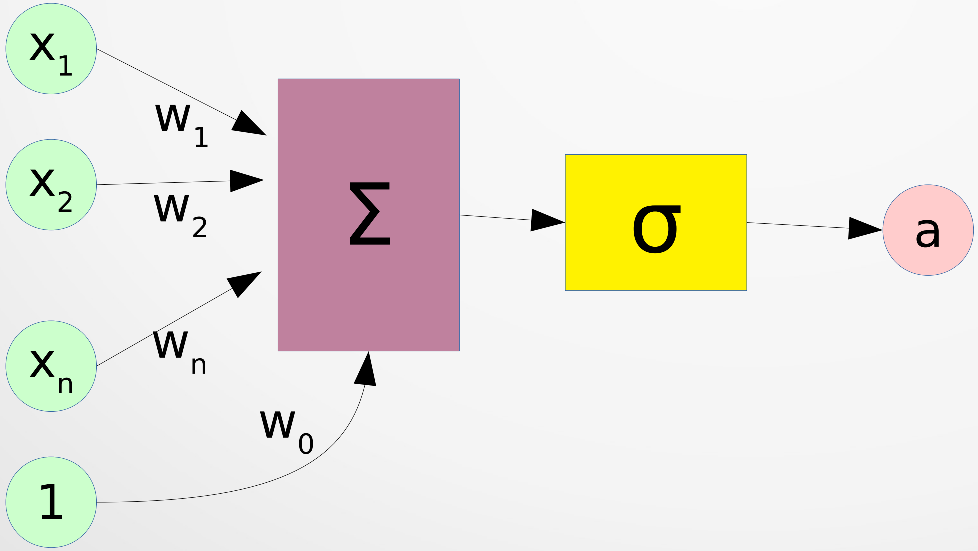
Линейные методы: линейный классификатор

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

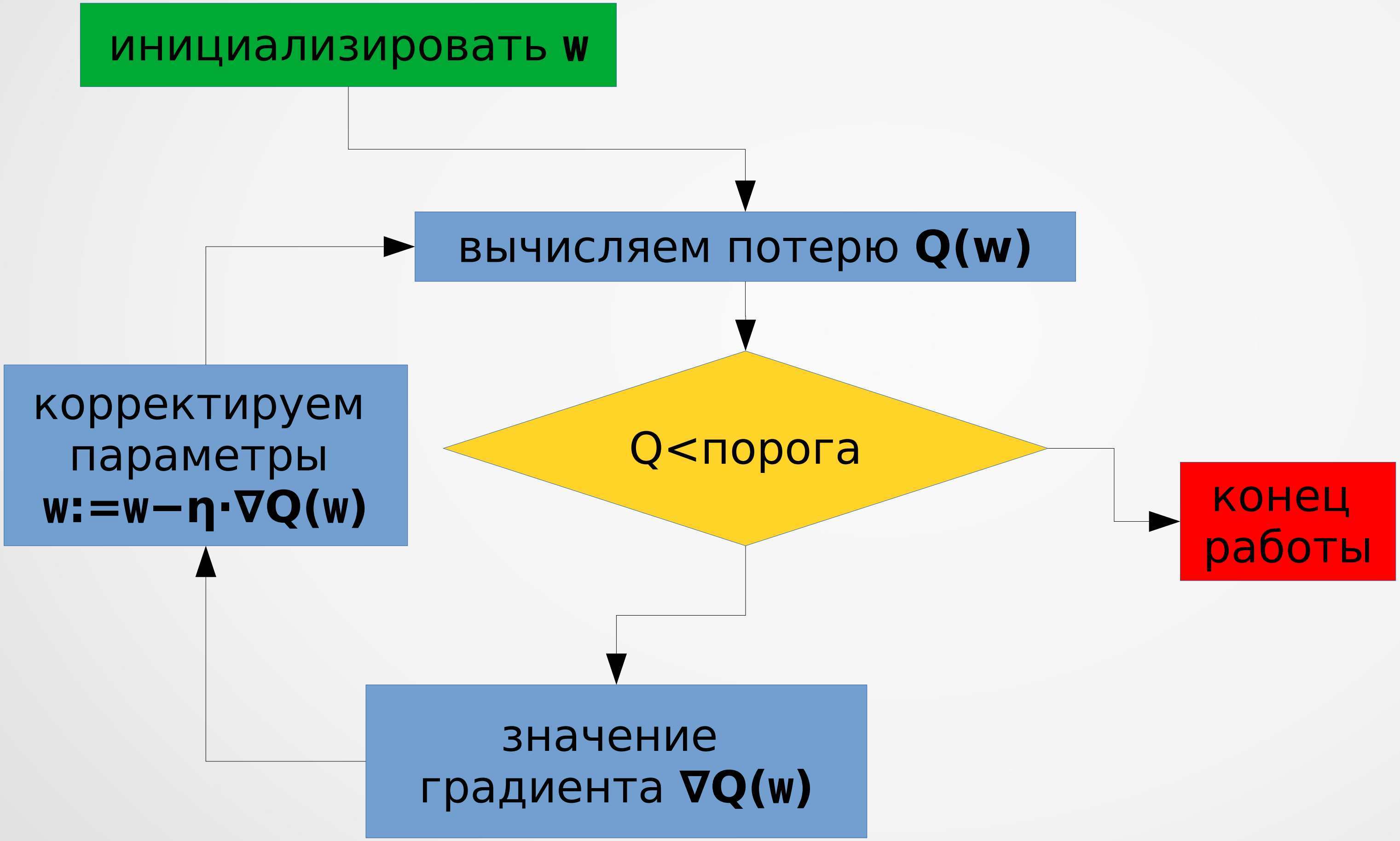
обучение классификатора как задача оптимизации

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

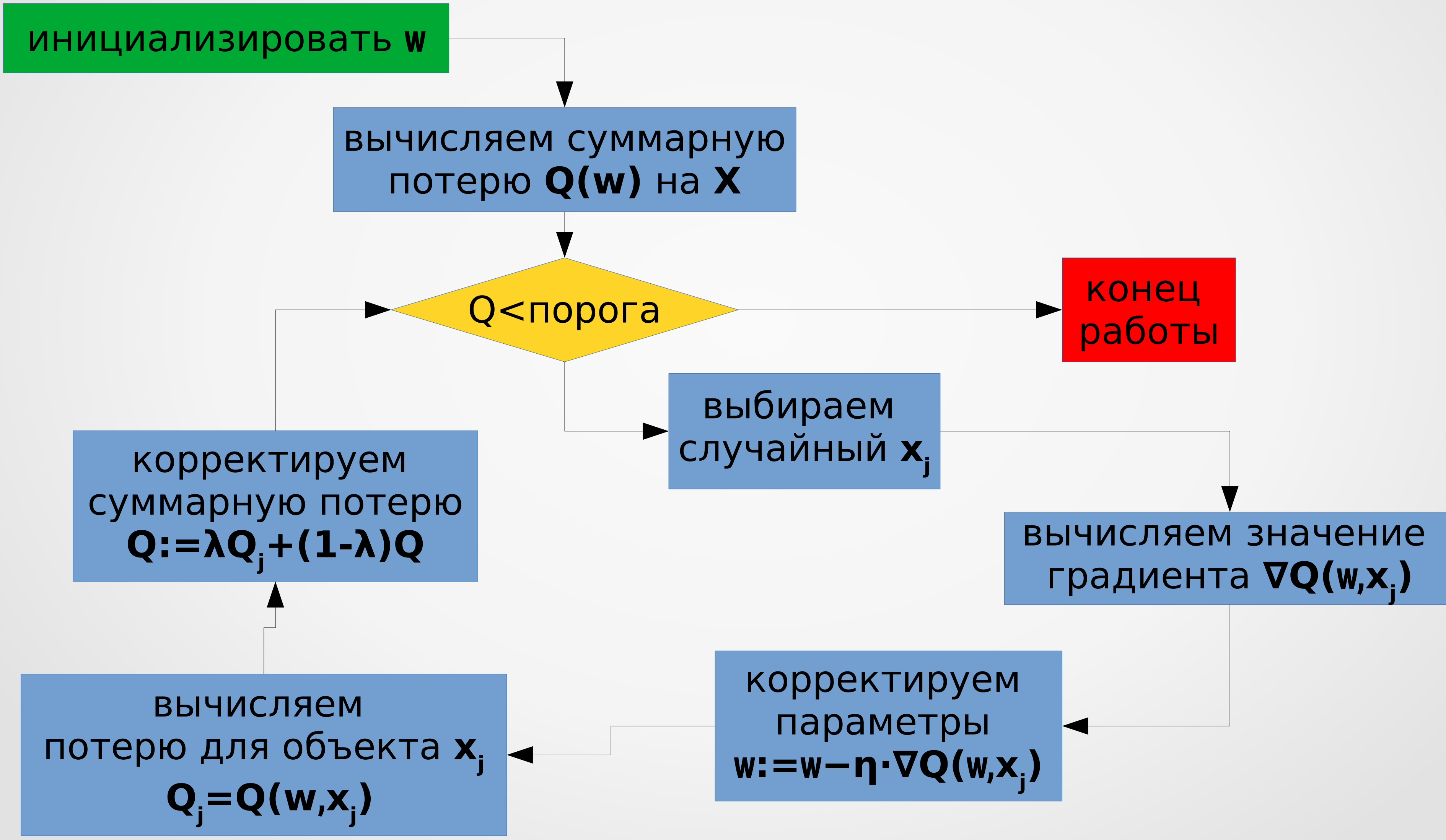
можно использовать градиентные методы

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

Линейные методы: градиентный спуск (GD)



Линейные методы: стохастический градиентный спуск (SGD)



Линейные методы

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

<u>задача регрессии</u>

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

Линейные методы

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

задача регрессии

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

Линейные методы

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

<u>задача регрессии</u>

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

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>

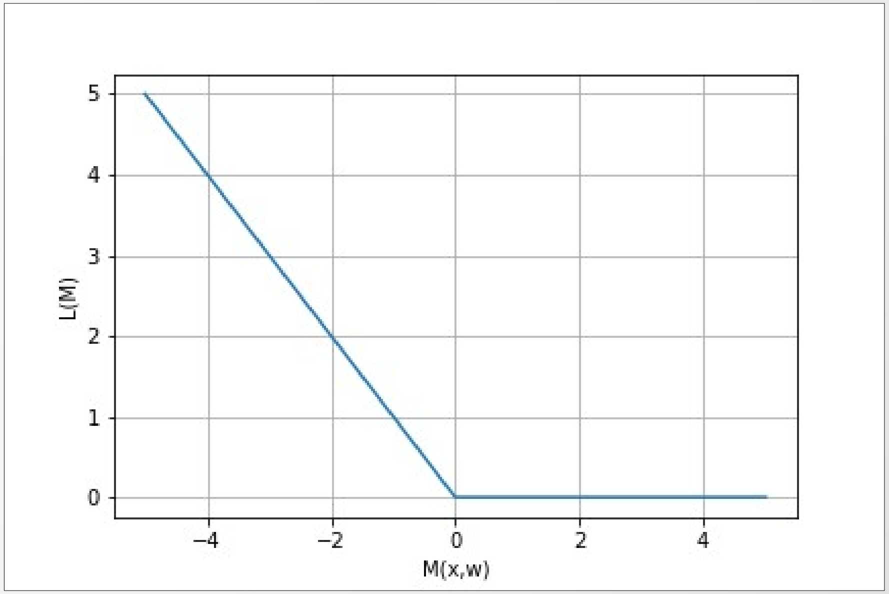
$x \in \mathbb{R}^n \quad y \in \{-1, 1\} \quad a(x, w) = sign(\langle x, w \rangle)$

Линейные методы

частный случай 2:
правило обучения Хебба (1949)

задача классификации

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



Линейные методы

частный случай 2:
правило обучения Хебба (1949)

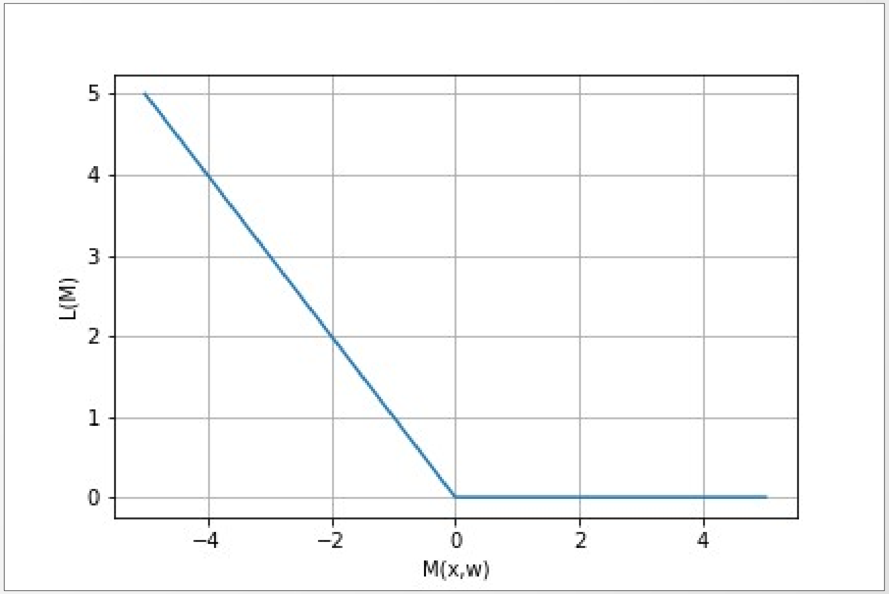
<u>задача классификации</u>

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

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

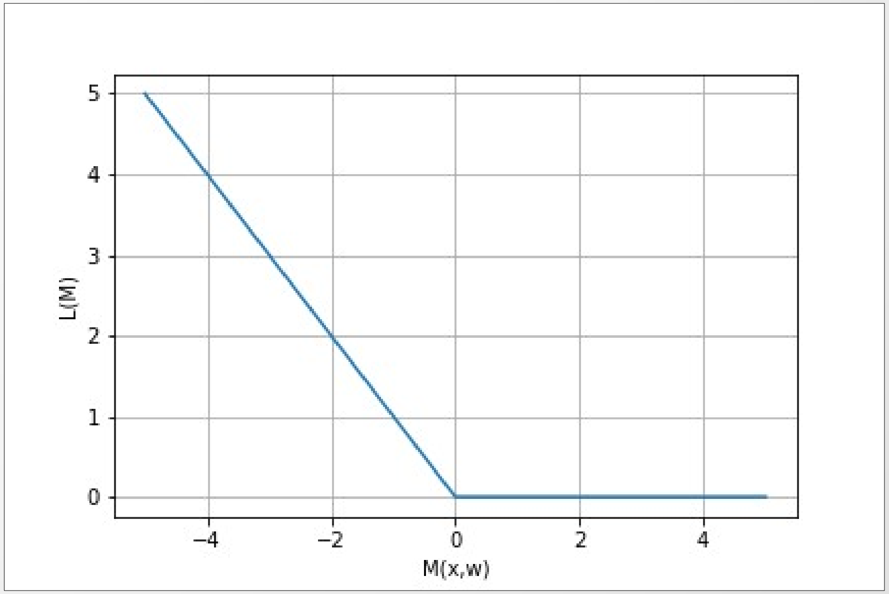
частный случай 3:
правило обучения Розенблатта (1957)

<u>задача классификации</u>

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

градиентный шаг

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



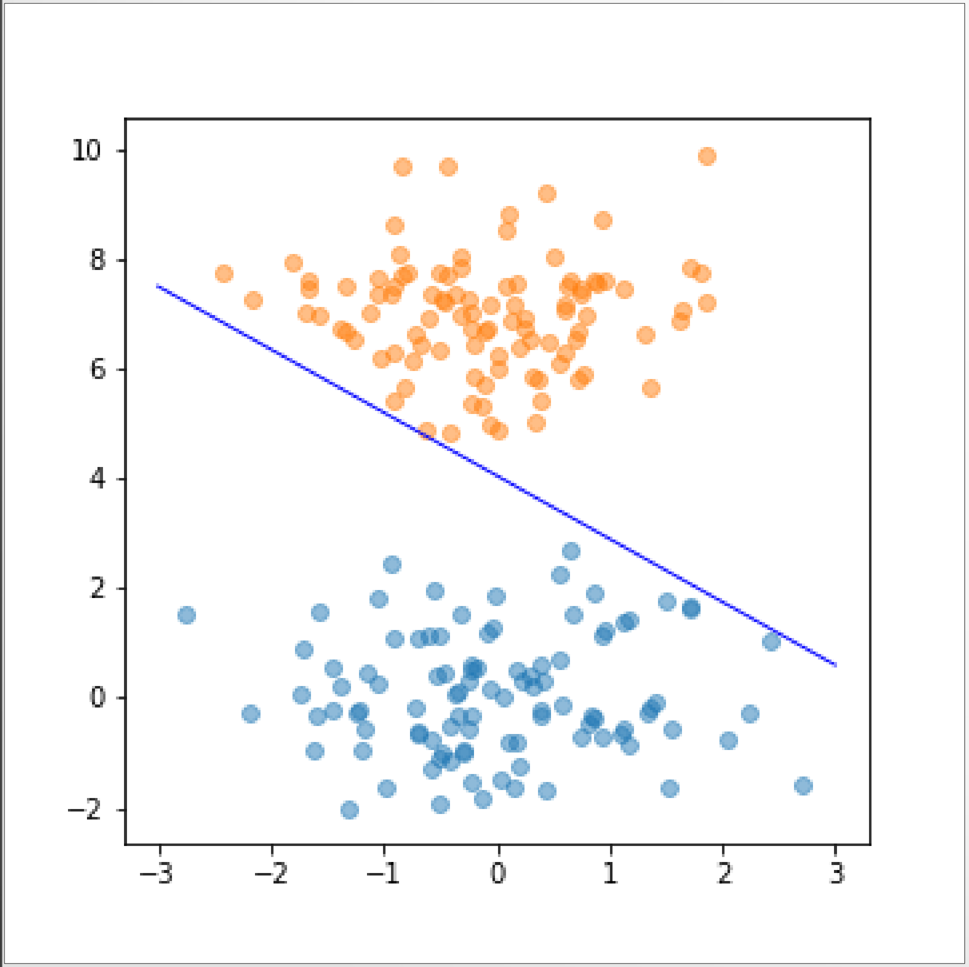
Линейные методы

«зоопарк» методов

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

Линейные методы: SVM

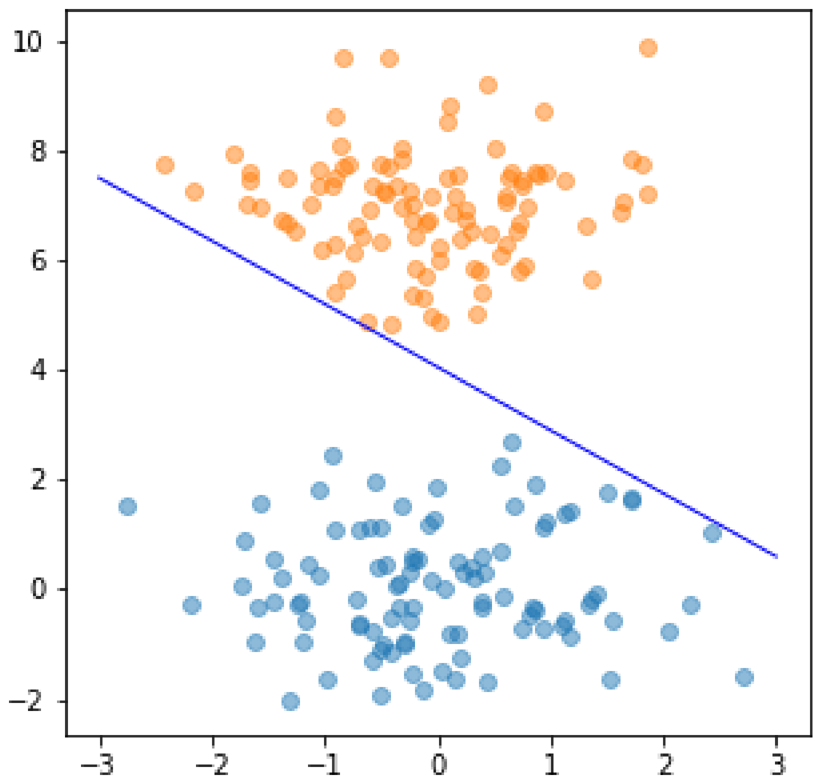
рассмотрим линейно разделимый набор

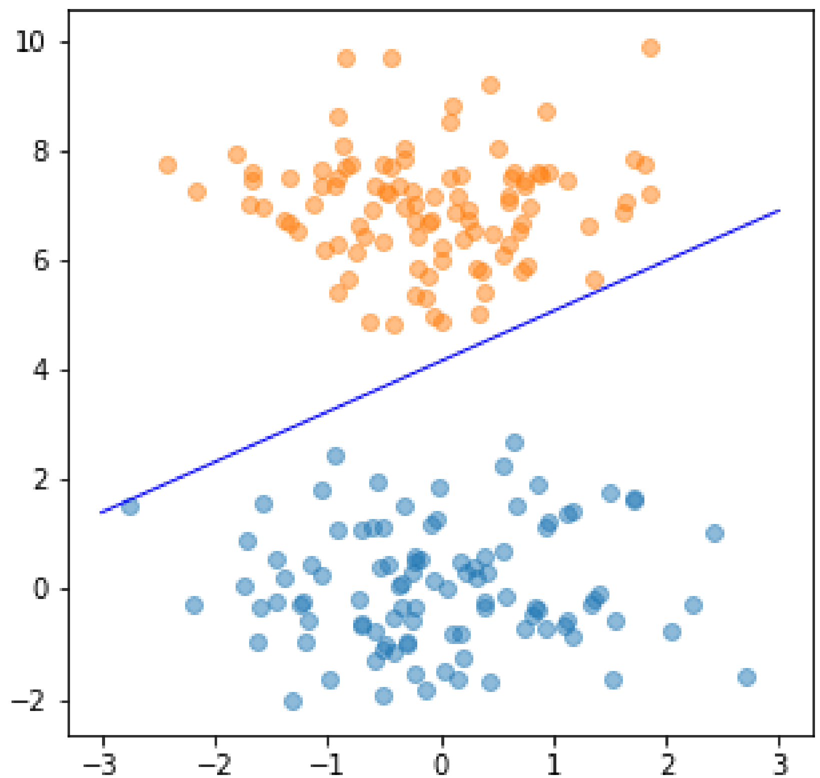


Линейные методы: SVM

рассмотрим линейно разделимый набор

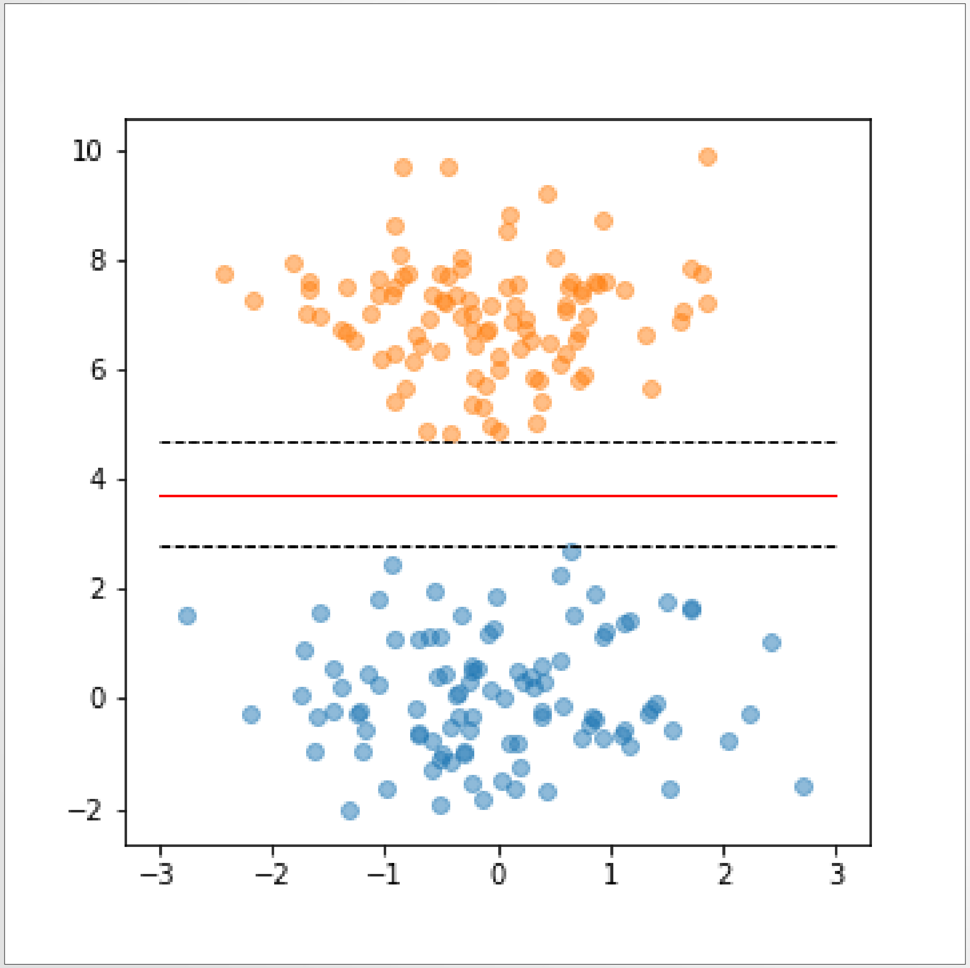
много разделяющих гиперплоскостей





Линейные методы: SVM

разделительная полоса



цель: увеличить отступы,
получить полосу максимальной ширины

Линейные методы: SVM

модель: машина опорных векторов (SVM)

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

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

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

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

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

Линейные методы: SVM

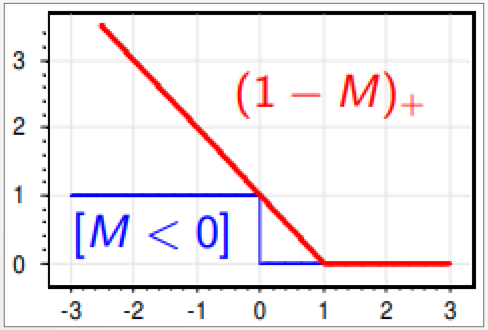
замена пороговой ф-ции потери на кусочно линейную

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

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

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

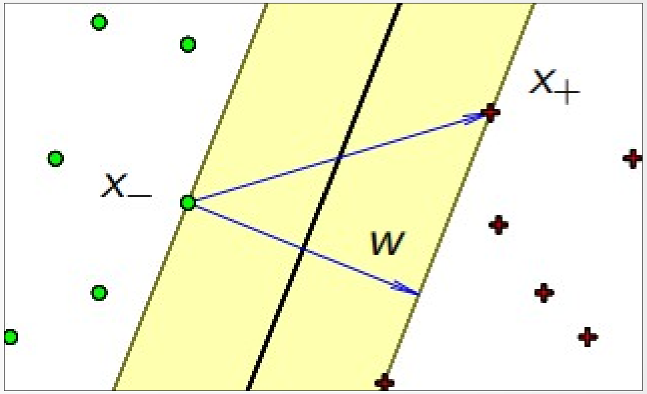
Линейные методы: SVM

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

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

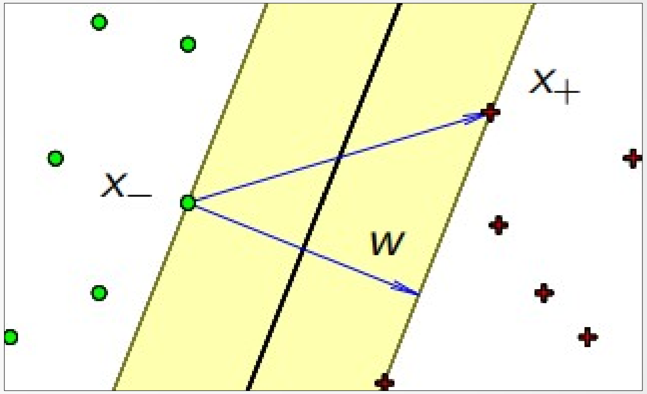
Линейные методы: SVM

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

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

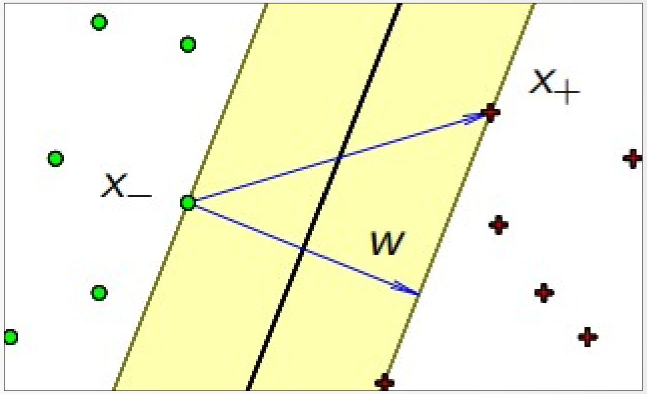
Линейные методы: SVM

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

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

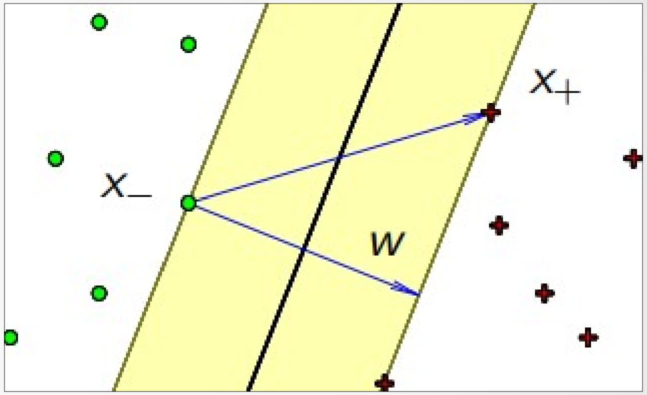
Линейные методы: SVM

постановка задачи

для линейно разделимого набора

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

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



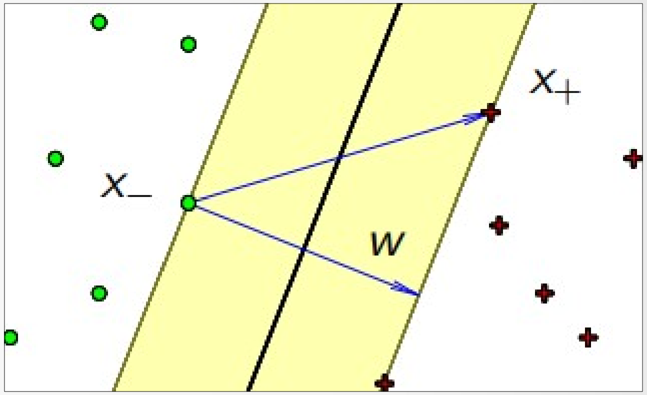
Линейные методы: SVM

постановка задачи

для линейно разделимого набора

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

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



для линейно НЕразделимого набора
система неравенств несовместна
решения нет

Линейные методы: SVM

эвристика для линейно НЕразделимого набора

ослабим ограничения

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

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

эквивалентная задача оптимизации

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

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

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

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

после решения задачи оптимизации и нахождения опорных объектов

классификатор приобретает 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

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

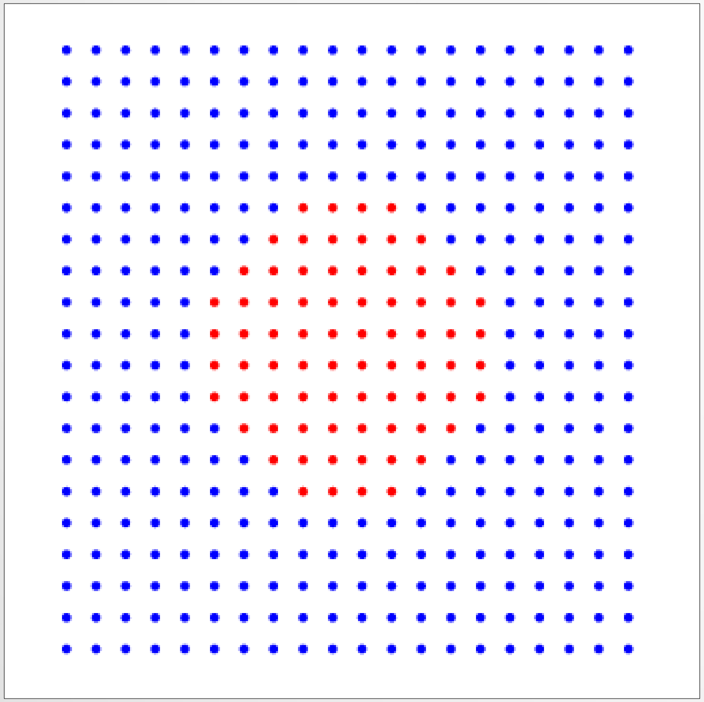
функция K - ядро
если для него существует отображение,
удовлетворяющее условиям скалярного произведения

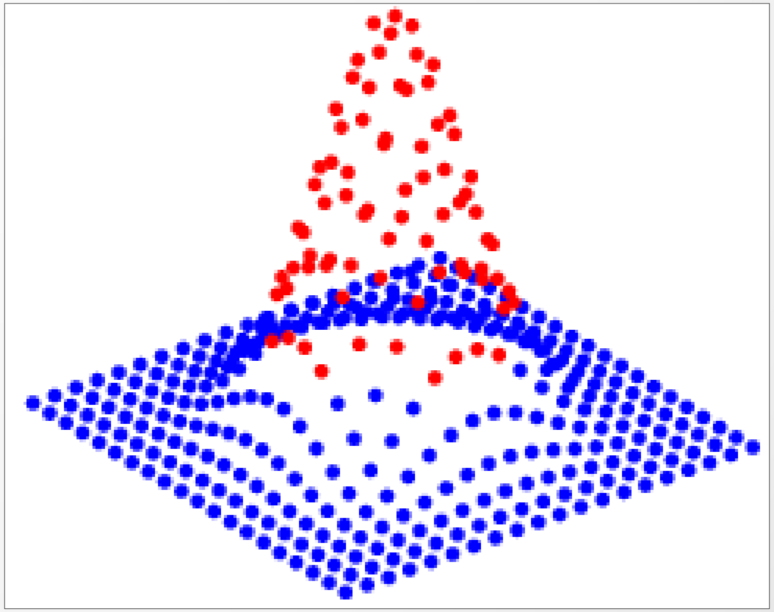
$$\exists\, \psi : K(x, x') = \langle \psi(x), \psi(x') \rangle$$

функция K симметрична и неотрицательно определена

Линейные методы: SVM

kernel trick
повышаем размерность пространства
линейно неразделимая задача
превращается в линейно разделимую



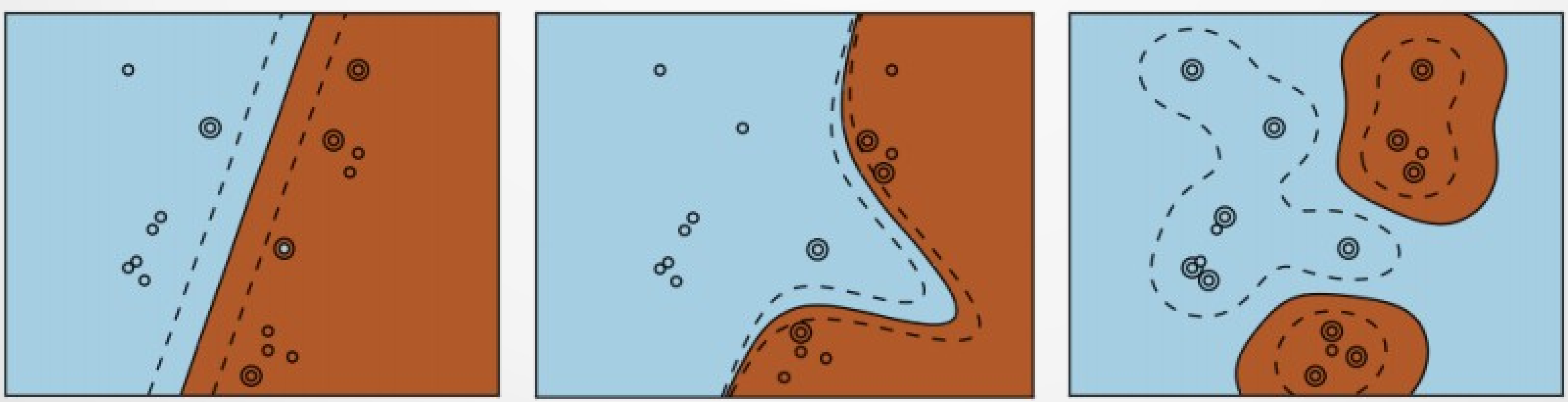


Линейные методы: SVM

kernel trick
повышаем размерность пространства
линейно неразделимая задача
превращается в линейно разделимую

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

линейное	полиномиальное	гауссовское (RBF)
$\langle x, x' \rangle$	$\left(\langle x, x' \rangle + 1\right)^d,\ \ d{=}3$	$\exp\left(-\gamma \lVert x - x' \rVert^2\right)$



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

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