ТЕХНОСФЕРА

Лекция 10
Линейные модели
алгоритмическая перспектива

Николай Анохин

25 апреля 2016 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

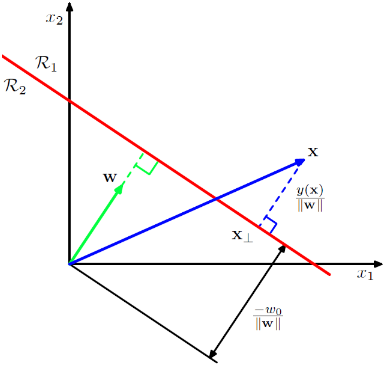
$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + w_0$$

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

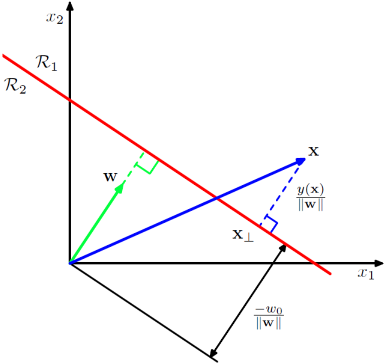
Разделяющая поверхность

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

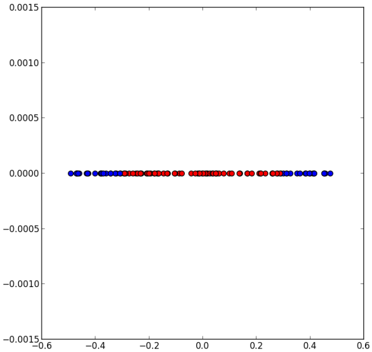
1. $\mathbf{w}$ – нормаль к $\mathcal{D}$
2. $d = -\frac{w_0}{\|\mathbf{w}\|}$ – расстояние от центра координат до $\mathcal{D}$
3. $r(\mathbf{x}) = \frac{y(x)}{\|\mathbf{w}\|}$ – расстояние от $\mathcal{D}$ до $\mathbf{x}$

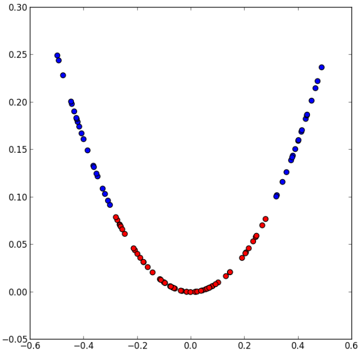
Положим $x_0 \equiv 1$, получим модель

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



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

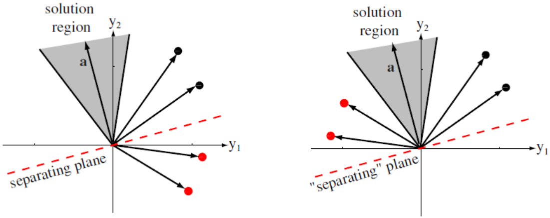
$$y(\mathbf{x}) = \sum w_i \phi_i(\mathbf{x})$$

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

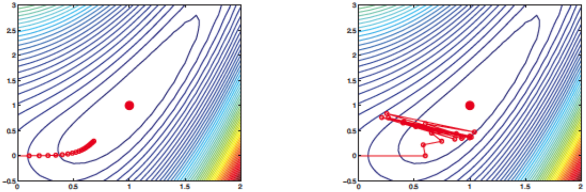
$$\nabla J_c(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} (p(y = 1|\phi_n) - y_n)\phi_n$$

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

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

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

```
function newton(grad, hessian, a0, epsilon):
    initialise eta(k)
    k = 0
    a = a0
    do:
        k = k + 1
        g = grad(a)
        H = hessian(a)
        d = solve(H * d = -g) # find d = - inv(H) * g
        a = a + eta(k) d
    until convergence
    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

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

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

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

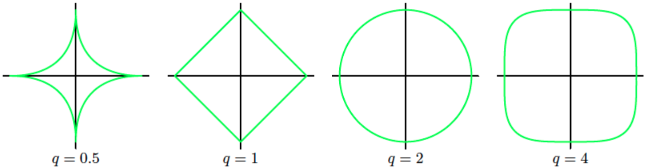
Снова переобучение

Оптимизируем критерий с регуляризацией

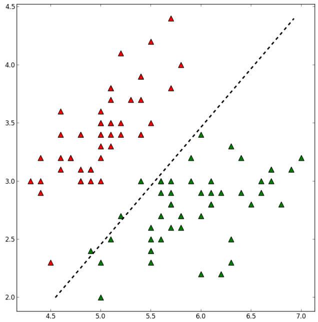
$$J_1(a) = J(a) + \lambda J_R(a)$$

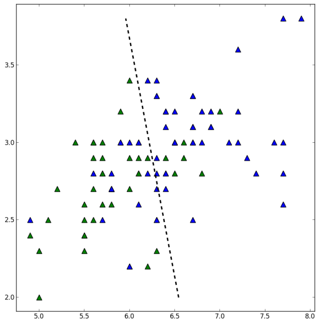
λ – коэффициент регуляризации

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



Перцептрон: результаты





SVM

Максимальный зазор

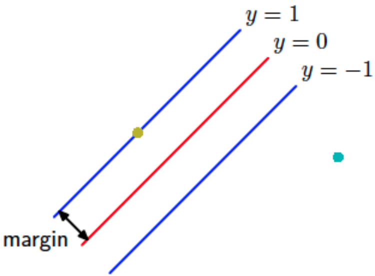
Margin – наименьшее расстояние между РП и обучающим объектом.

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

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

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

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

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

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

Дифференцируем по $\mathbf{w}$ и b

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

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

Сопряженная задача

Сопряженная 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

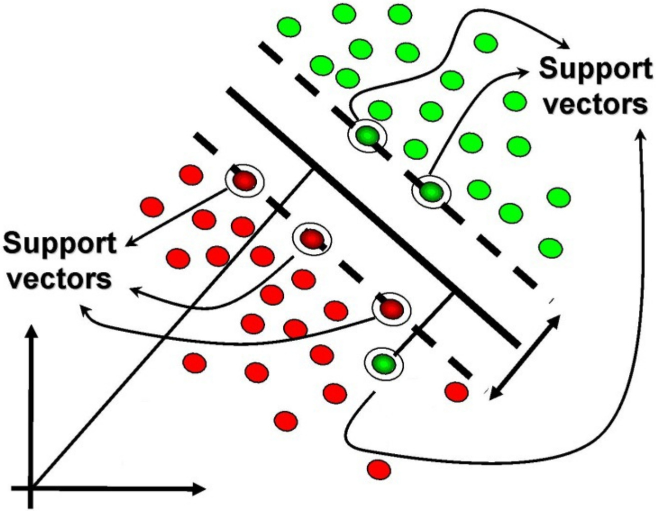
Задача

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):

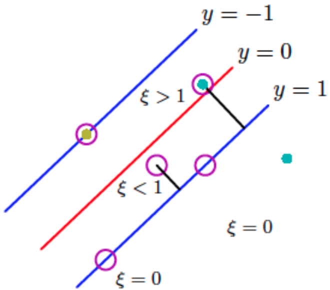
$$\xi_j = \begin{cases} 0, & \text{если } y(\mathbf{x_j})t_j \geq 1 \\ |t_j - y(\mathbf{x}_j)|, & \text{иначе} \end{cases}$$

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

Сопряженная 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
- $0 < a_j < C$ – 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

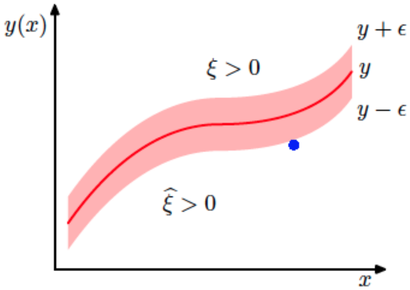
Переменные $\xi_j \geq 0$, $\hat{\xi}_j \geq 0$ (slacks):

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

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

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 $\phi(\mathbf{x})$

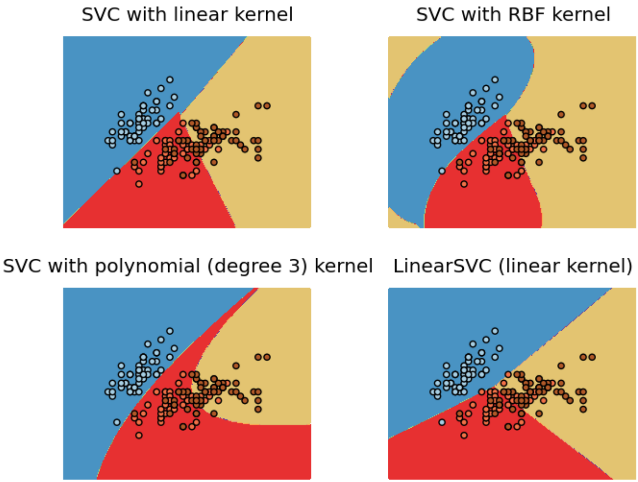
$$\phi(\mathbf{x}) = (1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2).$$

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
ALLACRONYMS

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