Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Тема: Линейные классификаторы

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем

План

1. Понятие линейной классификации

План

1. Понятие линейной классификации
2. Биологический нейрон и перцептрон

План

1. Понятие линейной классификации
2. Биологический нейрон и перцептрон
3. Функции активации

План

1. Понятие линейной классификации
2. Биологический нейрон и перцептрон
3. Функции активации
4. Эмпирические правила обучения и SGD

План

1. Понятие линейной классификации
2. Биологический нейрон и перцептрон
3. Функции активации
4. Эмпирические правила обучения и SGD
5. Теорема Новикова

План

1. Понятие линейной классификации
2. Биологический нейрон и перцептрон
3. Функции активации
4. Эмпирические правила обучения и SGD
5. Теорема Новикова
6. Примеры линейных классификаторов: логистическая регрессия, оптимальный байесовский классификатор

Понятие линейной классификации

Линейный классификатор

Это алгоритм классификации, основанный на построении **линейной** разделяющей поверхности

Понятие линейной классификации

Линейный классификатор

Это алгоритм классификации, основанный на построении **линейной** разделяющей поверхности

- В случае **двух** классов разделяющей поверхностью является **гиперплоскость**, которая делит пространство признаков на два полупространства

Понятие линейной классификации

Линейный классификатор

Это алгоритм классификации, основанный на построении **линейной** разделяющей поверхности

- В случае **двух** классов разделяющей поверхностью является **гиперплоскость**, которая делит пространство признаков на два полупространства
- В случае числа классов **больше двух** разделяющая поверхность **кусочно-линейна**

Разделяющая поверхность: напоминание

- Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$

Разделяющая поверхность: напоминание

- Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$
- Будем алгоритм искать в виде $a(x, w) = \operatorname{sign} g(x, w)$, где $g(x, w)$ - дискриминантная функция, а w - вектор параметров

Разделяющая поверхность: напоминание

- Рассмотрим задачу бинарной классификации: $X \to Y$, $Y = \{+1, -1\}$ на обучающей выборке $X^m = (x_i, y_i)_{i=1}^m$
- Будем алгоритм искать в виде $a(x, w) = \operatorname{sign} g(x, w)$, где $g(x, w)$ - дискриминантная функция, а w - вектор параметров
- $g(x, w) = 0$ - **разделяющая поверхность** (граница между классами); тогда ошибка классификации $a(x_i, w) \neq y_i \Leftrightarrow y_i g(x_i, w) < 0$.

Линейная классификация: определения

Два класса

Дискриминантная функция:
$g(x, w) = \sum_{j=1}^{n} w_j f_j - w_0$, где
$f_j : X \to \mathbb{R}$ – числовые признаки.
Алгоритм классификации
$a(x, w) = \mathrm{sign}(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j - w_0)$.
Если ввести константный признак $f_0 \equiv -1$, то
$x = (f_0(x), \dots, f_n(x))$,
и алгоритм в векторной записи:
$a(x, w) = \mathrm{sign}(\langle w, x \rangle)$.
$y_i g(x_i, w) = \langle w, x_i \rangle y_i$

Два класса

Дискриминантная функция:
$g(x, w) = \sum_{j=1}^{n} w_j f_j - w_0$, где
$f_j : X \to \mathbb{R}$ – числовые признаки.
Алгоритм классификации
$a(x, w) = \operatorname{sign}(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j - w_0)$.
Если ввести константный признак $f_0 \equiv -1$, то
$x = (f_0(x), \dots, f_n(x))$,
и алгоритм в векторной записи:
$a(x, w) = \operatorname{sign}(\langle w, x \rangle)$.
$y_i g(x_i, w) = \langle w, x_i \rangle y_i$

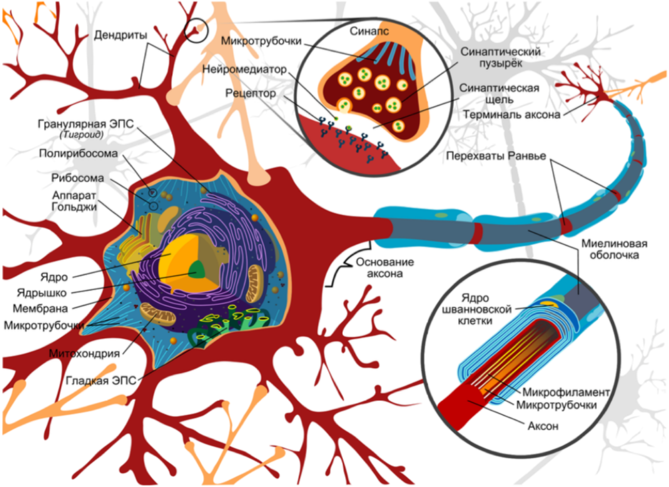
Произвольное число классов

У каждого класса $c \in Y$ свой вектор весов: $w^c = (w_0^c, \dots, w_n^c)$.
Линейный классификатор:
$a(x, w) = \arg\max_{c \in Y} \sum_{j=0}^{n} w_j^c f_j(x) = \arg\max_{c \in Y} \langle w^c, x \rangle$.
$y_i g(x_i, w) = \langle x_i, w^{y_i} \rangle - \max_{c \in Y, c \neq y_i} \langle x_i, w^c \rangle$

Замечание. Обратите внимание на разницу со случаем двух классов!

Время для вопросов

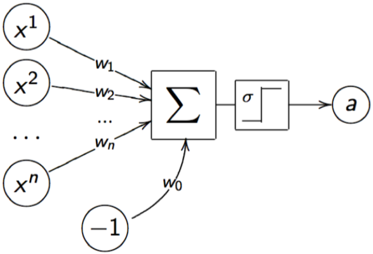
- Кора головного мозга содержит 10^{11} нейронов
- Каждый нейрон связан синапсами с $10^3 - 10^4$ другими нейронами
- Скорость распространения импульсов 100 м/с
- Входы (много) - дендриты
- Выход (один) - аксон



Предложена МакКалоком и Питтсом в 1943 году[1].

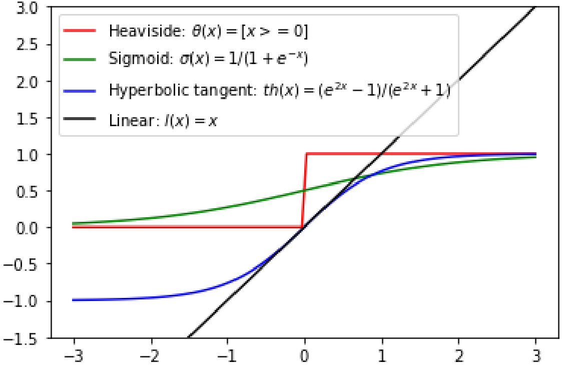
$$a(x, w) = \sigma(\langle w, x \rangle) = \sigma(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j - w_0)$$

где $\sigma(x)$ - некоторая функция активации (например, sign).



[1] McCulloch, W. S. and Pitts, W. (1943). "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity"

Примеры функций активаций



Историческая справка: правила Хэбба и Розенблатта

Правило Хэбба, 1949[2]

В задаче бинарной ($Y = \{-1, +1\}$) классификации линейный классификатор:
$a(x, w) = \text{sign}(\langle w, x \rangle)$
Функция потерь: $L(a(x_i, w), y_i) = [a(x_i, w) \neq y_i]$.
Шаг обновления: если $a(x_i, w^{(t)}) \neq y_i \Leftrightarrow a(x_i, w^{(t)})y_i < 0$, то $w^{(t+1)} = w^{(t)} + \eta x_i y_i$

[2] Hebb, D. O. (1949). "The organization of behavior: a neuropsychological theory."
[3] Rosenblatt, F. (1957). "The perceptron, a perceiving and recognizing automaton"

Историческая справка: правила Хэбба и Розенблатта

Правило Хэбба, 1949[2]

В задаче бинарной ($Y = \{-1, +1\}$) классификации линейный классификатор:
$a(x, w) = \text{sign}(\langle w, x \rangle)$
Функция потерь: $L(a(x_i, w), y_i) = [a(x_i, w) \neq y_i]$.
Шаг обновления: если $a(x_i, w^{(t)}) \neq y_i \Leftrightarrow a(x_i, w^{(t)})y_i < 0$, то $w^{(t+1)} = w^{(t)} + \eta x_i y_i$

Правило перцептрона Розенблатта, 1957[3]

Пусть $X = \{0, 1\}^n$, $Y = \{0, +1\}$, линейный классификатор — это функция Хевисайда $a(x, w) = \theta(\langle w, x \rangle) = [\langle w, x \rangle > 0]$. Тогда:
если $a(x_i, w^{(t)}) \neq y_i$: $w^{(t+1)} = w^{(t)} + \eta x_i$, если $y_i = 1$, и $w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta x_i$, если $y_i = 0$

[2] Hebb, D. O. (1949). "The organization of behavior: a neuropsychological theory."
[3] Rosenblatt, F. (1957). "The perceptron, a perceiving and recognizing automaton"

SGD для линейной регрессии: ADALINE

В задаче регрессии функция потерь:

$$L(a(x_i, w), y_i) = \frac{1}{2}(a(x_i, w) - y_i)^2$$

Эмпирическое правило обновления весов — т.н. **дельта-правило**:

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta(a(x_i, w^{(t)}) - y_i)x_i$$

Адаптивный линейный нейрон (ADAptive Linear NEuron) ADALINE предложен Уидроу и Хоффом в 1960[4]: $a(x, w) = \langle w, x \rangle$

Дельта-правило в случае ADALINE совпадает с градиентным шагом стохастического градиентного спуска:

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta(\langle w^{(t)}, x_i \rangle - y_i)x_i$$

[4] Widrow, B. and Hoff, M. E. (1960). "Adaptive switching circuits"

SGD как объединяющая сила правил обновления

Дельта-правило (эмпирическое правило обновления весов):

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - \eta(a(x_i, w^{(t)}) - y_i)x_i$$

Т.о., правило Хэбба и правило Розенблатта — суть одно и то же (а именно, дельта-правило), и совпадают с правилом ADALINE (которое является градиентным шагом стохастического градиентного спуска) с заменой $\langle w^{(t)}, x_i \rangle$ на:

- $a(x, w) = \operatorname{sign}(\langle w, x \rangle)$ в случае правила Хэбба,
- $a(x, w) = \theta(\langle w, x \rangle)$ в случае правила Розенблатта.

Теорема Новикова[5]

Задача бинарной классификации $X = \mathbb{R}^{n+1}$, $Y = \{-1, +1\}$.

Теорема Новикова, 1962

Пусть выборка X^m линейно разделима, т.е. $\exists \tilde{w}, ||\tilde{w}|| = 1, \exists \delta > 0 : \langle \tilde{w}, x_i \rangle y_i > \delta$ для всех $i = 1, ..., m$. Пусть начальный вектор весов $w^0 = 0$. Также в процедуре обучения каждый объект обучающей выборки появляется повторно через некоторый конечный интервал времени.

Тогда алгоритм SGD с правилом Хэбба находит вектор весов w:

- разделяющий выборку без ошибок,
- при любом шаге градиентного спуска η,
- независимо от порядка предъявления x_i,
- за конечное число исправлений вектора w: $t_{max} \leq \frac{1}{\delta^2} \max_i ||x_i||^2$

[5] Novikoff, A. (1962). "On Convergence Proofs on Perceptrons"

С одной стороны,
$\langle \tilde{w}, w^t \rangle = \langle \tilde{w}, w^{t-1} \rangle + \eta \langle \tilde{w}, x_i \rangle y_i > \langle \tilde{w}, w^{t-1} \rangle + \eta\delta > \dots > \langle \tilde{w}, w^0 \rangle + t\eta\delta = t\eta\delta$.
С другой стороны, поскольку выборка конечна, $\exists D > 0 : ||x_i|| < D$ для всех i. В силу этого $||w^t||^2 = ||w^{t-1}||^2 + \eta^2 ||x_i||^2 + 2\eta \langle w^{t-1}, x_i \rangle y_i$. Так как для применения правила Хэбба должно быть $\langle w^{t-1}, x_i \rangle y_i < 0$, то
$||w^t||^2 < ||w^{t-1}||^2 + \eta^2 D^2 < \dots < ||w^0||^2 + t\eta^2 D^2 = t\eta^2 D^2$.
По неравенству Коши-Буняковского $\langle \tilde{w}, w^t \rangle \leq ||\tilde{w}|| \cdot ||w^t||$.
Объединяя эти неравенства, получаем $\eta\delta t \leq \langle \tilde{w}, w^t \rangle \leq \eta D\sqrt{t} \cdot ||\tilde{w}||$, или $\sqrt{t} \leq \frac{D}{\delta}$.
Т.о. при $t > \frac{D^2}{\delta^2}$ не найдётся ни одного x_i, т.ч. $\langle w^t, x_i \rangle y_i < 0$, т.е. вся выборка будет правильно классифицирована. Ч.т.д.

Время для вопросов

Линейность байесовского классификатора

Из предыдущего материала известно, что оптимальный байесовский бинарный классификатор определяется как:

$a(x) = \mathrm{sign}(\lambda_+ p(y = +1|x) - \lambda_- p(y = -1|x)) = \mathrm{sign}\left(\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)$

Теорема о линейности байесовского классификатора

Если распределения $p(y|x)$ экспонентны, параметры $d(), \delta$ не зависят от y, и среди признаков $x_1, \ldots, x_n$ есть константа, то байесовский классификатор линеен:

$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x\rangle - w_0), w_0 = \ln \frac{\lambda_-}{\lambda_+}$;

при этом апостериорные вероятности классов $p(y|x) = \sigma(\langle w, x\rangle y)$, где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ – логистическая функция (сигмоид).

Линейность байесовского классификатора

Из предыдущего материала известно, что оптимальный байесовский бинарный классификатор определяется как:
$a(x) = \mathrm{sign}(\lambda_+ p(y = +1|x) - \lambda_- p(y = -1|x)) = \mathrm{sign}\left(\frac{p(y=+1|x)}{p(y=-1|x)} - \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)$

Теорема о линейности байесовского классификатора

Если распределения $p(y|x)$ экспонентны, параметры $d(), \delta$ не зависят от y, и среди признаков $x_1, \ldots, x_n$ есть константа, то байесовский классификатор линеен:
$a(x) = \mathrm{sign}(\langle w, x\rangle - w_0), w_0 = \ln \frac{\lambda_-}{\lambda_+}$;
при этом апостериорные вероятности классов $p(y|x) = \sigma(\langle w, x\rangle y)$, где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ – логистическая функция (сигмоид).

Т.о., от решающего правила типа $a(x, w) = \theta(\langle w, x\rangle)$ перешли к правилу $a(x, w) = [\sigma(\langle w, x\rangle) > \frac{1}{2}]$, но все так же от линейной функции по входу; однако при этом дополнительно приобрели возможность оценивать вероятность принадлежности к классу.

Определение логистической регрессии

Классификационная бинарная модель, в которой вероятность принадлежности к положительному классу задаётся **сигмоидом** от **линейной функции** по входу.

Логарифмическая функция потерь и логистическая регрессия

Определение логистической регрессии

Классификационная бинарная модель, в которой вероятность принадлежности к положительному классу задаётся **сигмоидом** от **линейной функции** по входу.

Напоминание: максимизация логарифма правдоподобия:

- $L(w, X^m) = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$

Логарифмическая функция потерь и логистическая регрессия

Определение логистической регрессии

Классификационная бинарная модель, в которой вероятность принадлежности к положительному классу задаётся **сигмоидом** от **линейной функции** по входу.

Напоминание: максимизация логарифма правдоподобия:

- $L(w, X^m) = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$

Подставим в формулу выражение для логистической регрессии $p(x, y) = p(y|x) \cdot p(x) = \sigma(\langle w, x \rangle) \cdot const(w)$:

- $L(w, X^m) = \sum_{i=1}^{m} \log \sigma(\langle w, x_i \rangle y_i) + const(w) \to \max_w$

Определение логистической регрессии

Классификационная бинарная модель, в которой вероятность принадлежности к положительному классу задаётся **сигмоидом** от **линейной функции** по входу.

Напоминание: максимизация логарифма правдоподобия:

- $L(w, X^m) = \log \prod_{i=1}^{m} p(x_i, y_i) \to \max_w$

Подставим в формулу выражение для логистической регрессии $p(x, y) = p(y|x) \cdot p(x) = \sigma(\langle w, x\rangle) \cdot const(w)$:

- $L(w, X^m) = \sum_{i=1}^{m} \log \sigma(\langle w, x_i\rangle y_i) + const(w) \to \max_w$

Максимизация L эквивалентна минимизации аппроксимированного Э.Р. с логарифмической функцией потерь R:

$$R(w, X^m) = \sum_{i=1}^{m} \log(1 + \exp(-\langle w, x_i\rangle y_i)) \to \min_w$$

Многоклассовая логистическая регрессия

Рассмотрим случай произвольного количества классов $|Y| > 2$. Тогда линейный классификатор (напоминание):

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

Многоклассовая логистическая регрессия

Рассмотрим случай произвольного количества классов $|Y| > 2$. Тогда линейный классификатор (напоминание):

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

Вероятность принадлежности объекта x к классу c определяется т.н. функцией SoftMax:

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

Т.о. функция $SoftMax : \mathbb{R}^{|Y|} \to \mathbb{R}^{|Y|}$ преобразует любой вещественнозначный вектор в вектор дискретного распределения.

Takeaway notes

1. Линейный классификатор – предельный простой случай (тем не менее, работающий на практике!)

Takeaway notes

1. Линейный классификатор – предельный простой случай (тем не менее, работающий на практике!)
2. При линейно разделимых множествах процедура построения разделяющей поверхности конечна

Takeaway notes

1. Линейный классификатор – предельный простой случай (тем не менее, работающий на практике!)
2. При линейно разделимых множествах процедура построения разделяющей поверхности конечна
3. Все эмпирические правила классификации и регрессии — это частные случаи SGD

Время для вопросов