Лекция 4. Линейные методы классификации

Основы интеллектуального анализа данных

Полузёров Т. Д.

БГУ ФПМИ

Бинарная классификация

Рассмотрим задачу бинарной классификации,
$X = (x_1, \dots, x_\ell) \in \mathbb{X}$, $Y \in \mathbb{Y} = \{-1, 1\}$

Модель для классификации

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

- где $f(x, \theta)$ будем называть **дискриминантной функцией**.

Множество точек x где $f(x, \theta) = 0$ - **разделяющая поверхность**.

Задача состоит в настройке параметров θ в функции $f(x, \theta)$ по выборке (X, Y)

Отступ

Величина

$$M_i(\theta) = y_i f(x_i, \theta)$$

- **отступ** (margin) классификатора $a(x, \theta) = \operatorname{sign} f(x, \theta)$ относительно объекта x_i.

Если $M_i(\theta) < 0$ то алгоритм a допускает ошибку на объекте x_i.

Чем больше $M_i(\theta)$ **тем правильнее** и надежнее классификация.

Функция потерь

Требуется подобрать параметры θ при которых классификатор a допускает как можно меньше ошибок:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [M_i(\theta) < 0] \to \min_{\theta}$$

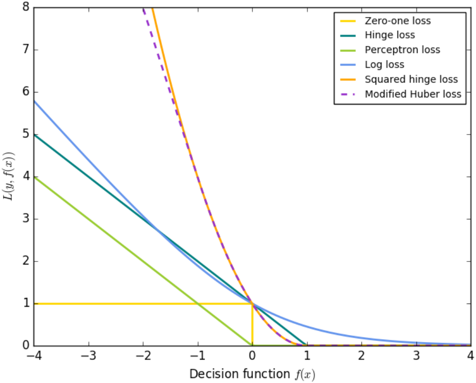
Однако в таком виде Q - кусочно постоянная функция

Идея - мажорирование (оценка сверху) индикатора ошибки $[M_i(\theta) < 0]$ с помощью "удобной"функцией потерь $\mathcal{L}(M_i)$:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [M_i(\theta) < 0] \leq \widetilde{Q}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(M_i(\theta))$$

Популярные функции потерь

1. $[M < 0]$ - индикатор ошибки
2. $(1 - M)^2$ - квадратичная
3. $(1 - M)_+$ - кусочно линейная
4. $\frac{2}{1+e^M}$ - сигмоидная
5. $\log_2(1 + e^{-M})$ - логистическая
6. e^{-M} - экспоненциальная



Функция потерь и совместное распределение

Пусть множество $(\mathbb{X} \times \mathbb{Y})$ - вероятностное пространосво. Имея выборку (X, Y) и предполагаемый вид совместной плотности $p(x, y; \theta)$, применим метод максимального правдоподобия

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{\ell} p(x_i, y_i; \theta) \to \max_{\theta}$$

$$\ln L = \sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i, y_i; \theta) \to \max_{\theta}$$

$$-\ln p(x_i, y_i; \theta) = \mathcal{L}(y_i f(x_i, \theta))$$

По виду плотности $p(x, y; \theta)$ восстанавливается f и $\mathcal{L}$. И обратно, используя некоторые разделяющую поверхность и функцию потерь - предполагаем определенное распределение в данных.

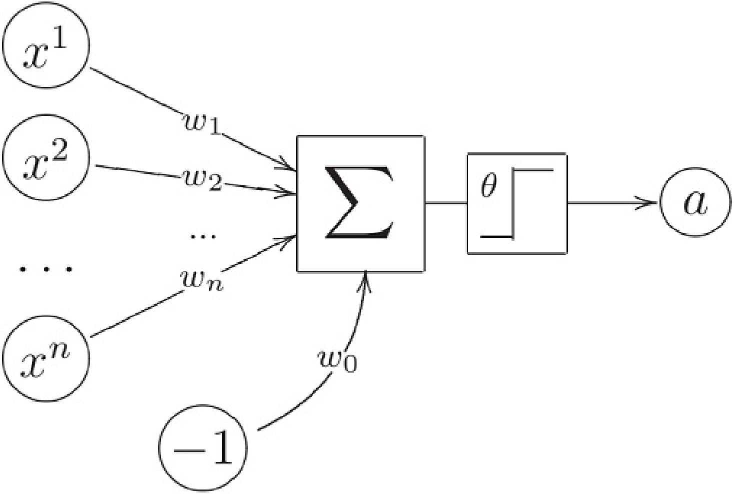
Линейная модель

Случай $f(x,\omega) = \langle x,\omega\rangle$ - класс линейных моделей классификации.

$$a(x,\omega) = \operatorname{sign}\langle x,\omega\rangle$$

Разделяющая поверхность $\operatorname{sign}\langle x,\omega\rangle = 0$ является гиперплосткостью в $\mathbb{R}^n$. Причем объекты по одну сторону от гиперплосткости относятся к одному классу, по другую - к другому.

Модель нейрона МакКаллока-Питтса



Метод обучения

Метод минимизации мажорированного эмпирического риска

$$\widetilde{Q}(a, X) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(\langle x_i, \omega \rangle y_i) \to \min_{\omega}$$

Необходимое условие минимума:

$$\frac{\partial Q}{\partial \omega} = \sum_{i=1}^{\ell} x_i y_i \mathcal{L}'(\langle x_i, \omega \rangle y_i) = 0$$

Логистическая регрессия

Логистическая регрессия (Logistic regression) - линейный алгоритм бинарной классификации.

При выполнении достаточно сильных предположений обладает свойствами:

- оптимальный байесовский классификатор
- однозначно определена функция потерь
- возможность оценивать вероятности классов

Пусть $(\mathbb{X} \times \mathbb{Y}) = (\mathbb{R}^n \times \{-1, 1\})$ - вероятностное пространтсво с плотностью $p(x, y)$. Выборка (X, Y) получена из этого распределения.

Экспонентный класс распределений

Плотность $p(x), x \in \mathbb{R}^n$ называется экспонентной, если

$$p(x) = \exp(c(\delta)\langle\theta, x\rangle + b(\delta, \theta) + d(x, \delta))$$

где θ -параметр сдвига, δ - масштаба, b, c, d - произвольные числовые функции.

Принадлежат к классу экспонентных:

- Равномерное, Нормальное, Гамма
- Гипергеометрическое, Пуассоновское, Биномиальное
- и другие

Обоснование линейной модели

Теорема

Если *функции правдоподобия* $p(x|y)$ *принадлежат экспонентному классу, причем параметры* d *и* δ *одинаковы, а отличаются только параметры сдвига* θ*,*

то:

1. *байесовский классификатор является линейным:* $a(x) = \operatorname{sign}\langle \omega, x \rangle$
2. *апостериорная вероятность* $p(y|x) = \sigma(\langle \omega, x \rangle y)$

где $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ - *сигмоидная функция,* $\sigma(-z) = 1 - \sigma(z)$

Модель оценки вероятностей

Построим модель которая оценивает не сами метки классов, а **вероятности** принадлежности к ним.

$$b(x, \omega) = P(+1|x) = \sigma(\langle w, x\rangle)$$

Другими словами, в каждой точке x величина $y \sim Bernoulli(\sigma(\langle w, x\rangle))$

Задача классификации решается путем выбора порога $t \in [0, 1]$. И тогда итоговый классификатор имеет вид:

$$a(x, t) = \text{sign}(a(x, \omega) - t)$$

Метод максимального правдоподобия

С учетом вероятностной постановки задачи, воспользуемся **методом максимального правдоподобия**:

$$L(\omega) = \prod_{i=1}^{\ell} p(y_i|x_i) = \prod_{i=1}^{\ell} \sigma(\langle w, x_i \rangle y_i) \to \max_{\omega}$$

$$\ln L(\omega) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln \sigma(\langle w, x_i \rangle y_i) =$$

$$= - \sum_{i=1}^{\ell} \ln(1 + e^{-y_i \langle w, x \rangle}) \to \max_{\omega}$$

-совпадает с логистической функция потерь

$$Q(\omega) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln(1 + e^{-M_i}) \to \min_{\omega}$$

Решение оптимизационной задачи

Имеем

$$Q(\omega) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln(1 + e^{-\langle w, x \rangle}) \to \min_{\omega}$$

Аналитического решения нет, поэтому применяются градиентные методы

$$\nabla Q(\omega) = \sum_{i=1}^{\ell} x_i y_i \sigma(-\langle w, x_i \rangle)$$

Случай линейно разделимой выборки

По выборке (X, Y) будем строить классификатор вида

$$a(x, \omega) = \langle x, \omega \rangle$$

и предположим, что выборка (X, Y) линейна разделима. То есть найдутся такие веса ω^*, что

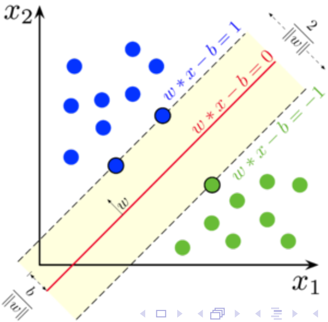
$$Q(\omega^*) = \frac{1}{\ell}[y_i \cdot a(x_i, \omega^*) < 0] = 0$$

Однако такое решение ω^* не единственное. Идея состоит в распоряжении этой свободой с умом.

Максимизация отступа

Среди всех подходящих разделяющих гиперплоскостей выберем ту, которая максимально удалена от "граничных"объектов.

$$\begin{cases} ||\omega||^2 \to \min \\ M_i(\omega) \geq 1, \qquad i = 1, ..., \ell \end{cases}$$



Линейно неразделимая выборка

В случае линейно неразделимой выборки смягчим требования

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min \\ M_i(\omega) \geq 1 - \xi_i, i = 1, ..., \ell \\ \xi_i \geq 0, i = 1, ..., \ell \end{cases}$$

Эту задачу можно упростить до:

$$\begin{cases} \xi_i \geq \max(0, 1 - M_i(\omega)) \\ \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \to \min \end{cases}$$

Итог - задача безусловной оптимизации

$$\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{\ell}(1 - M_i(\omega))_+ \to \min_{\omega}$$

где C - гиперпарамер алгоритма

Двойственная задача

По теореме Каруша-Куна-Такера, исходная задача эквивалентна двойственной задаче поиска седловой точки функции Лагранжа

$$\mathcal{L}(\omega, \lambda, \eta) = \frac{1}{2}||\omega||^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i (M_i(\omega) - 1) - \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i (\lambda_i + \eta_i - C)$$

Приравнивая частные производные к нулю

$$\begin{cases} \omega = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \\ \eta_i + \lambda_i = C, i = 1, ..., \ell \end{cases}$$

Типы объектов

При условии

$$\begin{cases} \eta_i + \lambda_i = C, i = 1, ..., \ell \\ \eta_i \geq 0, \lambda_i \geq 0 \end{cases}$$

Существуют три ситуации

1. $\lambda_i = 0, \eta_i = C, \xi_i = 0, M_i \geq 1$ - **неинформативный** объект, классифицируется правильно и не влияет на ω
2. $0 < \lambda_i < C, 0 < \eta_i < C, \xi_i = 0, M_i = 1$ - **опорный** объект, классифицируется правильно и лежит на разделяющей полосе
3. $\lambda_i = C, \eta_i = 0, \xi_i > 0, M_i < 1$ - **опорный нарушитель**, либо неверно классифицируется, либо лежит внутри разделяющей полосы

Метод опорных векторов

Лагранжиан упрощается до

$$\begin{cases} -\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle \to \min_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, i = 1, ..., \ell \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \end{cases}$$

Откуда параметры классификатора равны

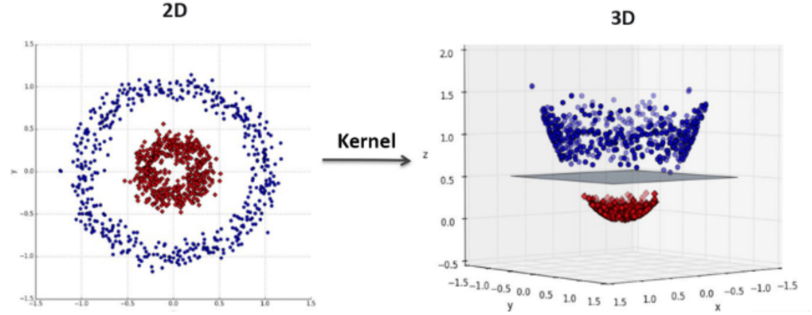
$$\begin{cases} \omega = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \\ \omega_0 = \langle x, \omega \rangle - y_i, \quad \forall i : \lambda_i > 0, M_i = 1 \end{cases}$$

И итоговый классификатор имеет вид

$$a(x) = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \langle x, x_i \rangle - \omega_0 \right)$$

Трюк с ядром

Идея состоит в переходе от исходного призакового пространства $\mathbb{X}$ в другое $\mathbb{H}$ где, быть может, выборка является линейно разделимой, посредством $\psi : \mathbb{X} \to \mathbb{H}$.
Это выливается в использование вместо $\langle\psi(x_i), \psi(x_j)\rangle$ некоторого ядра $K(x_i, x_j)$



Резюме

- Линейный классификатор - модель нейрона
- Аппроксимация пороговой функции потерь
- Оценка вероятностей с помощью логистической регрессии
- SVM - очень сильный алгоритм классификации благодаря трюку с ядром