Лекция 2

Линейные модели

План

1. Gradient descent
2. Linear models
    a. Linear regression
    b. Logistic regression
        i. Kernel trick
        ii. Two-layer perceptron
    c. Mini Batch Gradient Descent
    d. Regularization
    e. SVM
        i. Separable case
        ii. Kernel trick
        iii. Non-separable case - smoothing
        iv. SVM Regression

Полезные ссылки

- Линейная регрессия http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=%D0%9B%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D0%B9%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%80%D0%B5%D0%B3%D1%80%D0%B5%D1%81%D1%81%D0%B8%D1%8F_%28%D0%BF%D1%80%D0%B8%D0%BC%D0%B5%D1%80%29
- Статья про SVM https://habr.com/ru/post/428503/
- Playground от гугла https://playground.tensorflow.org/#activation=tanh&batchSize=10&dataset=circle&regDataset=reg-plane&learningRate=0.03&regularizationRate=0&noise=0&networkShape=4,2&seed=0.50213&showTestData=false&discretize=false&percTrainData=50&x=true&y=true&xTimesY=false&xSquared=false&ySquared=false&cosX=false&sinX=false&cosY=false&sinY=false&collectStats=false&problem=classification&initZero=false&hideText=false

Ссылки внизу слайдов тоже полезные, но более углубленные по теме слайда.

Повторение

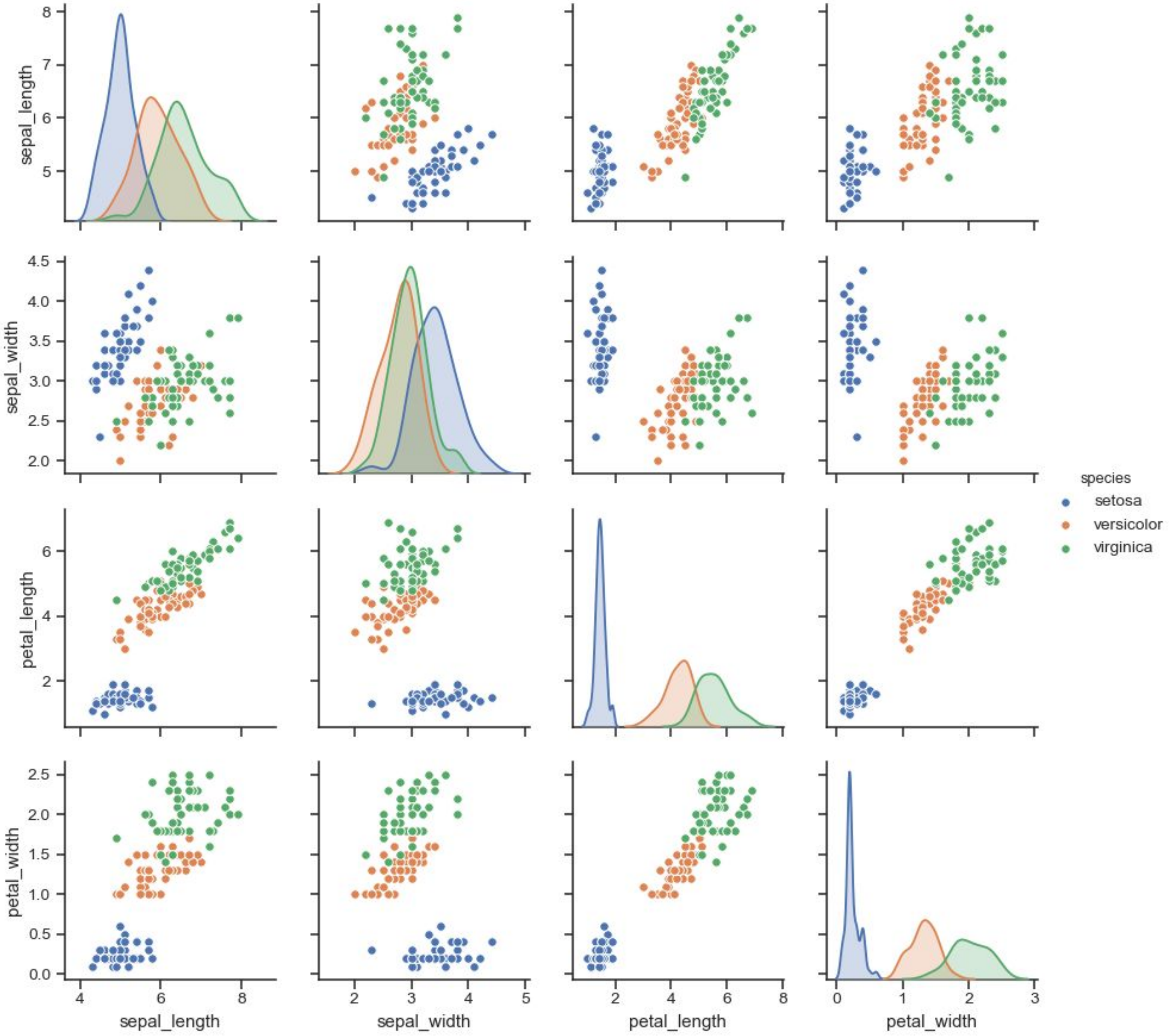
Данные

X y* features

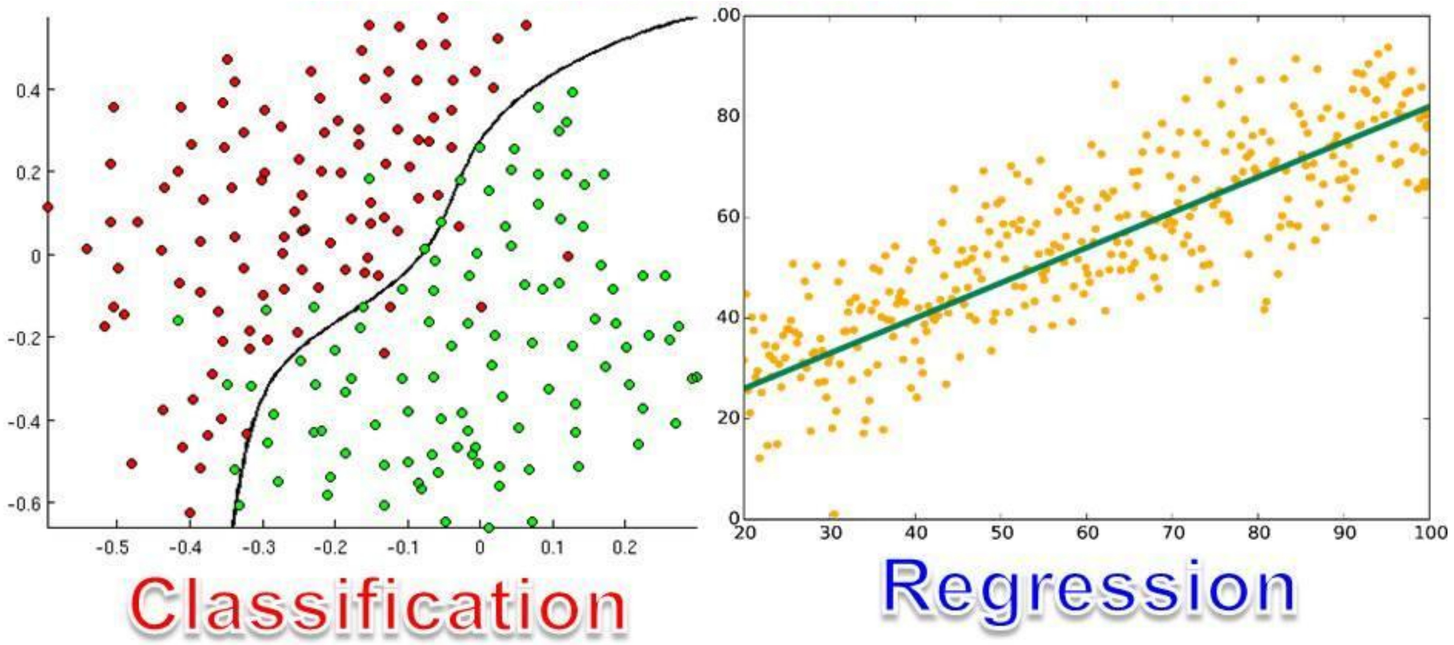
PassengerId	Survived	Pclass	Name	Sex	Age	SibSp	Parch	Ticket
1	0	3	Braund, Mr. Owen Harris	male	22	1	0	A/5 21171
2	1	1	Cumings, Mrs. John Bradley (Florence Briggs Thayer)	female	38	1	0	PC 17599
3	1	3	Heikkinen, Miss. Laina	female	26	0	0	STON/O2. 310128
4	1	1	Futrelle, Mrs. Jacques Heath (Lily May Peel)	female	35	1	0	113803
5	0	3	Allen, Mr. William Henry	male	35	0	0	373450
6	0	3	Moran, Mr. James	male		0	0	330877
7	0	1	McCarthy, Mr. Timothy J	male	54	0	0	17463
8	0	3	Palsson, Master. Gosta Leonard	male	2	3	1	349909

Признаки

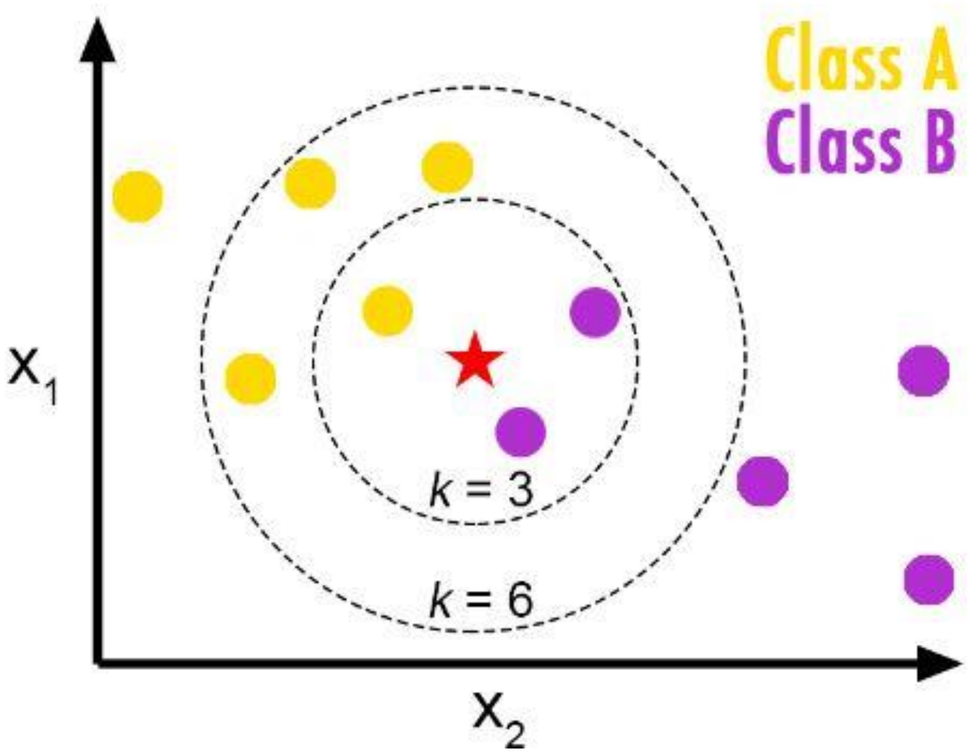
- Числовые
- Бинарные
- Категориальные



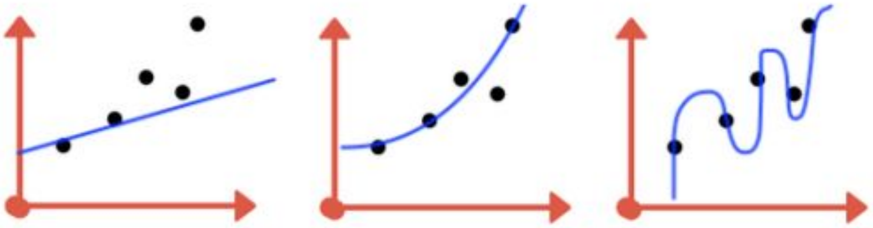
Классификация и регрессия



K Nearest Neighbors

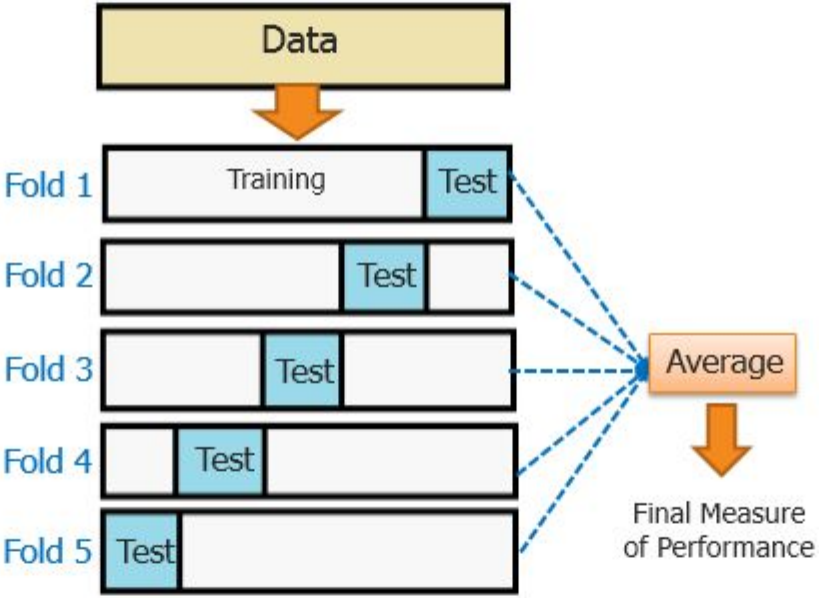


Cross-validation



Чтобы получить несмещенную оценку на всей выборке, используют кросс-валидацию.

Модель при этом обучается несколько раз.



Параметры модели

- Внешние параметры или гиперпараметры
  - Задаются перед обучением вручную
  - Например, число соседей в K Nearest Neighbors
  - Подбираются с помощью кросс-валидации
- Внутренние, обучаемые параметры
  - Задаются во время обучения самим алгоритмом обучения
  - Например, веса для линейной регрессии

Gradient Descent

Задача оптимизации

Нахождение минимума (максимума) некоторой функции - важная подзадача во многих методах машинного обучения, в том числе deep learning.

$$min_{\theta_1, \theta_2, ..., \theta_n} F(\theta_1, \theta_2, ..., \theta_n)$$

Функция F зависит от многих параметров (иногда миллионы) и дифференцируема по каждому из них.

Нужен быстрый способ найти минимум. Хотя бы локальный.

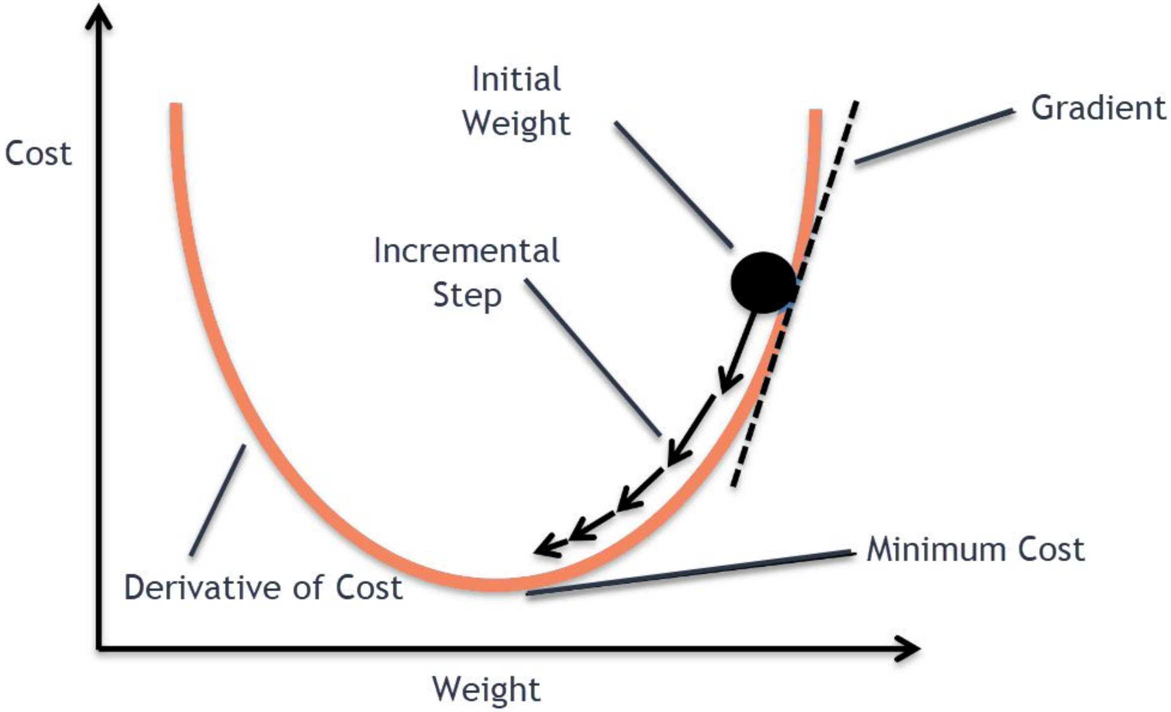
Градиентный спуск

$$\theta_i' = \theta_i - \alpha \frac{\delta F(\theta_i)}{\delta \theta_i}$$

α - learning rate

Векторная запись:

$$\vec{\theta}' = \vec{\theta} - \alpha \vec{\nabla}_\theta F$$



Interviewer: What's your biggest strength?

Me: I'm an expert in machine learning.

Interviewer: What's 9 + 10?

Me: Its 3.

Interviewer: Not even close. It's 19.

Me: It's 16.

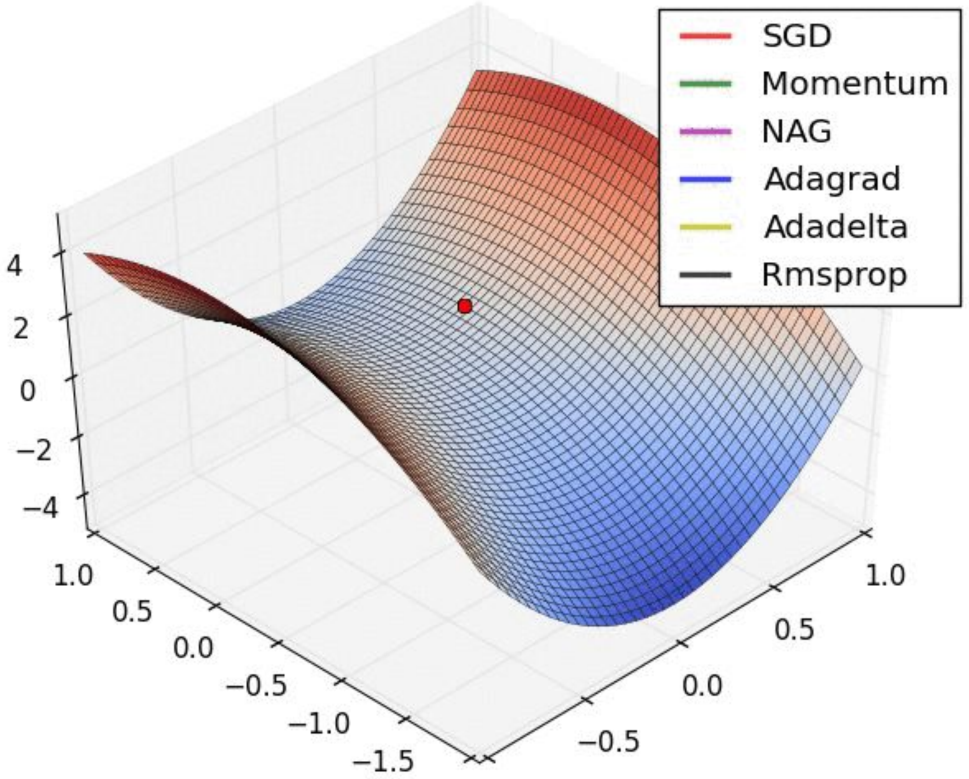
Interviewer: Wrong. Its still 19.

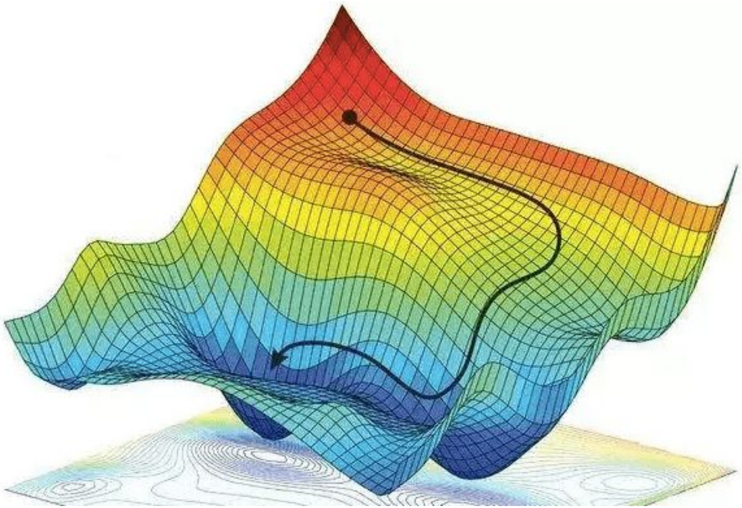
Me: It's 18.

Interviewer: No, it's 19.

Me: it's 19.

Interviewer: You're hired



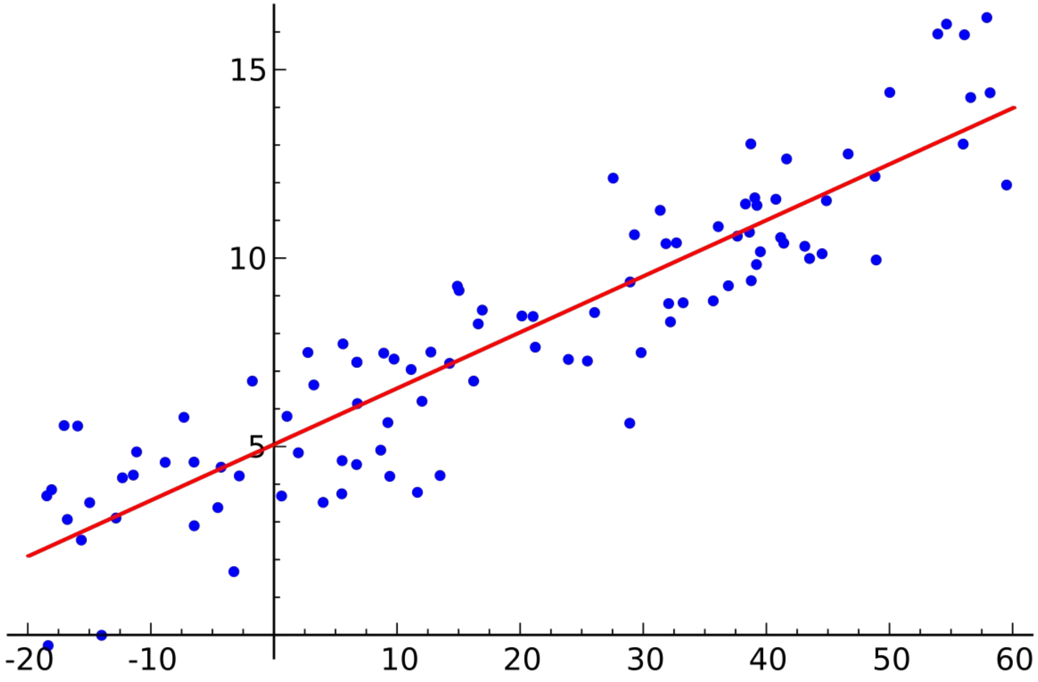


Доп. чтение по методам градиентного спуска: http://ruder.io/optimizing-gradient-descent/

Linear models

Linear regression

Линейная регрессия. Также известна как МНК - метод наименьших квадратов.



Linear regression

Линейная зависимость:

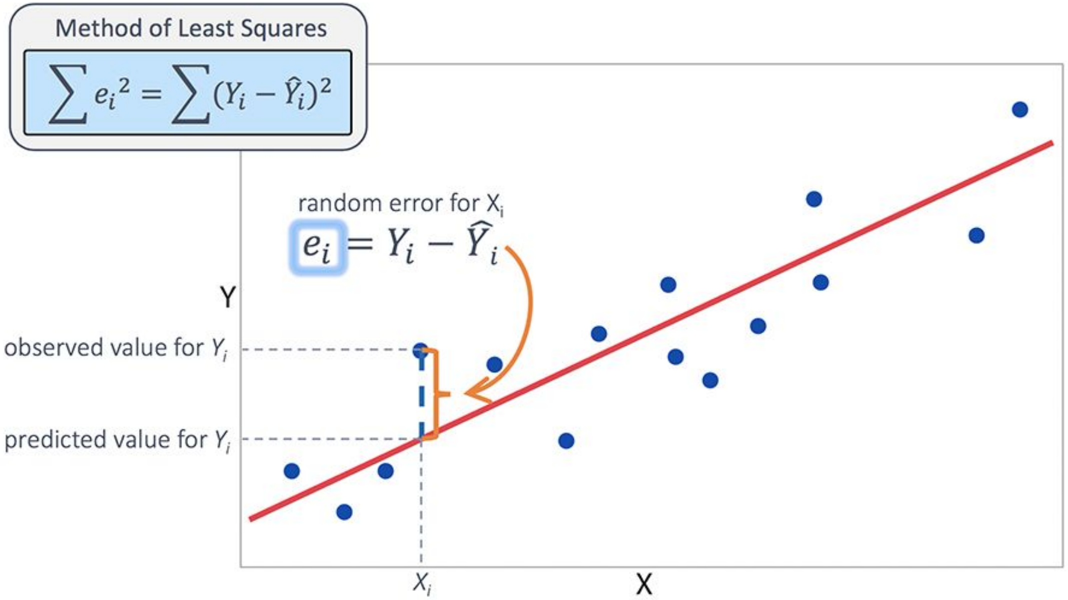
$$\hat{y}_i = wx_i + b$$

Где w и b нужно подобрать.

Среднеквадратичная ошибка:

$$\mathcal{L} = \sum_i (wx_i + b - y_i)^2$$

Будем называть это loss, или “функция потерь”



Точное решение

В случае многих переменных:

$$\hat{y}_i = W\vec{x}_i + b$$

$$\mathcal{L} = \sum_i (W\vec{x}_i + b - y_i)^2$$

Целевая переменная - все равно скаляр

Нахождение минимума сводится к решению системы линейных уравнений:

$$\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta W_j} = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta b} = 0$$

Или:

$$\sum_i \vec{x}_i(W\vec{x}_i + b - y_i) = 0$$

Перепишем:

$$\sum_i \vec{x}'_i(\vec{x}'_i W' - y_i) = 0$$

Еще перепишем:

$$X'^T X' W' - X'^T Y = 0$$

Тогда решение: (штрихи опущены)

$$\boxed{W = (X^T X)^{-1} X^T Y}$$

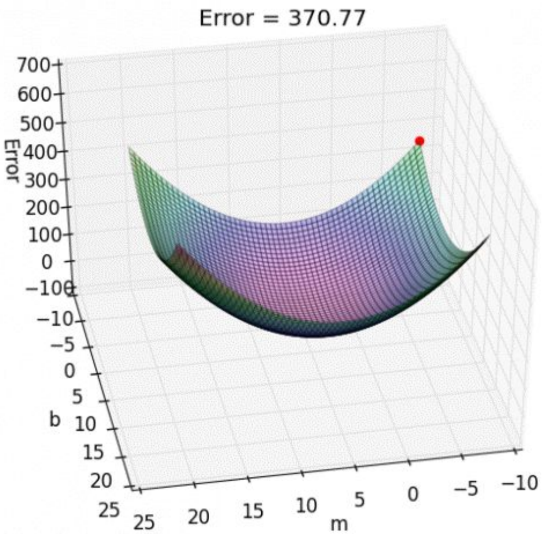
$$\mathcal{L} = \sum_i (W\vec{x}_i + b - y_i)^2$$

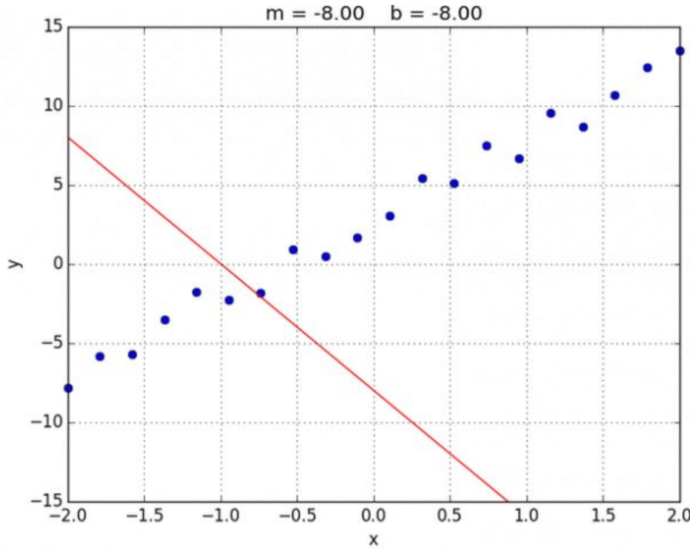
Градиентный спуск

Точное решение существует и единственно.

Однако при большом кол-ве параметров и данных искать его аналитически становится невыгодно.

Градиентный спуск часто оказывается быстрее.





начальные значения весов выбираются случайно

Другие loss'ы

Среднеквадратичная ошибка имеет свои минусы, и иногда не подходит для конкретной задачи

- MSE чувствительна к выбросам
- MAE не гладкая
- Huber их объединяет, но имеет внешний параметр

Не для каждой функции потерь есть аналитическое решение

Градиентный спуск работает всегда, когда функция хотя бы кусочно дифференцируема

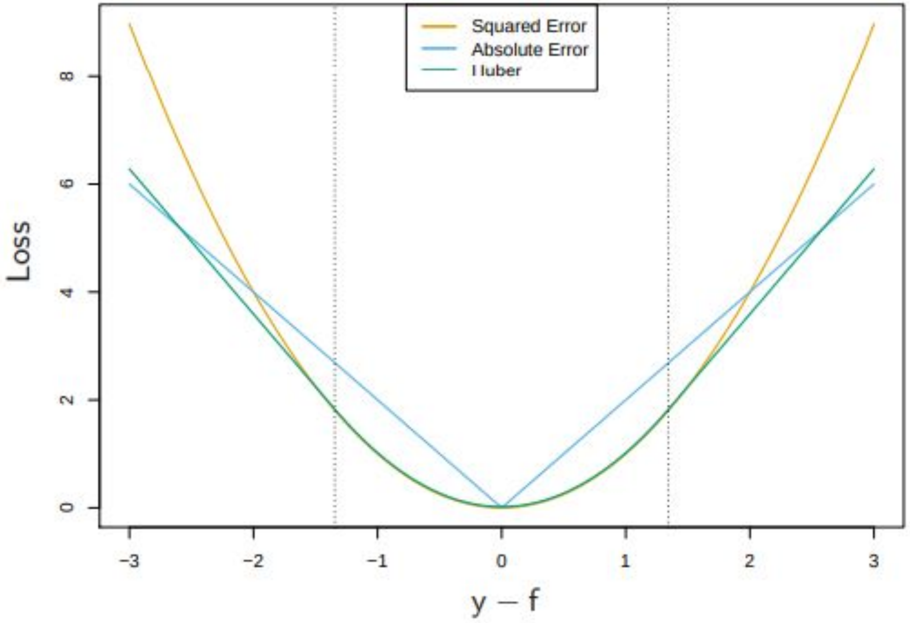


FIGURE 10.5. *A comparison of three loss functions for regression, plotted as a function of the margin $y-f$. The Huber loss function combines the good properties of squared-error loss near zero and absolute error loss when $|y-f|$ is large.*

Отличие loss от метрики

- loss используется для подбора параметров модели на тренировочном наборе
- метрика используется для оценки модели на тестовом наборе
- они могут быть как одинаковыми функциями, так и разными
- метрика не обязательно должна быть дифференцируема
- метрик может быть несколько, а loss у модели один

метрики для регрессии

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$$

$$\text{SMAPE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{2 \cdot |y_i - \hat{y}_i|}{|y_i| + |\hat{y}_i|}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}$$

Регуляризация

L2 regularization

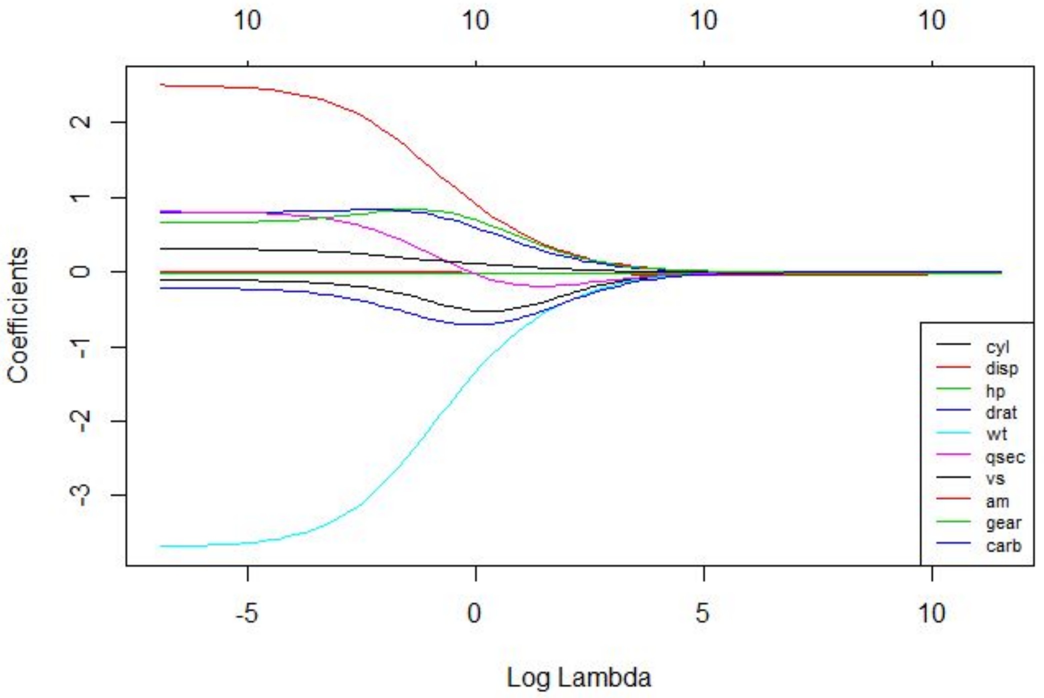
$$\mathcal{L}` = \mathcal{L} + \lambda \cdot ||w||_{L_2}$$

Проблемы линейных моделей:

- Некоторые признаки линейно зависимы
- По некоторым признакам статистика представлена мало

Можно добавить веса к функции потерь, и тогда модель будет получать штраф за большие веса

В случае линейной регрессии такая модель называется **ridge regression**



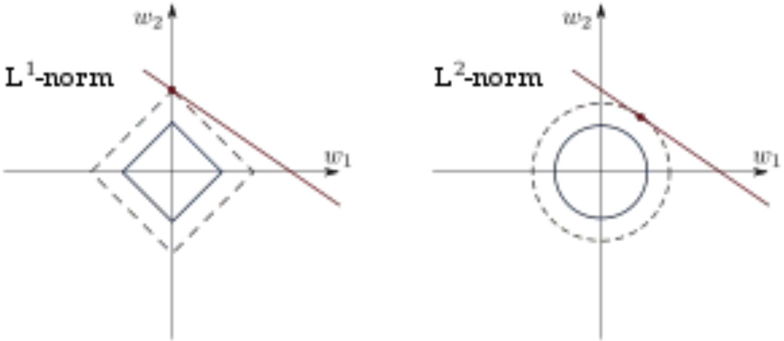
$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \lambda \cdot ||w||_{L_1}$$

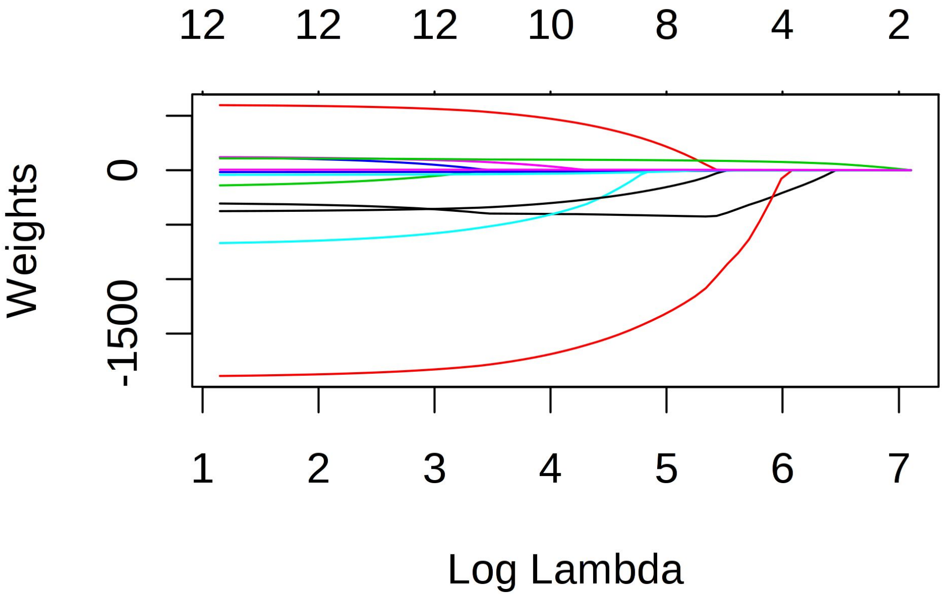
L1 regularization

Норма L1 тоже применяется, и ведет себя немного по-другому.

Модель линейной регрессии с такой регуляризацией называется **lasso regression**

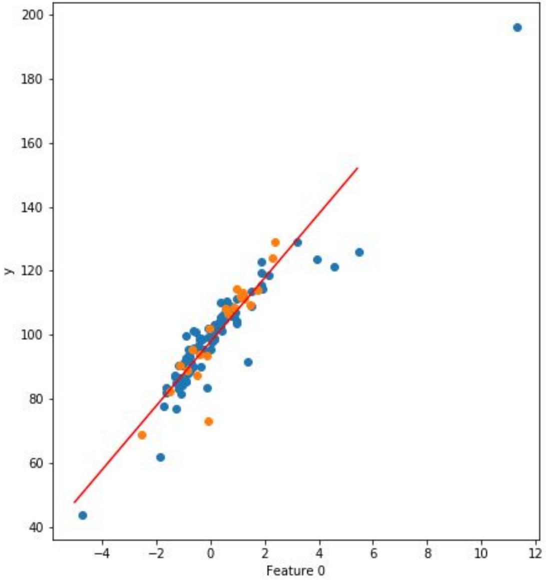
LASSO - least absolute shrinkage and selection operator

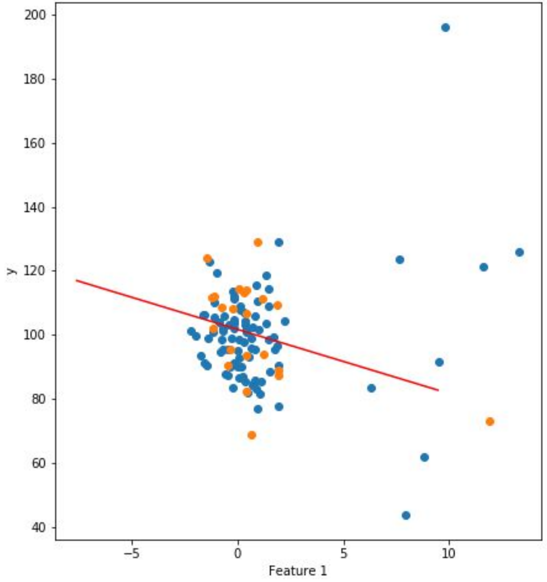


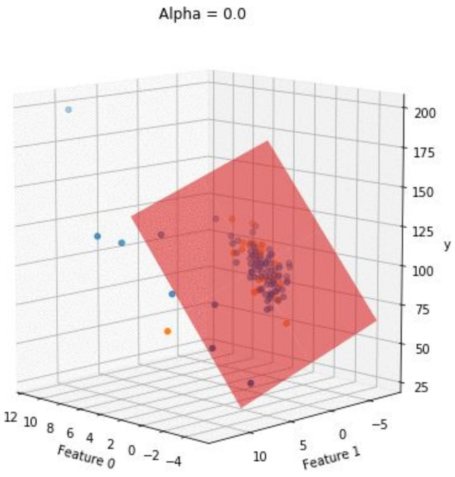


Регуляризация: как выглядит

$$\hat{y}_i = W\vec{x}_i + b$$







Параметр Feature 1 содержит выбросы, которые ведут к переобучению. При увеличении alpha (=lambda), вес данного параметра стремится к нулю. Заметьте, что среднее значение y сохраняется

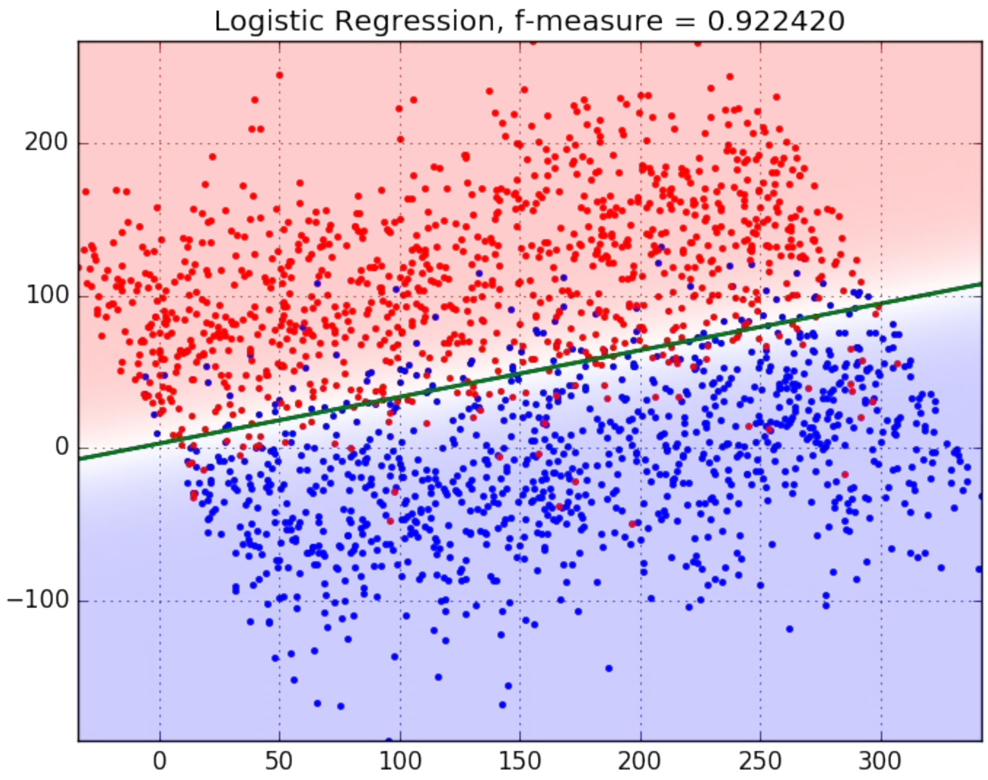
Логистическая регрессия

Logistic regression

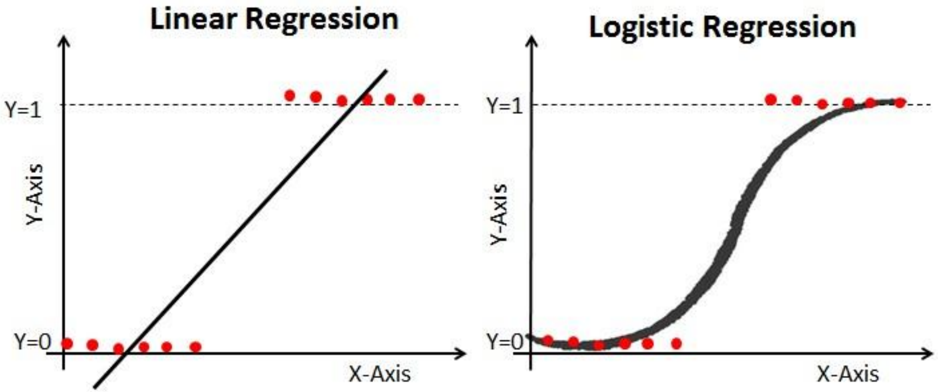
Логистическая регрессия - линейный метод **классификации**

Название исторически сложилось, т.к. этот метод предсказывает вероятность

Также называют линейным классификатором



Логистическая функция



$$y = \frac{1}{1 + e^{-(W\vec{x}+b)}}$$

Кросс-энтропия

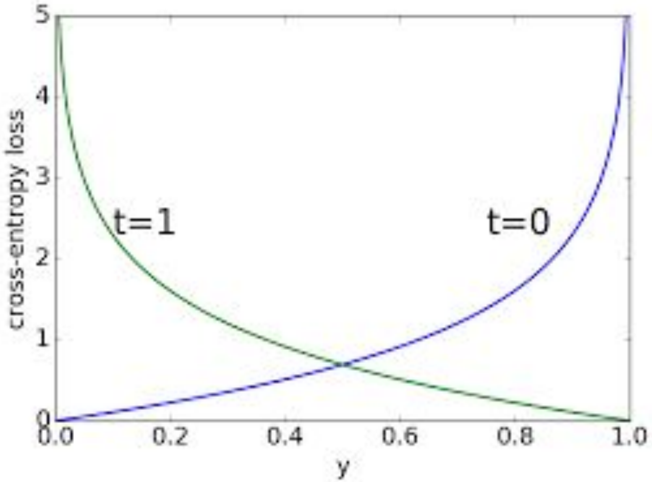
В качестве функции потерь используется т.н. кросс-энтропия

$$H(\hat{p}, p) = -\sum_i p_i log(\hat{p}_i)$$

Это мера расстояния между двумя распределениями - она минимальна, когда одно распределение приближается к другому

Например, лосс для одного объекта в случае бинарной классификации:

$$\mathcal{L} = -p \cdot log(\hat{p}) - (1-p) \cdot log(1-\hat{p})$$



А что если классов больше одного?

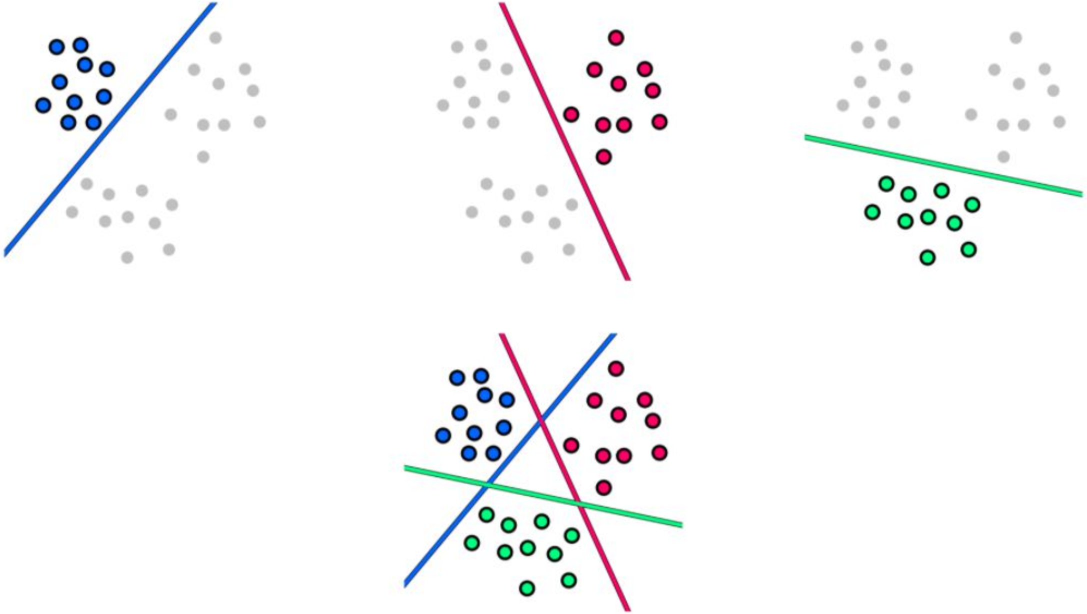
имеем две стратегии

1. OvR (One VS Rest)
2. OvO (One VS One)

OvR

имеем N классификаторов и хотим усреднять их предсказания

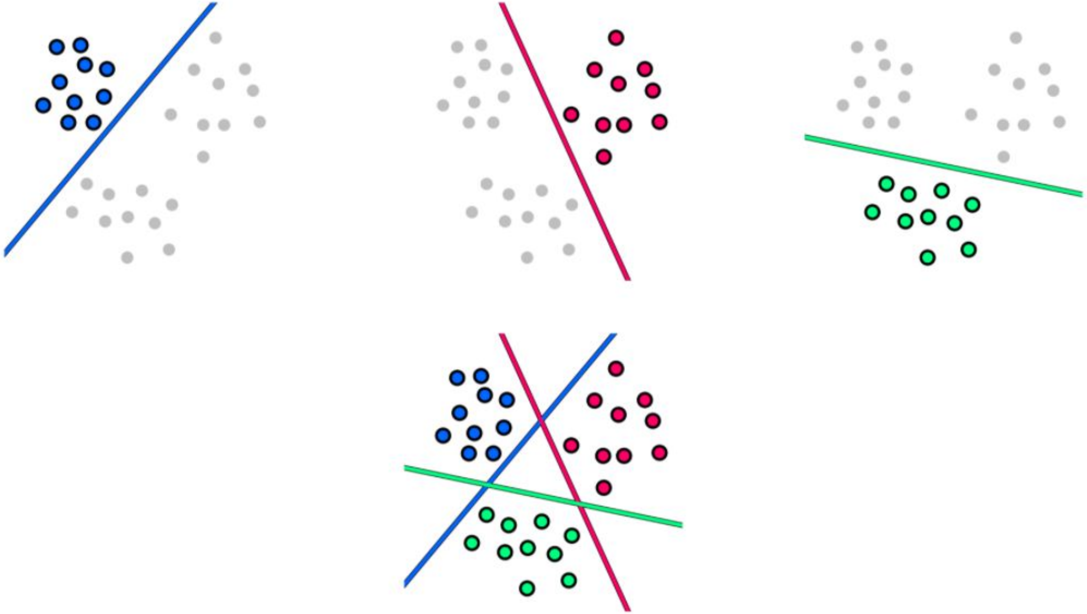
обучаемся на всех примерах



OvO

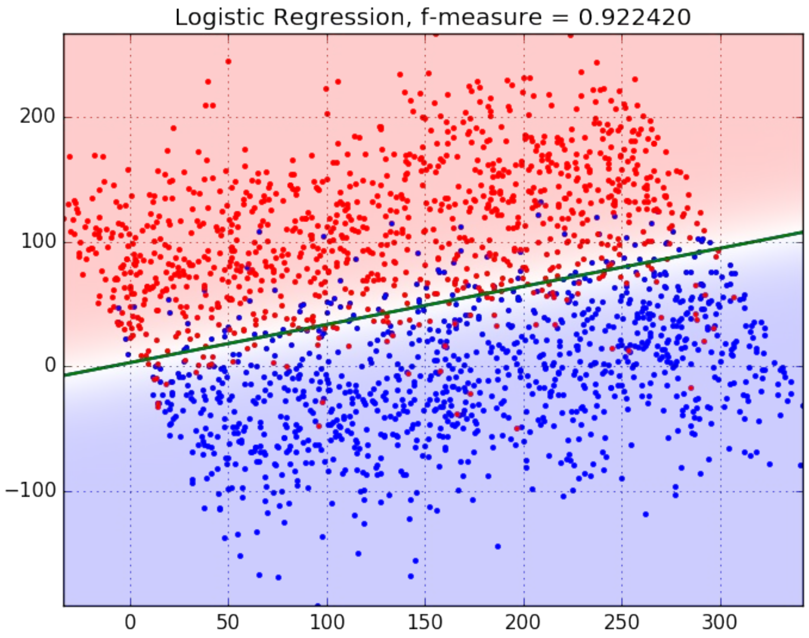
имеем N(N-1)/2 классификаторов и хотим усреднять их предсказания

обучаемся на части датасета

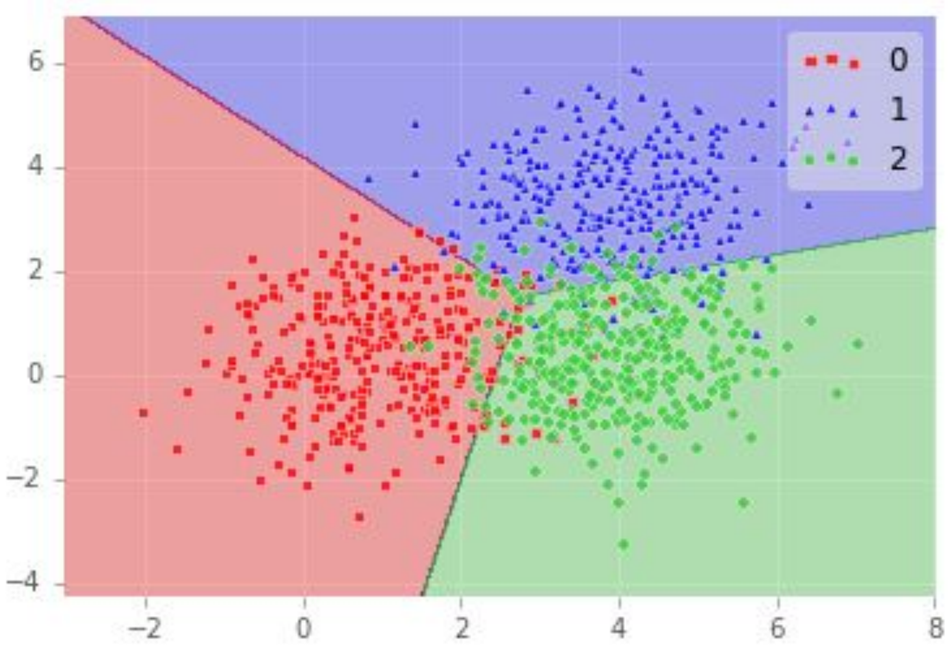


Визуализация в 2d

$$y = sigmoid(W\vec{x})$$



$$\vec{y} = softmax(W\vec{x})$$



Софтмакс

$$\vec{y} = W\vec{x}$$

В логистической регрессии предсказывается вероятность. Поэтому используется функция, которая превращает logit'ы в вероятностное распределение:

$$softmax(x_i) = \frac{exp(x_i)}{\sum_j exp(x_j)}$$

$$\boxed{\vec{y} = softmax(W\vec{x})}$$

Kernel trick

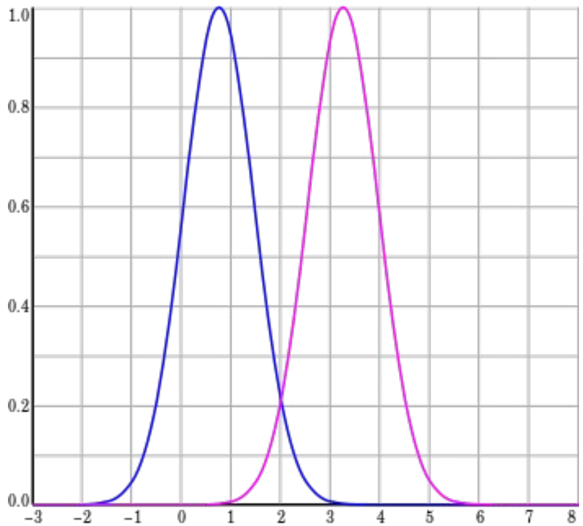
Есть простой способ сделать линейную модель нелинейной

Добавить новые признаки!

Новый признак - **нелинейная функция** от одного или нескольких базовых признаков

Например:

- Полиномы n-й степени от базовых признаков
- Радиально базисные функции



Kernel trick

Fig.3

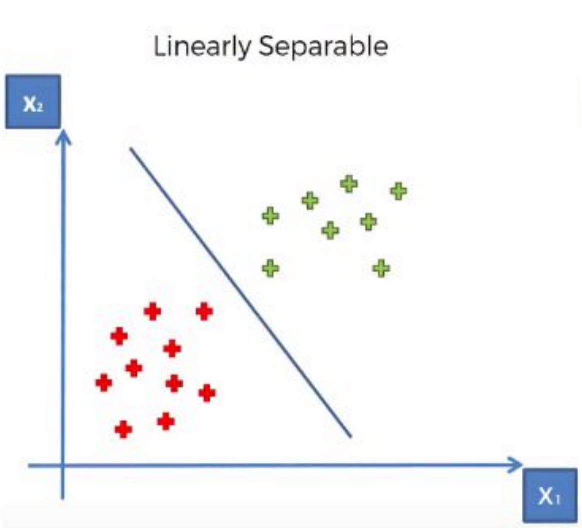
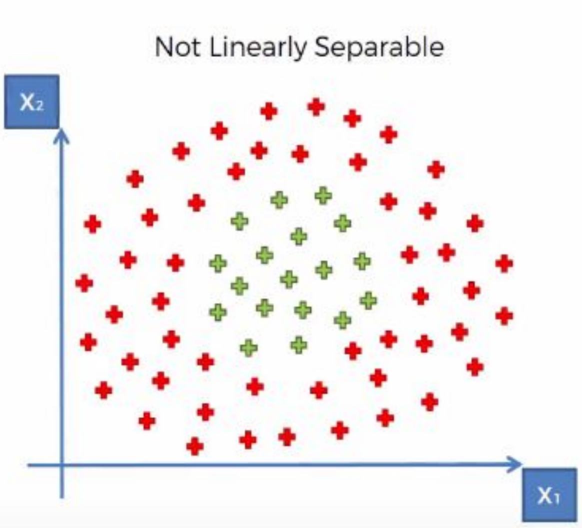
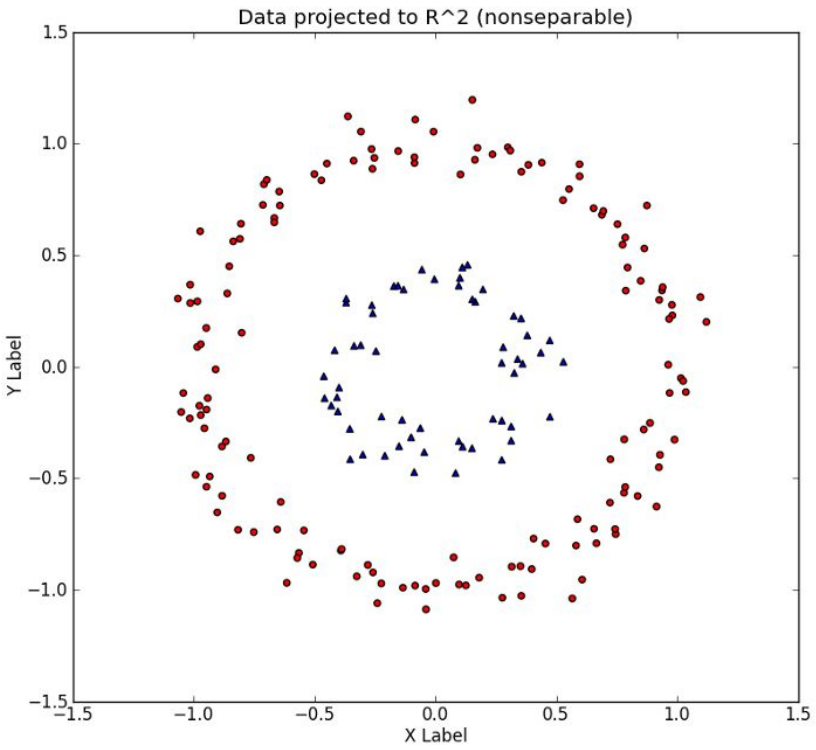
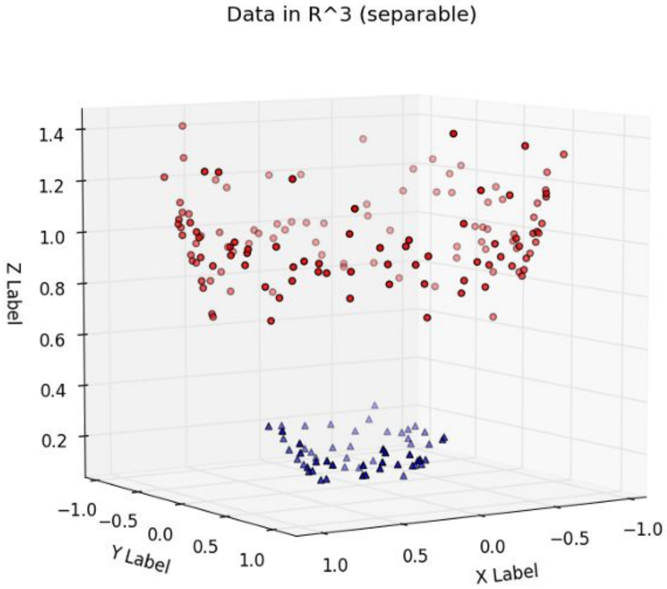


Fig.4

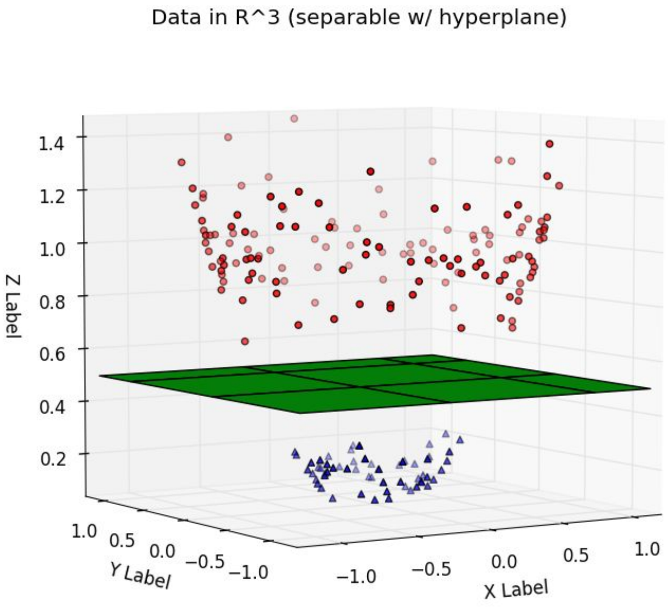


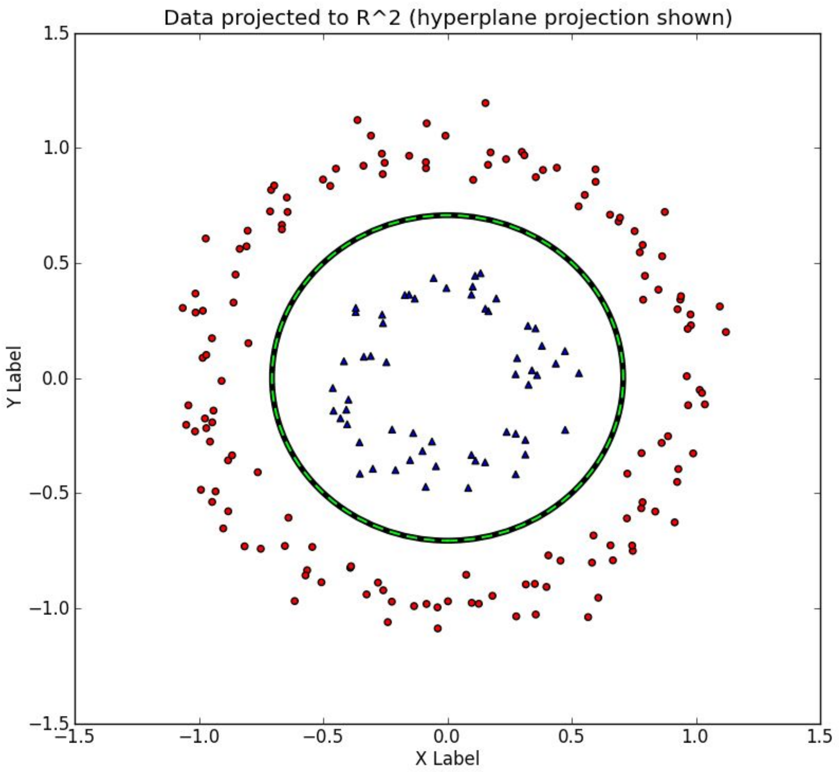
Kernel trick





Kernel trick

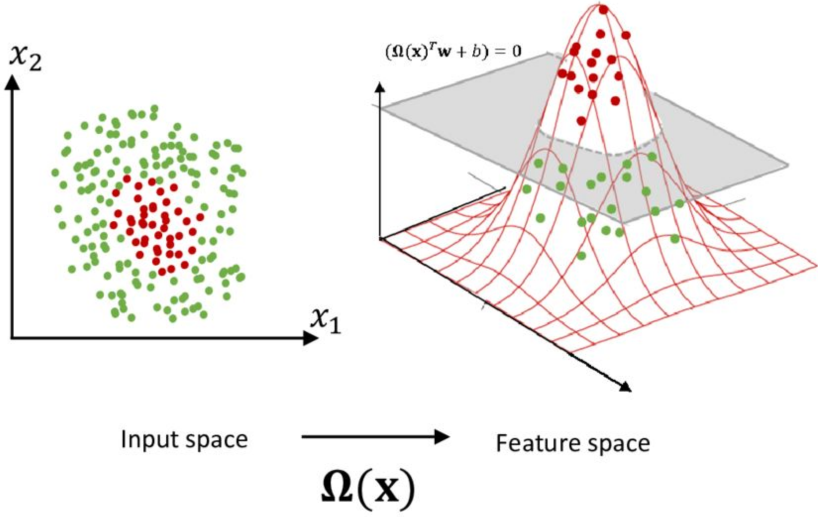




Kernel trick

Как именно выбирается центр RBF - зависит от реализации. Например, в центрах кластеров (кластеризацию еще не проходили)

Kernel trick реализован в стандартных библиотеках

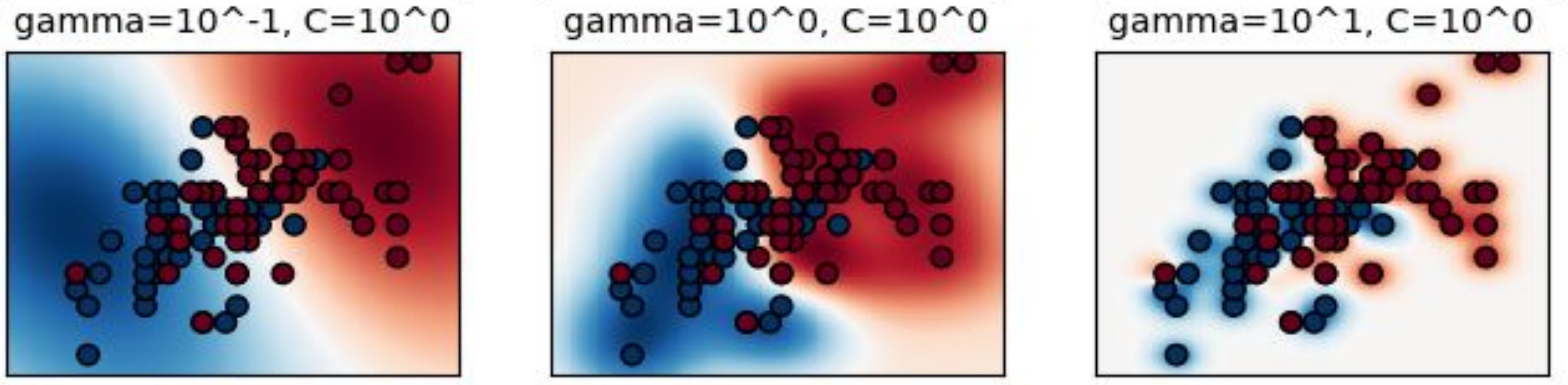


Параметр ядра

У ядра есть один параметр - gamma. Он задает размер ядра.

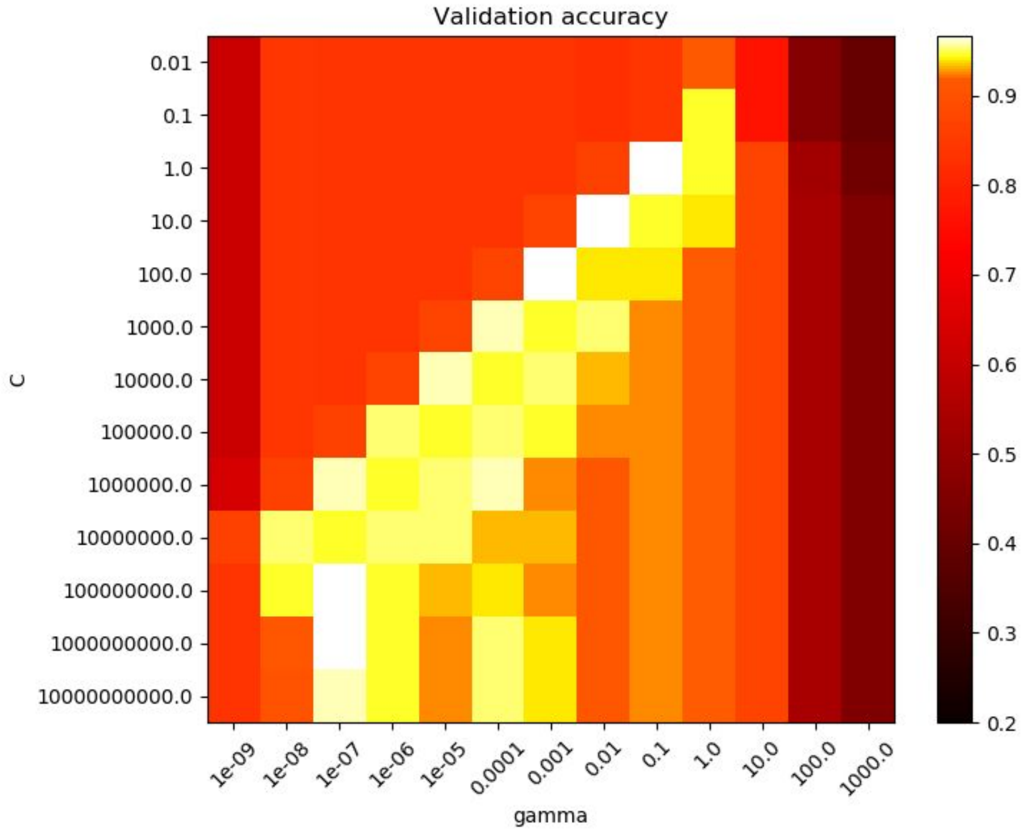
Маленькое gamma - большой радиус ядра. Большое gamma - малое ядро.

Gamma, как и другие гиперпараметры, влияет на сложность модели



https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/svm/plot_rbf_parameters.html

Параметр ядра

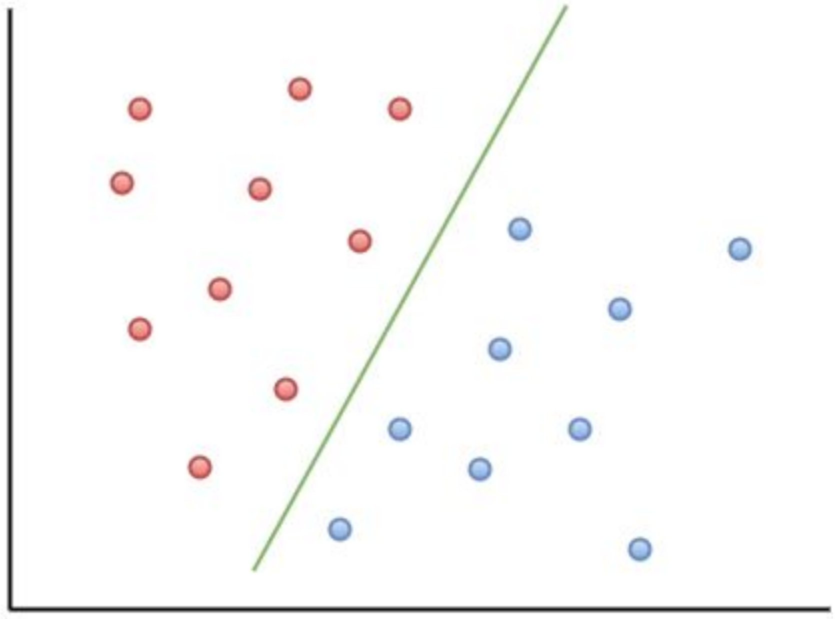


SVM

Support vector machine classifier

Предположим, что точки в пространстве можно разделить некоторой гиперплоскостью на два класса

Вопрос: как выбрать расположение гиперплоскости, чтобы максимально точно классифицировать новые точки?

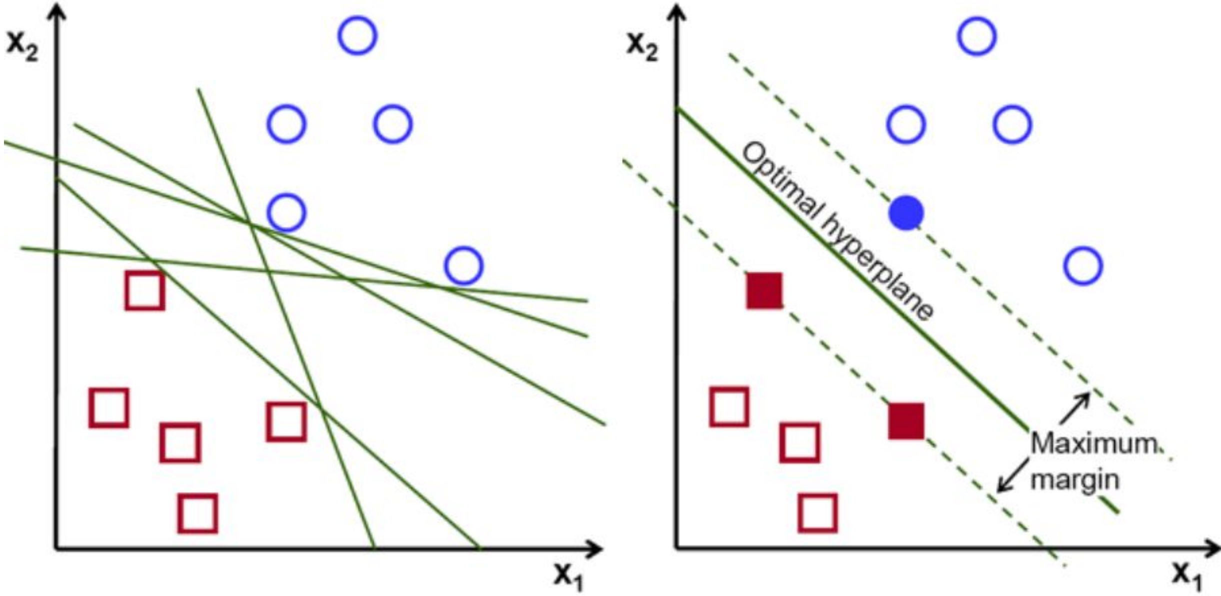


Maximum margin

Идея метода SVM: выбрать плоскость таким образом, чтобы **максимизировать зазор** между классами

Т.о. положение плоскости будет задаваться всего несколькими точками

Эти точки называются **опорными векторами**



Hyperplane

Уравнение плоскости:

$$\vec{w}\vec{x} + b = 0$$

Уравнение плоскости, смещенной в одну сторону:

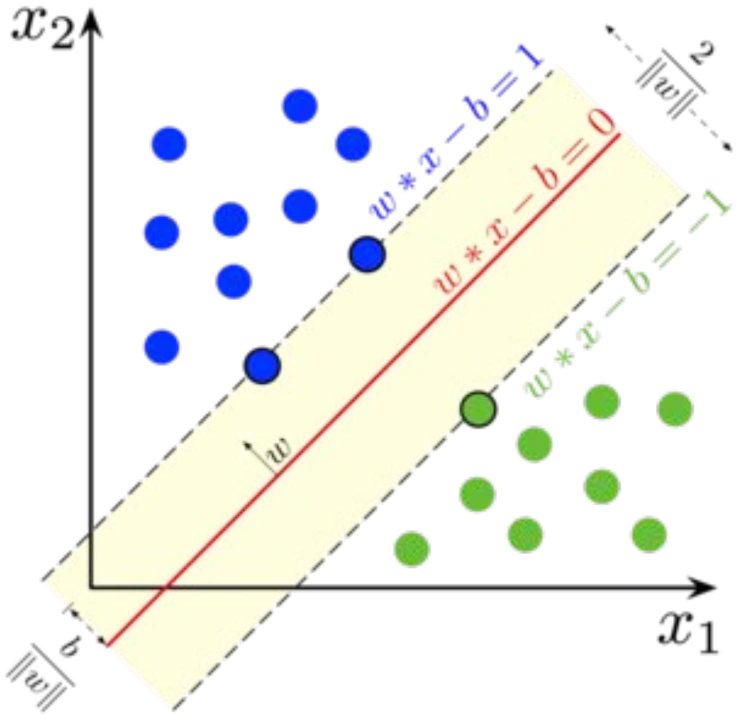
$$\vec{w}\vec{x} + b = 1$$

Уравнение плоскости, смещенной в другую сторону:

$$\vec{w}\vec{x} + b = -1$$

Величина смещения:

$$\frac{2}{||w||_{L_2}}$$



нужно минимизировать $||w||_{L_2}$

Hinge Loss

Для всех точек первого класса:

$$\vec{w}\vec{x} + b \geqslant 1$$

Для всех точек второго класса:

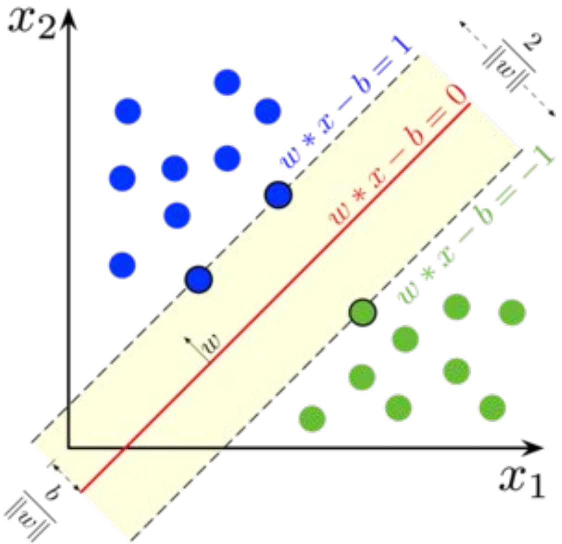
$$\vec{w}\vec{x} + b \leqslant -1$$

Пусть y = +-1. Тогда условие для всех точек:

$$y(\vec{w}\vec{x} + b) \geqslant 1$$

И максимизировать зазор:

$$||\vec{w}||_{L_2} \rightarrow min$$



Тогда функция потерь будет выглядеть следующим образом.

Здесь C - внешний параметр.

При больших C условие на границах становится жестким.

Можно применить градиентный спуск.

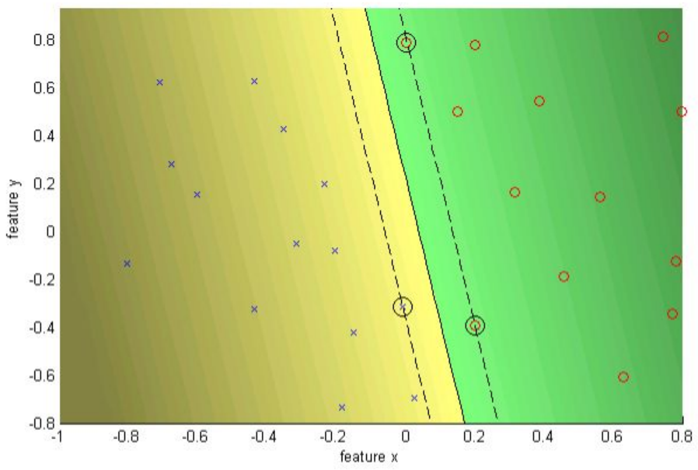
$$\mathcal{L} = ||\vec{w}||_{L_2} + C\sum_i max(0, 1 - y_i(\vec{w}\vec{x}_i + b))$$

$$\mathcal{L} = ||\vec{w}||_{L_2} + C\sum_i max(0, 1 - y_i(\vec{w}\vec{x}_i + b))$$

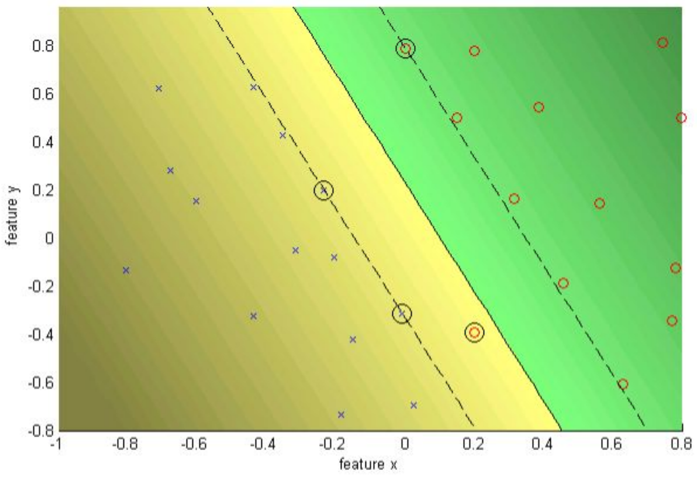
Hinge loss

Не обязательно делать С очень большим. Маленькое значение С делает классификатор устойчивым к выбросам. Кроме того, **линейная разделимость**, которую мы предположили в начале, становится **необязательным условием**.

C = Infinity   hard margin

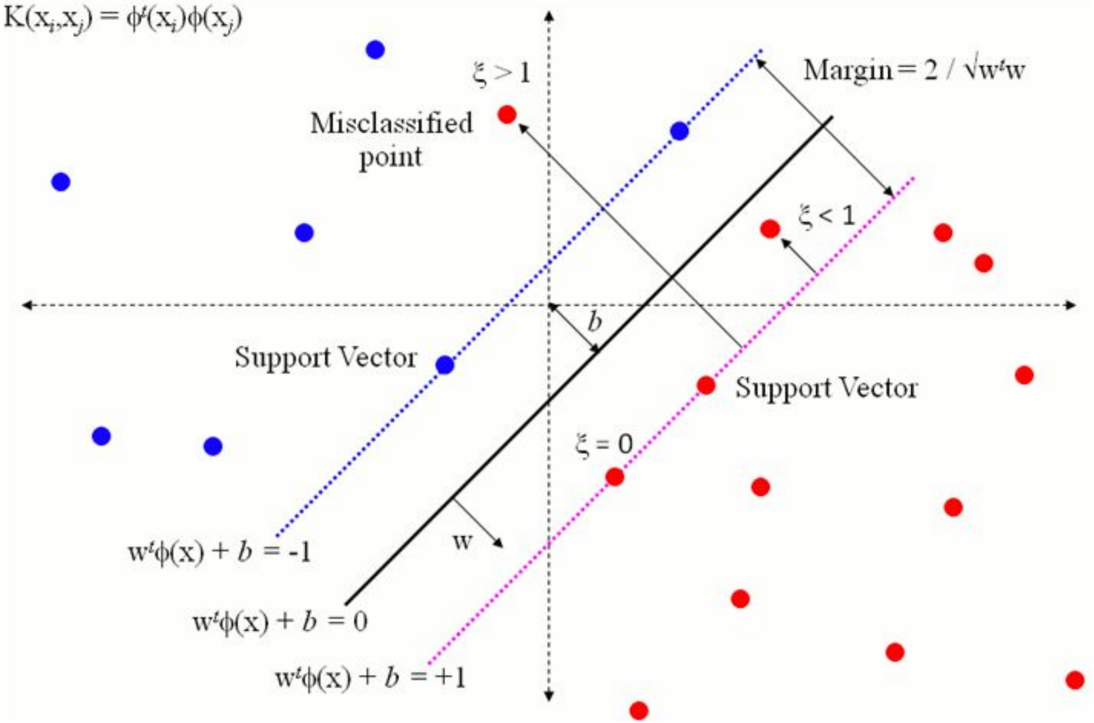


C = 10   soft margin



http://www.robots.ox.ac.uk/~az/lectures/ml/lect2.pdf

Случай линейной неразделимости



Hinge loss

Из функций потерь, представленных справа, мы знаем кросс-энтропию (binomial deviance) и hinge loss (support vector)

Видно, что hinge loss не зависит от точек, которые уже классифицированы правильно, что делает SVM более робастным методом, чем линейная регрессия

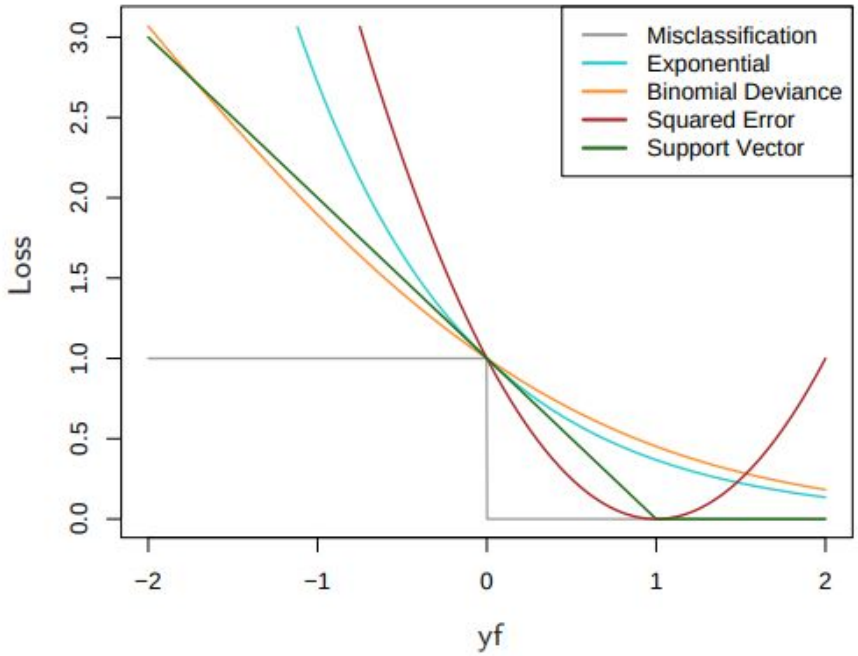
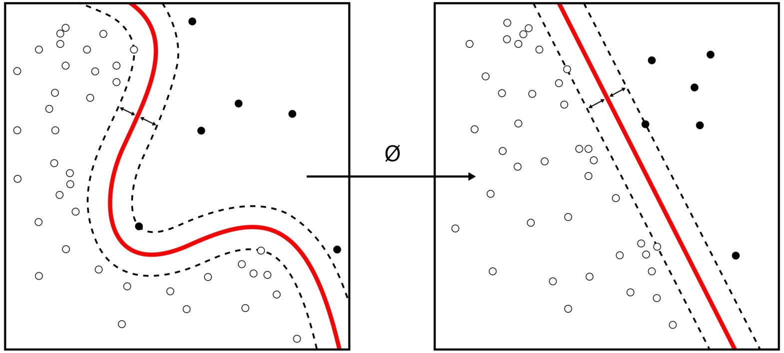
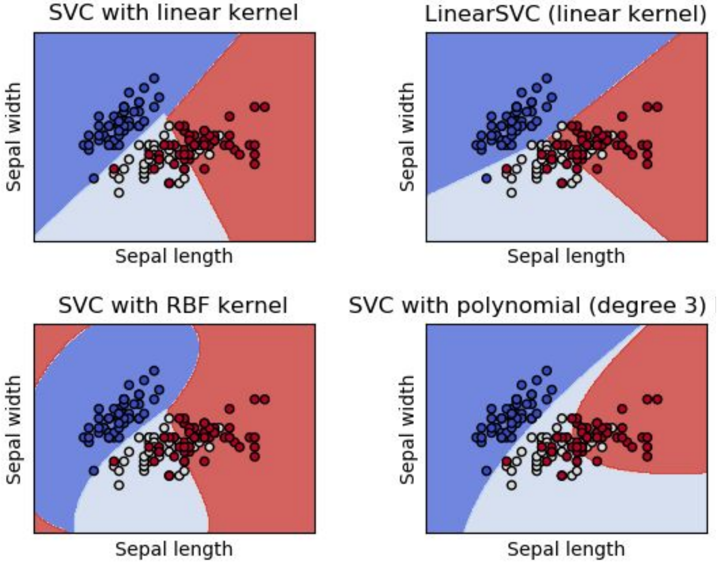


FIGURE 10.4. *Loss functions for two-class classification. The response is* $y = \pm 1$*; the prediction is* f*, with class prediction* $\text{sign}(f)$*. The losses are misclassification:* $I(\text{sign}(f) \neq y)$*; exponential:* $\exp(-yf)$*; binomial deviance:* $\log(1 + \exp(-2yf))$*; squared error:* $(y - f)^2$*; and support vector:* $(1 - yf)_+$ *(see Section 12.3). Each function has been scaled so that it passes through the point* $(0, 1)$.

Kernel trick





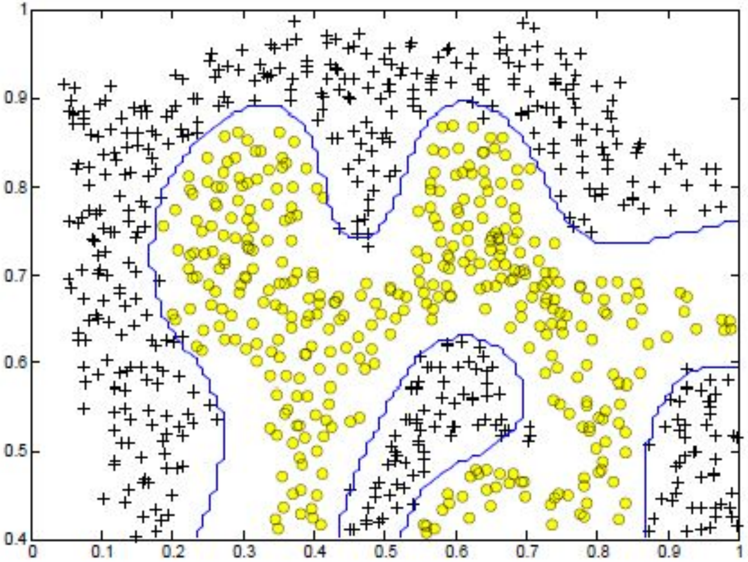
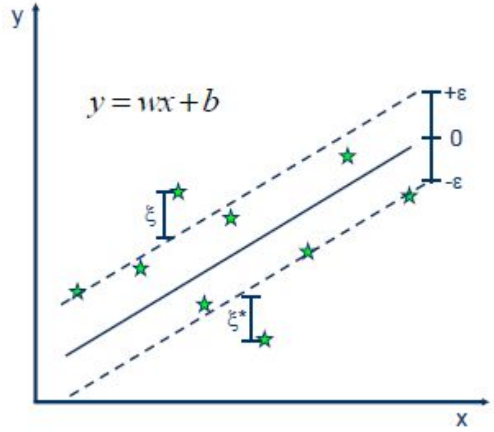


Figure 5: SVM (Gaussian Kernel) Decision Boundary (Example Dataset 2)

SVM Regression



- Minimize:

$$\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\left(\xi_i + \xi_i^*\right)$$

- Constraints:

$$y_i - wx_i - b \le \varepsilon + \xi_i$$
$$wx_i + b - y_i \le \varepsilon + \xi_i^*$$
$$\xi_i, \xi_i^* \ge 0$$