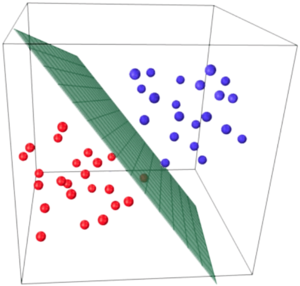
Линейная классификация

Виктор Китов

victorkitov.github.io



Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

Многоклассовый классификатор

- Определим дискриминантные функции $g_c(x)$ для классов $c = \overline{1, C}$.
- Классификация - предсказывается класс с максимальным рейтингом:

$$\widehat{y}(x) = \arg\max_c g_c(x)$$

- Граница между классами i и j:

$$\{x : g_i(x) = g_j(x)\}$$

- Отступ измеряет качество классификации:

$$M(x, y) = g_y(x) - \max_{c \neq y} g_c(x)$$

Бинарный классификатор

- $y \in \{+1, -1\}$, поэтому есть только $g_{+1}(x)$ и $g_{-1}(x)$.
- Предпочтительность класса $+1$ относительно класса -1:

$$g(x) = g_{+1}(x) - g_{-1}(x)$$

- Бинарный классификатор:

$$\widehat{y}(x) = \arg\max_{c \in \{+1,-1\}} g_c(x) = \operatorname{sign}\left(g_{+1}(x) - g_{-1}(x)\right) = \operatorname{sign}\left(g(x)\right)$$

- Отступ:

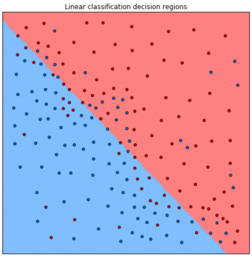
$$M(x, y) = g_y(x) - g_{-y}(x) = y\left(g_{+1}(x) - g_{-1}(x)\right) = yg(x)$$

Линейный классификатор

- Включим константу 1 в признаки для учета смещения: $x = [1, x^2, x^3, ...x^D]$.
- Линейный классификатор - все его дискриминантные функции линейны:

$$g_c(x) = w_c^T x, \quad c = \overline{1, C}.$$

- Граница между классами i и j линейна: $\left\{x : w_i^T x = w_j^T x\right\}$



Бинарный линейный классификатор

- Дискриминантные функции: $w_{+1}^T x, w_{-1}^T x$.
- Определим $w = w_{+1} - w_{-1}$.
- Бинарный линейный классификатор:

$$\widehat{y}(x) = \arg\max_{c \in \{+1,-1\}} w_c^T x = \text{sign}\left(w_{+1}^T x - w_{-1}^T x\right) = \text{sign}\left(w^T x\right)$$

- Отступ:

$$M(x,y) = w_y^T x - w_{-y}^T x = y\left(w_{+1}^T x - w_{-1}^T x\right) = y w^T x = w^T x y$$

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

Вектор, ортогональный гиперплоскости

Теорема 1

Вектор w ортогонален гиперплоскости $w^T x + w_0 = 0$

Доказательство. Рассмотрим произвольные $x_A, x_B \in \{x : w^T x + w_0 = 0\}$:

$$w^T x_A + w_0 = 0 \tag{1}$$

$$w^T x_B + w_0 = 0 \tag{2}$$

□

Вычитая (2) из (1), получим $w^T(x_A - x_B) = 0$, поэтому w ортогонален гиперплоскости.

Расстояние от точки до гиперплоскости

Теорема 2

Расстояние от точки x до гиперплоскости $w^T x + w_0 = 0$ равно $\frac{w^T x + w_0}{\|w_0\|}$.

Доказательство. Пусть p - проекция x на гиперплоскость, а $h = x - p$ - ортогональное дополнение. Тогда

$$x = p + h$$

Поскольку p лежит на гиперплоскости, то

$$w^T p + w_0 = 0$$

Поскольку h ортогонально гиперплоскости по теореме 1, то

$$h = r\frac{w}{\|w\|}, \; r \in \mathbb{R} \text{ - расстояние до гиперплоскости.}$$

□

Расстояние от точки до гиперплоскости

$$x = p + r\frac{w}{\|w\|}$$

После домножения равенства на w и прибавления w_0:

$$w^T x + w_0 = w^T p + w_0 + r\frac{w^T w}{\|w\|} = r\left\|w\right\|,$$

поскольку $w^T p + w_0 = 0$ и $\|w\| = \sqrt{w^T w}$. В итоге получаем

$$r = \frac{w^T x + w_0}{\|w\|}$$

Комментарии:

- С одной стороны гиперплоскости $r > 0 \Leftrightarrow w^T x + w_0 > 0$
- С другой стороны гиперплоскости $r < 0 \Leftrightarrow w^T x + w_0 < 0$.
- Расстояние от начала координат до гиперплоскости $\frac{w_0}{\|w\|}$. Поэтому w_0 отвечает за смещение.

Бинарный линейный классификатор - интерпретация

- Бинарный линейный классификатор:

$$\widehat{y}(x) = \text{sign}\left(w^T x + w_0\right)$$

  разделяет классы гиперплоскостью $w^T x + w_0 = 0$.
- Т.к. расстояние до границы равно $\frac{|w^T x + w_0|}{\|w\|}$, то $\left|w^T x + w_0\right| \in [0, +\infty)$ - уверенность классификации.
  - связана с вероятностью класса
- Качество классификации, с учетом верного y:

$$M(x, y) = y\left(w^T x + w_0\right)$$

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

Оценка вектора весов w

- Прямой подход: выберем w, чтобы минимизировать #ошибок:

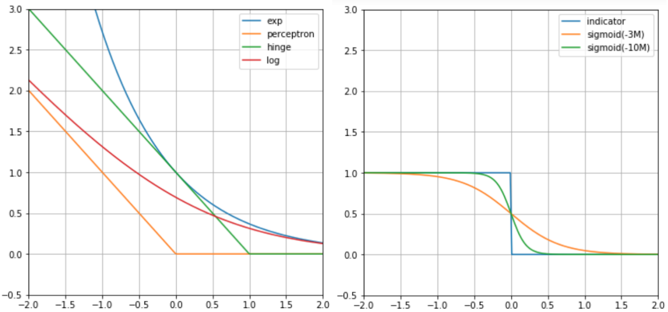
$$\sum_{n=1}^{N} \mathbb{I}\left[w^T x_n y_n < 0\right] \to \min_w$$

- Получили кусочно-постоянный критерий, градиент=0 почти везде.
- Для получения невырожденных градиентов, применим убывающую $\mathcal{L}(\cdot)$ к отступу:
    - минимизация нового критерия аппроксимирует минимизацию старого.

$$\sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}\left(M(x_n, y_n)\right) = \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}\left(w^T x_n y_n\right) \to \min_w$$

Популярные функции потерь

$$\mathcal{L}_{exp}(M) = e^{-M} \quad \mathcal{L}_{perceptron}(M) = [-M]_+$$
$$\mathcal{L}_{hinge}(M) = [1-M]_+ \quad \mathcal{L}_{log}(M) = \log_2\left(1+e^{-M}\right)$$



Какие из них будут выпуклыми? устойчивыми к выбросам? улучшать даже безошибочный классификатор?

Учёт матрицы цен

Если определена матрица цен (cost matrix)

$$\lambda\left(i,j\right)=\text{cost}\left\{y=i,\widehat{y}=j\right\},$$

то выгоднее оптимизировать не

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}\left(\widehat{y}_w\left(x_n\right),y_n\right)\to\min_w,$$

а взвешенные потери по цене

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\lambda\left(\widehat{y}_w\left(x_n\right),y_n\right)\mathcal{L}\left(\widehat{y}_w\left(x_n\right),y_n\right)\to\min_w$$

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

Регуляризация

- Хотим не только точную, но и простую модель.
  - простые модели обладают лучшей обобщающей способностью
  - измеряем сложность регуляризатором $R(w)$

$$\sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}\left(M(x_n, y_n|w\right) + \lambda R(w) \to \min_w$$

- $\lambda > 0$ - гиперпараметр[1] (насколько простота важнее точности).
- Популярные варианты $R(w)$:

$R(\beta) = ||w||_1$ — L_1 регуляризация

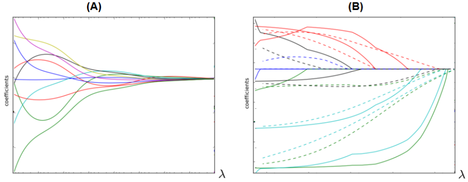
$R(\beta) = ||w||_2^2$ — L_2 регуляризация

$R(\beta) = \alpha \left\|w\right\|_1 + (1-\alpha) \left\|w\right\|_2^2$ — ElasticNet $\alpha \in (0,1)$

[1] Как меняется сложность модели при увеличении λ?

Комментарии

- Зависимость w от λ для L_2 (A) и L_1 (B) регуляризации:



- L_1 может автоматически отбирать признаки.
- λ обычно находится по экспоненциальной шкале $[10^{-6}, 10^{-5}, ...10^{5}, 10^{6}]$.
  - можно уточнить по мелкой сетке в окрестности оптимума
- Использование регуляризации позволяет плавно контролировать сложности модели.

ElasticNet

- ElasticNet - линейная комбинация L_1 и L_2 регуляризации:

$$R(\beta) = \alpha||w||_1 + (1-\alpha)||w||_2^2 \to \min_w$$

$$\alpha \in [0,1] - \text{гиперпараметр.}$$

- Если два признака x^i и x^j равны:
    - Гребневая регрессия выберет оба с равным весом
        - правильно, т.к. нет априорных предпочтений
    - Лассо регрессия выберет один из них (в общем случае)
        - зато отберет лишние признаки
- ElasticNet обладает обоими преимуществами.

Учет разных признаков с разной силой

- Прогнозы обычного линейного классификатора инвариантны к масштабированию признаков:

$$g(x) = \widehat{w}_1 x^1 + \widehat{w}_2 x^2 + \ldots \xrightarrow{x^1 \to x^1/\alpha} (\alpha \widehat{w}_1)\left(\frac{x^1}{\alpha}\right) + \widehat{w}_2 x^2 + \ldots$$

- Но не регуляризованного:

$$\sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}\left(M(x_n, y_n | w)\right) + \lambda R(w) \to \min_w$$

- После изменения масштаба признаков, они будут вносить другой вклад в прогноз.
  - для большего учета признака как нужно изменить его масштаб?

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

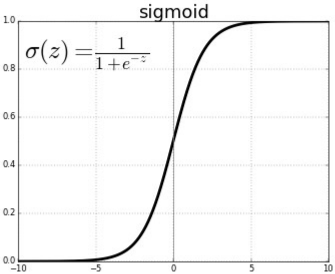
Бинарная классификация[2]

- Предпочтение $y=+1$ относительно $y=-1$ бинарного классификатора:

$$g(x)=w^T x$$

- Предположение *логистической регрессии*:

$$p(y=+1|x)=\sigma(w^T x)$$



[2] Является частным случаем GLM модели (Generalized Linear Model).

Оценка параметров[3]

Свойство сигмоиды:

$$1-\sigma(z)=1-\frac{1}{1+e^{-z}}=\frac{e^{-z}}{1+e^{-z}}=\frac{1}{1+e^{z}}=\sigma(-z)$$

поэтому

$$p(y=+1|x)=\sigma(w^Tx)\Longrightarrow p(y=-1|x)=1-p(y=+1|x)=\sigma(-w^Tx$$

$$p(y|x)=\sigma(y\langle w,x\rangle)\text{ в общем случае.}$$

Оценим w методом условного максимального правдоподобия:

$$ML=P(Y|X)=\prod_{n=1}^{N}p(y_n|x_n)=\prod_{n=1}^{N}\sigma(\langle w,x_n\rangle y_n)\to\max_w$$

[3] Почему $\|w\|\to\infty$ при линейной разделимости классов? Как с этим бороться?

Минимизация эмпирического риска и максимизация правдоподобия

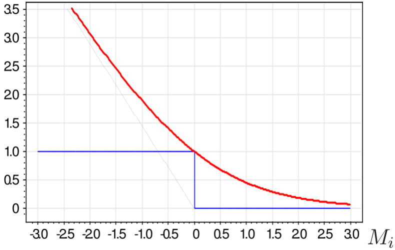
$$\prod_{n=1}^{N}\sigma(\langle w,x_n\rangle y_n)=\prod_{n=1}^{N}\frac{1}{1+e^{-\langle w,x_n\rangle y_n}}\to\max_w$$

$$\prod_{n=1}^{N}\left(1+e^{-\langle w,x_n\rangle y_n}\right)\to\min_w$$

$$\sum_{n=1}^{N}\log_2(1+e^{-\langle w,x_n\rangle y_n})\to\min_w$$ (прологарифмировали критерий)

Иллюстрация

Обратим внимание, что логистическая ф-ция потерь - сглаженная версия ф-ции потерь персептрона



SGD для логистической регрессии

$$w := w - \varepsilon \nabla_w \mathcal{L}(w^T xy) = w - \varepsilon \frac{\partial \mathcal{L}(M)}{\partial M} \frac{\partial M}{\partial w} = w - \varepsilon \frac{\partial \mathcal{L}(M)}{\partial M} xy$$

$$\mathcal{L}(\mathbf{M}) = [-\mathbf{M}]_+ :$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(M)}{\partial M} = -\mathbb{I}[M < 0]$$

$$w := w + \varepsilon \mathbb{I}[M < 0] xy$$

$$\mathcal{L}(\mathbf{M}) = \log_{\mathbf{2}}(\mathbf{1} + \mathbf{e}^{-\mathbf{M}}) :$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(M)}{\partial M} = \frac{1}{\log_2 e} \frac{-e^{-M}}{(1 + e^{-M})} = \frac{1}{\log_2 e} \frac{-1}{(1 + e^{M})} = -\frac{\sigma(-M)}{\log_2 e}$$

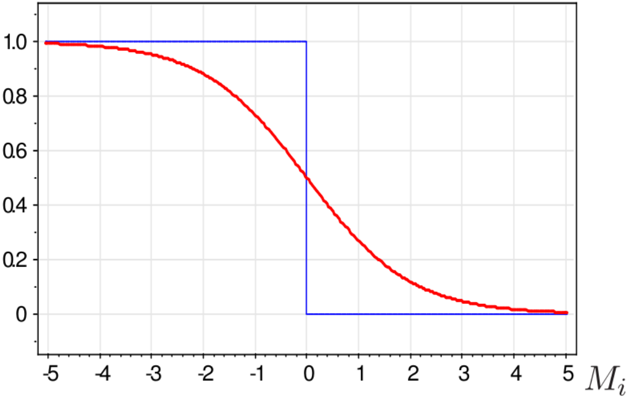
$$w := w + \varepsilon' \sigma(-M) xy$$

Получили сглаженный классификатора персептрона[4].

[4]Может ли $M(x_i, y_i)$ после обновления весов уменьшиться?

Иллюстрация

Иллюстрация:



Использование логистической регрессии

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.metrics import brier_score_loss
from sklearn.metrics import accuracy_score

X_train, X_test, Y_train, Y_test =
    get_demo_classification_data()
model = LogisticRegression(C=1, penalty='l2') # иниц-
    ция
model.fit(X_train, Y_train)     # обучение модели
Y_hat = model.predict(X_test)   # построение прогнозов
print(f'Точность прогнозов: \
{100*accuracy_score(Y_test, Y_hat):.1f}%')
P_hat = model.predict_proba(X_test)  # вер-ти классов
loss = brier_score_loss(Y_test, P_hat[:,1])
print(f'Мера Бриера ошибки вероятностей: {loss:.2f}')
```

- 1/C - вес при регуляризаторе.
- Больше информации. Полный код.

Многоклассовая логистическая регрессия

Многоклассовая классификация:

$$
\begin{array}{ll}
y = 1: & g_1(x) = w_1^T x \\
y = 2: & g_2(x) = w_2^T x \\
\cdots & \cdots \\
y = C: & g_C(x) = w_C^T x
\end{array}
$$

Логистическая регрессия предполагает связь $g_1(x), ...g_C(x)$ и вероятностей классов через softmax преобразование:

$$
p(y = c|x) = \mathrm{SoftMax}(w_c^T x | x_1^T x, ...x_C^T x) = \frac{e^{w_c^T x}}{\sum_{i=1}^{C} e^{w_i^T x}}
$$

SoftMax

- SoftMax преобразует уверенности исходов в их вероятности:

$$\text{SoftMax}_\tau(z_1, ...z_K) =$$
$$= \left[\frac{e^{z_1/\tau}}{e^{z_1/\tau} + ... + e^{z_K/\tau}}, \frac{e^{z_2/\tau}}{e^{z_1/\tau} + ... + e^{z_K/\tau}}, ..., \frac{e^{z_K/\tau}}{e^{z_1/\tau} + ... + e^{z_K/\tau}}\right]$$

- τ - параметр температуры, контролирующий контрастность вероятностей[5].

[5] как?

Неоднозначность параметров и их оценка

- Веса $\{w_c\}$ определены с точностью до сдвига v:

$$\frac{exp((w_c - v)^T x)}{\sum_i exp((w_i - v)^T x)} = \frac{exp(-v^T x) exp(w_c^T x)}{\sum_i exp(-v^T x) exp(w_i^T x)} = \frac{exp(w_c^T x)}{\sum_i exp(w_i^T x)}$$

  Чтобы убрать неоднозначность, ограничим $w_C = \mathbf{0}$ (соответствует $v = w_C$)

- Параметры оценим максимизацией условного правдоподобия:

$$\begin{cases} \prod_{n=1}^{N} softmax(w_{y_n}^T x_n | x_1^T x, ... x_C^T x) \to \max_{w_1, ... w_{C-1}} \\ w_C = \mathbf{0} \end{cases}$$

Содержание

1. Виды классификатоов
2. Геометрическая интерпретация
3. Оценка параметров
4. Регуляризация
5. Логистическая регрессия
6. Многоклассовая классификация бинарными классификаторами
7. Связь с вероятностными подходами

Многоклассовая классификация бинарными классификаторами

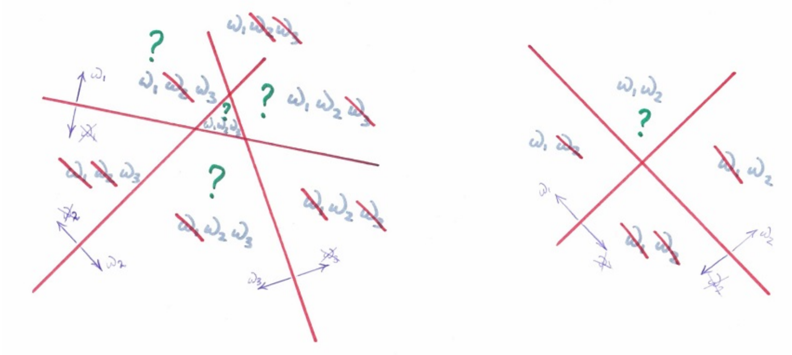
Хотим построить C-классовый классификатор по совокупности бинарных.

Подходы:

- один против всех (one-versus-all)
  - для каждого класса $c = 1, 2, ...C$ обучим бинарный классификатор на $y' = \mathbb{I}[y = c]$,
  - назначим класс, предсказанный с максимальной уверенностью (среди C классификаторов).
- один против одного (one-versus-one)
  - для каждой пары классов $i \neq j \in \{1, 2, ...C\}$ обучим бинарные классификаторы на $(x_n, y_n): \ y_n \in \{i, j\}$.
    - назначим класс, максимально часто побеждающий среди $C(C-1)/2$ сравнений.
    - при неоднозначности - используем уверенность классификации
- коды, исправляющие ошибки (error correcting codes)

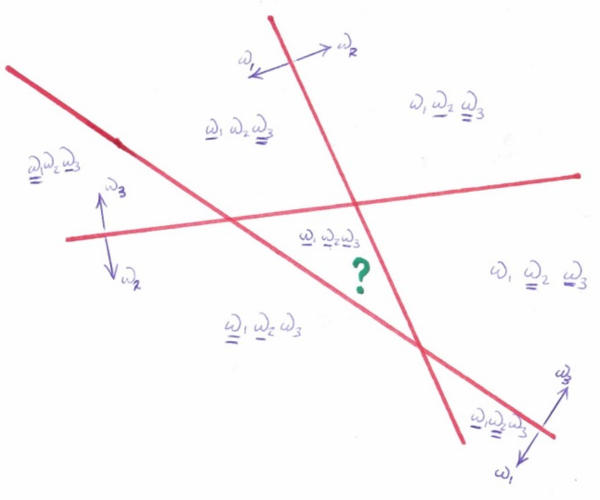
Один против всех - неоднозначность

Классификация среди 3х классов $\omega_1, \omega_2, \omega_3$:



Один против одного - неоднозначность

Классификация среди 3х классов $\omega_1, \omega_2, \omega_3$:



Коды исправляющие ошибки

- Каждый класс i кодируется бинарным представлением W_i из B бит:

$$\text{класс } i \to W_i \in \mathbb{R}^B,\ W_{ik} \in \{0,1\},\ k = 1,2,...B.$$

- Минимально достаточное количество бит для однозначного кодирования C классов $= \lceil \log_2 C \rceil$
- Для заданного x, B бинарных классификаторов $\widehat{y}_1(x),...\widehat{y}_B(x)$ предсказывают каждый бит.
- Итоговый класс прогнозируется по правилу[6]:

$$\hat{y}(x) = \arg\min_c \rho\left(W_c, [\widehat{y}_1(x),...\widehat{y}_B(x)]\right)$$

- Обычно, $\rho(\cdot,\cdot)$ считается по L_1 норме.

[6] Какому методу будет соответствовать случай, когда y представляется one-hot кодированием?

Коды исправляющие ошибки

- Используется избыточное количество бит $B \geq \lceil \log_2 C \rceil$ через коды, исправляющие ошибки (error correcting codes)
    - ошибки отдельных классификаторов исправляются другими.
- В качестве $\widehat{y}_1(x), ... \widehat{y}_B(x)$ выдаются вероятности классов.
    - метки загрубляют информацию о неточной классификации.
- Кодовые представления классов W_i выбираются, чтобы быть максимально непохожими по расстоянию Хэмминга.

Содержание

1 Виды классификатоов

2 Геометрическая интерпретация

3 Оценка параметров

4 Регуляризация

5 Логистическая регрессия

6 Многоклассовая классификация бинарными классификаторами

7 Связь с вероятностными подходами

Связь с принипом максимального правдоподобия

- $X=\{x_1,x_2,...x_N\}$, $Y=\{y_1,y_2,...y_N\}$ - обучающая выборка; $(x_i,y_i)\sim p(y|x,w)$
- Принцип максимума правдоподобия (при условии наблюдаемых X)

$$\widehat{w}=\arg\max_w p(Y|X,w)$$

$$\prod_{i=1}^N p(y_i|x_i,w)\to\max_w \quad\Longleftrightarrow\quad \sum_{i=1}^N \ln p(y_i|x_i,w)\to\max_w$$

- Минимизация эмпирического риска:

$$\sum_{i=1}^N \mathcal{L}(g(x_i)y_i|w)\to\min_w$$

- Взаимосвязь между $\mathcal{L}(\cdot)$ и $p(\cdot)$:

$$\mathcal{L}(g(x_i)y_i|w)=-\ln p(y_i|x_i,w)$$

Связь с оценкой максимальной апостериорной вероятности

- Оценка максимальной апостериорной вероятности - англ. Maximum a prosteriori (MAP) estimation.
- Байесовский подход: w - случайная величина с априорным распределением $p(w)$
  - $p(w)$ не зависит от последующей обучающей выборки

$$p(w|Y,X) = \frac{p(Y,w|X)}{p(Y|X)} = \frac{p(Y|X,w)p(w|X)}{p(Y|X)}$$
$$\propto p(Y|X,w)p(w|X) = p(Y|X,w)p(w)$$

$$w = \arg\max_w p(w|X,Y) = \arg\max_w p(Y|X,w)p(w)$$

$$\sum_{i=1}^{N} \ln p(y_i|x_i,\theta) + \ln p(w) \to \max_w$$

Связь с оценкой максимальной апостериорной вероятности

$$\sum_{i=1}^{N} \ln p(y_i|x_i,\theta) + \ln p(w) \to \max_w$$

$$\sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}(g(x_i)y_i|w) + \lambda R(w) \to \min_w$$

Взаимосвязь:

$$\mathcal{L}(g(x_i)y_i|w) = -\ln p(y_i|x_i,w), \qquad \lambda R(w) = -\ln p(w)$$

Априорные распределения для L_1 и L_2 регуляризации

- Распределение Гаусса:

$$\ln p(w,\sigma^2) = \ln\left(C_1 e^{-\frac{||w||_2^2}{2\sigma^2}}\right) = -\frac{1}{2\sigma^2}||w||_2^2 + \text{const}(w)$$

- Распределение Лапласа:

$$\ln p(w,C) = \ln\left(C_2 e^{-\frac{||w||_1}{C}}\right) = -\frac{1}{C}||w||_1 + \text{const}(w)$$

Заключение

- Линейный классификатор - классификатор с линейными дискриминантными функциями.
- Линейный бинарный классификатор: $\widehat{y}(x) = \text{sign}(w^T x + w_0)$, граница классов - гиперплоскость.
  - популярные методы: метод опорных векторов и логистическая регрессия.
- Регуляризация контролирует сложность модели.
  - L_1 регуляризация может отбирать признаки.
- Логистическая регрессия может оценивать вероятности классов.
- Многоклассовые классификаторы можно строить из набора бинарных классификаторов.