Обучение с учителем. Классификация. Дискриминантный анализ.

Е. Ларин, Ф. Ежов, И. Кононыхин

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Обучение с учителем

Выборка из генеральной случайной величины

- Для задачи регрессии: $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$
- Для задачи классификации: $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{A}^n$

Обучение с учителем: формальная постановка

- *Вход*: $\mathbf{X}$ — выборка $\boldsymbol{\xi}$, $\mathbf{y}$ — выборка η. Предполагаем, что существует неизвестное отображение $y^* : \boldsymbol{\xi} \to \eta$ (гипотеза непрерывности или компактности)
- *Задача*: По $\mathbf{X}$ и $\mathbf{y}$ найти такое отображение $\hat{y}^* : \boldsymbol{\xi} \to \eta$, которое приблизит отображение y^*.
- *Оценка*: Функция потерь $\mathfrak{L}(y^*(x), \hat{y}^*(x))$. Здесь x — реализация $\boldsymbol{\xi}$

Классификация

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{A}^n \tag{1}$$

Гипотеза компактности

«Близкие» объекты, как правило, принадлежат одному классу

Понятие близости может быть формализовано, например, так:

$$\rho(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}) = \left(\sum_{i=1}^{p} w_i |x_1^i - x_2^i|^k \right)^{\frac{1}{k}}$$

Классификация: генеральная постановка

Дано:

- $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^p$ — вектор признаков
- $\eta \in \mathbb{A}$ — классовая принадлежность

Предположение об их зависимсти можно записать в виде 2.

$$\eta = \Phi(\boldsymbol{\xi}, \varepsilon) \tag{2}$$

Обычно на ε накладываются условия

$$E\varepsilon = 0, \quad D\varepsilon = \sigma^2, \boldsymbol{\xi} \perp \varepsilon$$

Задача: найти Φ

Классификация: выборочная постановка

Дано:

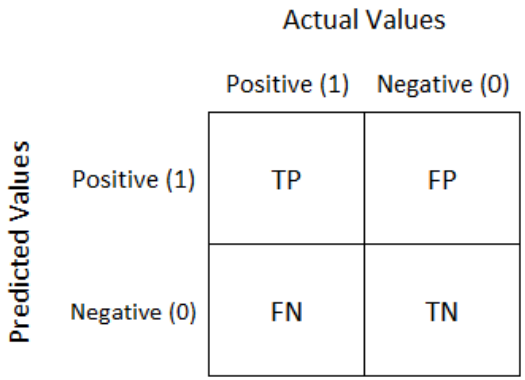
- $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ — матрица признаков
- $\mathbf{y} \in \mathbb{A}^n$ — вектор классовой принадлежности

Предположение имеет вид 3.

$$y_i = \Phi(\mathbf{x}_i, \varepsilon_i), \quad i = 1, \ldots, n \tag{3}$$

Задача: найти Φ

Классификация: оценка качества



На основе этой матрицы есть большое количество разных метрик: *accuracy*, *recall*, *precision*, F_β, *ROC–AUC*

Классификация: типы классов

- По количеству классов:
  - бинарная классификация
  - многоклассовая классификация
- По пересечению классов
  - пересекающиеся
  - непересекающаяся
  - нечёткие

Классификация: этапы обучения модели

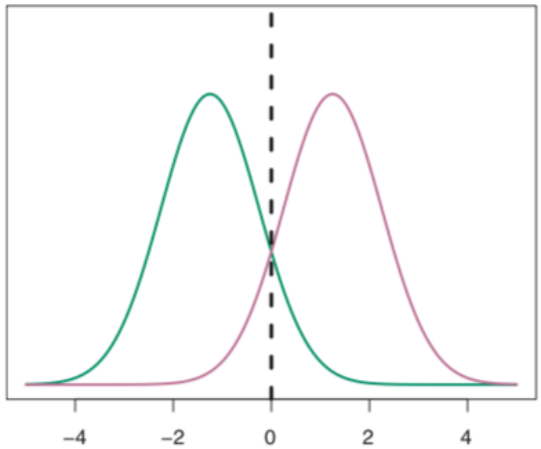
- Выбор модели (класс рассматриваемых Φ из $\Im$)
- Выбор метрики
- Выбор метода обучения (способ подбора параметров для минимизации метрики на обучающем множестве)
- Выбор метода проверки (способ оценки качества модели)

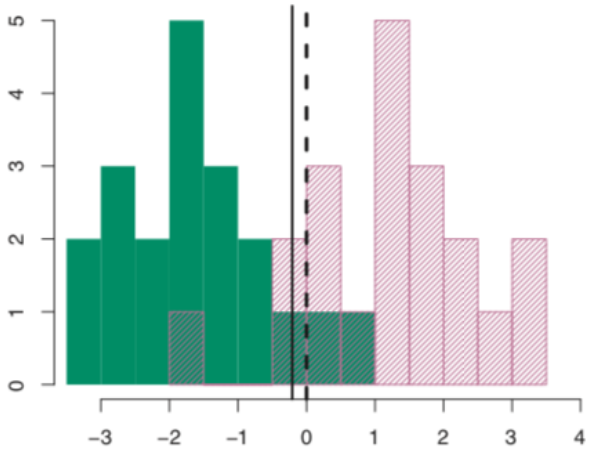
Классификация: задача оптимизации

- $\hat{\beta}$ — параметры модели
- $\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta)$ — функционал классификации
- $\mathfrak{L}(\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta), \mathbf{y})$ — функция потерь (метрика)

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta} \mathfrak{L}(\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta), \mathbf{y})$$

Классификация: отступы





Классификация: общий подход к решению

Как построить функционал Ф?
Общий подход — построить набор f_i, $i = 1, \ldots, K$. Каждая функция $f_i(\mathbf{x})$ показывает меру принадлежности $\mathbf{x}$ классу i.
Таким образом,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \arg\max_i(f_i(\mathbf{x})). \tag{4}$$

Дискриминантный анализ

Примем за функции f_i из 4 оценку вероятности принадлежности к i-му классу.

$$\Phi(\mathbf{x}) = \arg\max_i(P(C_i|\mathbf{x})).$$

C_i — класс, состоящий из одного события: $\mathbf{x}$ принадлежит i-му классу.

Дискриминантный анализ

Если известны априорные вероятности получения i-го класса (π_i), применим формулу Байеса

$$P(C_i|\mathbf{x}) = \frac{\pi_i P(\mathbf{x}|C_i)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j P(\mathbf{x}|C_j)}.$$

Отбросим знаменатель

$$f_i = P(C_i|\mathbf{x}) = \pi_i P(\mathbf{x}|C_i).$$

LDA

Предположение:

$$\mathtt{P}(\boldsymbol{\xi}|\eta = A_i) = \mathtt{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma})$$

Классифицирующая функция:

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\pi_i}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}}\right)$$

После упрощения:

$$h_i(\mathbf{x}) = -0.5\boldsymbol{\mu}_i\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i^{\mathtt{T}} + \boldsymbol{\mu}_i\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \log\pi_i$$

QDA

Предположение:

$$\mathtt{P}(\boldsymbol{\xi}|\eta = A_i) = \mathtt{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$$

Классифицирующая функция:

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\pi_i}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}_i|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}}\right)$$

После упрощения:

$$g_i(\mathbf{x}) = -0.5(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}} - 0.5\log|\boldsymbol{\Sigma}_i| + \log\pi_i$$

Лог. регрессия

Зададим модель логистической регрессии следующим образом:

$$\log \frac{P(\eta = G_i | \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})}{P(\eta = G_K | \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x})} = \beta_{i0} + \boldsymbol{\beta}_i^T \mathbf{x}, i = 1, \cdots, K-1.$$

Перейдем от логитов к вероятностям:

$$P(\eta = G_i | \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \frac{e^{\beta_{i0} + \boldsymbol{\beta}_i^T \mathbf{x}}}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\beta_{k0} + \boldsymbol{\beta}_k^T \mathbf{x}}}, i = 1, \cdots, K-1,$$

$$P(\eta = G_K | \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} e^{\beta_{k0} + \boldsymbol{\beta}_k^T \mathbf{x}}}.$$

Лог. регрессия: метод максимального правдоподобия

Для оценки параметров воспользуемся методом максимального правдоподобия:

$$l(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log P(\eta = G_k | \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}; \theta),$$

$$\theta = (\beta_{10}, \beta_1^T, \ldots, \beta_{(K-1)0}, \beta_{K-1}^T).$$

Iteratively reweighted least squares (IRLS).

Функция потерь: $\mathfrak{L}(M_i(\beta)) = \log(1 + e^{-y_i \beta^T x_i})$

SVM

Выборка: $\{x_i, y_i\}_{i=1}^n, x_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \{-1, 1\}$.
Задача построить классифицирующие правило.

Предположим, что данные - разделимы гиперплоскостью,

$$\mathbf{x}^T\beta - \beta_0 = 0; \beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R},$$

$$g(x) = \mathbf{x}^T\beta - \beta_0,$$

$$h(x) = sign(g(x)).$$

SVM

Критерий оптимальности: максимальное расстояние между двумя гиперплоскостями, параллельных данной и симметрично расположенных относительно нее.

Эта пара гиперплоскостей может быть описана парой уравнений:

$$\mathbf{x}^T\beta - \beta_0 = -1,$$

$$\mathbf{x}^T\beta - \beta_0 = 1.$$

Растояние между ними: $\frac{2}{||\beta||}$.

SVM

Принадлежность точек обучающей выборки полупространства описывается

$$(\mathbf{x}^T\beta - \beta_0)y_i \geqslant 1$$

Задача сводится к задаче квадратичного программирования с линейными ограничениями:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||\beta||_2^2 \to \min\limits_{\beta,\beta_0} \\ y_i\left(x_i^\intercal\beta - \beta_0\right) \geqslant 1 \end{cases}$$

SVM

Принадлежность точек обучающей выборки полупространства описывается

$$(\mathbf{x}^T\beta - \beta_0)y_i \geqslant 1$$

Задача сводится к задаче квадратичного программирования с линейными ограничениями:

$$\begin{cases} \frac{1}{2}||\beta||_2^2 \to \min\limits_{\beta,\beta_0} \\ y_i\left(x_i^\intercal\beta - \beta_0\right) \geqslant 1 \end{cases}$$

«««< HEAD

=======

Кросс-валидация

Кросс-валидация (aka перекрестная проверка, скользящий контроль) — процедура эмпирического оценивания обобщающей способности алгоритмов.
С помощью кросс-валидации "эмулируется"наличие тестовой выборки, которая не участвует в обучении модели, но для которой известны правильные ответы.

Кросс-валидация: виды

- Валидация на отложенных данных (Hold-Out Validation);
- Полная кросс-валидация (Complete Cross-Validation);
- k-fold Cross-Validation;
- t×k-fold Cross Validation;
- Кросс-валидация по отдельным объектам (Leave-One-Out);
- Случайные разбиения (Random Subsampling).

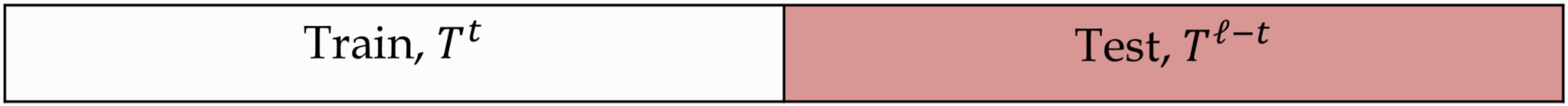
Кросс-валидация: Обозначения

Введем обозначения:

- $\mathbf{X}$ — матрица признаков, описывающие таргеты $\mathbf{y}$;
- $\mathbf{X}^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l, x_i \in \mathbf{X}, y_i \in \mathbf{y}$ — обучающая выборка;
- $\mathfrak{L}$ — функция потерь (мера качества);
- A — исследуемая модель;
- $\mu : (\mathbf{X} \times \mathbf{y}) \to A$ — алгоритм обучения.

Кросс-валидация: Hold-Out Validation

Обучающая выборка один раз случайным образом разбивается на две части $\mathbf{T} = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}$.



После чего решается задача оптимизации:
$HO(\mu, \mathbf{T}^t, \mathbf{T}^{l-t}) = \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^t), \mathbf{T}^{l-t}) \to min$.
Метод Hold-out применяется в случаях больших датасетов, т.к. требует меньше вычислительных мощностей по сравнению с другими методами кросс-валидации.
Недостатком метода является то, что оценка существенно зависит от разбиения, тогда как желательно, чтобы она характеризовала только алгоритм обучения.

Кросс-валидация: Complite cross-validation

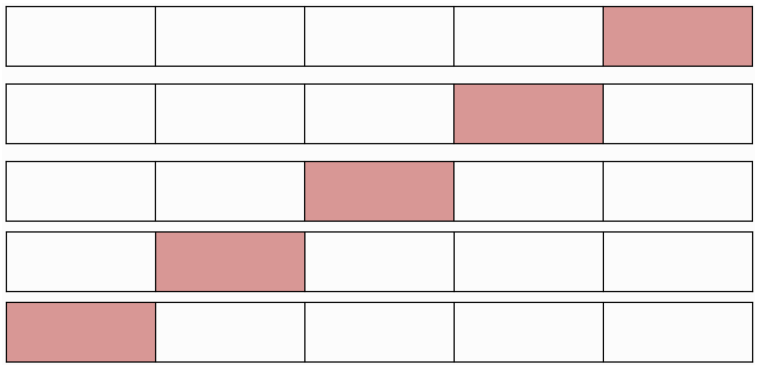
- Выбирается значение t;
- Выборка разбивается всевозможными способами на две части $\mathbf{T} = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}$.

После чего решается задача оптимизации:
$CVV_t = \frac{1}{C_l^{l-t}} \sum_{\mathbf{X}^l = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^t), \mathbf{T}^{l-t}) \to min.$
Здесь число разбиений C_l^{l-t} становится слишком большим даже при сравнительно малых значениях t, что затрудняет практическое применение данного метода.

Кросс-валидация: k-fold Cross-Validation

- $\mathbf{X}^l$ разбивается на $\mathbf{F_1} \cup \cdots \cup \mathbf{F_k}$, $|\mathbf{F_i}| \approx \frac{1}{k}$ частей;
- Производится k итераций:
  - Модель обучается на $k-1$ части обучающей выборки;
  - Модель тестируется на части обучающей выборки, которая не участвовала в обучении.

Каждая из k частей единожды используется для тестирования.



После чего решается задача оптимизации:

$$CV_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{X}^l \setminus \mathbf{F}_i), \mathbf{F}_i) \to min.$$

Кросс-валидация: t×k-fold Cross Validation

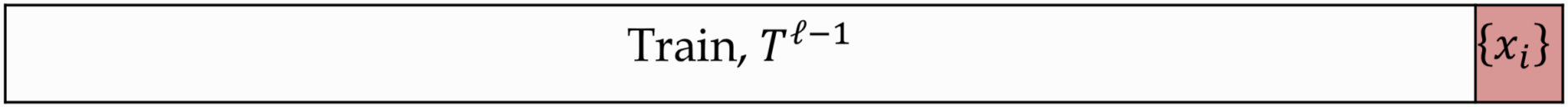
Как k-fold Cross-Validation, только t раз.

Разбиение: $\mathbf{X}^l = \mathbf{F}_{(1,1)} \cup \cdots \cup \mathbf{F}_{(k,1)} = \mathbf{F}_{(1,t)} \cup \cdots \cup \mathbf{F}_{(k,t)}, |\mathbf{F}_{(i,j)}| \approx \frac{l}{k},$

Задача оптимизации: $CV_{t\times k} = \frac{1}{tk} \sum_{j=1}^{t} \sum_{i=1}^{k} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{X}^l \setminus \mathbf{F}_{i,j}), \mathbf{F}_{i,j}) \to min$

Кросс-валидация: Leave-One-Out

Выборка разбивается на $l - 1$ и 1 объект l раз.



$LOO = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{X}^l \setminus p_i), p_i) \to min$, где $p_i = (x_i, y_i)$.

Преимущества LOO в том, что каждый объект ровно один раз участвует в контроле, а длина обучающих подвыборок лишь на единицу меньше длины полной выборки.

Недостатком LOO является большая ресурсоёмкость, так как обучаться приходится L раз.

Кросс-валидация: Random subsampling (Monte-Carlo cross-validation)

Выборка разбивается в случайной пропорции. Процедура повторяется несколько раз.

Кросс-валидация: Выбор лучшей модели

Не переобученый алгоритм должен показывать одинаковую эффективность на каждой части.

SGD

Стохастический градиентный спуск - оптимизационный алгоритм, при котором градиент оптимизируемой функции считается на каждой итерации от случайно выбранного элемента выборки.

Вспомним про GD: обозначения

- $\mathbf{X} \in \mathrm{R}^{n \times p}$ — матрица признаков;
- $y^* : \mathbf{X} \to \mathbf{y}$ - целевая зависимость, известная на $\mathbf{X}^l$;
- $\mathbf{y} = y^*(\mathbf{X}) \in \mathrm{A}^n$ — вектор классовой принадлежности;
- $\mathbf{X}^l$ — обучающая выборка, состоящая из пар $(x_i, y_i)_{i=1}^l$;
- $a(x, \omega)$ — семейство алгоритмов с параметром вектора весов ω;
- $\mathfrak{L}(a, y)$ — функция потерь, выбранная из класса C_1.

Вспомним про GD: постановка задачи

Найдем алгоритм $a(x, \omega)$, аппроксимирующий зависимость y^*.
Например, в случае линейного классификатора искомый алгоритм имеет вид:

$$a(x, \omega) = \phi(\sum_{j=1}^{n} \omega_j x^j - \omega_0),$$

где $\phi(z)$ - функция активации.
Решаемая задача оптимизации:

$$Q(\omega) = \sum_{i=1}^{l} \mathfrak{L}(a(x_i, \omega), y_i) \to \min_{\omega}$$

Обновление весов:

$$\omega^{(t+1)} = \omega^{(t)} - h\nabla Q(\omega^{(t)})$$

Вспомним про GD: Проблемы

Проблема GD — чтобы определить новое приближение вектора весов необходимо вычислить градиент от каждого элемента выборки, что может сильно замедлять алгоритм. Идея ускорения заключается в использовании либо одного элемента (SGD), либо некоторой подвыборки (Batch GD) для получения нового приближения весов.

Ускоряем GD - SGD

Веса, при подходе SGD, обновляются следующим образом:

$$\omega^{(t+1)} = \omega^{(t)} - h\nabla\mathfrak{L}(a(x_i, \omega^{(t)}), y_t),$$

где i — случайно выбранный индекс.
Т.к. направление изменения ω будет определяться за $O(1)$, подсчет Q на каждом шаге будет слишком дорогостоящим. Для ускорения оценки, будем использовать одну из рекуррентных формул:

- Среднее арифметическое:
  $\overline{Q}_m = \frac{1}{m}\mathfrak{L}(a(x_m, \omega), y_m) + (1 - \frac{1}{m})\overline{Q}_{m-1}$;
- Экспоненциальное скользящее среднее:
  $\overline{Q}_m = \lambda\mathfrak{L}(a(x_m, \omega), y_m) + (1 - \lambda)\overline{Q}_{m-1}$, где λ — темп забывания "предыстории"ряда.

SGD: А что с инициализацией весов?

Существует несколько способов:

- $\omega = 0$;
- $\omega_j = random(-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n})$;
- $\omega_j = \frac{\langle y, x_j \rangle}{\langle x_j, x_j \rangle}$, если признаки независимы, функция активации линейна, а функция потерь квадратична.

SGD: А что со сходимостью?

Установлено, что если скорость обучения убывает при увеличении числа итераций SGD сходится почти наверняка к глобальному минимуму в случае выпуклой или псевдовыпуклой функции $Q(\omega)$, в противном случае метод сходится почти наверняка к локальному минимуму.

SGD: Достоинства и недостатки

Достоинства:

- Легко реализуется;
- Функция потерь и семейство алгоритмов могут быть любыми (если функция потерь не дифференцируема, ее можно аппроксимировать дифференцируемой);
- Легко добавить регуляризацию;
- Возможно потоковое обучение;
- Подходит для задач с большими данными, иногда можно получить решение даже не обработав всю выборку.

Недостатки:

- Нет универсального набора эвристик, их нужно выбирать для конкретной задачи отдельно;
- На практике остаются проблемы с локальными экстремумами.

Модификации (или о чем можно почитать на досуге)

- Не выраженные явно изменения (ISGD) — градиент пересчитывается на следующей итерации;
- Метод импульса — запоминает $\Delta\omega$ на каждой итерации и определяет следующее изменение в виде линейной комбинации градиента и предыдущего изменения;
- Усреднённый стохастический градиентный спуск;
- AdaGrad — модификация SGD с отдельной для каждого параметра скоростью обучения;
- RMSProp — это метод, в котором скорость обучения настраивается для каждого параметра. Идея заключается в делении скорости обучения для весов на скользящие средние значения недавних градиентов для этого веса;
- Adam — это обновление оптимизатора RMSProp. Здесь используются скользящие средние как градиентов, так и вторых моментов градиентов.
- Kalman-based SGD.