Машинное обучение

Лекция 5. Линейные методы классификации.

Катя Тузова

Разбор летучки

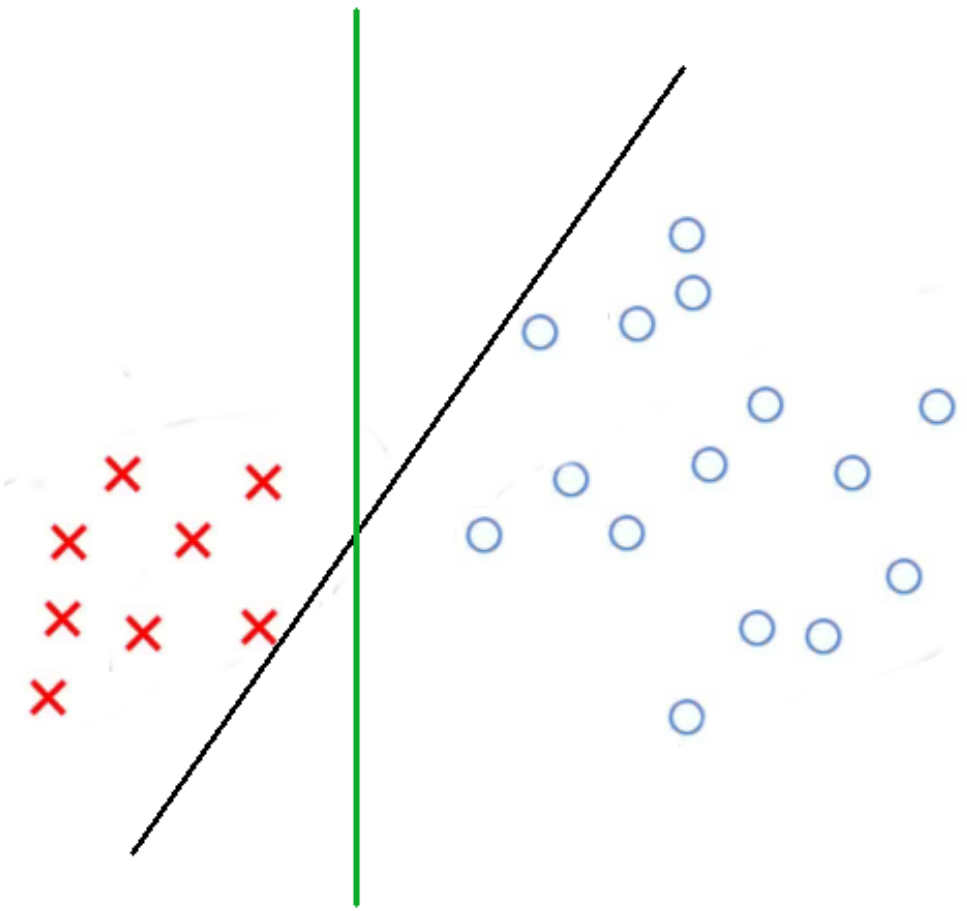
Постановка задачи

$X = \mathbb{R}^n$, $Y = \{-1, +1\}$
$X^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l$ – обучающая выборка

Найти:
$(n-1)$-мерную гиперплоскость, которая разделяет данные как можно лучше.

Как можно лучше – это как?

Пример



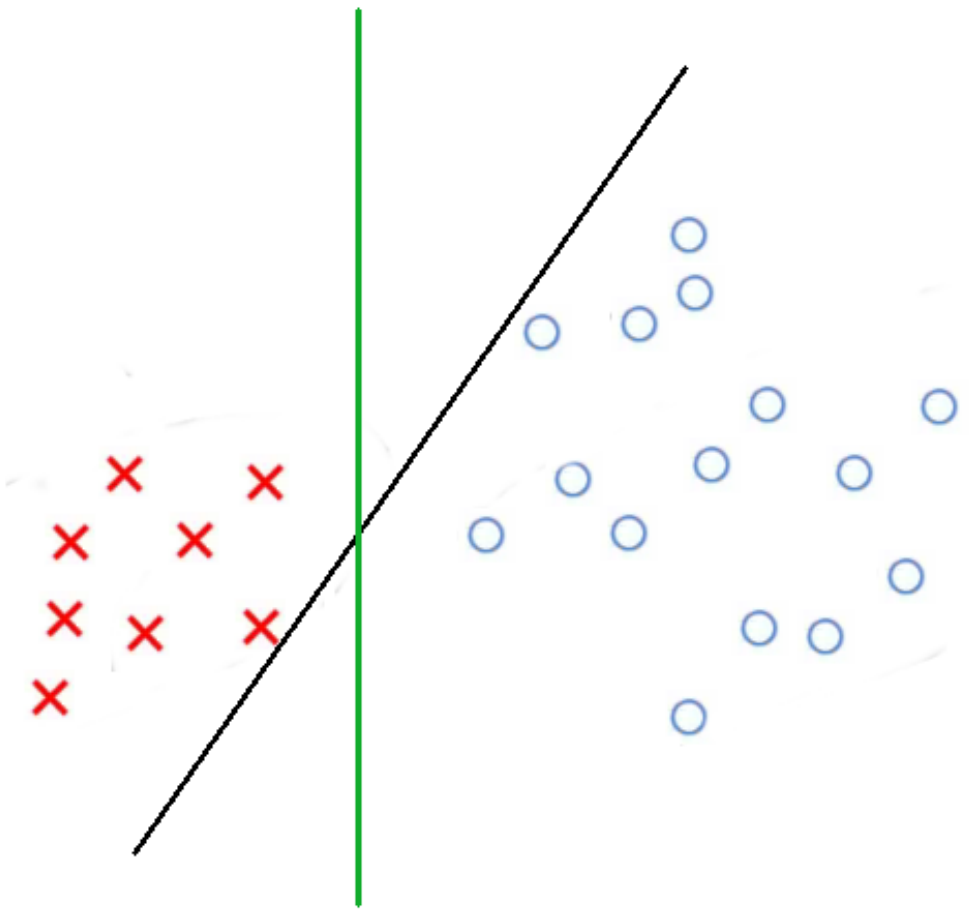
Постановка задачи

Как можно лучше:
Два разделенных класса должны лежать как можно дальше от разделяющей гиперплоскости.

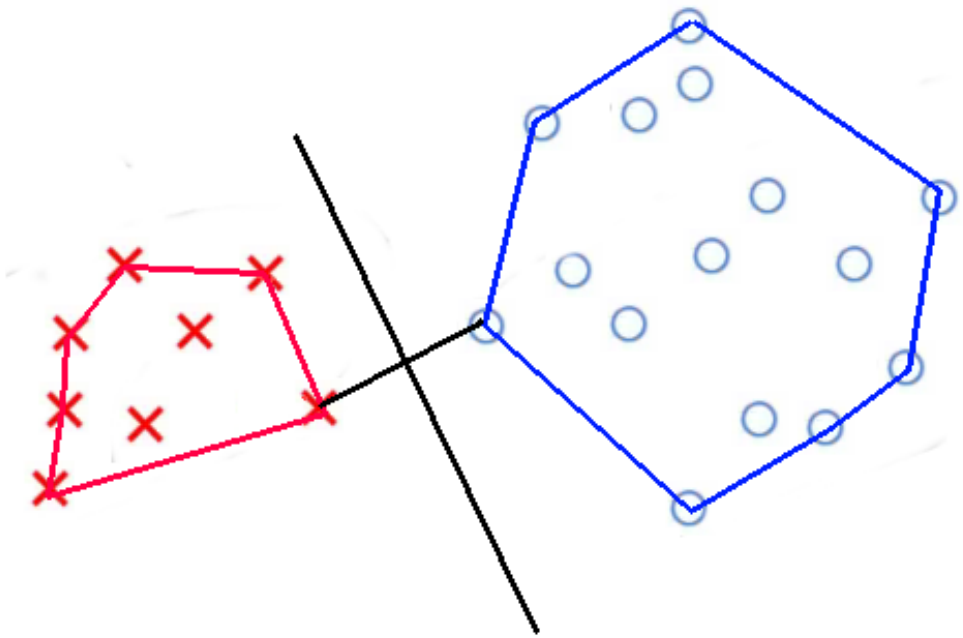
Вопрос

Как построить такую гиперплоскость?

Пример



Выпуклая оболочка

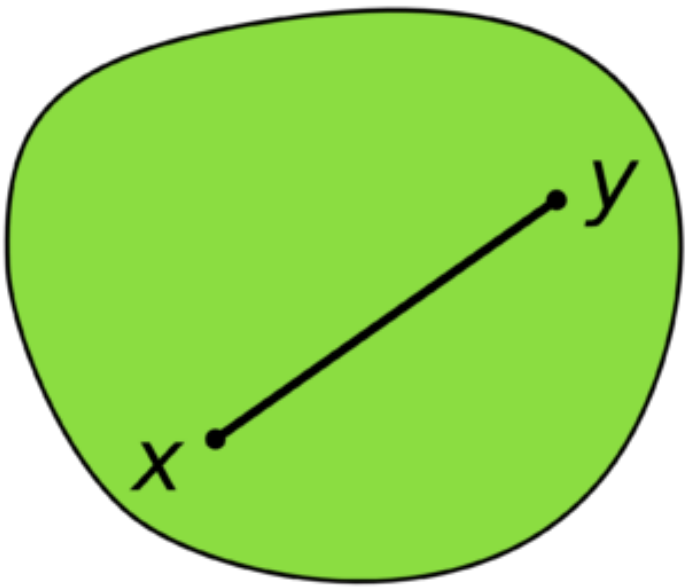


Выпуклая оболочка

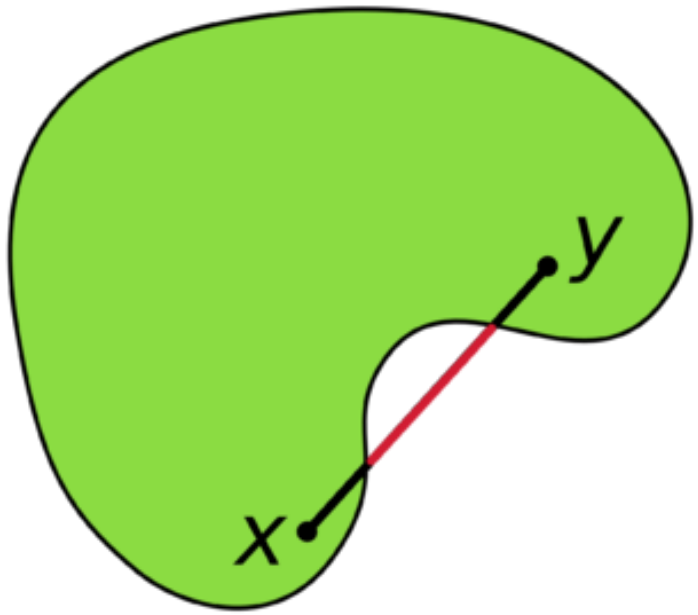
Выпуклой оболочкой множества X называется наименьшее выпуклое множество, содержащее X.

Выпуклое множество — множество, содержащее вместе с любыми двумя точками соединяющий их отрезок.

Выпуклая оболочка



Выпуклая оболочка



Невыпуклая оболочка

Выпуклая оболочка

Найти две ближайшие точки в выпуклых оболочках данных, а затем провести разделяющую гиперплоскость через середину отрезка.

Выпуклая оболочка

$$\min_w \|c - d\|^2, \text{ где } c = \sum_{y_i=1} w_i x_i,\ d = \sum_{y_i=-1} w_i x_i$$

$$\sum_{y_i=1} w_i = \sum_{y_i=-1} w_i = 1,\ w_i \geq 0$$

Задачу можно решать общими оптимизационными алгоритмами.

Построение разделяющей поверхности

Построение разделяющей поверхности

$X^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l$ – обучающая выборка
$Y = \{-1, +1\}$

Задача:
Построить алгоритм классификации $a(x, \theta) = \operatorname{sign} g(x, \theta)$

$g(x, \theta)$ – разделяющая функция
θ – вектор параметров, $\theta \in \mathbb{R}^l$

Линейный классификатор

$f_j : X \to \mathbb{R}$, $j = 1, \ldots, n$ $\qquad$ $w_j \in \mathbb{R}$

$g(x, w) = w_j f_j(x) - w_0$

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

Введём константный признак $f_0 \equiv -1$:

$$a(x, w) = sign(\sum_{j=0}^{n} w_j f_j(x))$$

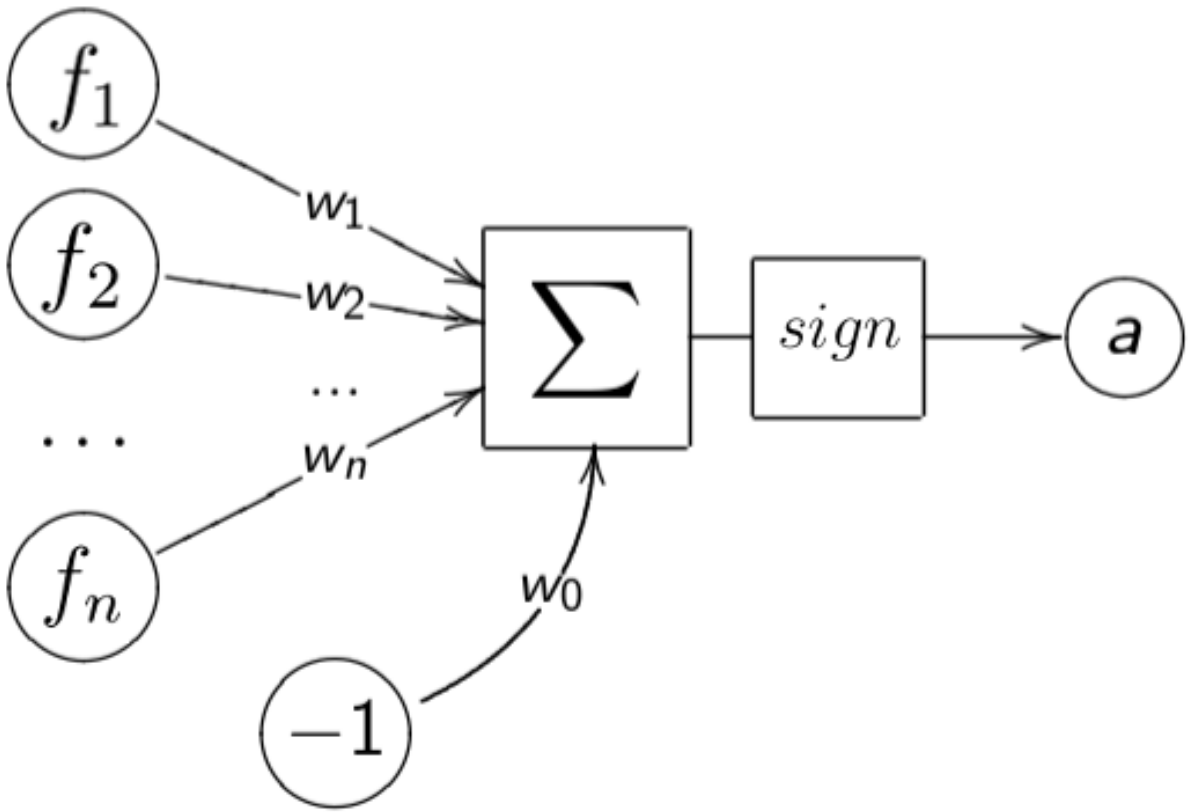
Линейный классификатор

$$a(x, w) = sign(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x))$$

Перейдём к векторной записи:
$\mathbf{x} = (f_1, f_2, \ldots, f_n)$

$$a(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = sign(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle)$$

Линейный классификатор



Линейный классификатор

Как подбирать w_j?

Построение разделяющей поверхности

Как оценить качество классификации?

Определение отступа

$g(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle = 0$ – разделяющая поверхность
$M_i(\mathbf{w}) = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i$ – отступ объекта x_i
$M_i(\mathbf{w}) < 0 \Rightarrow$ алгоритм $a(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ ошибается на x_i

Минимизация эмпирического риска

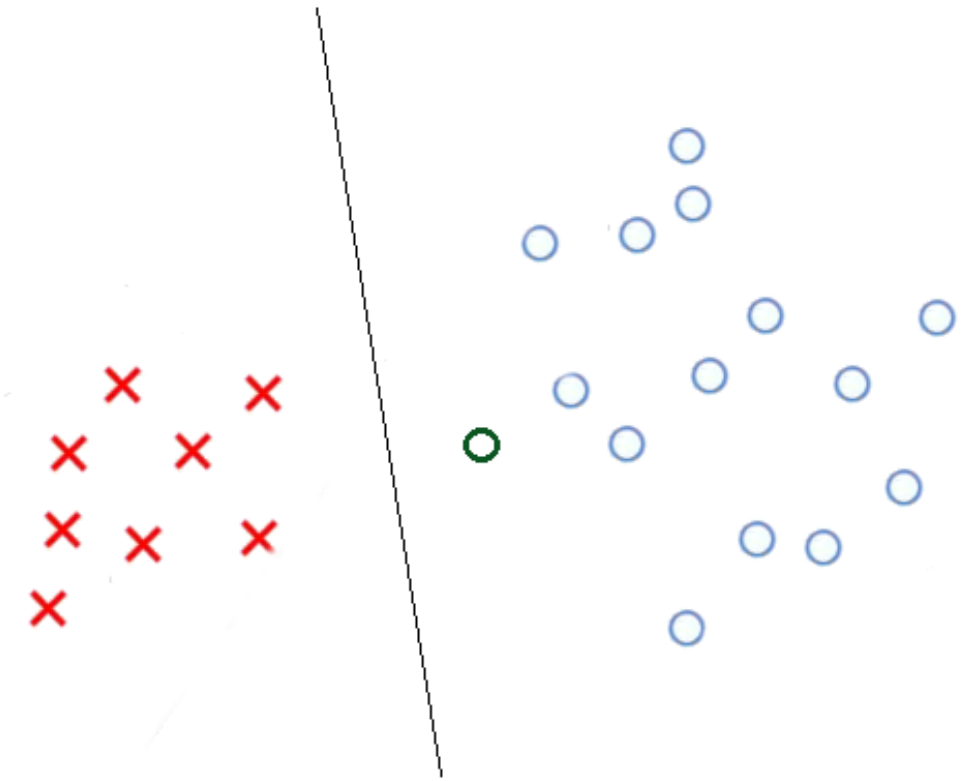
Число ошибок на обучающей выборке:

$$Q(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{l} [M_i(\mathbf{w}) < 0] \to \min_{\mathbf{w}}$$

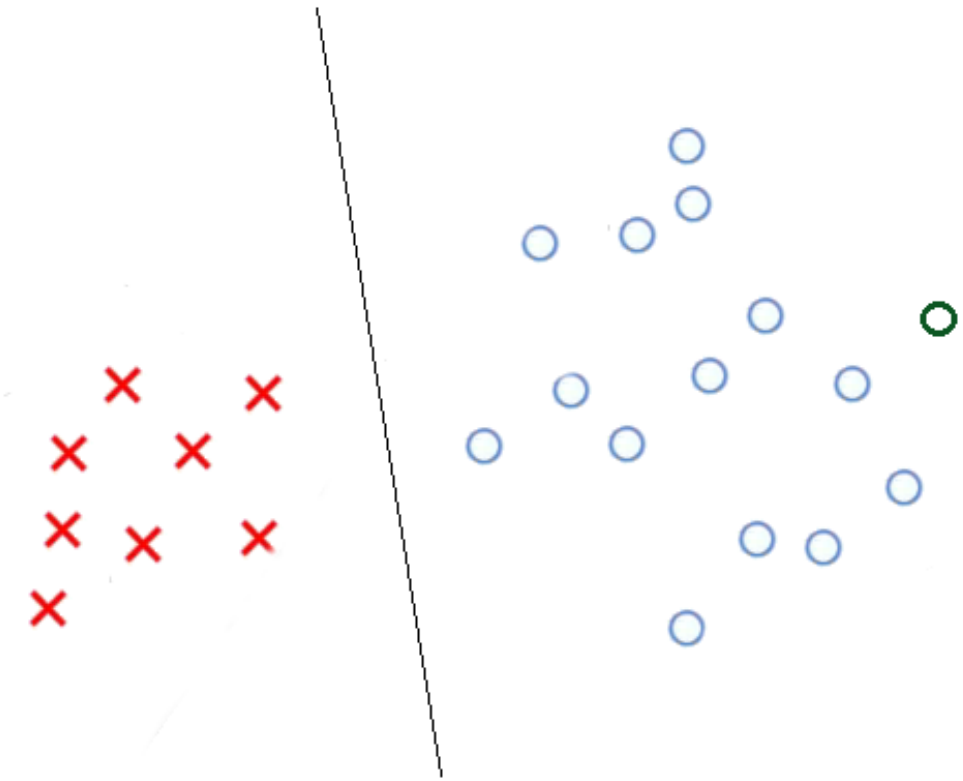
$Q(\mathbf{w})$ – функционал качества

- Индикаторную функцию сложно оптимизировать
- Теряем информацию насколько i-й объект был надежен

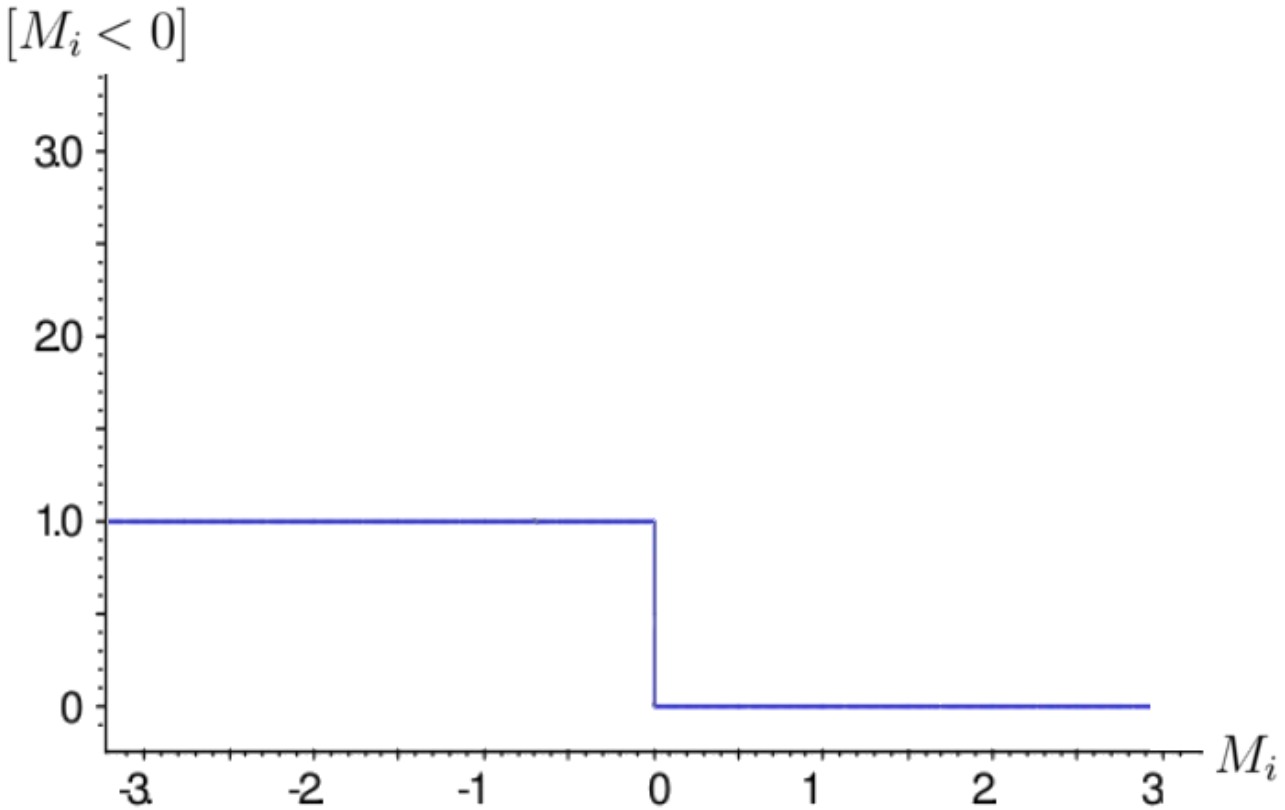
Отступ



Отступ



Функция $[M < 0]$



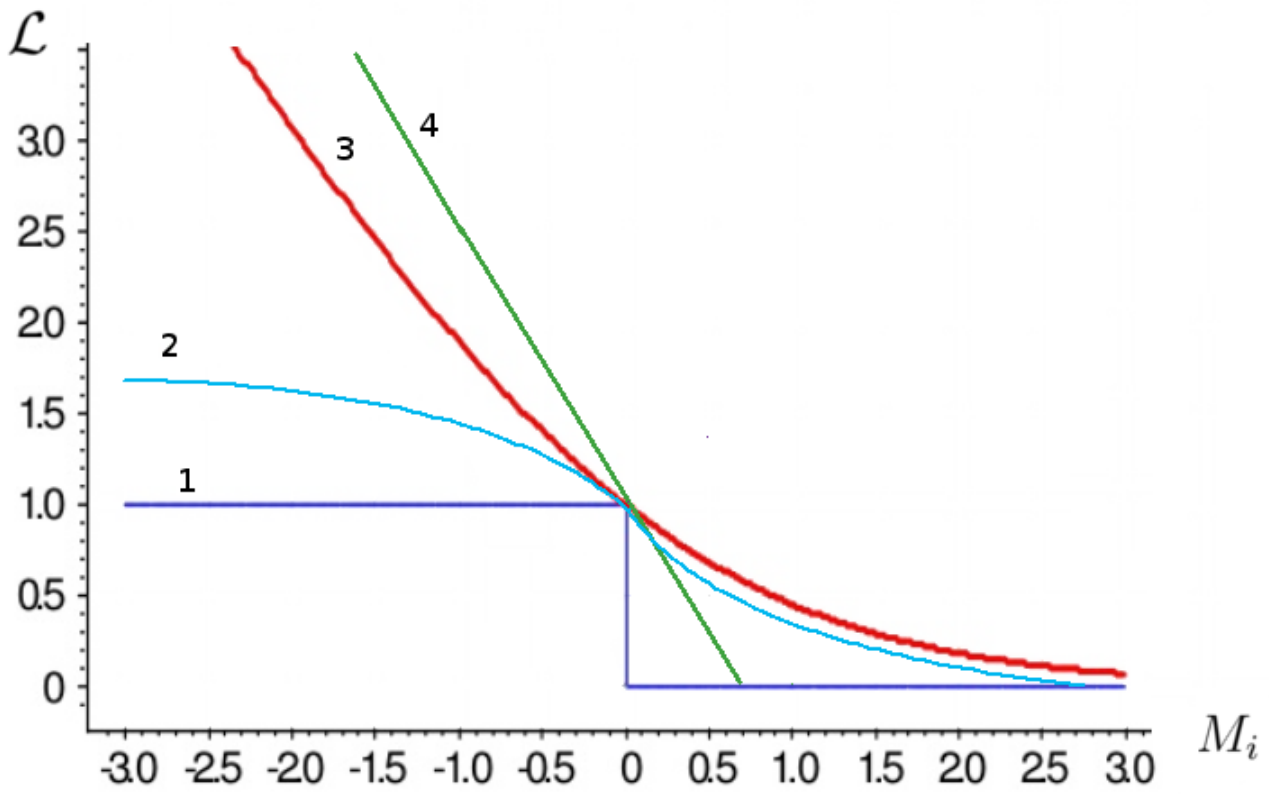
Минимизация эмпирического риска

$$Q(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{l} [M_i(\mathbf{w}) < 0] \leq$$

$$\leq \sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(M_i(\mathbf{w})) \to \min_{\mathbf{w}}$$

$\mathcal{L}$ – функция потерь, невозрастающая, неотрицательная.
$\mathcal{L}$ должна мажорировать $[M_i(\mathbf{w}) < 0]$

Примеры $\mathcal{L}$

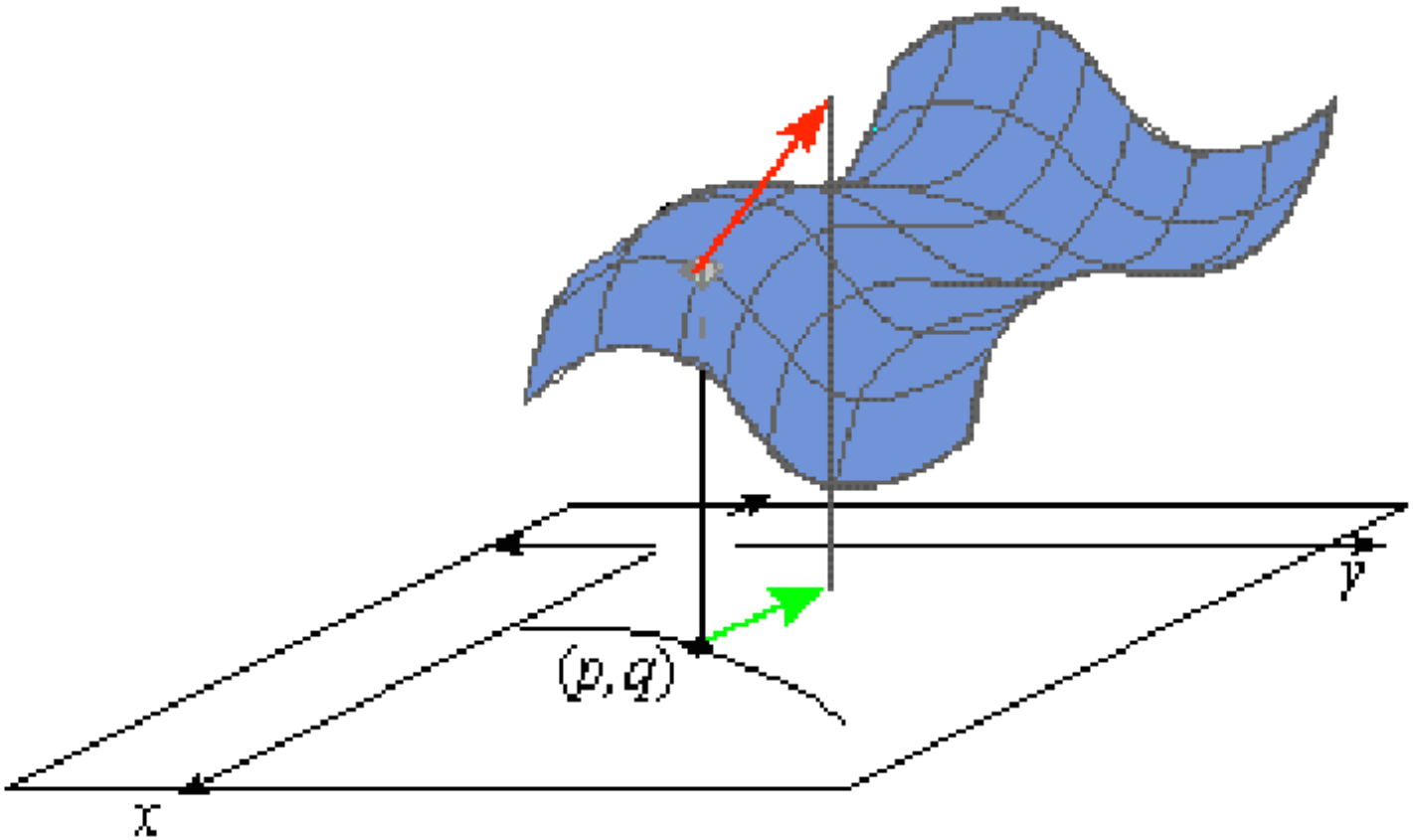


1. $[M_i(\mathbf{w}) < 0]$
2. $L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ – логарифмическая
3. $S(M) = 2(1 + e^{M})^{-1}$ – сигмоидная
4. $V(M) = (1 - M)_+$ – кусочно-линейная

Градиент

Что такое градиент?

Градиент



Метод градиентного спуска

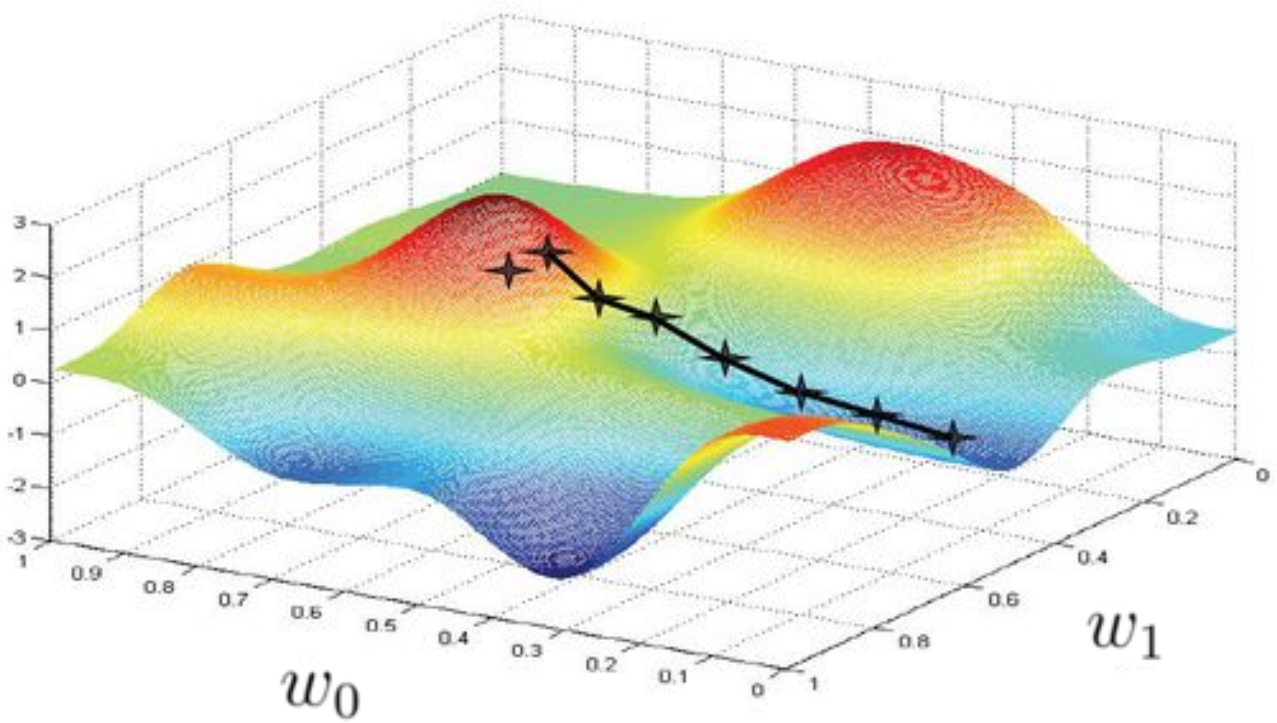
Input: η – градиентный шаг (темп обучения)
Output: $w_0, w_1, \ldots, w_n$

Инициализировать: w_j, $j = 0, \ldots, n$
Повторить пока $\mathbf{w}$ не стабилизируются:

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta \bigtriangledown Q(\mathbf{w})$$

$$\bigtriangledown Q(\mathbf{w}) = (\frac{\partial Q(\mathbf{w})}{\partial w_j})_{j=0}^{n}$$

Градиентный спуск



Метод градиентного спуска

Случай двух признаков.
Input: η – градиентный шаг (темп обучения)
Output: w_0, w_1

Инициализировать: w_0, w_1
Повторить пока w_0 и w_1 не стабилизируются:

$$tmp_0 = w_0 - \eta \frac{\partial Q(w)}{\partial w_0}$$
$$tmp_1 = w_1 - \eta \frac{\partial Q(w)}{\partial w_1}$$
$$w_0 = tmp_0$$
$$w_1 = tmp_1$$

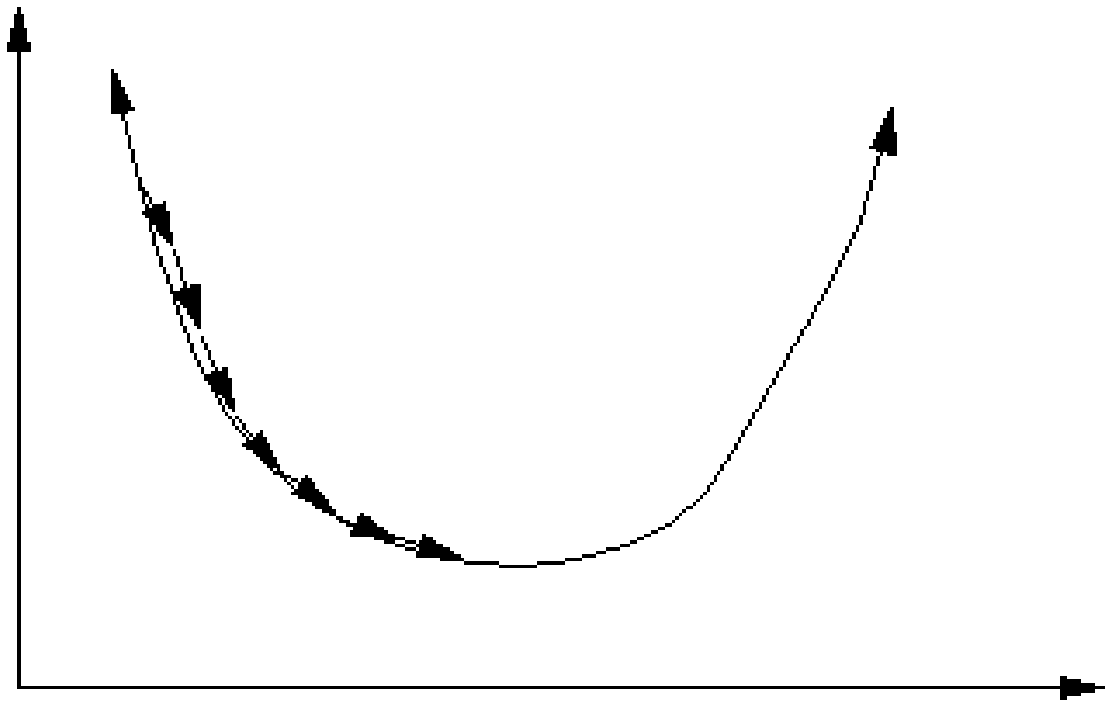
Метод градиентного спуска

Почему важно обновить w_0 и w_1 одновременно?

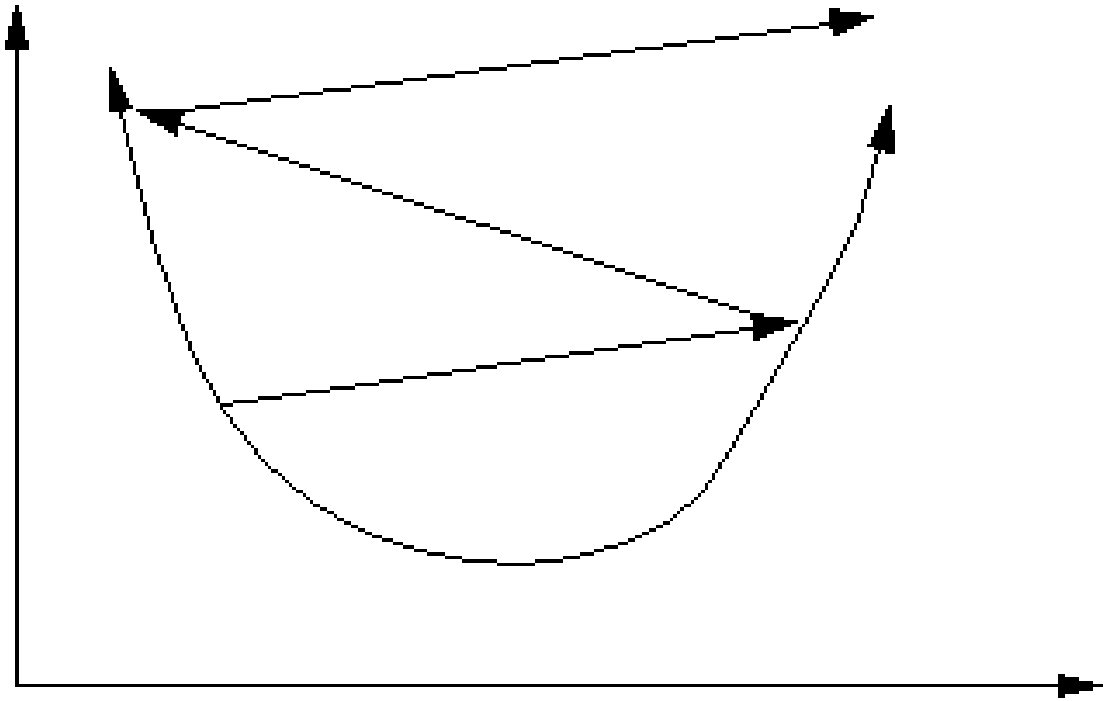
Градиент функционала качества Q

$$\bigtriangledown Q(\mathbf{w}) = (\frac{\partial Q(\mathbf{w})}{\partial w_j})_{j=0}^{n} = \sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}'(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i) \mathbf{x_i} y_i$$

Маленький градиентный шаг



Большой градиентный шаг



Выбор величины шага

- $\eta_t \to 0$
- Метод скорейшего градиентного спуска:
  $Q(w - \eta \bigtriangledown Q(w)) \to \min\limits_{\eta}$
- Пробные случайные шаги

В чем проблема?

В чем проблема?

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta \sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}'(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i) \mathbf{x_i} y_i$$

Метод стохастического градиента

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \eta \sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}'(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i) \mathbf{x_i} y_i$$

Давайте брать (x_i, y_i) по одному и сразу обновлять вектор весов

Алгоритм

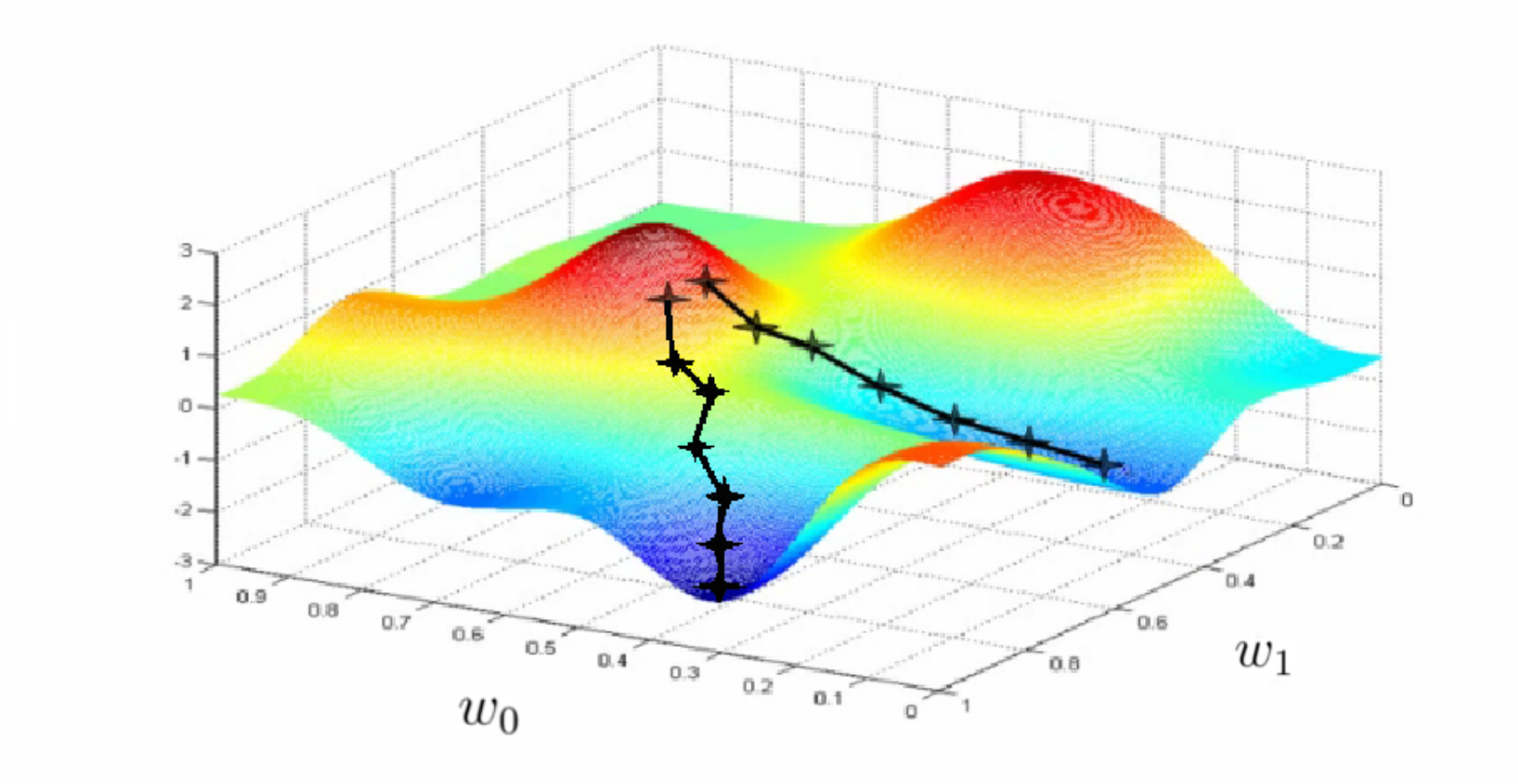
Input: X^l, η, λ
Output: $w_0, w_1, \ldots, w_n$

Перемешать данные в X^l
Инициализировать: w_j, $j = 0, \ldots, n$

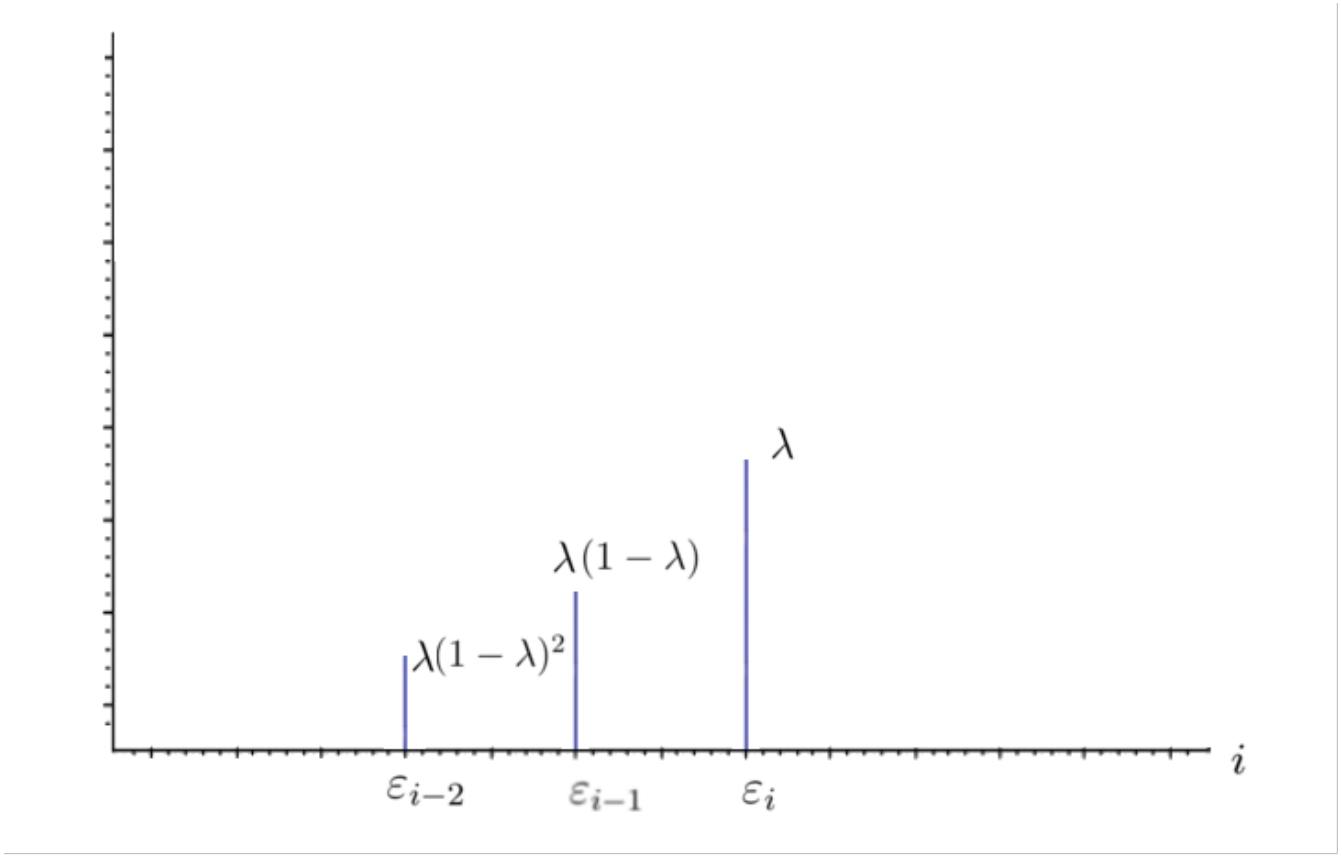
$$Q(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{l} \mathcal{L}(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i)$$

Повторить пока Q и/или w не стабилизируются:
- Взять x_i из X^l
- Потеря: $\varepsilon_i = \mathcal{L}(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i)$
- Градиентный шаг: $w = w - \eta \mathcal{L}'(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x_i} \rangle y_i) \mathbf{x_i} y_i$
- Оценить $Q = (1 - \lambda) Q + \lambda \varepsilon_i$

Градиентный спуск



Учет ошибки ε_i в алгоритме



Вопрос

Чего не хватает?

Вопрос

Как выбрать параметр λ?

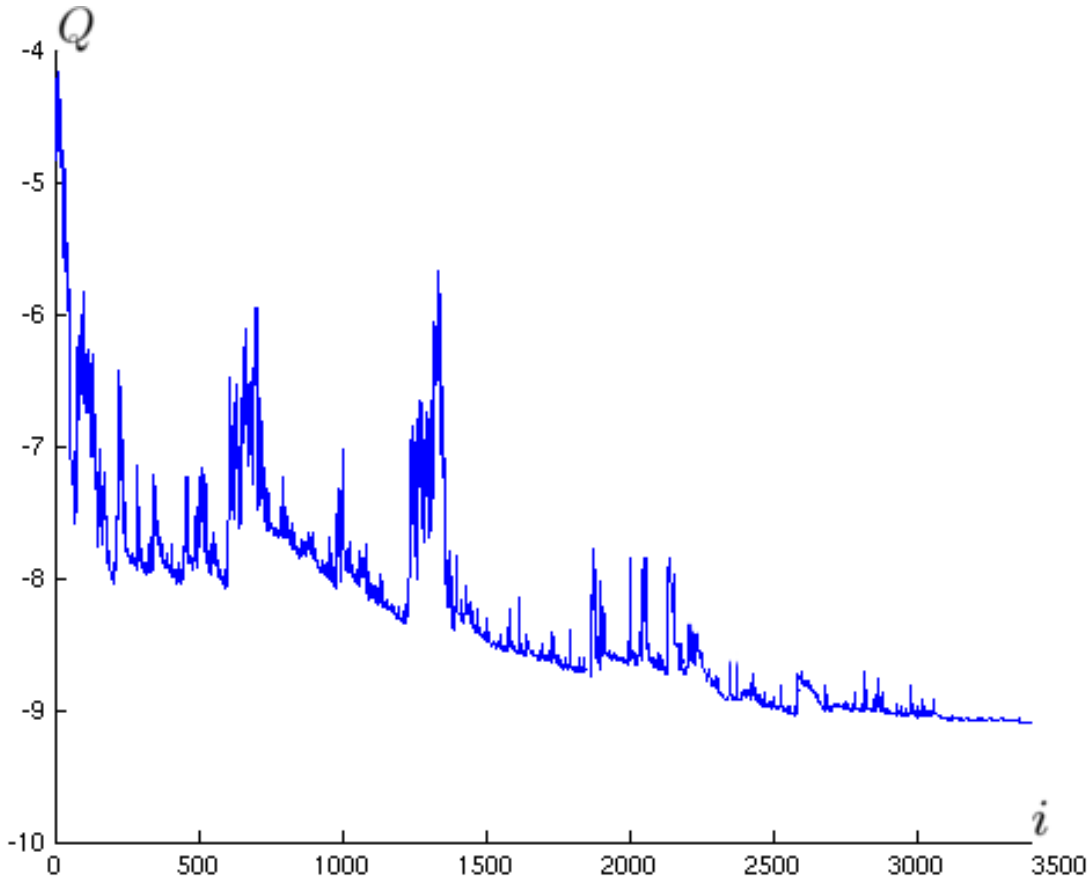
Эмпирическое правило для выбора λ

$\lambda = \frac{1}{k}$, где k – количество объектов, по которым хотим усреднять функционал.

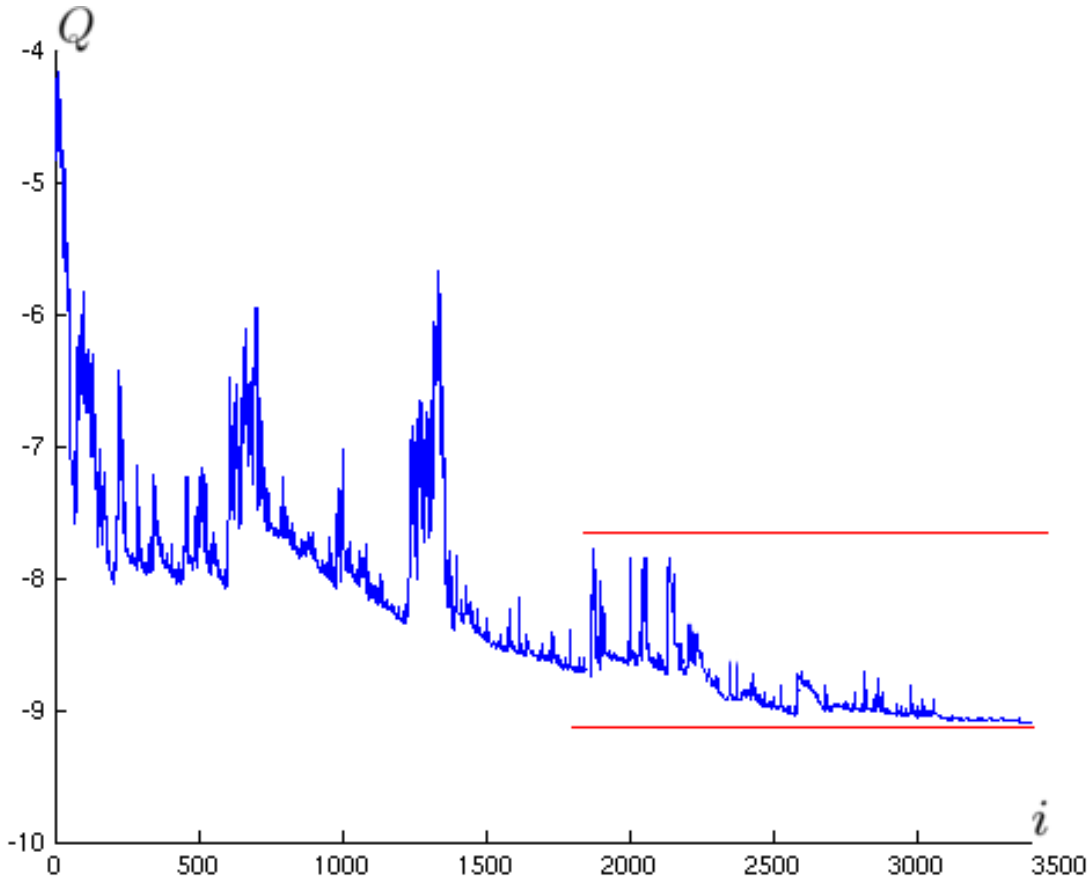
Вопрос

Что значит – "пока Q и/или w не стабилизируются"?

Зависимость Q от номера итерации



Зависимость Q от номера итерации



Актуальные вопросы

- Инициализация весов
- Порядок предъявления объектов

Инициализация весов

Инициализация весов

- $w_j = 0$, j = 1, . . . , n
- $w_j = random(-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n})$ – небольшие случайные значения
- $w_j = \frac{\langle y, f_j \rangle}{\langle f_j, f_j \rangle}$, $f_j = (f_j(x_i))_{i=1}^n$
- Обучение по небольшой случайной подвыборке объектов
- Многократный запуск из разных случайных начальных приближений

Порядок предъявления объектов

Порядок предъявления объектов

- Попеременно брать объекты из разных классов
- Чаще брать те объекты, на которых была допущена большая ошибка
- Вообще не брать "хорошие"объекты с $M_i > \mu_+$
- Вообще не брать выбросы с $M_i < \mu_-$

Плюсы и минусы

+ Легко реализовать
+ Легко обобщить на разные g, $\mathcal{L}$
+ Не обязательно брать все элементы выборки для обучения

– Возможна медленная сходимость
– Застревание в локальных минимумах
– Подбор параметров
– Проблема переобучения

Проблема переобучения

Почему случается переобучение?

Проблема переобучения

$a(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = sign(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle)$
Линейная зависимость признаков:
$\forall \mathbf{x} \exists \mathbf{u} : \langle \mathbf{u}, \mathbf{x} \rangle = 0$
$\Rightarrow \forall \gamma : a'(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = sign(\langle \mathbf{w} + \gamma \mathbf{u}, \mathbf{x} \rangle)$

Алгоритм a' работает точно также как исходный a.
А значит мы можем получить любое решение из семейства $\mathbf{w} + \gamma \mathbf{u}$

Проблема переобучения

- Слишком мало объектов
- Слишком много признаков
- Линейная зависимость признаков

Как заподозрить?

- Слишком большие веса $\|\mathbf{w}\|$
- Неустойчивость $a(\mathbf{x}, \mathbf{w})$
- Плохое качество классификации на контрольных данных

Решение

- Сокращение весов
- Ранняя остановка алгоритма

Сокращение весов

Как можно сокращать веса?

Сокращение весов

Штраф за увеличение нормы вектора весов:
$Q_\tau = Q + \frac{\tau}{2}\|\mathbf{w}\|^2 \to \min\limits_{\mathbf{w}}$

Градиент:
$\bigtriangledown Q_\tau = \bigtriangledown Q + \tau\mathbf{w}$

Градиентный шаг:
$\mathbf{w} = \mathbf{w}(1 - \eta\tau) - \eta \bigtriangledown Q(\mathbf{w})$

Вопрос

Как подобрать τ?

Как подобрать τ?

– Скользящий контроль

Степени свободы

Степени свободы

- Вид разделяющей поверхности
- Вид аппроксимации функционала качества $Q(\mathbf{w})$
- Вид регуляризатора

Резюме лекции

- Построение выпуклых оболочек
- Определение линейного классификатора
- Минимизация эмпирического риска
- Метод градиентного спуска
- Метод стохастического градиентного спуска

На следующей лекции

– Метод опорных векторов