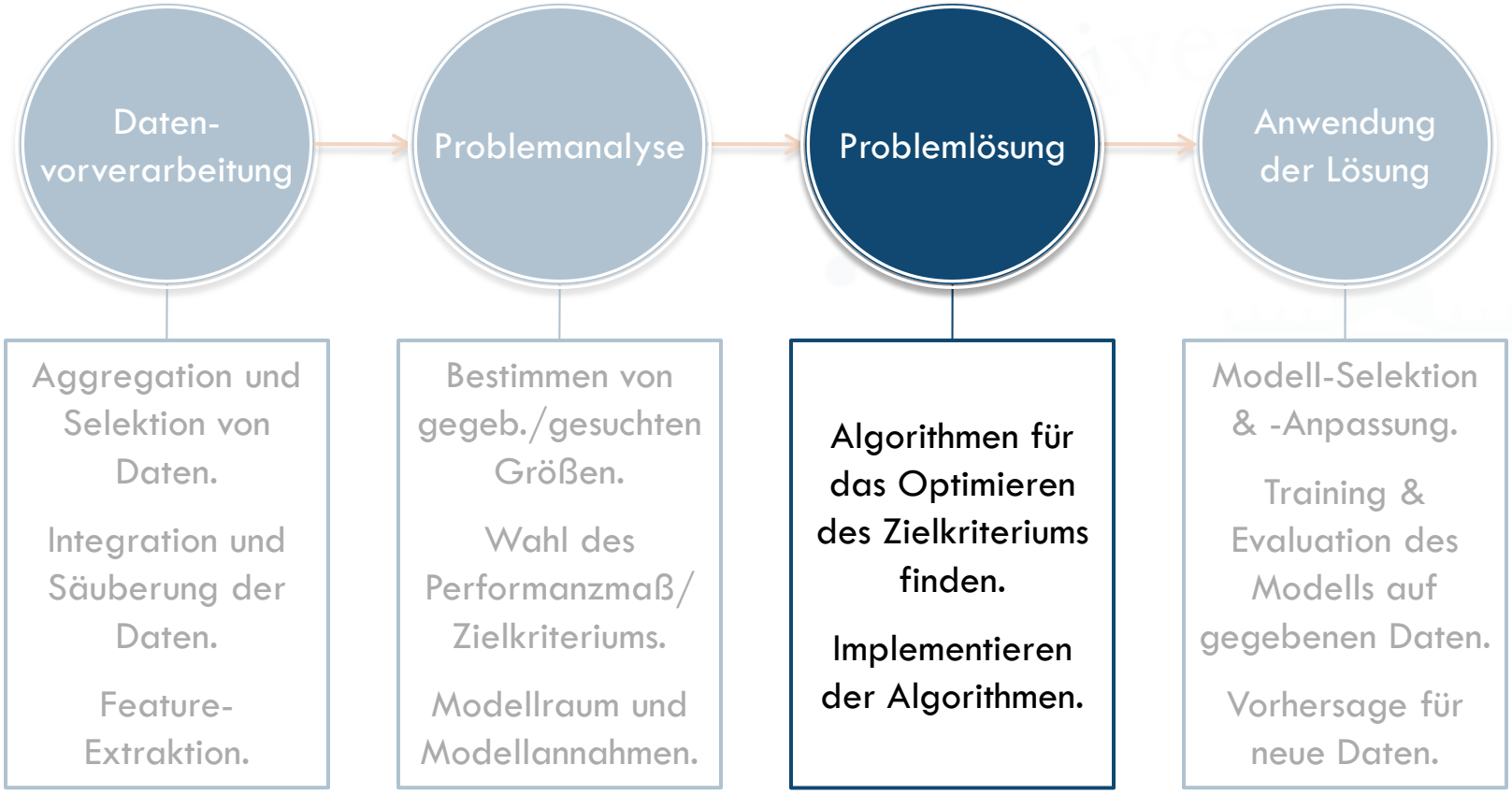
INTELLIGENTE DATENANALYSE IN MATLAB

Überwachtes Lernen: Lineare Modelle

Überblick

- Schritte der Datenanalyse:



Überwachtes Lernen

Problemstellung

- Gegeben: Trainingsdaten mit bekannten Zielattributen (gelabelte Daten).
- Eingabe: Instanz (Objekt, Beispiel, Datenpunkt, Merkmalsvektor) = Vektor mit Attribut-Belegungen.
- Ausgabe: Belegung des/der Zielattribut(e).
  - Klassifikation: Nominaler Wertebereich des Zielattributs.
  - Ordinale Regression: Ordinaler Wertebereich des Zielattributs.
  - Regression: Numerischer Wertebereich des Zielattributs.
- Gesucht: Modell $f : \mathbf{x} \mapsto y$.

Überwachtes Lernen

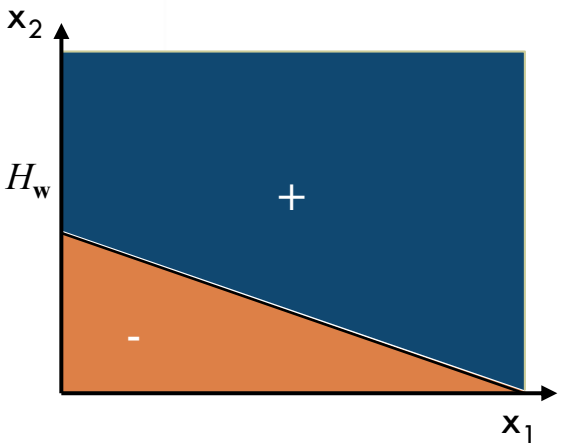
Arten von Modellen

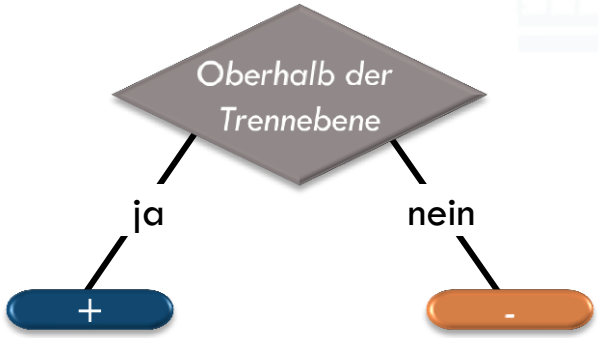
- Entscheidungsbäume/Regelsysteme:
  - Klassifikations-, Regressions-, Modellbaum.
- Lineare Modelle:
  - Trennebenen, Regressionsgerade.
- Nicht-lineare Modelle, linear in den Parametern:
  - Nicht-lineare Datentransformation + lineares Modell.
  - Kernel-Modell.
  - Probabilistisches Modell.
- Nicht-lineare Modelle, nicht-linear in den Parametern:
  - Neuronales Netz.

Lineare Modelle

Lineare Modelle für Klassifikation

- Instanzen (Vektoren mit m Einträgen) liegen im m-dimensionalen Eingaberaum.
- Dieser wird in durch Trenngerade (Hyperebene H_w) halbiert.

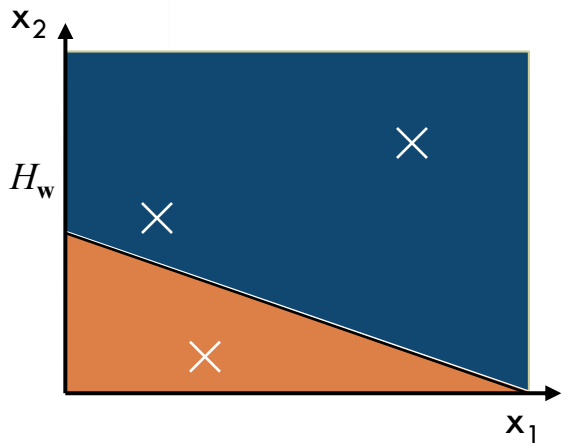




Lineare Modelle

Lineare Modelle für Klassifikation

- Instanzen (Vektoren mit m Einträgen) liegen im m-dimensionalen Eingaberaum.
- Dieser wird in durch Trenngerade (Hyperebene H_w) halbiert.

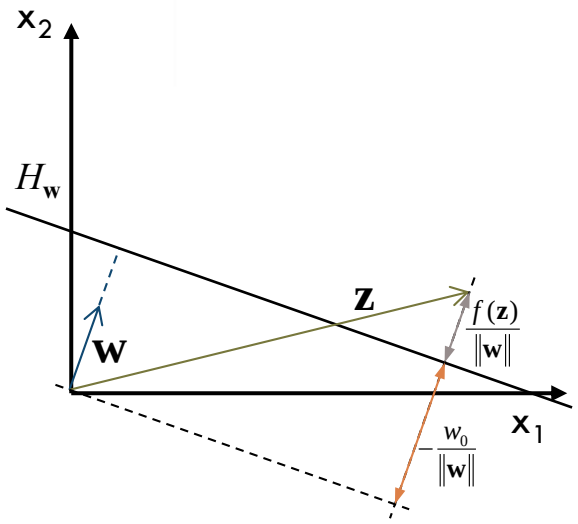


ID	x_1	x_2	y
1	0,9	3,0	+
2	3,0	4,1	+
3	1,2	0,3	-

Lineare Modelle

Lineare Modelle für Klassifikation

- Hyperebene $H_{\mathbf{w}}$ ist durch Normalenvektor $\mathbf{w}$ und Verschiebung w_0 gegeben: $H_{\mathbf{w}} = \{\mathbf{x} \mid f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} + w_0 = 0\}$
- Klassifikator: $y(\mathbf{x}) = sign(f(\mathbf{x}))$



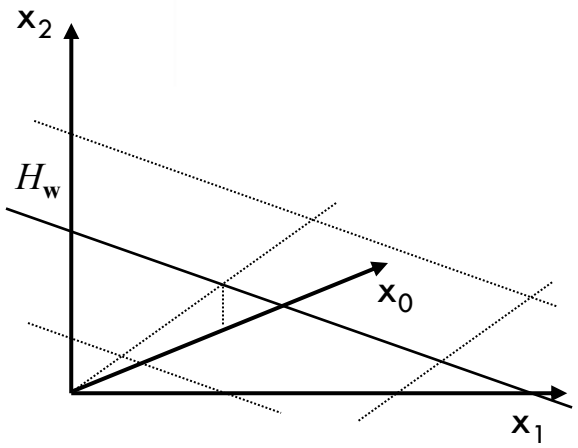
Normalenvektor $\mathbf{w}$
Zu klassifizierender Punkt $\mathbf{z}$
Zielfunktionswert $f(\mathbf{z})$
Verschiebung w_0

Lineare Modelle

Lineare Modelle für Klassifikation

- Umformulierung mit zusätzlichem, konstanten Eingabeattribut $x_0=1$:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} + w_0 = w_0 + [x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_m] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = \underbrace{[1 \quad x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_m]}_{\text{Erweiterte Instanz}} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}$$

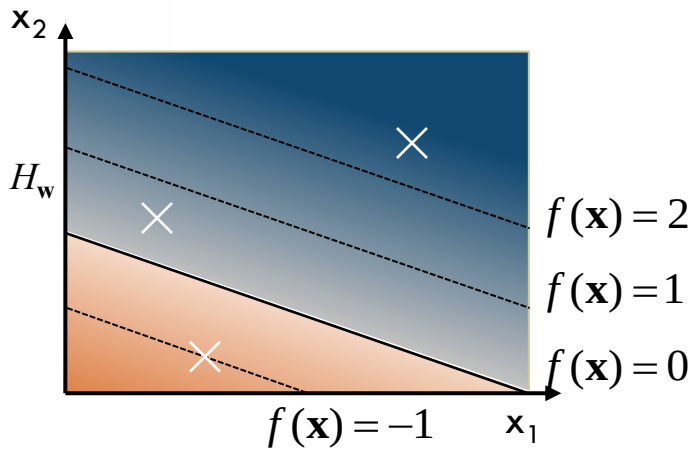


Aus Hyperebene im m-dimensionalen Eingaberaum wird Hyperebene im $(m+1)$-dimensionalen Eingaberaum.

Lineare Modelle

Lineare Modelle für Regression

- Abstand zur Regressionsgerade (Hyperebene H_w) liefert numerischen Wert.
- Entscheidungsfunktion: $y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$



ID	x_1	x_2	y
1	0,9	3,0	0,5
2	3,0	4,1	2,5
3	1,2	0,3	-1,0

Lineare Modelle

Besonders geeignet …

- Für kleine bis sehr große Klassifikations- & Regressionsprobleme.
- Falls unverrauschte Daten linear separierbar.
- Falls Interpretierbarkeit der Entscheidung nicht notwendig.
- Für Daten mit überwiegend numerischen Attributen.
- Falls schnelles & einfaches Verfahren gewünscht.

Lernen linearer Modelle

Problemstellung

- Gegeben: n Trainingsinstanzen $\mathbf{x}_i$ mit Zielattribut y_i.

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_n] = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & \cdots & x_{mn} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{y} = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_n]$$

- Gesucht: Parametervektor $\mathbf{w}$ der Klassifikations-/ Regressionsfunktion $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}$.
  - Maximum Likelihood (ML)-Schätzer für Parameter.
  - Maximum A-Posteriori (MAP)-Schätzer für Parameter.

Lernen linearer Modelle

Ansatz

- ML-Schätzer = minimieren einer Verlustfunktion:

$$\mathbf{w}_{ML} = \arg\max_{\mathbf{w}} p(\mathbf{X}, \mathbf{y} \mid \mathbf{w}) = \arg\max_{\mathbf{w}} \prod_{i=1}^{n} p(y_i \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w})$$

$$= \arg\min_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} l(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i)$$

- MAP-Schätzer = minimieren einer regularisierten Verlustfunktion:

$$\mathbf{w}_{MAP} = \arg\max_{\mathbf{w}} p(\mathbf{w} \mid \mathbf{X}, \mathbf{y}) = \arg\max_{\mathbf{w}} \left(\prod_{i=1}^{n} p(y_i \mid \mathbf{x}_i, \mathbf{w}) \right) p(\mathbf{w})$$

$$= \arg\min_{\mathbf{w}} \sum_{i=1}^{n} l(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) + \Omega(\mathbf{w})$$

Lernen linearer Modelle

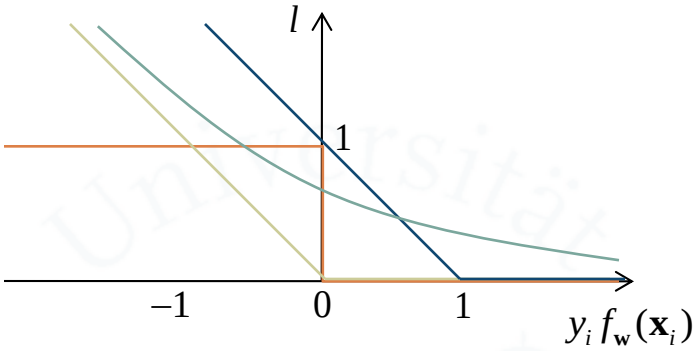
Verlustfunktion für binäre Klassifikation $y_i \in \{-1,+1\}$

- **Binary loss:**

$$l_{0/1}(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} 1 & -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) > 0 \\ 0 & -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) \leq 0 \end{cases}$$

$-y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) > 0$: $sign(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i)) \neq y_i$

$-y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) \leq 0$: $sign(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i)) = y_i$



- **Perceptron loss:**

$$l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) & -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) > 0 \\ 0 & -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) \leq 0 \end{cases} = \max(0, -y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i))$$

Binary loss ist nicht konvex
$\Rightarrow$ schwer zu minimieren!

- **Hinge loss:**

$$l_h(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} 1 - y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) & 1 - y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) > 0 \\ 0 & 1 - y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) \leq 0 \end{cases} = \max(0, 1 - y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i))$$

- **Logistic loss:**

$$l_{\log}(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \log(1 + e^{-y_i f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i)})$$

Lernen linearer Modelle

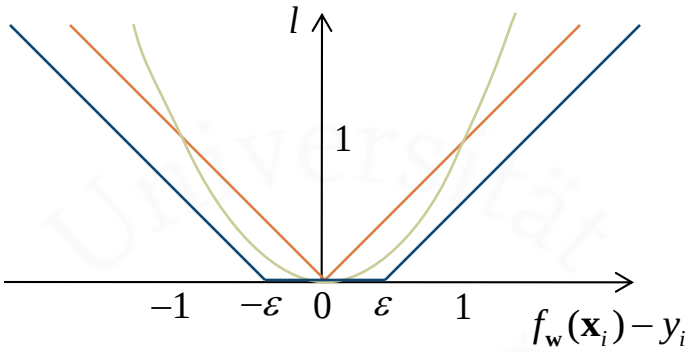
Verlustfunktion für Regression

- Absolute loss:

$$l_a(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i|$$

- Squared loss:

$$l_s(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i|^2$$



- ε-Insensitive loss:

$$l_\varepsilon(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i| - \varepsilon & |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i| - \varepsilon > 0 \\ 0 & |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i| - \varepsilon \le 0 \end{cases} = \max(0, |f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i) - y_i| - \varepsilon)$$

Lernen linearer Modelle

Regularisierer

- Idee: Entscheidung basierend auf so wenig wie möglich Attributen treffen.
  - Wenig Einträge im Parametervektor (Gewichte) ungleich Null:

$$\Omega_0(\mathbf{w}) \propto \|\mathbf{w}\|_0 = \text{Anzahl } w_j \neq 0$$

Ω_0 ist nicht konvex
$\Rightarrow$ schwer zu minimieren!

  - Geringe Manhatten-Norm:

$$\Omega_1(\mathbf{w}) \propto \|\mathbf{w}\|_1 = \sum_{j=1}^{m} |w_j|$$

  - Geringe (quadratische) euklidische Norm:

$$\Omega_2(\mathbf{w}) \propto \|\mathbf{w}\|_2^2 = \sum_{j=1}^{m} w_j^2$$

Lernen linearer Modelle

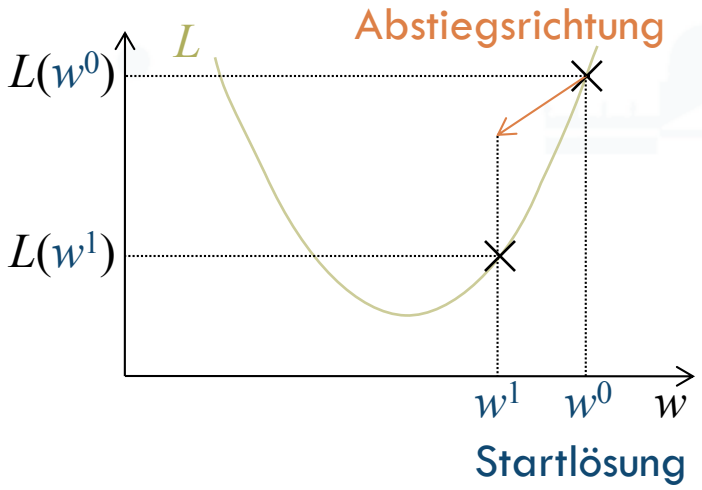
Lösen der Minimierungsaufgabe

- Ziel: Minimierung von empirischen Verlust + Regularisierer: $L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} l(\mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}, y_i) + \Omega(\mathbf{w})$
- Analytische Lösung (nur selten möglich).
  - Beispiel: *Ridge Regression*.
- Numerische Lösung der primalen OA.
  - Beispiel: *Perceptron*.
- Numerische Lösung der dualen OA.
  - Beispiel: duale *Support Vector Machine* (SVM).

Lernen linearer Modelle

Numerische Lösungsansätze

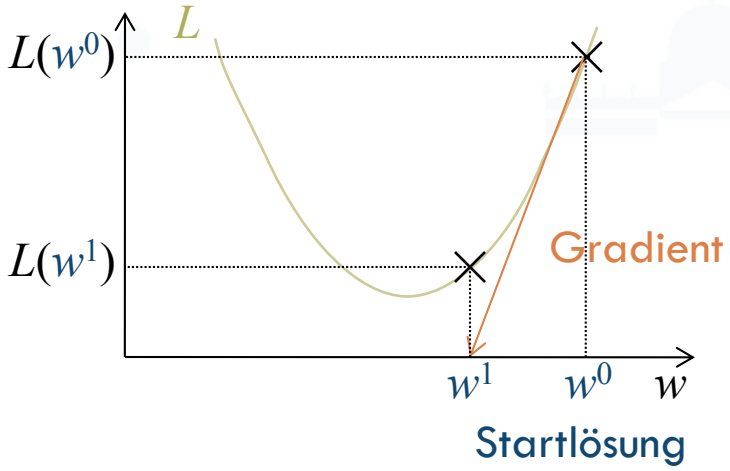
- Greedy-Suche (z.B. Abstiegsrichtung + Linesearch).



Lernen linearer Modelle

Numerische Lösungsansätze

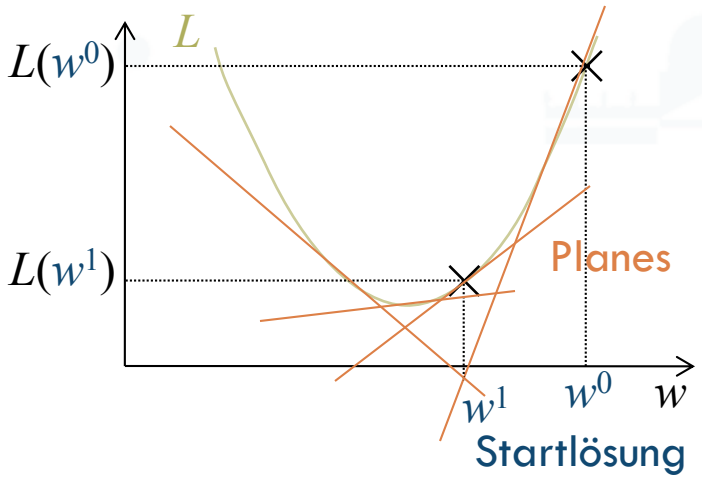
- Greedy-Suche (z.B. Abstiegsrichtung + Linesearch).
- Gradientenabstieg (z.B. Newton-Verfahren).



Lernen linearer Modelle

Numerische Lösungsansätze

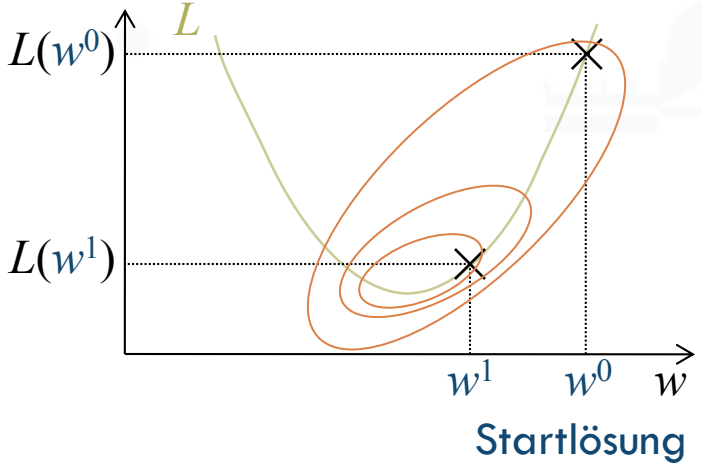
- Greedy-Suche (z.B. Abstiegsrichtung + Linesearch).
- Gradientenabstieg (z.B. Newton-Verfahren).
- Cutting-Plane-Verfahren.



Lernen linearer Modelle

Numerische Lösungsansätze

- Greedy-Suche (z.B. Abstiegsrichtung + Linesearch).
- Gradientenabstieg (z.B. Newton-Verfahren).
- Cutting-Plane-Verfahren.
- Innere-Punkt-Verfahren.



Lernen linearer Modelle

Beispiel: Ridge Regression ($y_i \in \mathrm{R}$)

- Verlustfunktion: $l_s(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \left|\mathbf{x}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - y_i\right|^2$
- Regularisierer: $\Omega_2(\mathbf{w}) = \lambda \sum_{j=1}^{m} \left|w_j\right|^2$
- Analytische Lösung:

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} \left|\mathbf{x}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{w} - y_i\right|^2 + \lambda \sum_{j=1}^{m} \left|w_j\right|^2$$

$$= \left\|\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}\right\|_2^2 + \lambda \left\|\mathbf{w}\right\|_2^2$$

$$= (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) + \lambda \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}$$

$$= \mathbf{w}^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{w} - 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} + \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

Quadratische OA ohne Nebenbedingungen

Nach $\mathbf{w}$ ableiten und Ableitung Null setzen

$$\nabla L(\mathbf{w}) = 2(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{w} - 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = 0$$

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

Lernen linearer Modelle

Beispiel: Perceptron ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $$l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$$
- Regularisierer: 0
- Numerische Lösung des primalen Problems:

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i).$$

  - Stochastischer Gradientenabstieg.

Gradient

$$\nabla L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i)}{\partial \mathbf{w}}$$

i-ter Stochastischer Gradient

$$\frac{\partial l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i)}{\partial \mathbf{w}} = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ \mathbf{0} & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$$

Lernen linearer Modelle

Beispiel: Perceptron ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $$l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$$
- Regularisierer: 0
- Algorithmus (Gradientenabstieg):

Perceptron(*Instanzen* $(\mathbf{x}_i, y_i)$)

  Setze $\mathbf{w} = \mathbf{0}$

  DO

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i)}{\partial \mathbf{w}}$$

  WHILE $\mathbf{w}$ verändert

  RETURN $\mathbf{w}$

Lernen linearer Modelle

Beispiel: Perceptron ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$
- Regularisierer: 0
- Algorithmus (Stochastischer Gradientenabstieg):

```
Perceptron(Instanzen (x_i, y_i))
  Setze w = 0
  DO
    FOR i = 1...n
      w = w − ∂l_p(f_w(x_i), y_i) / ∂w
  WHILE w verändert
  RETURN w
```

Lernen linearer Modelle

Beispiel: Perceptron ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $$l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & -y_i \mathbf{x}_i{}^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$$
- Regularisierer: 0
- Algorithmus (Stochastischer Gradientenabstieg):

```
Perceptron(Instanzen (x_i, y_i))
  Setze w = 0
  DO
    FOR i = 1...n
      w = w + { y_i x_i    -y_i x_i^T w > 0
              { 0          -y_i x_i^T w ≤ 0
  WHILE w verändert
  RETURN w
```

Lernen linearer Modelle

Beispiel: Perceptron ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $l_p(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} -y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & -y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & -y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$
- Regularisierer: 0
- Algorithmus (Stochastischer Gradientenabstieg):

Perceptron(*Instanzen* $(\mathbf{x}_i, y_i)$)

  Setze $\mathbf{w} = \mathbf{0}$

  DO

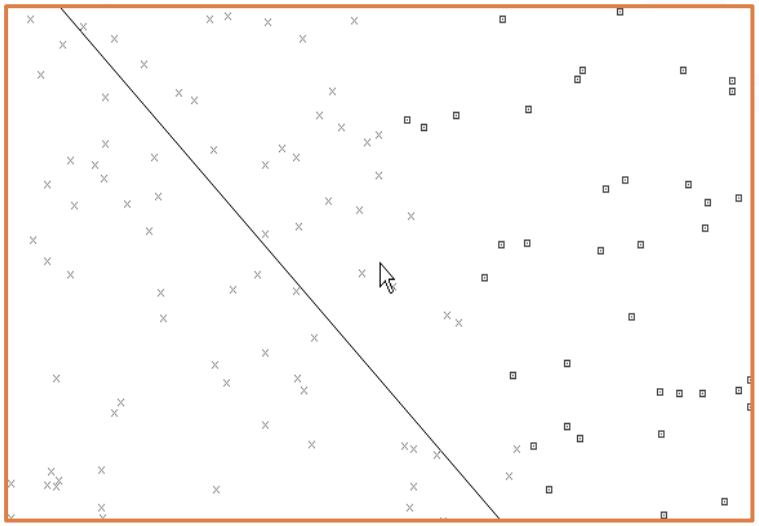
    FOR $i = 1 \ldots n$

      IF $y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0$ THEN

        $\mathbf{w} = \mathbf{w} + y_i \mathbf{x}_i$

  WHILE $\mathbf{w}$ verändert

  RETURN $\mathbf{w}$



Lernen linearer Modelle

Beispiel: Support Vector Machine ($y_i \in \{-1,+1\}$)

- Verlustfunktion: $$l_h(f_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}_i), y_i) = \begin{cases} 1 - y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} & 1 - y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} > 0 \\ 0 & 1 - y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq 0 \end{cases}$$
- Regularisierer: $$\Omega_2(\mathbf{w}) = \frac{1}{2\lambda} \sum_{j=1}^{m} |w_j|^2$$
- Numerische Lösung des primalen Problems

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} \xi_i + \frac{1}{2\lambda} \sum_{j=1}^{m} |w_j|^2 \quad \text{mit } 1 - y_i \mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w} \leq \xi_i,\ 0 \leq \xi_i$$

  bspw. mittels Subgradientenansatz, z.B. Pegasos.

- Lösen der dualen (quadratischen) OA

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \mathbf{X}^{\mathrm{T}} \mathbf{X} \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{y}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} \quad \text{mit } \mathbf{1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} = 0,\ 0 \leq y_i \alpha_i \leq \lambda$$

  bspw. mittels QP-Solver, z.B. QuadProg.

Lernen linearer Modelle

Allgemein: Regularized Empirical Risk Minimization

- Gegegeben:
  - Konvexe, ableitbare Verlustfunktion *l* mit Ableitung $l' = \frac{\partial l(z, y)}{\partial z}$.
  - Konvexer, ableitbarer Regularisierer Ω mit Ableitung Ω'.
- Algorithmus (Gradientenabstieg mit dyn. Schrittweite):

RegERM(*Instanzen* ($\mathbf{x}_i$, y_i))

Setze $k = 0$, $\mu^0 = 1$, $\mathbf{w}^0 = \mathbf{0}$

DO

$$\mathbf{g}^k = \sum_{i=1}^{n} l'(\mathbf{x}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{w}^k, y_i)\mathbf{x}_i + \Omega'(\mathbf{w}^k)$$

IF $k > 0$ THEN

$$\mu^k = \mu^{k-1} (\mathbf{g}^{k-1^{\mathrm{T}}} \mathbf{g}^{k-1}) / ((\mathbf{g}^{k-1} - \mathbf{g}^k)^{\mathrm{T}} \mathbf{g}^{k-1})$$

$$\mathbf{w}^{k+1} = \mathbf{w}^k - \mu^k \mathbf{g}^k$$

$$k = k + 1$$

WHILE $\left\| \mathbf{w}^k - \mathbf{w}^{k-1} \right\| > \varepsilon$

RETURN $\mathbf{w}^k$

Barzilai-Borwein-Verfahren

Zusammenfassung

- Lineare Modelle geeignet für sehr große Klassifikations- & Regressionsprobleme.
  - Besonders geeignet für numerische, (nahezu) linear separierbare Daten.
- Lernen von linearen Modellen:
  - Analytisch (z.B. Ridge Regression).
  - Numerisch bspw. durch Gradientenabstieg (z.B. primale SVM).
- Gefundene Lösung global optimal für konvexe Verlustfunktion & Regularisierer.