

Лекция 6

Многоклассовая классификация и категориальные признаки

Е. А. Соколов
ФКН ВШЭ

16 октября 2020 г.

Ранее мы разобрались с общим подходом к решению задачи бинарной классификации, а также изучили свойства двух конкретных методов: логистической регрессии и метода опорных векторов. Теперь мы перейдём к более общей, многоклассовой постановке задачи классификации, и попытаемся понять, как можно свести её к уже известным нам методам.

Также мы обсудим методы работы с категориальными признаками и поймём, почему на таких данных чаще всего используются линейные модели.

1 Многоклассовая классификация

В данном разделе будем считать, что каждый объект относится к одному из K классов: $\mathbb{Y} = \{1, \dots, K\}$.

§1.1 Сведение к серии бинарных задач

Мы уже подробно изучили задачу бинарной классификации, и поэтому вполне естественно попытаться свести многоклассовую задачу к набору бинарных. Существует достаточно много способов сделать это — мы перечислим лишь два самых популярных, а об остальных можно почитать, например, [1, раздел 4.2.7]

Один против всех (one-versus-all). Обучим K линейных классификаторов $b_1(x), \dots, b_K(x)$, выдающих оценки принадлежности классам $1, \dots, K$ соответственно. Например, в случае с линейными моделями эти модели будут иметь вид

$$b_k(x) = \langle w_k, x \rangle + w_{0k}.$$

Классификатор с номером k будем обучать по выборке $(x_i, 2[y_i = k] - 1)_{i=1}^\ell$; иными словами, мы учим классификатор отличать k -й класс от всех остальных.

Итоговый классификатор будет выдавать класс, соответствующий самому уверенному из бинарных алгоритмов:

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1, \dots, K\}} b_k(x).$$

Проблема данного подхода заключается в том, что каждый из классификаторов $b_1(x), \dots, b_K(x)$ обучается на своей выборке, и выходы этих классификаторов могут иметь разные масштабы, из-за чего сравнивать их будет неправильно [2]. Нормировать вектора весов, чтобы они выдавали ответы в одной и той же шкале, не всегда может быть разумным решением — так, в случае с SVM веса перестанут являться решением задачи, поскольку нормировка изменит норму весов.

Все против всех (all-versus-all). Обучим C_K^2 классификаторов $a_{ij}(x)$, $i, j = 1, \dots, K$, $i \neq j$. Например, в случае с линейными моделями эти модели будут иметь вид

$$b_k(x) = \text{sign}(\langle w_k, x \rangle + w_{0k}).$$

Классификатор $a_{ij}(x)$ будем настраивать по подвыборке $X_{ij} \subset X$, содержащей только объекты классов i и j :

$$X_{ij} = \{(x_n, y_n) \in X \mid [y_n = i] = 1 \text{ или } [y_n = j] = 1\}.$$

Соответственно, классификатор $a_{ij}(x)$ будет выдавать для любого объекта либо класс i , либо класс j .

Чтобы классифицировать новый объект, подадим его на вход каждого из построенных бинарных классификаторов. Каждый из них проголосует за свой класс; в качестве ответа выберем тот класс, за который наберется больше всего голосов:

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1, \dots, K\}} \sum_{i=1}^K \sum_{j \neq i} [a_{ij}(x) = k].$$

§1.2 Многоклассовая логистическая регрессия

Некоторые методы бинарной классификации можно напрямую обобщить на случай многих классов. Выясним, как это можно проделать с логистической регрессией.

В логистической регрессии для двух классов мы строили линейную модель $b(x) = \langle w, x \rangle + w_0$, а затем переводили её прогноз в вероятность с помощью сигмоидной функции $\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$. Допустим, что мы теперь решаем многоклассовую задачу и построили K линейных моделей $b_k(x) = \langle w_k, x \rangle + w_{0k}$, каждая из которых даёт оценку принадлежности объекта одному из классов. Как преобразовать вектор оценок $(b_1(x), \dots, b_K(x))$ в вероятности? Для этого можно воспользоваться оператором $\text{SoftMax}(z_1, \dots, z_K)$, который производит «нормировку» вектора:

$$\text{SoftMax}(z_1, \dots, z_K) = \left(\frac{\exp(z_1)}{\sum_{k=1}^K \exp(z_k)}, \dots, \frac{\exp(z_K)}{\sum_{k=1}^K \exp(z_k)} \right).$$

В этом случае вероятность k -го класса будет выражаться как

$$P(y = k \mid x, w) = \frac{\exp(\langle w_k, x \rangle + w_{0k})}{\sum_{j=1}^K \exp(\langle w_j, x \rangle + w_{0j})}.$$

Обучать эти веса предлагается с помощью метода максимального правдоподобия — так же, как и в случае с двухклассовой логистической регрессией:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \log P(y = y_i | x_i, w) \rightarrow \max_{w_1, \dots, w_K}.$$

§1.3 Многоклассовый метод опорных векторов

(данный материал является опциональным)

В алгоритме «один против всех» мы *независимо* строили свой классификатор за каждый класс. Попробуем теперь строить эти классификаторы одновременно, в рамках одной оптимизационной задачи. Подходов к обобщению метода опорных векторов на многоклассовый случай достаточно много; мы разберём способ, описанный в работе [3].

Для простоты будем считать, что в выборке имеется константный признак, и не будет явно указывать сдвиг b . Будем настраивать K наборов параметров w_1, \dots, w_K , и итоговый алгоритм определим как

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1, \dots, K\}} \langle w_k, x \rangle.$$

Рассмотрим следующую функцию потерь:

$$\max_k \left\{ \langle w_k, x \rangle + 1 - [k = y(x)] \right\} - \langle w_{y(x)}, x \rangle. \quad (1.1)$$

Разберемся сначала с выражением, по которому берется максимум. Если $k = y(x)$, то оно равно $\langle w_k, x \rangle$; в противном же случае оно равно $\langle w_k, x \rangle + 1$. Если оценка за верный класс больше оценок за остальные классы хотя бы на единицу, то максимум будет достигаться на $k = y(x)$; в этом случае потеря будет равна нулю. Иначе же потеря будет больше нуля. Здесь можно увидеть некоторую аналогию с бинарным SVM: мы штрафует не только за неверный ответ на объекте, но и за неуверенную классификацию (за попадание объекта в разделяющую полосу).

Рассмотрим сначала линейно разделимую выборку — т.е. такую, что существуют веса w_{1*}, \dots, w_{K*} , при которых потеря (1.1) равна нулю. В бинарном SVM мы строили классификатор с максимальным отступом. Известно, что аналогом отступа для многоклассового случая является норма Фробениуса матрицы W , k -я строка которой совпадает с w_k :

$$\rho = \frac{1}{\|W\|^2} = \frac{1}{\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^d w_{kj}^2}.$$

Получаем следующую задачу:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|W\|^2 \rightarrow \min_W \\ \langle w_{y_i}, x_i \rangle + [y_i = k] - \langle w_k, x_i \rangle \geq 1, \quad i = 1, \dots, \ell; k = 1, \dots, K. \end{cases} \quad (1.2)$$

Перейдем теперь к общему случаю. Как и в бинарном методе опорных векторов, перейдем к мягкой функции потерь, введя штрафы за неверную или неуверенную

классификацию. Получим задачу

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|W\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \rightarrow \min_{W, \xi} \\ \langle w_{y_i}, x_i \rangle + [y_i = k] - \langle w_k, x_i \rangle \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, \ell; k = 1, \dots, K; \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{cases} \quad (1.3)$$

Решать задачу (1.3) можно, например, при помощи пакета $\text{SVM}^{\text{multiclass}}$.

Отметим, что такой подход решает проблему с несоизмеримостью величин, выдаваемых отдельными классификаторами (о которой шла речь в подходе «один против всех»): классификаторы настраиваются одновременно, и выдаваемые ими оценки должны правильно соотноситься друг с другом, чтобы удовлетворять ограничениям.

§1.4 Метрики качества многоклассовой классификации

В многоклассовых задачах, как правило, стараются свести подсчет качества к вычислению одной из рассмотренных выше двухклассовых метрик. Выделяют два подхода к такому сведению: микро- и макро-усреднение.

Пусть выборка состоит из K классов. Рассмотрим K двухклассовых задач, каждая из которых заключается в отделении своего класса от остальных, то есть целевые значения для k -й задачи вычисляются как $y_i^k = [y_i = k]$. Для каждой из них можно вычислить различные характеристики (ТР, ФР, и т.д.) алгоритма $a^k(x) = [a(x) = k]$; будем обозначать эти величины как $\text{TP}_k, \text{FP}_k, \text{FN}_k, \text{TN}_k$. Заметим, что в двухклассовом случае все метрики качества, которые мы изучали, выражались через эти элементы матрицы ошибок.

При микро-усреднении сначала эти характеристики усредняются по всем классам, а затем вычисляется итоговая двухклассовая метрика — например, точность, полнота или F-мера. Например, точность будет вычисляться по формуле

$$\text{precision}(a, X) = \frac{\overline{\text{TP}}}{\overline{\text{TP}} + \overline{\text{FP}}},$$

где, например, $\overline{\text{TP}}$ вычисляется по формуле

$$\overline{\text{TP}} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \text{TP}_k.$$

При макро-усреднении сначала вычисляется итоговая метрика для каждого класса, а затем результаты усредняются по всем классам. Например, точность будет вычислена как

$$\text{precision}(a, X) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \text{precision}_k(a, X); \quad \text{precision}_k(a, X) = \frac{\text{TP}_k}{\text{TP}_k + \text{FP}_k}.$$

Если какой-то класс имеет очень маленькую мощность, то при микро-усреднении он практически никак не будет влиять на результат, поскольку его вклад в средние ТР, ФР, FN и TN будет незначителен. В случае же с макро-вариантом усреднение проводится для величин, которые уже не чувствительны к соотношению размеров классов (если мы используем, например, точность или полноту), и поэтому каждый класс внесет равный вклад в итоговую метрику.

2 Классификация с пересекающимися классами

Усложним постановку задачи. Будем считать, что в задаче K классов, но теперь они могут *пересекаться* — каждый объект может относиться одновременно к нескольким классам. Это означает, что каждому объекту x соответствует вектор $y \in \{0, 1\}^K$, показывающий, к каким классам данный объект относится. Соответственно, обучающей выборке X будет соответствовать матрица $Y \in \{0, 1\}^{\ell \times K}$, описывающая метки объектов; её элемент y_{ik} показывает, относится ли объект x_i к классу k . Данная задача в англоязычной литературе носит название *multi-label classification*. К ней может относиться, например, определение тэгов для фильма или категорий для статьи на Википедии.

§2.1 Независимая классификация (Binary relevance)

Самый простой подход к решению данной задачи — предположить, что все классы независимы, и определять принадлежность объекта к каждому отдельным классификатором. Это означает, что мы обучаем K бинарных классификаторов $a_1(x), \dots, a_K(x)$, причём классификатор $b_k(x)$ обучается по выборке $(x_i, y_{ik})_{i=1}^{\ell}$. Для нового объекта x целевая переменная оценивается как $(a_1(x), \dots, a_K(x))$.

Основная проблема данного подхода состоит в том, что никак не учитываются возможные связи между отдельными классами. Тем не менее, такие связи могут иметь место — например, категории на Википедии имеют древовидную структуру, и если мы с большой уверенностью отнесли статью к некоторой категории, то из этого может следовать, что статья относится к одной из категорий-потомков.

§2.2 Стекинг классификаторов

Для учёта корреляций между классами можно воспользоваться следующим несложным подходом. Разобьём обучающую выборку X на две части X_1 и X_2 . На первой части обучим K независимых классификаторов $b_1(x), \dots, b_K(x)$. Далее сформируем для каждого объекта $x_i \in X_2$ из второй выборки признаковое описание, состоящее из прогнозов наших классификаторов:

$$x'_{ik} = b_k(x_i), \quad x_i \in X_2,$$

получив тем самым выборку X'_2 . Обучим на ней новый набор классификаторов $a_1(x'), \dots, a_K(x')$, каждый из которых определяет принадлежность объекта к одному из классов. При этом все новые классификаторы опираются на прогнозы классификаторов первого этапа $b_1(x), \dots, b_K(x)$, и поэтому могут обнаружить связи между различными классами. Такой подход называется *стекингом* и достаточно часто используется в машинном обучении для усиления моделей.

Отметим, что обучать классификаторы $b_k(x)$ и $a_k(x)$ на одной и той же выборке было бы плохой идеей. Прогнозы базовых моделей $b_k(x)$ содержат в себе информацию об обучающей выборке X_1 ; получается, что новые признаки $x'_{ik} = b_k(x_i)$, посчитанные по этой же выборке, по сути будут «подглядывать» в целевую переменную, и обучение на них новой модели просто приведёт к переобучению.

Посмотрим на эту проблему несколько иначе. Допустим, мы обучили на выборке X_1 алгоритм $b(x)$, а затем на этой же выборке обучили второй алгоритм $a(b(x))$,

использующий в качестве единственного признака результат работы $b(x)$. Если модель $b(x)$ не переобучилась и будет показывать на новых данных такое же качество, как и на обучающей выборке, то никаких проблем не будет. Тем не менее, обычно модели хотя бы немного переобучаются. Будем считать, что на обучении $b(x)$ имеет среднее отклонение от целевой переменной в 5%, а на новых данных она в среднем ошибается на 10% из-за переобучения. Тогда модель $a(x)$ будет рассчитывать на среднее отклонение в 5%, но на новых данных ситуация будет другой — фактически, изменится распределение её признака, что приведёт к не самым лучшим последствиям.

§2.3 Трансформация пространства ответов

Существуют подходы, которые пытаются в рамках одной модели учитывать взаимосвязи между классами. Один из них [4] предлагает преобразовать пространство ответов так, что классы оказались как можно менее зависимыми. Это можно сделать с помощью сингулярного разложения матрицы Y :

$$Y = U\Sigma V^T.$$

Известно, что если в этом разложении занулить все диагональные элементы матрицы Σ кроме m наибольших, то мы получим матрицу, наиболее близкую к Y с точки зрения нормы Фробениуса среди всех матриц ранга m .

Обозначим через V_M матрицу, состоящую из тех M столбцов матрицы V , которые соответствуют наибольшим сингулярным числам. Спроецируем с её помощью матрицу Y :

$$YV_M = Y' \in \mathbb{R}^{\ell \times M}.$$

Настроим на новые метки Y' независимые модели $a_1(x), \dots, a_M(x)$. Обозначим матрицу прогнозов для нашей выборки через $A' \in \mathbb{R}^{\ell \times M}$. Чтобы получить оценки принадлежности исходным классам, переведём матрицу A' в исходное пространство:

$$A = A'V_M^T.$$

Далее в лекциях мы будем изучать метод главных компонент и увидим, что описанный подход, по сути, аналогичен применению данного метода к матрице меток.

§2.4 Метрики качества классификации с пересекающимися классами

Обозначим через Y_i множество классов, которым объект x_i принадлежит на самом деле, а через Z_i — множество классов, к которым объект был отнесён алгоритмом $a(x)$.

Вполне логичной мерой ошибки будет хэммингово расстояние между этими множествами — то есть доля классов, факт принадлежности которым угадан неверно:

$$\text{hamming}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|Y_i \setminus Z_i| + |Z_i \setminus Y_i|}{K}.$$

Данную метрику необходимо минимизировать.

Стандартные метрики качества классификации можно обобщить на multilabel-задачу так же, как и на случай с непересекающимися классами — через микро- или макро-усреднение. Есть и несколько другой подход к обобщению основных метрик качества:

$$\text{accuracy}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|Y_i \cap Z_i|}{|Y_i \cup Z_i|},$$

$$\text{precision}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|Y_i \cap Z_i|}{|Z_i|},$$

$$\text{recall}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|Y_i \cap Z_i|}{|Y_i|}.$$

Все эти метрики необходимо максимизировать.

3 Категориальные признаки

Допустим, в выборке имеется категориальный признак, значение которого на объекте x будем обозначать через $f(x)$. Будем считать, что он принимает значения из множества $U = \{u_1, \dots, u_n\}$. Чтобы использовать такой признак в линейных моделях, необходимо сначала его закодировать. Существует много подходов к использованию категориальных признаков — о многих из них можно узнать в работе [5], мы же рассмотрим несколько наиболее популярных.

§3.1 Бинарное кодирование (one-hot encoding)

Простейший способ — создать n индикаторов, каждый из которых будет отвечать за одно из возможных значений признака. Иными словами, мы сформируем n бинарных признаков $g_1(x), \dots, g_n(x)$, которые определяются как

$$g_j(x) = [f(x) = u_j].$$

Главная проблема этого подхода заключается в том, что на выборках, где категориальные признаки имеют миллионы возможных значений, мы получим огромное количество признаков. Линейные модели хорошо справляются с такими ситуациями за счёт небольшого количества параметров и достаточно простых методов обучения, и поэтому их часто используют на выборках с категориальными признаками.

§3.2 Бинарное кодирование с хэшированием

Рассмотрим модификацию бинарного кодирования, которая позволяет ускорить процесс вычисления признаков. Выберем хэш-функцию $h : U \rightarrow \{1, 2, \dots, B\}$, которая переводит значения категориального признака в числа от 1 до B . После этого бинарные признаки можно индексировать значениями хэш-функции:

$$g_j(x) = [h(f(x)) = j], \quad j = 1, \dots, B.$$

Основное преимущество этого подхода состоит в том, что отпадает необходимость в хранении соответствий между значениями категориального признака и индексами бинарных признаков. Теперь достаточно лишь уметь вычислять саму хэш-функцию, которая уже автоматически даёт правильную индексацию.

Также хэширование позволяет понизить количество признаков (если $B < |U|$), причём, как правило, это не приводит к существенной потере качества. Это можно объяснить и с помощью интуиции — если у категориального признака много значений, то, скорее всего, большая часть этих значений крайне редко встречается в выборке, и поэтому не несёт в себе много информации; основную ценность представляют значения $u \in U$, которые много раз встречаются в выборке, поскольку для них можно установить связи с целевой переменной. Хэширование, по сути, случайно группирует значения признака — в одну группу попадают значения, получающие одинаковые индексы $h(u)$. Поскольку «частых» значений не так много, вероятность их попадания в одну группу будет ниже, чем вероятность группировки редких значений.

§3.3 Счётчики

Попробуем закодировать признаки более экономно. Заметим, что значения категориального признака нужны нам не сами по себе, а лишь для предсказания класса. Соответственно, если два возможных значения u_i и u_j характерны для одного и того же класса, то можно их и не различать.

Определим наш способ кодирования. Вычислим для каждого значения u категориального признака $(K + 1)$ величин:

$$\begin{aligned} \text{counts}(u, X) &= \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u], \\ \text{successes}_k(u, X) &= \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u][y = k], \quad k = 1, \dots, K. \end{aligned}$$

По сути, мы посчитали количество объектов с данным значением признака, а также количество объектов различных классов среди них.

После того, как данные величины подсчитаны, заменим наш категориальный признак $f(x)$ на K вещественных $g_1(x), \dots, g_K(x)$:

$$g_k(x, X) = \frac{\text{successes}_k(f(x), X) + c_k}{\text{counts}(f(x), X) + \sum_{m=1}^K c_m}, \quad k = 1, \dots, K.$$

Здесь признак $g_k(x)$ фактически оценивает вероятность $p(y = k | f(x))$. Величины c_k являются своего рода регуляризаторами и предотвращают деление на ноль в случае, если в выборке X нет ни одного объекта с таким значением признака. Для простоты можно полагать их все равными единице: $c_1 = \dots = c_K = 1$. У признаков $g_k(x)$ есть много названий: счётчики¹, правдоподобия и т.д.

Отметим, что $g_k(x)$ можно воспринимать как простейший классификатор — значит, при обучении полноценного классификатора на признаках-счётчиках мы

¹<http://blogs.technet.com/b/machinelearning/archive/2015/02/17/big-learning-made-easy-with-counts.aspx>

рискуем столкнуться с переобучением из-за «утечки» целевой переменной в значения признаков (мы уже обсуждали эту проблему, разбираясь со стекингом). Чтобы избежать переобучения, как правило, пользуются подходом, аналогичным кросс-валидации. Выборка разбивается на m частей X_1, \dots, X_m , и для подвыборки X_i значения признаков вычисляются на основе статистик, подсчитанных по всем остальным частям:

$$x \in X_i \Rightarrow g_k(x) = g_k(x, X \setminus X_i).$$

Можно взять число блоков разбиения равным числу объектов $m = \ell$ — в этом случае значения признаков для каждого объекта будут вычисляться по статистикам, подсчитанным по всем остальным объектам.

Для тестовой выборки значения целевой переменной неизвестны, поэтому на таких объектах признаки-счётчики вычисляются на основе статистик $\text{successes}(u, X)$ и $\text{counts}(u, X)$, подсчитанных по всей обучающей выборке.

При использовании счётчиков нередко используют следующие трюки:

1. К признакам можно добавлять не только дроби $g_k(x)$, но и значения $\text{counts}(f(x), X)$ и $\text{successes}_k(f(x), X)$.
2. Можно сгенерировать парные категориальные признаки, т.е. для каждой пары категориальных признаков $f_i(x)$ и $f_j(x)$ создать новый признак $f_{ij}(x) = (f_i(x), f_j(x))$. После этого счётчики можно вычислить и для парных признаков; при этом общее количество признаков существенно увеличится, но при этом, как правило, прирост качества тоже оказывается существенным.
3. Если у категориальных признаков много возможных значений, то хранение статистик $\text{counts}(u, X)$ и $\text{successes}_k(u, X)$ может потребовать существенного количества памяти. Для экономии памяти можно хранить статистику не по самим значениям категориального признака $u \in U$, а по хэшам от этих значений $h(u)$. Регулируя количество возможных значений хэш-функции, можно ограничивать количество используемой памяти.
4. Можно вычислять несколько счётчиков для разных значений параметров c_1, \dots, c_K .
5. Можно все редкие значения категориального признака объединить в одно, поскольку скорее всего, для редких значений не получится качественно оценить статистики successes_k и counts . Благодаря этому можно будет сократить расходы на память при хранении статистики. Более того, можно предположить, что все редкие значения похожи, и относить к данной «объединённой» группе и новые значения признака, которые впервые встретятся на тестовой выборке.

Отметим, что данный подход работает только для задач классификации. В то же время можно пытаться адаптировать его и для задач регрессии, вычисляя несколько бинаризаций целевой переменной по разным порогам, и для каждой такой бинаризации вычисляя счётчики.

Список литературы

- [1] Мерков. А. Б. Введение в методы статистического обучения. // <http://www.recognition.mccme.ru/pub/RecognitionLab.html/slbook.pdf>
- [2] Bishop, C.M. Pattern Recognition and Machine Learning. // Springer, 2006.
- [3] Crammer, K., Singer, Y. On the Algorithmic Implementation of Multiclass Kernel-based Vector Machines. // Journal of Machine Learning Research, 2:265-292, 2001.
- [4] Tai, Farbound and Lin, Hsuan-Tien. Multilabel Classification with Principal Label Space Transformation. // Neural Comput., 24-9, 2012.
- [5] Дьяконов А. Г. Методы решения задач классификации с категориальными признаками. // Прикладная математика и информатика. Труды факультета Вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М.В. Ломоносова. 2014.