Основы машинного обучения

Лекция 18

Понижение размерности. Ранжирование.

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

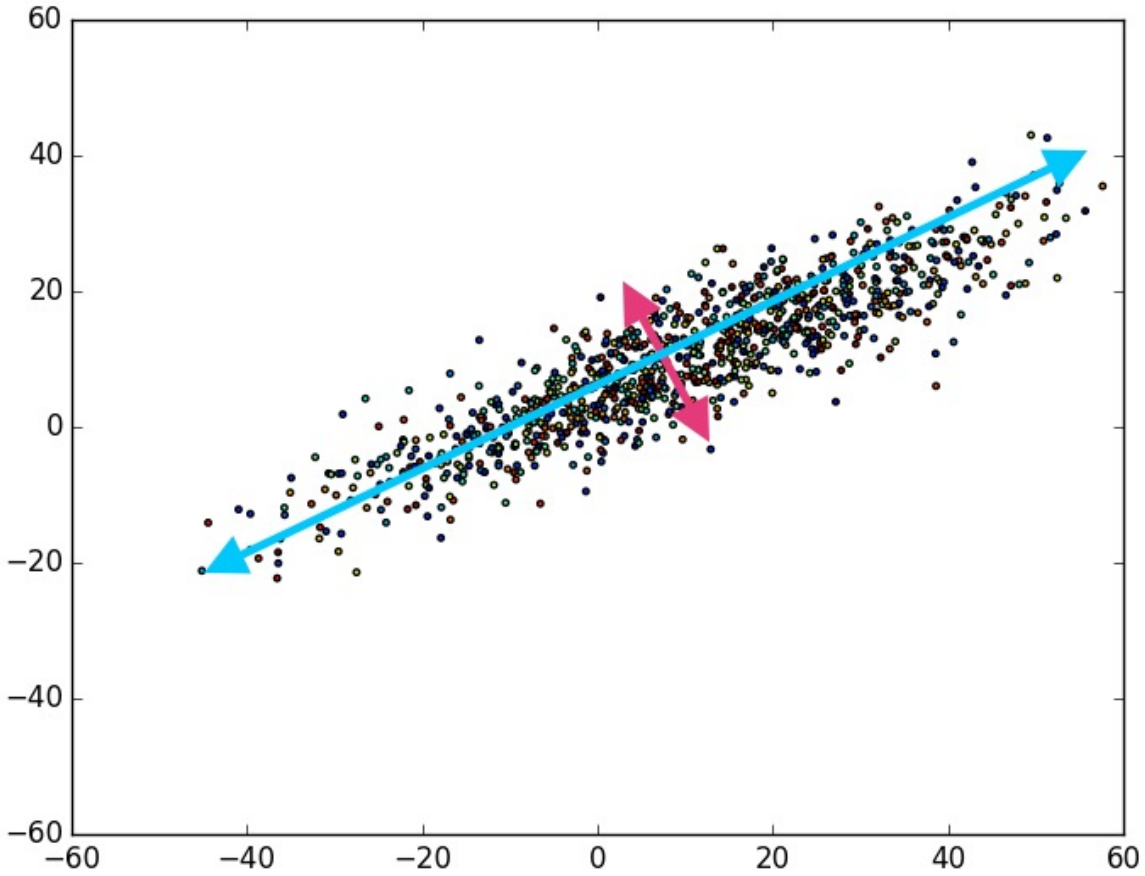
НИУ ВШЭ, 2024

Метод главных компонент

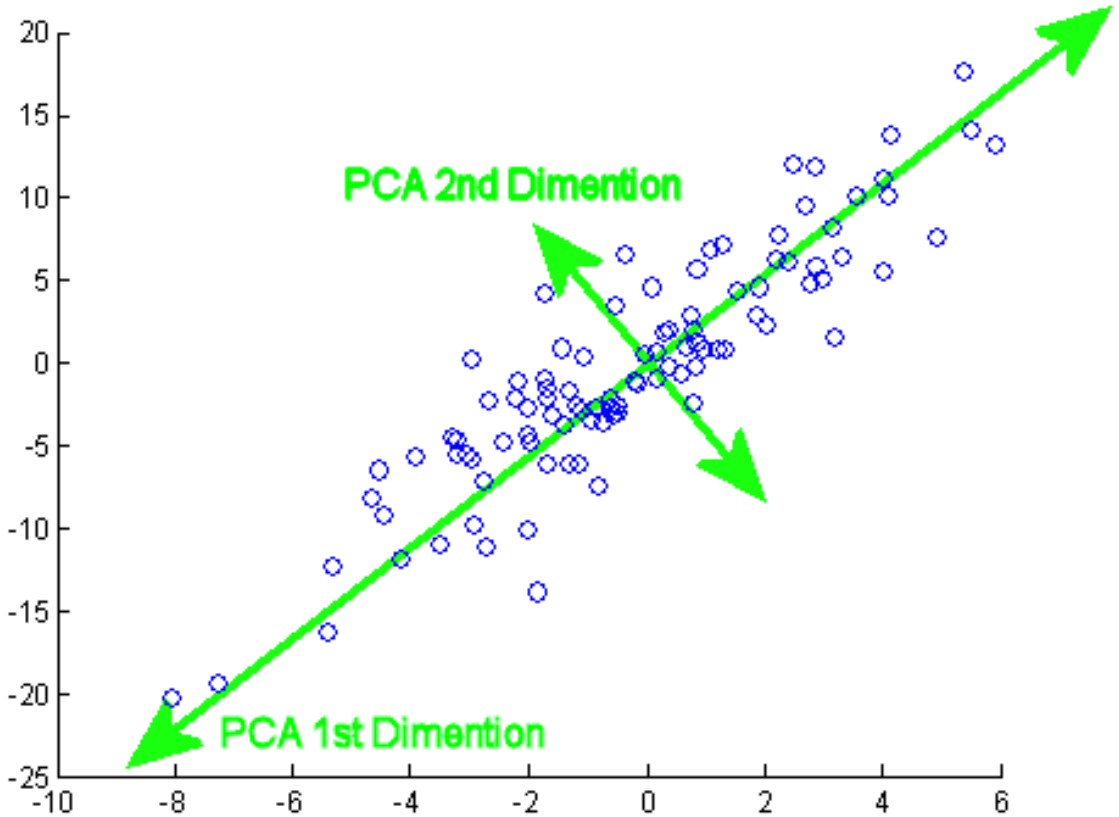
Метод главных компонент

- Principal component analysis (PCA)
- Проецирует данные в пространство меньшей размерности
- Относится к **методам фильтрации**
- Относится к **методам извлечения признаков**

Извлечение признаков



Извлечение признаков



Извлечение признаков

- Порождение новых признаков
- Их должно быть меньше
- Они должны содержать как можно больше информации из исходных признаков

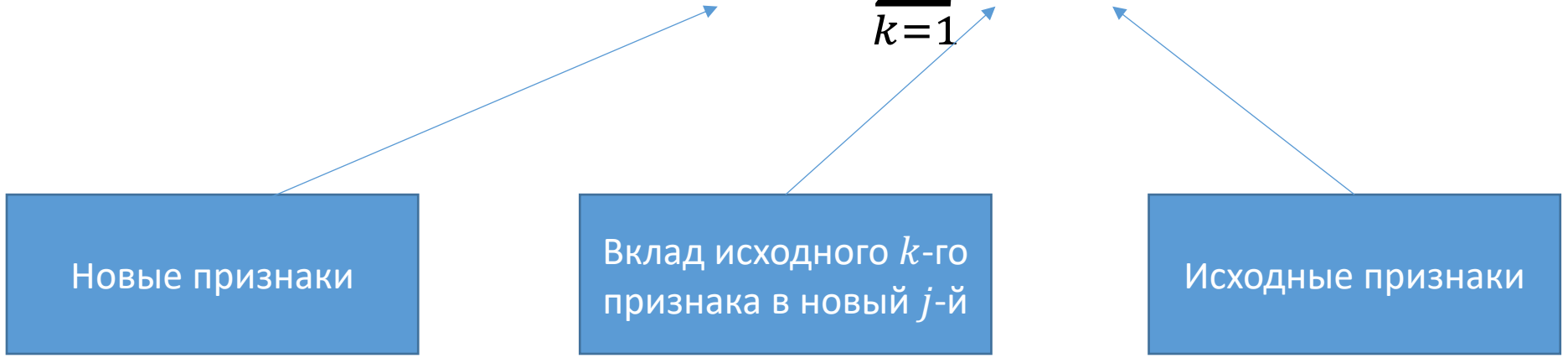
Извлечение признаков

- Линейные методы
- Каждый новый признак — линейная комбинация исходных

Извлечение признаков

- Исходные признаки: x_{ik}, D штук
- Новые признаки: z_{ij}, d штук
- Линейный подход:

$$z_{ij} = \sum_{k=1}^{D} w_{jk} x_{ik}$$



Метод главных компонент

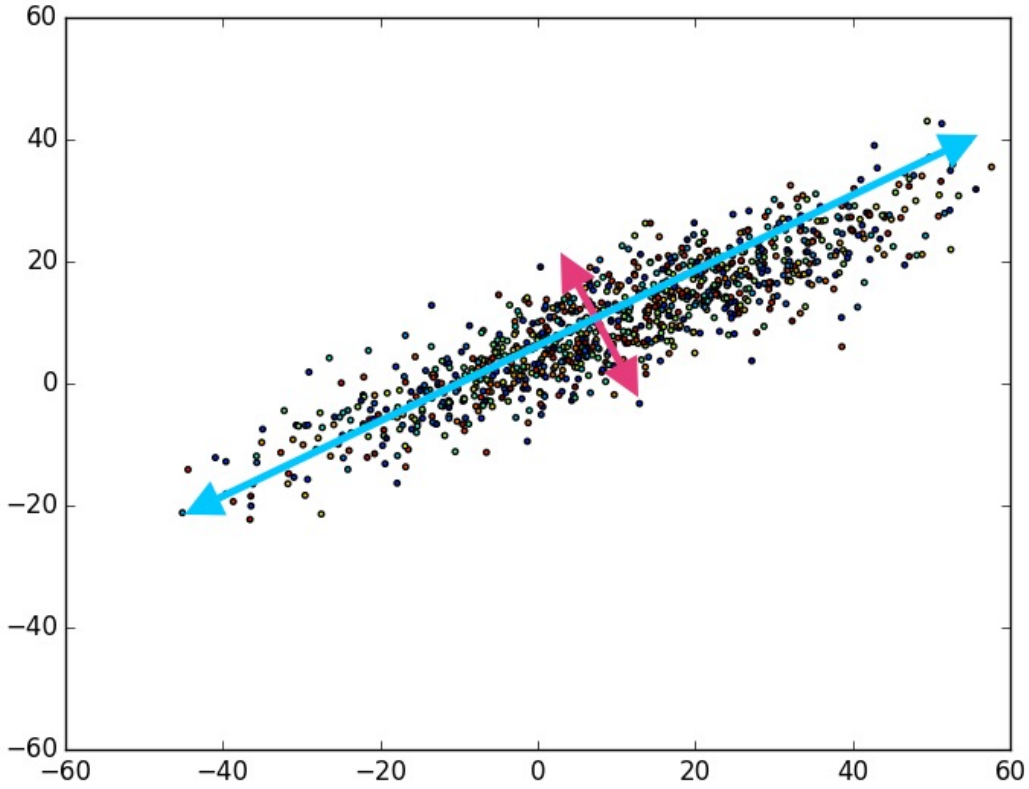
- Матричная запись:

$$Z = XW^T$$

- j-й столбец W — коэффициенты при исходных признаках для вычисления нового j-го признака

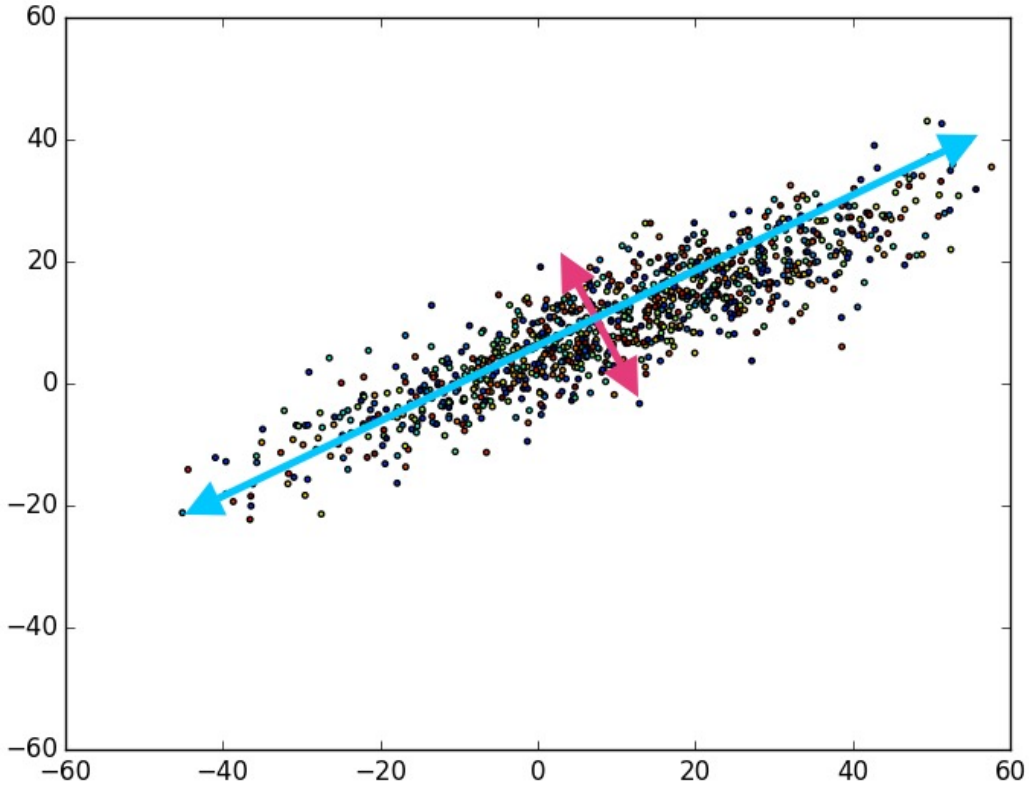
Метод главных компонент

- Геометрический смысл — поиск гиперплоскости для проецирования выборки
- Как выбирать гиперплоскость?

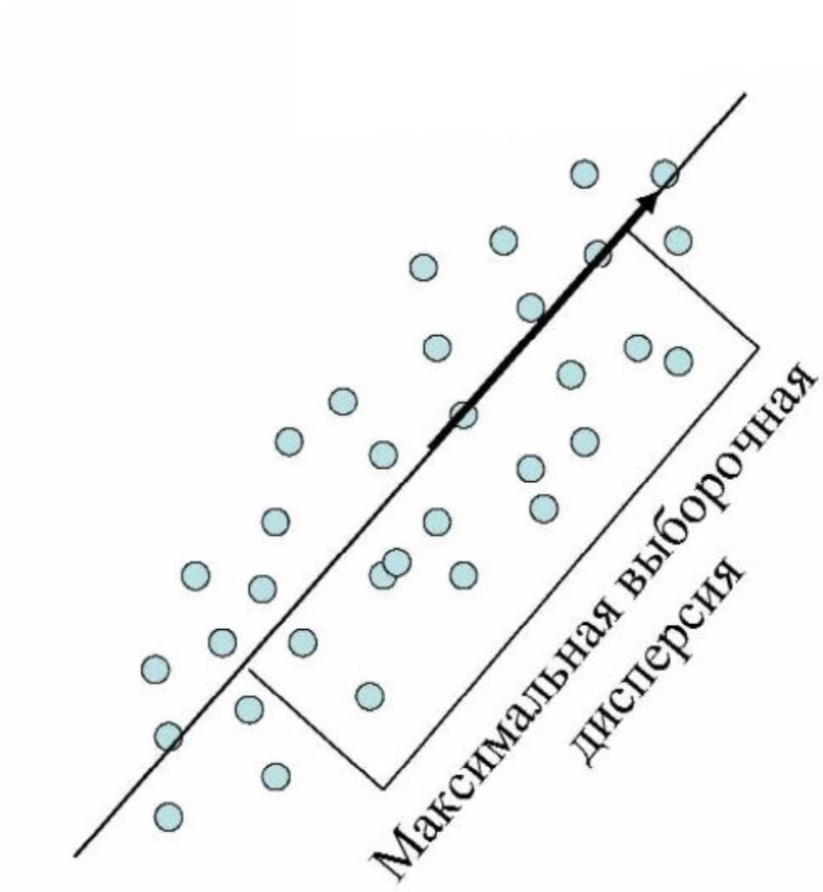


Метод главных компонент

- Чем выше дисперсия выборки после проецирования, тем лучше
- Дисперсия — мера количества информации



Метод главных компонент



Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{d} w_j^T X^T X w_j \to \max\limits_{W} \\ W^T W = I \end{cases}$$

Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{d} w_j^T X^T X w_j \to \max_W \\ W^T W = I \end{cases}$$

Дисперсия выборки

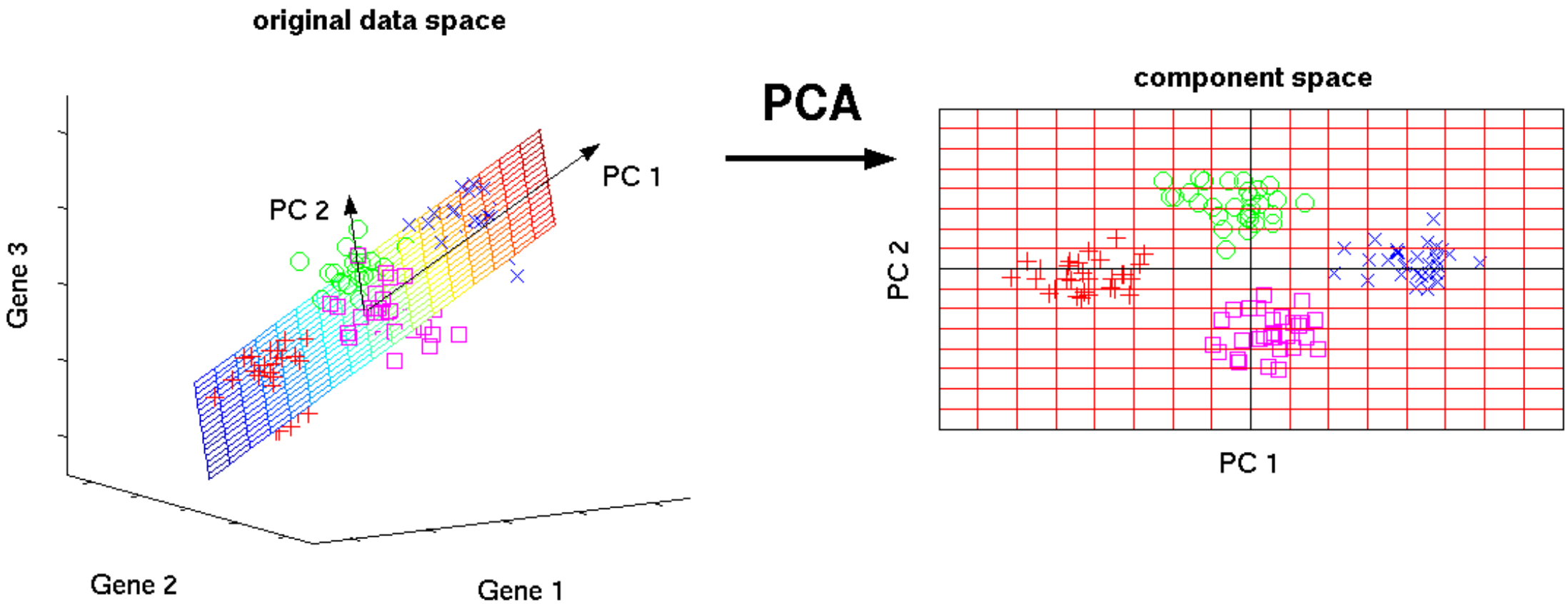
Собственные векторы

- A — матрица размера $n \times n$
- Пусть $Ax = \lambda x$
- Тогда x — собственный вектор, λ — собственное значение
- x — вектор, который не меняет направление под воздействием матрицы

Решение

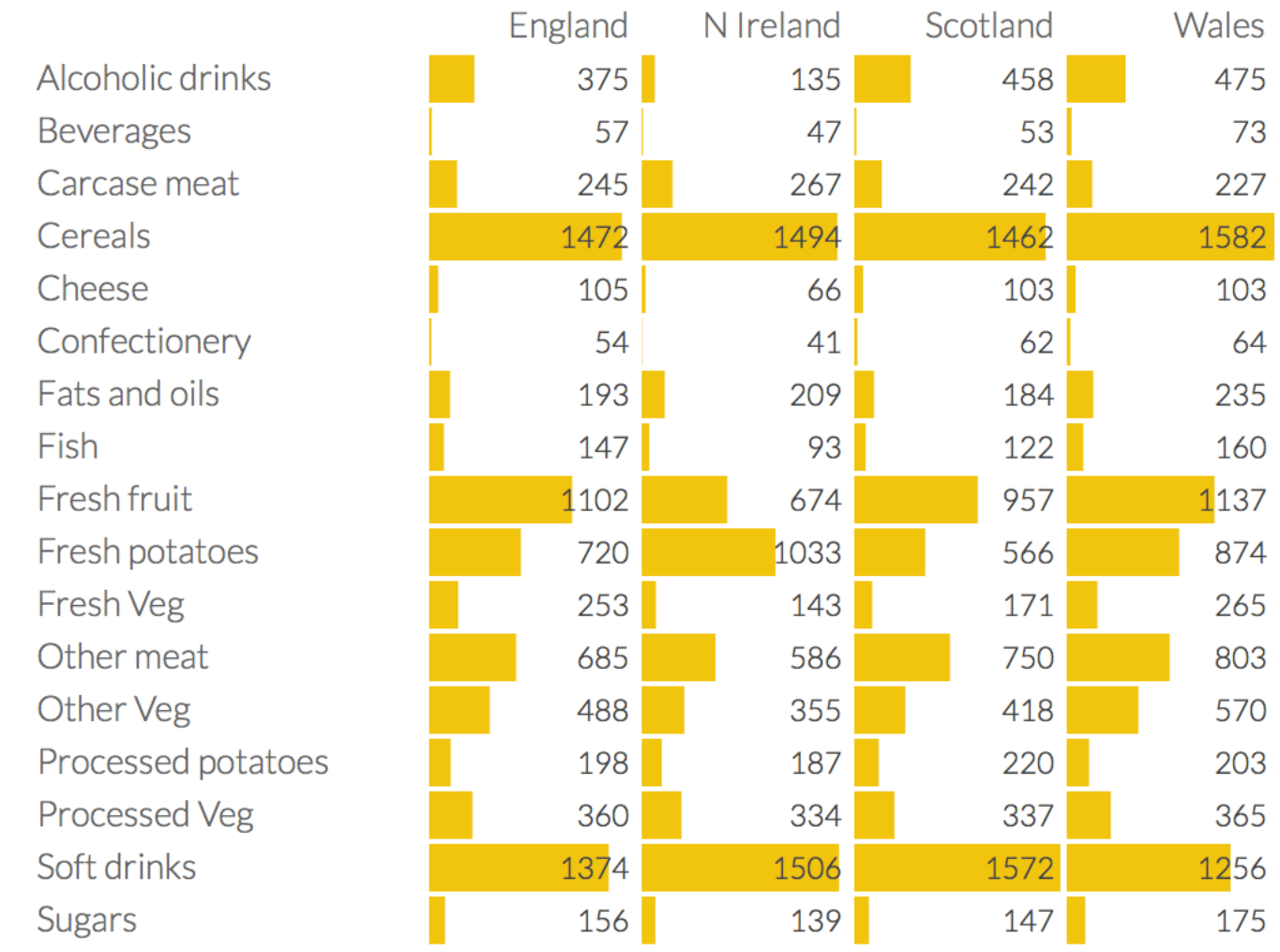
- Столбцы W — собственные векторы матрицы $X^T X$, соответствующие наибольшим собственным значениям $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_d$
- $\frac{\sum_{i=1}^{d} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{D} \lambda_i}$ — доля дисперсии, сохранённой при понижении размерности

Метод главных компонент



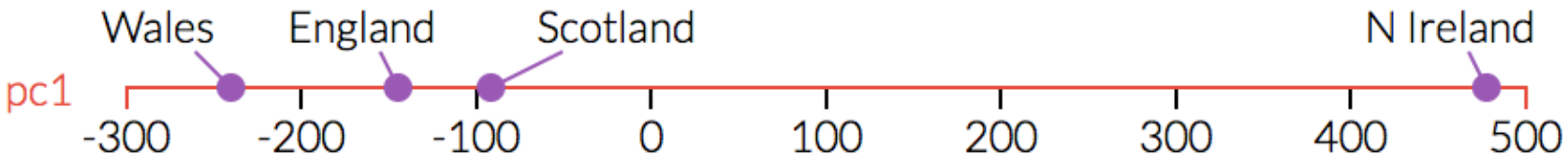
Рацион в Великобритании

- Данные — среднее потребление продуктов в неделю в каждой провинции
- Не очень удобно смотреть на них

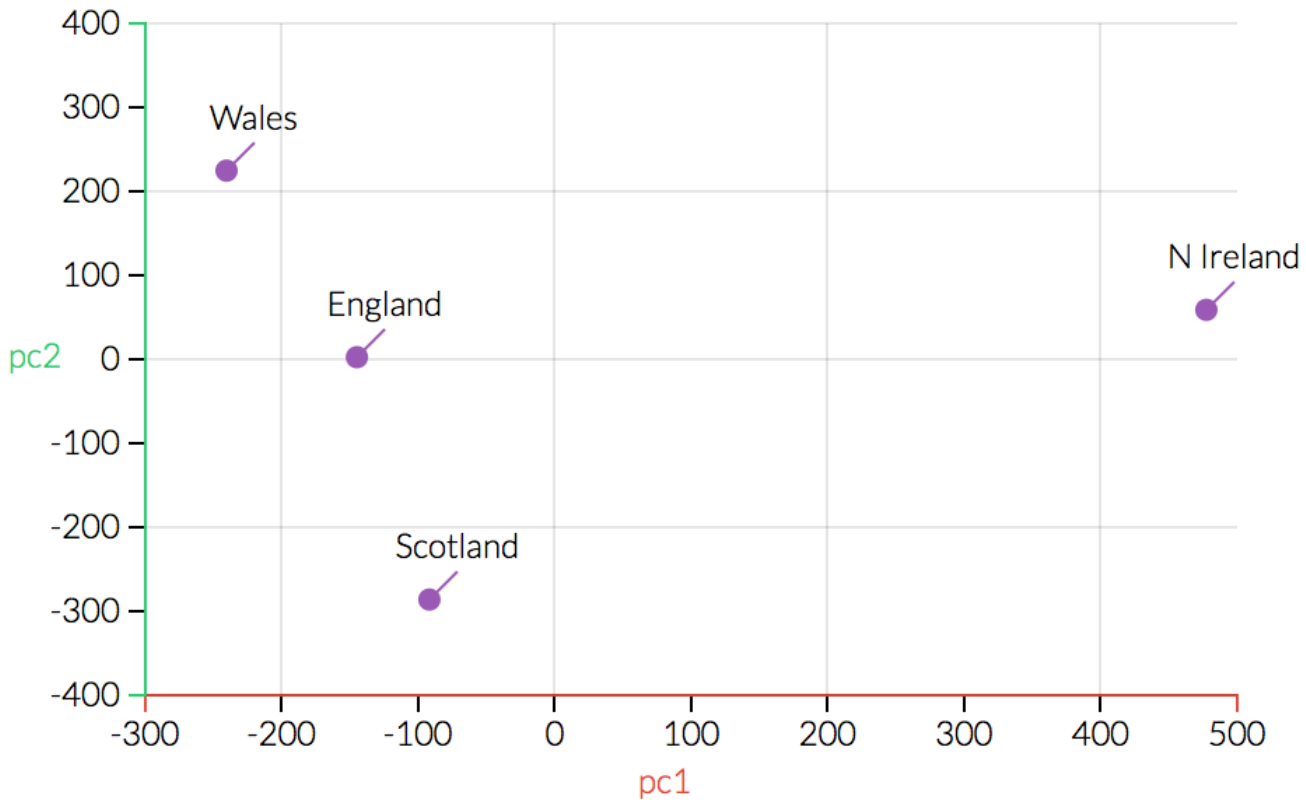


	England	N Ireland	Scotland	Wales
Alcoholic drinks	375	135	458	475
Beverages	57	47	53	73
Carcase meat	245	267	242	227
Cereals	1472	1494	1462	1582
Cheese	105	66	103	103
Confectionery	54	41	62	64
Fats and oils	193	209	184	235
Fish	147	93	122	160
Fresh fruit	1102	674	957	1137
Fresh potatoes	720	1033	566	874
Fresh Veg	253	143	171	265
Other meat	685	586	750	803
Other Veg	488	355	418	570
Processed potatoes	198	187	220	203
Processed Veg	360	334	337	365
Soft drinks	1374	1506	1572	1256
Sugars	156	139	147	175

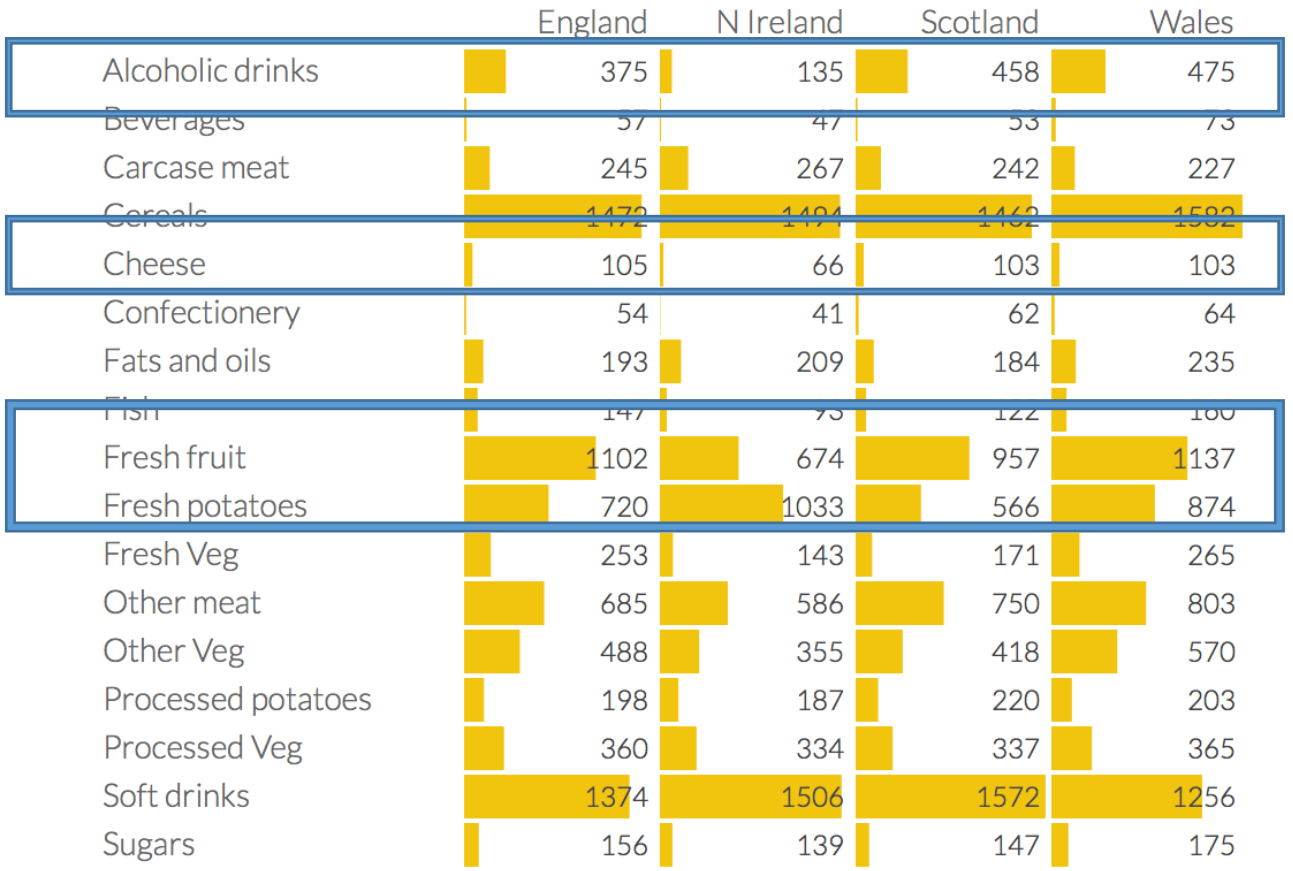
Рацион в Великобритании



Рацион в Великобритании

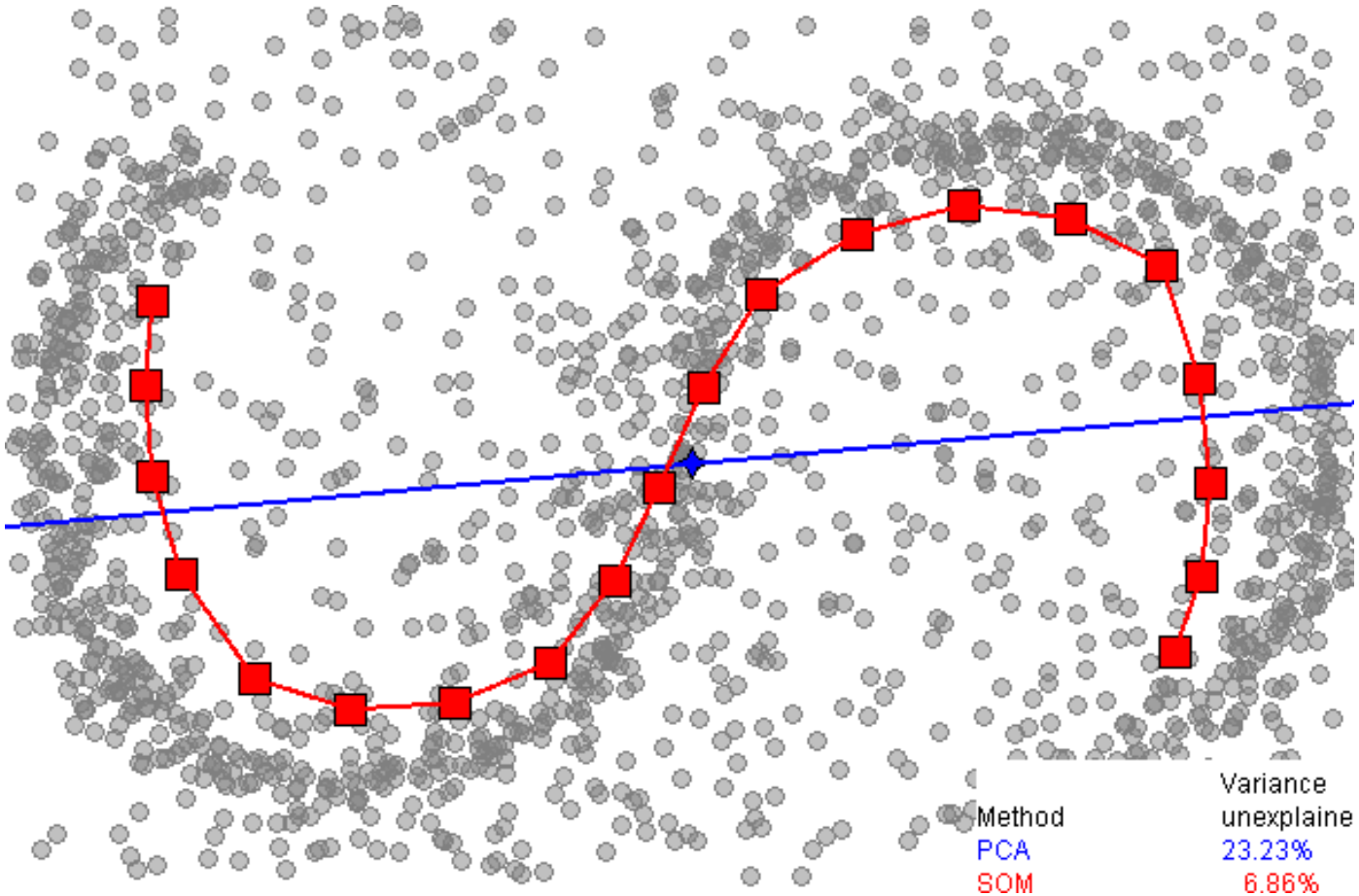


Рацион в Великобритании



	England	N Ireland	Scotland	Wales
Alcoholic drinks	375	135	458	475
Beverages	57	47	53	73
Carcase meat	245	267	242	227
Cereals	1472	1494	1462	1582
Cheese	105	66	103	103
Confectionery	54	41	62	64
Fats and oils	193	209	184	235
Fish	147	93	122	160
Fresh fruit	1102	674	957	1137
Fresh potatoes	720	1033	566	874
Fresh Veg	253	143	171	265
Other meat	685	586	750	803
Other Veg	488	355	418	570
Processed potatoes	198	187	220	203
Processed Veg	360	334	337	365
Soft drinks	1374	1506	1572	1256
Sugars	156	139	147	175

Ограничения

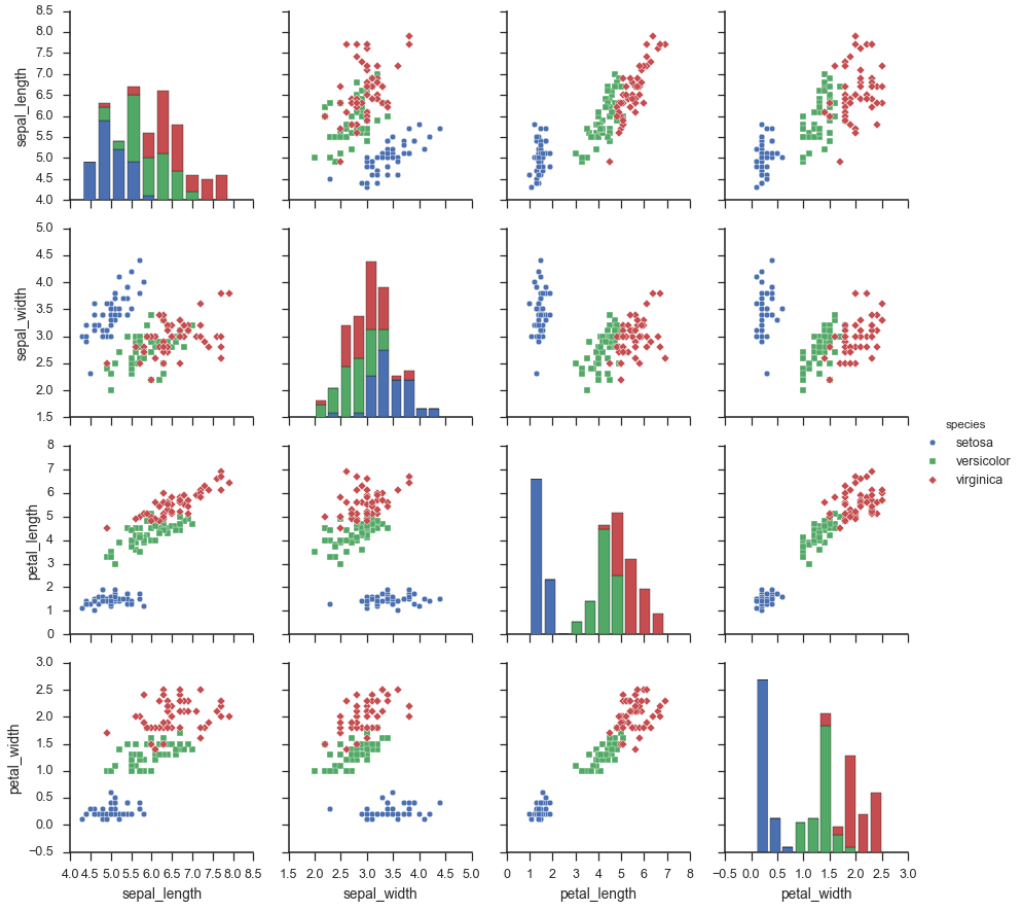


Визуализация данных

Визуализация данных

-99.99	-99.99	315.7	317.45	317.5	317.26	315.86	314.93	313.2	312.44	313.33	314.67	-99.99
315.62	316.38	316.71	317.72	318.29	318.16	316.54	314.8	313.84	313.26	314.8	315.58	315.98
316.43	316.97	317.58	319.02	320.03	319.59	318.18	315.91	314.16	313.84	315	316.19	316.91
316.93	317.7	318.54	319.48	320.58	319.77	318.57	316.79	314.8	315.38	316.1	317.01	317.64
317.94	318.56	319.68	320.63	321.01	320.55	319.58	317.4	316.25	315.42	316.69	317.7	318.45
318.74	319.08	319.86	321.39	322.24	321.47	319.74	317.77	316.21	315.99	317.12	318.31	318.99
319.57	-99.99	-99.99	-99.99	322.24	321.89	320.44	318.7	316.7	316.79	317.79	318.71	-99.99
319.44	320.44	320.89	322.13	322.16	321.87	321.39	318.8	317.81	317.3	318.87	319.42	320.04
320.62	321.59	322.39	323.87	324.01	323.75	322.39	320.37	318.64	318.1	319.79	321.08	321.38
322.06	322.5	323.04	324.42	325	324.09	322.55	320.92	319.31	319.31	320.72	321.96	322.16
322.57	323.15	323.89	325.02	325.57	325.36	324.14	322.03	320.41	320.25	321.31	322.84	323.05
324	324.42	325.64	326.66	327.34	326.76	325.88	323.67	322.38	321.78	322.85	324.12	324.63
325.03	325.99	326.87	328.14	328.07	327.66	326.35	324.69	323.1	323.16	323.98	325.13	325.68
326.17	326.68	327.18	327.78	328.92	328.57	327.34	325.46	323.36	323.57	324.8	326.01	326.32
326.77	327.63	327.75	329.72	330.07	329.09	328.05	326.32	324.93	325.06	326.5	327.55	327.45
328.55	329.56	330.3	331.5	332.48	332.07	330.87	329.31	327.51	327.18	328.16	328.64	329.68
329.35	330.71	331.48	332.65	333.09	332.25	331.18	329.4	327.43	327.37	328.46	329.57	330.25
330.4	331.41	332.04	333.31	333.96	333.6	331.91	330.06	328.56	328.34	329.49	330.76	331.15
331.75	332.56	333.5	334.58	334.87	334.34	333.05	330.94	329.3	328.94	330.31	331.68	332.15
332.93	333.42	334.7	336.07	336.74	336.27	334.93	332.75	331.59	331.16	332.4	333.85	333.9
334.97	335.39	336.64	337.76	338.01	337.89	336.54	334.68	332.76	332.55	333.92	334.95	335.51
336.23	336.76	337.96	338.89	339.47	339.29	337.73	336.09	333.91	333.86	335.29	336.73	336.85
338.01	338.36	340.08	340.77	341.46	341.17	339.56	337.6	335.88	336.02	337.1	338.21	338.69
339.23	340.47	341.38	342.51	342.91	342.25	340.49	338.43	336.69	336.86	338.36	339.61	339.93
340.75	341.61	342.7	343.57	344.13	343.35	342.06	339.81	337.98	337.86	339.26	340.49	341.13
341.37	342.52	343.1	344.94	345.75	345.32	343.99	342.39	339.86	339.99	341.15	342.99	342.78
343.7	344.5	345.28	347.08	347.43	346.79	345.4	343.28	341.07	341.35	342.98	344.22	344.42
344.97	346	347.43	348.35	348.93	348.25	346.56	344.68	343.09	342.8	344.24	345.55	345.9
346.3	346.96	347.86	349.55	350.21	349.54	347.94	345.9	344.85	344.17	345.66	346.9	347.15
348.02	348.47	349.42	350.99	351.84	351.25	349.52	348.1	346.45	346.36	347.81	348.96	348.93
350.43	351.73	352.22	353.59	354.22	353.79	352.38	350.43	348.72	348.88	350.07	351.34	351.48
352.76	353.07	353.68	355.42	355.67	355.13	353.9	351.67	349.8	349.99	351.29	352.52	352.91
353.66	354.7	355.39	356.2	357.16	356.23	354.82	352.91	350.96	351.18	352.83	354.21	354.19
354.72	355.75	357.16	358.6	359.33	358.24	356.17	354.02	352.15	352.21	353.75	354.99	355.59
355.98	356.72	357.81	359.15	359.66	359.25	357.02	355	353.01	353.31	354.16	355.4	356.37
356.7	357.16	358.38	359.46	360.28	359.6	357.57	355.52	353.69	353.99	355.34	356.8	357.04
358.37	358.91	359.97	361.26	361.68	360.95	359.55	357.48	355.84	355.99	357.58	359.04	358.89
359.97	361	361.64	363.45	363.79	363.26	361.9	359.46	358.05	357.76	359.56	360.7	360.88
362.05	363.25	364.02	364.72	365.41	364.97	363.65	361.48	359.45	359.6	360.76	362.33	362.64
363.18	364	364.56	366.35	366.79	365.62	364.47	362.51	360.19	360.77	362.43	364.28	363.76
365.33	366.15	367.31	368.61	369.3	368.87	367.64	365.77	363.9	364.23	365.46	366.97	366.63
368.15	368.87	369.59	371.14	371	370.35	369.27	366.93	364.63	365.13	366.67	368.01	368.31
369.14	369.46	370.52	371.66	371.82	371.7	370.12	368.12	366.62	366.73	368.29	369.53	369.48
370.28	371.5	372.12	372.87	374.02	373.3	371.62	369.55	367.96	368.09	369.68	371.24	371.02
372.43	373.09	373.52	374.86	375.55	375.41	374.02	371.49	370.7	370.25	372.08	373.78	373.1
374.68	375.63	376.11	377.65	378.35	378.13	376.62	374.5	372.99	373.01	374.35	375.7	375.64
376.79	377.37	378.41	380.52	380.63	379.57	377.79	375.86	374.07	374.24	375.86	377.47	377.38
378.37	379.69	380.41	382.1	382.28	382.13	380.66	378.71	376.42	376.88	378.32	380.04	379.67
381.38	382.03	382.64	384.62	384.95	384.06	382.29	380.47	378.67	379.06	380.14	381.74	381.84
382.45	383.68	384.23	386.26	386.39	385.87	384.39	381.78	380.73	380.81	382.33	383.69	383.55
385.07	385.72	385.85	386.71	388.45	387.64	386.1	383.95	382.91	382.73	383.96	385.02	385.34

Визуализация данных



Визуализация данных

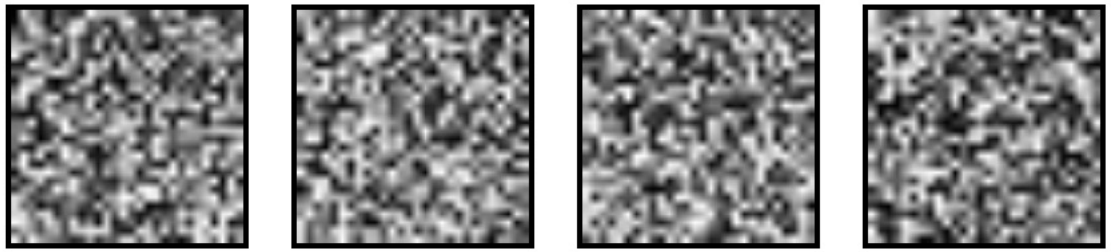
- Частный случай нелинейного понижения размерности
- $d = 2$ или $d = 3$
- Нужно сохранить структуру данных и зависимости

MNIST

A selection from the 64-dimensional digits dataset

MNIST

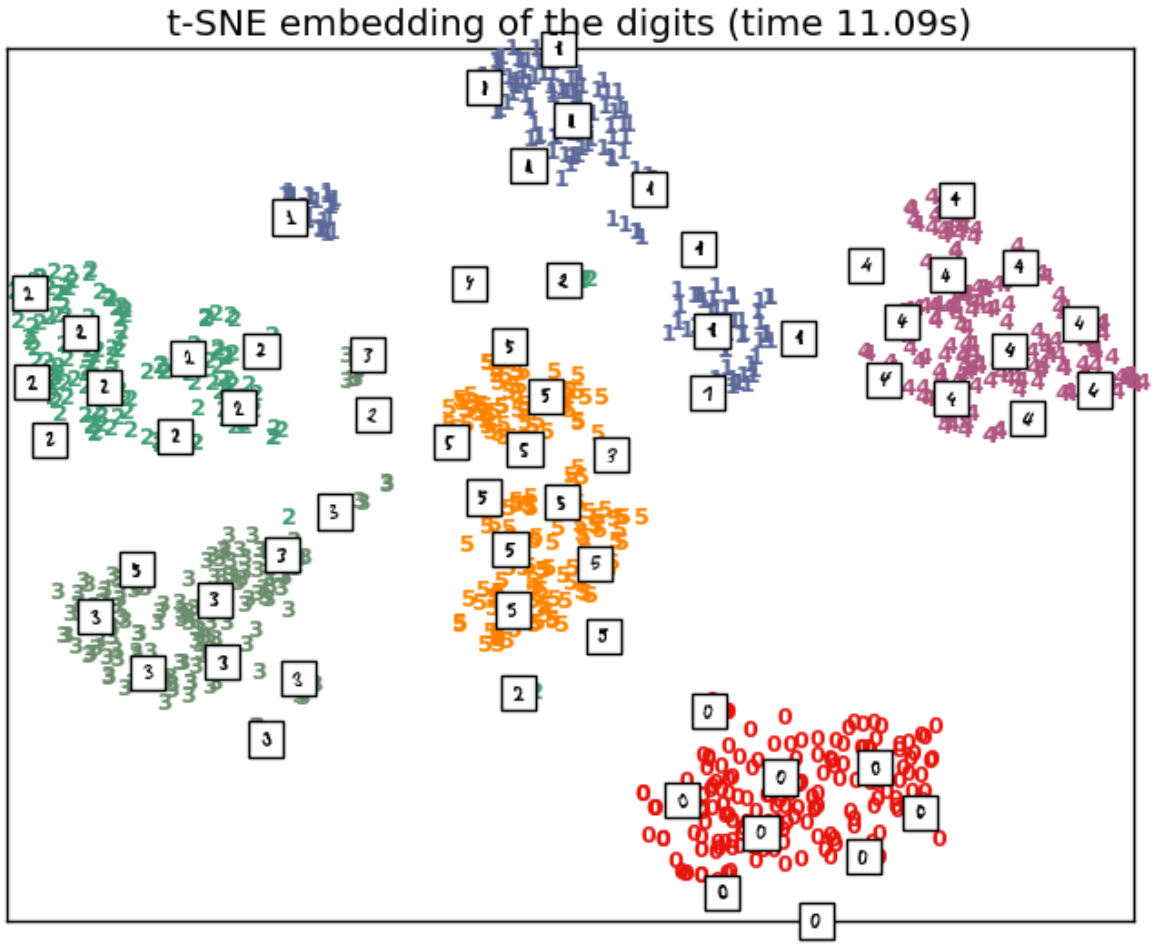
- Каждое изображение — 784 признака
- Внутренняя размерность данных гораздо ниже
- Случайное изображение такого же размера не является изображением цифры



t-SNE

- t-Stochastic Neighbor Embedding
- Метод визуализации
- Ищет такие точки на плоскости, которые лучше всего сохраняют расстояния из исходного пространства

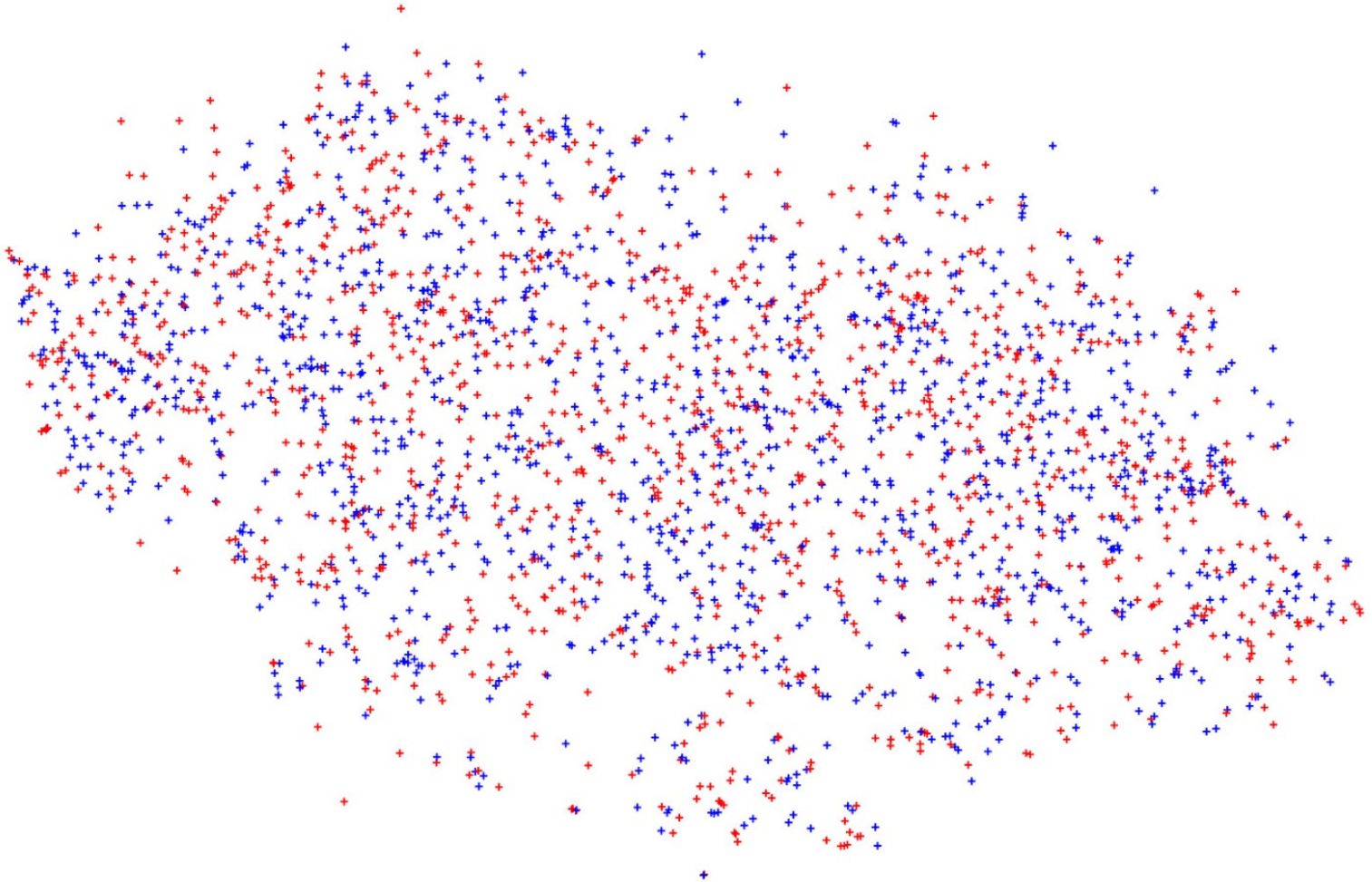
MNIST



Dogs vs. Cats

Deep Blue beat Kasparov at chess in 1997.
Watson beat the brightest trivia minds at Jeopardy in 2011.
Can you tell Fido from Mittens in 2013?

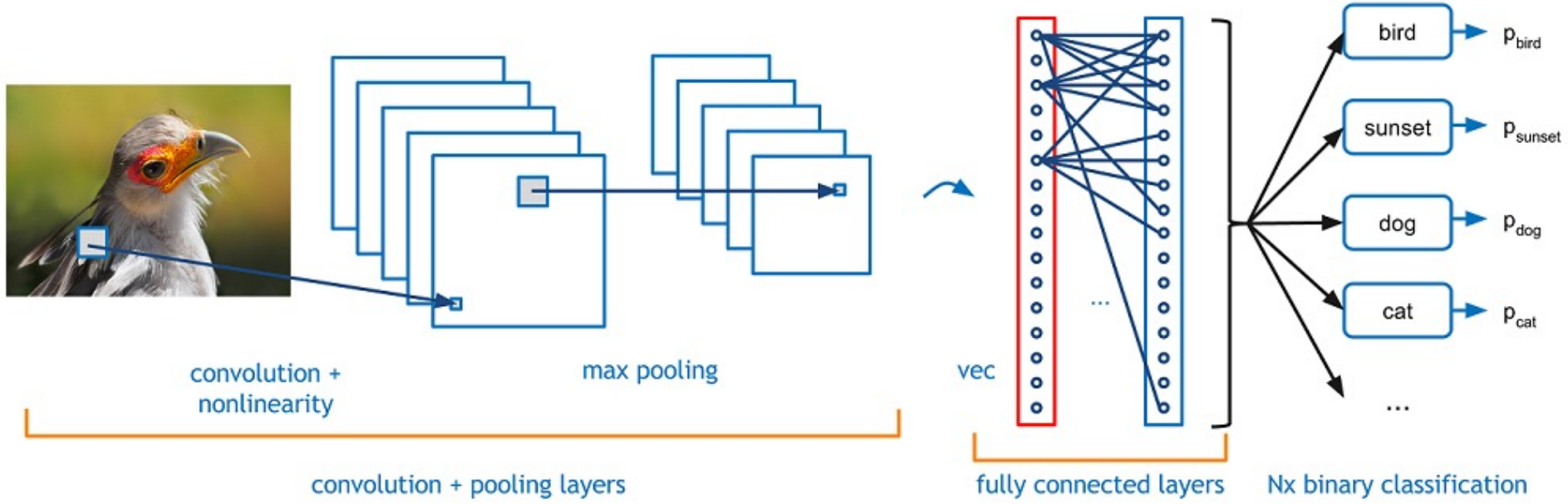
Dogs vs. Cats



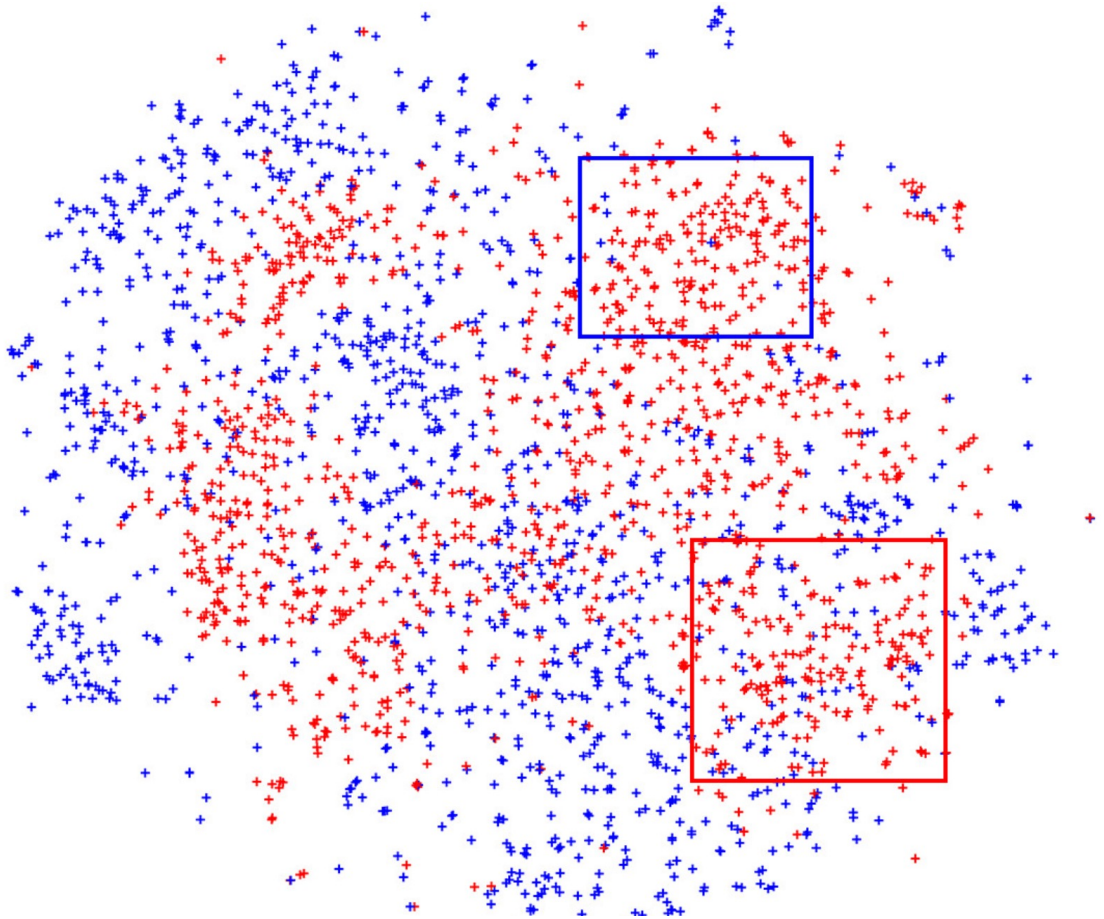
https://indico.io/blog/visualizing-with-t-sne/

Dogs vs. Cats

- Визуализация не очень осмысленная
- Мы использовали интенсивности пикселей как признаки
- Современный подход — прогнать изображения через свёрточную нейронную сеть, взять выходы одного из последних слоёв



Dogs vs. Cats



https://indico.io/blog/visualizing-with-t-sne/

Dogs vs. Cats

https://indico.io/blog/visualizing-with-t-sne/

Резюме

- Методы понижения размерности позволяют убрать неинформативные признаки и ускорить работу над моделями
- Классы методов: отбор признаков и извлечение признаков
- Отбор признаков: фильтрация и использование моделей
- Извлечение признаков: PCA
- Визуализация данных: t-SNE

Ранжирование

На прошлых лекциях

- Дано: матрица «объекты-признаки» X и ответы y
- Модель должна выдавать прогнозы, близкие к истинным ответам

На прошлых лекциях

- Методы обучения с учителем: линейные модели, решающие деревья, случайные леса, …
- Дано: матрица «объекты-признаки» X и ответы y
- Найти: модель $a(x)$
- Модель должна выдавать прогнозы, близкие к истинным ответам

ПОИСК КАРТИНКИ ВИДЕО КАРТЫ МАРКЕТ НОВОСТИ ПЕРЕВОДЧИК ЕЩЁ

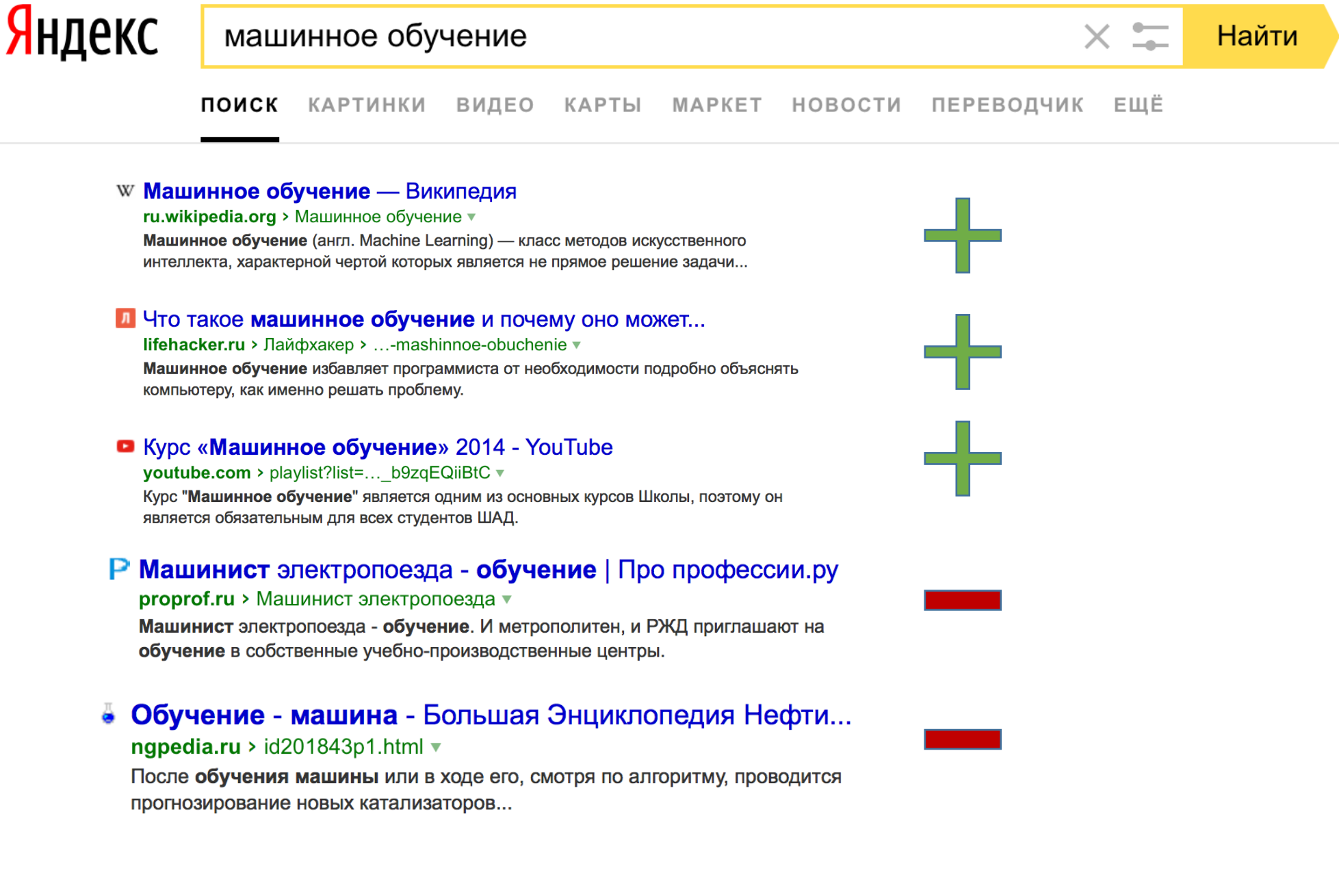
Машинное обучение — Википедия
ru.wikipedia.org › Машинное обучение
Машинное обучение (англ. Machine Learning) — класс методов искусственного интеллекта, характерной чертой которых является не прямое решение задачи...

Что такое **машинное обучение** и почему оно может...
lifehacker.ru › Лайфхакер › …-mashinnoe-obuchenie
Машинное обучение избавляет программиста от необходимости подробно объяснять компьютеру, как именно решать проблему.

Курс «**Машинное обучение**» 2014 - YouTube
youtube.com › playlist?list=…_b9zqEQiiBtC
Курс "**Машинное обучение**" является одним из основных курсов Школы, поэтому он является обязательным для всех студентов ШАД.

Машинист электропоезда - **обучение** | Про профессии.ру
proprof.ru › Машинист электропоезда
Машинист электропоезда - **обучение**. И метрополитен, и РЖД приглашают на **обучение** в собственные учебно-производственные центры.

Обучение - машина - Большая Энциклопедия Нефти...
ngpedia.ru › id201843p1.html
После **обучения машины** или в ходе его, смотря по алгоритму, проводится прогнозирование новых катализаторов...


Яндекс
машинное обучение
Найти
ПОИСК
КАРТИНКИ
ВИДЕО
КАРТЫ
МАРКЕТ
НОВОСТИ
ПЕРЕВОДЧИК
ЕЩЁ
Машинное обучение — Википедия
ru.wikipedia.org › Машинное обучение
Машинное обучение (англ. Machine Learning) — класс методов искусственного интеллекта, характерной чертой которых является не прямое решение задачи...
Что такое машинное обучение и почему оно может...
lifehacker.ru › Лайфхакер › …-mashinnoe-obuchenie
Машинное обучение избавляет программиста от необходимости подробно объяснять компьютеру, как именно решать проблему.
Курс «Машинное обучение» 2014 - YouTube
youtube.com › playlist?list=…_b9zqEQiiBtC
Курс "Машинное обучение" является одним из основных курсов Школы, поэтому он является обязательным для всех студентов ШАД.
Машинист электропоезда - обучение | Про профессии.ру
proprof.ru › Машинист электропоезда
Машинист электропоезда - обучение. И метрополитен, и РЖД приглашают на обучение в собственные учебно-производственные центры.
Обучение - машина - Большая Энциклопедия Нефти...
ngpedia.ru › id201843p1.html
После обучения машины или в ходе его, смотря по алгоритму, проводится прогнозирование новых катализаторов...

Ранжирование

- Дан набор запросов $\{q_1, \dots, q_m\}$
- Дан набор документов $\{d_1, \dots, d_n\}$
- Нужно для каждого запроса правильно упорядочить документы
- Что такое «правильно»?

Ранжирование

- Дан набор запросов $\{q_1, \dots, q_m\}$
- Дан набор документов $\{d_1, \dots, d_n\}$
- Рассматриваем пары «запрос-документ» (q, d)
- Для некоторых троек (q, d_1, d_2) известно, что для запроса q документ d_1 должен стоять раньше, чем d_2
- Обозначение: R — множество троек (q, d_1, d_2), для которых известен такой порядок

Ранжирование

- Раньше: строим модель $a(x)$, которая приближает ответы
- Сейчас: строим модель $a(q, d)$, которая правильно упорядочивает документы для запросов

$$(q, d_1, d_2) \in R \Rightarrow a(q, d_1) > a(q, d_2)$$

Пример

- Для запроса q известны пары $(d_3, d_1), (d_3, d_2), (d_1, d_4)$
- Какие наборы прогнозов модели лучше?
- $(3, 2, 4, 1)$
- $(2, 3, 4, 1)$
- $(3, 4, 2, 1)$
- $(13, 10, 20, 7)$

Пример

- Для запроса q известны пары $(d_3, d_1), (d_3, d_2), (d_1, d_4)$
- Какие наборы прогнозов модели лучше?
- $(\mathbf{3}, \mathbf{2}, \mathbf{4}, \mathbf{1})$
- $(\mathbf{2}, \mathbf{3}, \mathbf{4}, \mathbf{1})$
- $(3, 4, 2, 1)$
- $(\mathbf{13}, \mathbf{10}, \mathbf{20}, \mathbf{7})$

- Важен порядок, а не абсолютные значения!

Метрики качества ранжирования

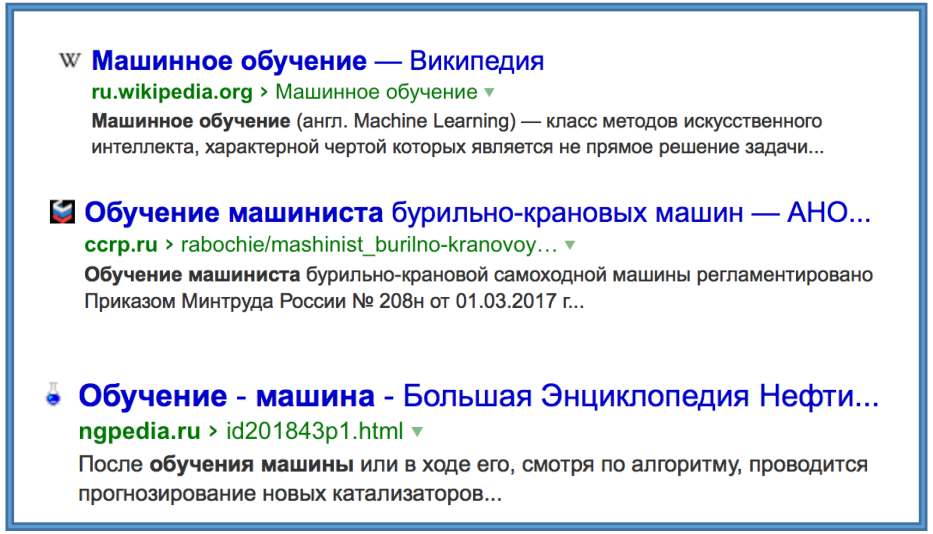
Целевая переменная

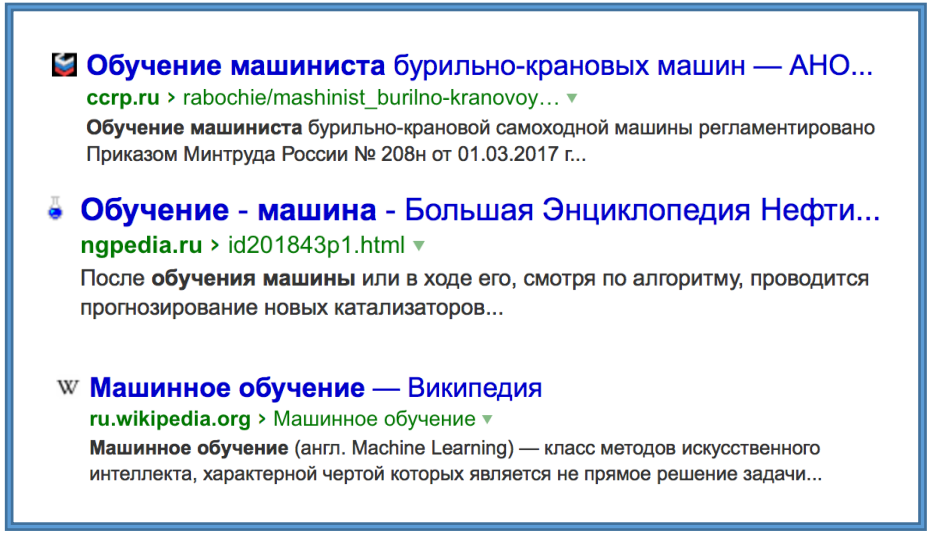
- Определение задачи через пары — правильно, но сложно
- Упростим постановку:
  - Объекты — пары «запрос-документ» $x_i = (q, d)$
  - Ответы — числа y_i
  - Требование — если есть объекты (q, d_1) и (q, d_2), такие что $y_1 > y_2$, то должно быть $a(q, d_1) > a(q, d_2)$

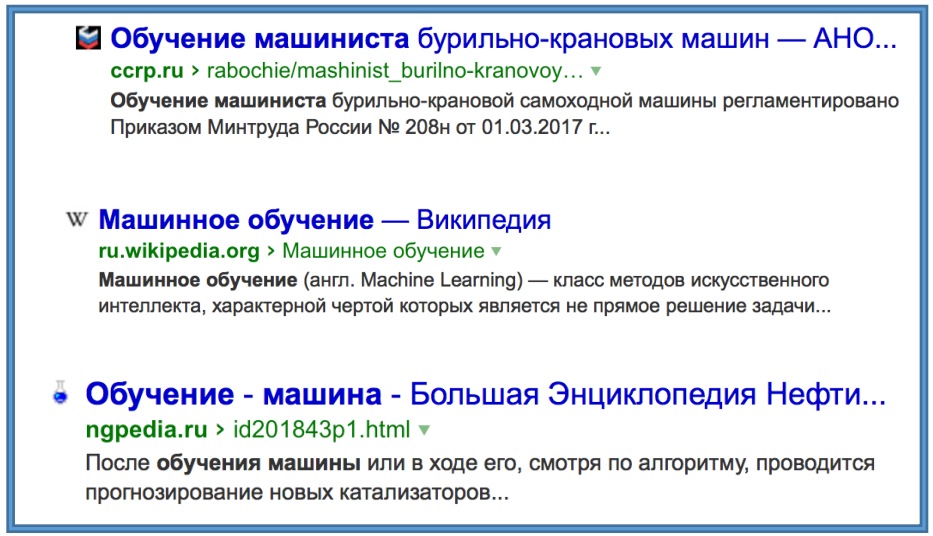
Целевая переменная, пример

- $(q_1, d_1), 1$
- $(q_1, d_2), 0.7$
- $(q_1, d_3), 0$
- $(q_2, d_1), 0$
- $(q_2, d_2), 1$
- Для q_1 должны получить ранжирование (d_1, d_2, d_3)
- Для q_2 должны получить ранжирование (d_2, d_1)

Качество ранжирования







- Какое ранжирование лучше?
- Какое хуже всех?

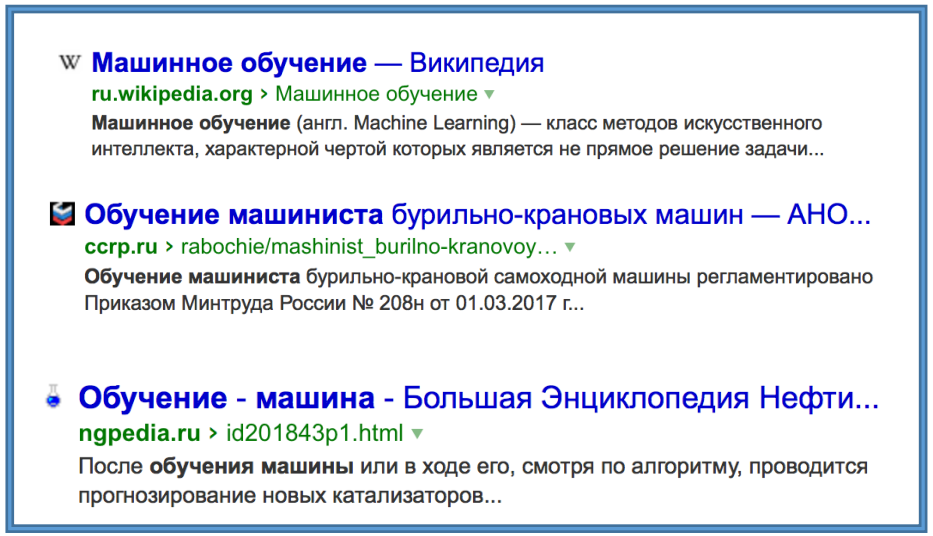
DCG (Discounted cumulative gain)

$$\mathrm{DCG@}k(q) = \sum_{i=1}^{k} \frac{2^{y_i} - 1}{\log(i+1)}$$

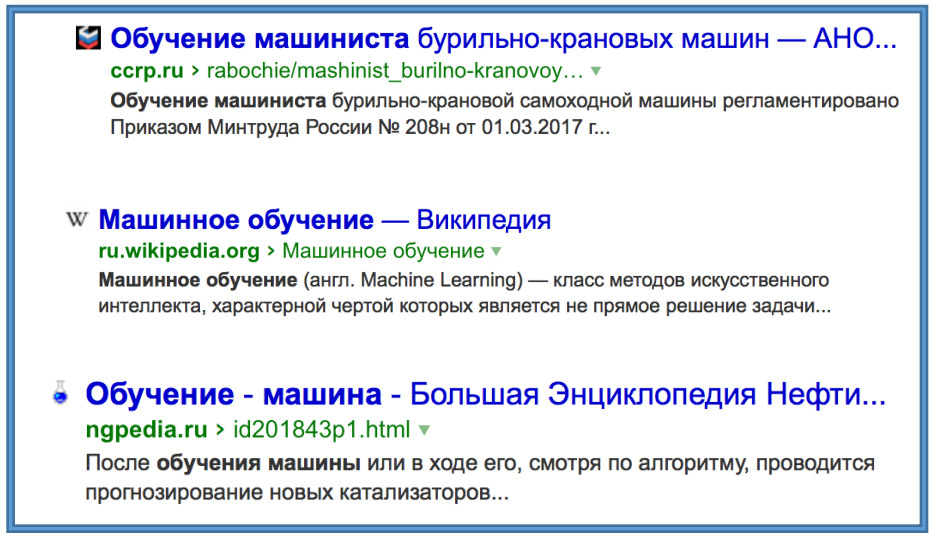
- Вычисляется по первым k документам из выдачи для запроса q
- y_i — истинный ответ для документа на i-й позиции

- Чтобы получить итоговую оценку, DCG усредняется по всем запросам

Качество ранжирования



$$DCG = \frac{2^1 - 1}{\log(2)} + \frac{2^0 - 1}{\log(3)} + \frac{2^0 - 1}{\log(4)} \approx 1.44$$



$$DCG = \frac{2^0 - 1}{\log(2)} + \frac{2^1 - 1}{\log(3)} + \frac{2^0 - 1}{\log(4)} \approx 0.91$$

Методы ранжирования

Поточечный (pointwise) подход

- Обучим модель $a(q, d)$, чтобы она как можно точнее приближала ответы y_i
- Например, линейная регрессия:

$$\sum_{(q,d,y)\in R} (\langle w, x(q,d)\rangle - y_i)^2 \to \min_w$$

- $x(q, d)$ — признаки для пары «запрос-документ»

Поточечный (pointwise) подход

- Простой в реализации
- Можно использовать любую из известных моделей (линейные, деревья, случайные леса, нейронные сети…)
- Восстанавливает точные значения y_i, хотя нас интересует порядок

Попарный (pairwise) подход

- В ранжировании требуется правильно располагать пары документов — формализуем это

$$\sum_{(q,d_i,d_j)\in R} \left[a(q,d_i) - a\left(q,d_j\right) < 0\right]$$

- Штрафуем, если второй документы из пары оказался раньше

Попарный (pairwise) подход

- Получили разрывный функционал — сложно оптимизировать
- Перейдём к гладкой верхней оценке (как в линейных классификаторах):

$$\sum_{(q,d_i,d_j)\in R} \left[a(q,x_i) - a\left(q,x_j\right) < 0\right] \leq \sum_{(q,d_i,d_j)\in R} L\left(a(q,x_i) - a\left(q,x_j\right)\right)$$

- Пример: $L(z) = \log(1 + e^{-z})$

Попарный (pairwise) подход

- Сложнее поточечного (больше слагаемых в функционале)
- Обычно даёт качество выше, чем поточечный

- Реализации: $\mathrm{SVM}^{\mathrm{light}}$, xgboost (rank:pairwise)

Резюме

- Ранжирование — задача сортировки документов по релевантности
- Метрика должна учитывать позиции, а не абсолютные значения прогнозов — например, DCG
- Поточечный и попарный подходы
- Отдельная задача — разработка признаков