Методы машинного обучения. Отбор признаков (feature selection)

Воронцов Константин Вячеславович
www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov
вопросы к лектору: vokov@forecsys.ru

материалы курса:
github.com/MSU-ML-COURSE/ML-COURSE-21-22
орг.вопросы по курсу: ml.cmc@mail.ru

ВМК МГУ • 30 ноября 2021

Содержание

Постановка задачи отбора признаков

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка, $y_i = y(x_i)$;
$f_j(x)$, $j = 1, \ldots, n$ — признаки объекта x

Почему полезно отбирать признаки:

- признак может быть неинформативным:
  $f_j(x)$ не содержит информации об $y(x)$
- признак может быть зависимым:
  информация о $f_j(x)$ содержится в других признаках
- признак может быть слишком сильно зашумлённым,
  и тогда его использование может повышать риск ошибки
- минимизация числа используемых признаков может
  давать экономию ресурсов времени и памяти
- понижение размерности n может уменьшать переобучение

Напоминание. Разновидности внешних критериев

Эмпирические критерии:

- Проверка на отложенных данных (hold-out validation)
- Кросс-проверка (cross-validation, CV)
- Скользящий контроль (leave one out, LOO)
- Поблочная кросс-проверка ($t \times q$-fold CV)
- Непротиворечивость или согласованность моделей
- Устойчивость модели при малых изменениях данных

Аналитические критерии (регуляризаторы):

- L_0-, L_1-, L_2-регуляризации линейных моделей
- Информационные критерии (AIC, BIC, CIC и др.)
- Сложностные оценки (Вапника-Червоненкиса и др.)

Задача отбора признаков в логических закономерностях

Закономерность R — *конъюнкция* пороговых условий:

$$R(x) = \bigwedge_{j \in J} \big[f_j(x) \geqslant a_j \big].$$

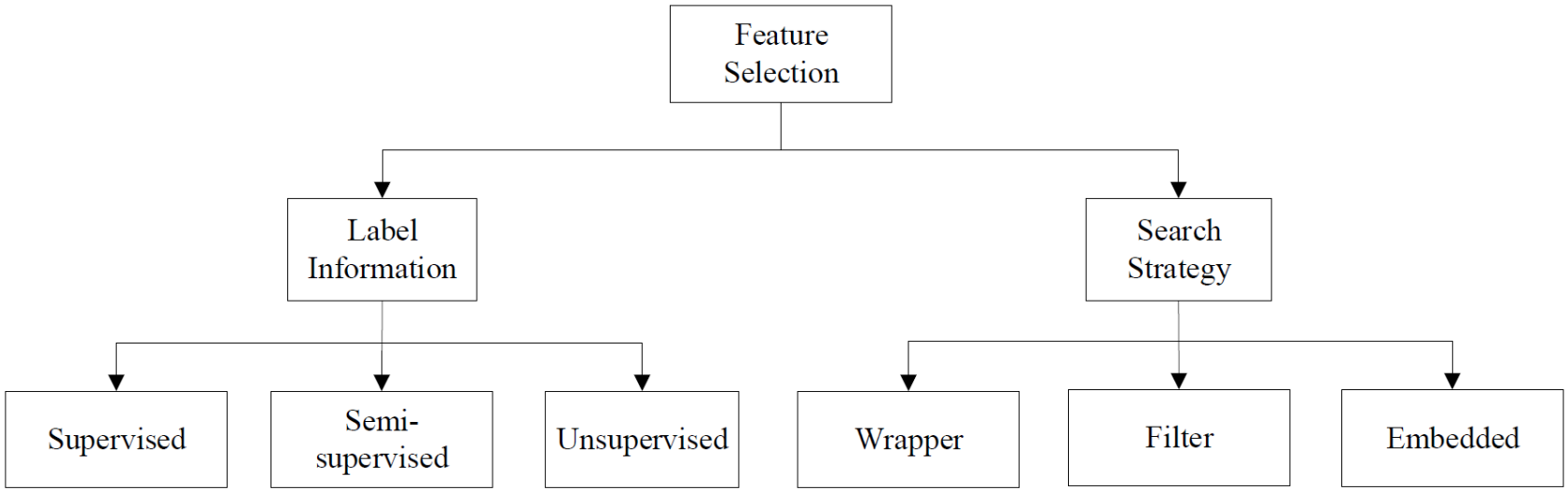
Критерий информативности относительно класса $c \in Y$:

$$I(p,n) \to \max_{J, \{a_j\}}; \quad \begin{cases} p(R) = \#\big\{ x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i=c \big\} \to \max \\ n(R) = \#\big\{ x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i \neq c \big\} \to \min \end{cases}$$

Информативность $I(p,n)$ имеет оптимум по сложности $|J|$, аналогично внешним критериям:

- слишком мало признаков $\Rightarrow$ большие n, низкая $I(p,n)$
- оптимально признаков $\Rightarrow$ малые n, большие p, высокая $I(p,n)$
- слишком много признаков $\Rightarrow$ малые $p+n$, низкая $I(p,n)$

Обзор подходов к отбору признаков



- Фильтры — оценивание признаков по отдельности
- Без учителя — например, по корреляциям признаков
- Встроенные методы, в некоторых моделях (LASSO, ElasticNet)

Jundong Li et al. Feature selection: a data perspective. 2016

Сколько информации об y содержится в f_j

$f_j : X \to V_j$ — дискретный признак, V_j — конечное множество
$p(v)$ — частотная оценка вероятности $P\big(f_j(x) = v\big)$

Энтропия, мера неопределённости значений y:

$$H(y) = -\sum_{y \in Y} p(y) \log p(y)$$

Условная энтропия, неопределённость y при известном f_j:

$$H(y|f_j) = -\sum_{v \in V_j} p(v) \sum_{y \in Y} p(y|v) \log p(y|v)$$

Взаимная информация (mutual information, information gain):

$$I(y, f_j) = H(y) - H(y|f_j) = \sum_{v \in V_j} \sum_{y \in Y} p(y, v) \log \frac{p(y, v)}{p(y)p(v)}$$

$I(y, f_j) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad$ переменные y и f_j независимы

Отбор признаков с учителем и без учителя

Отбор признаков с учителем:

- вычисление полезности признаков: MI или корреляции (y, f_j)
- ранжирование признаков по их полезности
- отбор top-k полезных признаков по выбранному критерию
- **плюс:** очень быстро
- **минус:** не учитываются зависимости между признаками

Отбор признаков без учителя:

- вычисление парных корреляций признаков (f_j, f_s)
- выделение кластеров или связных подграфов
- выбор представителей от каждого кластера
  (метод корреляционных плеяд П.В.Терентьева, 1928)
- **минус:** не учитываются зависимости между признаками

Отбор признаков в линейных моделях

Негладкие регуляризаторы с параметром селективности μ:

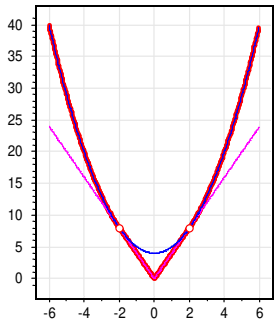
$$\sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(\langle x_i, w\rangle, y_i\big) + \tau \sum_{j=1}^{n} R_\mu(w_j) \;\to\; \min_w .$$

LASSO (L_1): $R_\mu(w) = \mu|w|$

Elastic Net: $R_\mu(w) = \mu|w| + w^2$

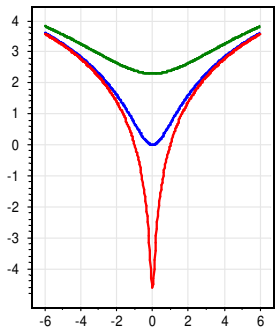
Support Features Machine (SFM):

$$R_\mu(w) = \begin{cases} 2\mu|w|, & |w| \leqslant \mu; \\ \mu^2 + w^2, & |w| \geqslant \mu; \end{cases}$$



Relevance Features Machine (RFM):

$$R_\mu(w) = \ln\big(\mu w^2 + 1\big)$$



Задача отбора признаков по внешнему критерию

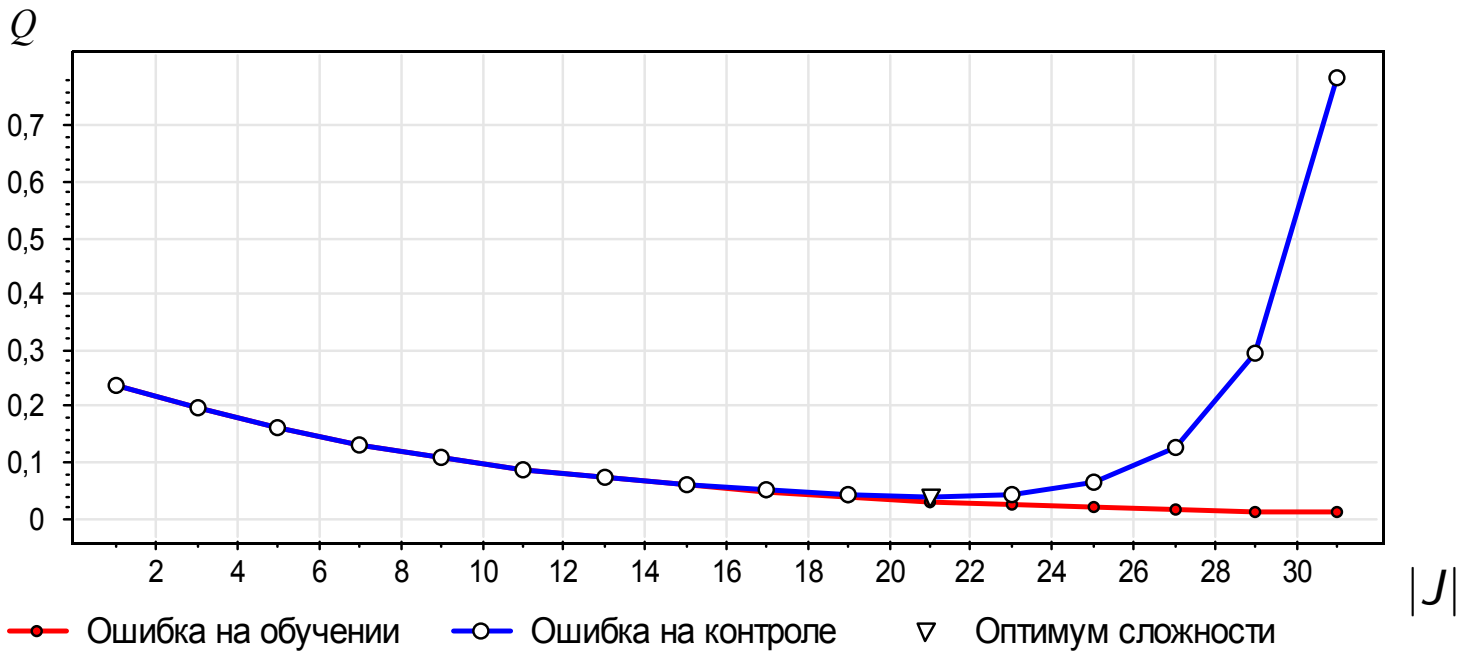
$F = \{f_j : X \to D_j : j = 1, \ldots, n\}$ — множество признаков;

μ_J — метод обучения, использующий только признаки $J \subseteq F$;

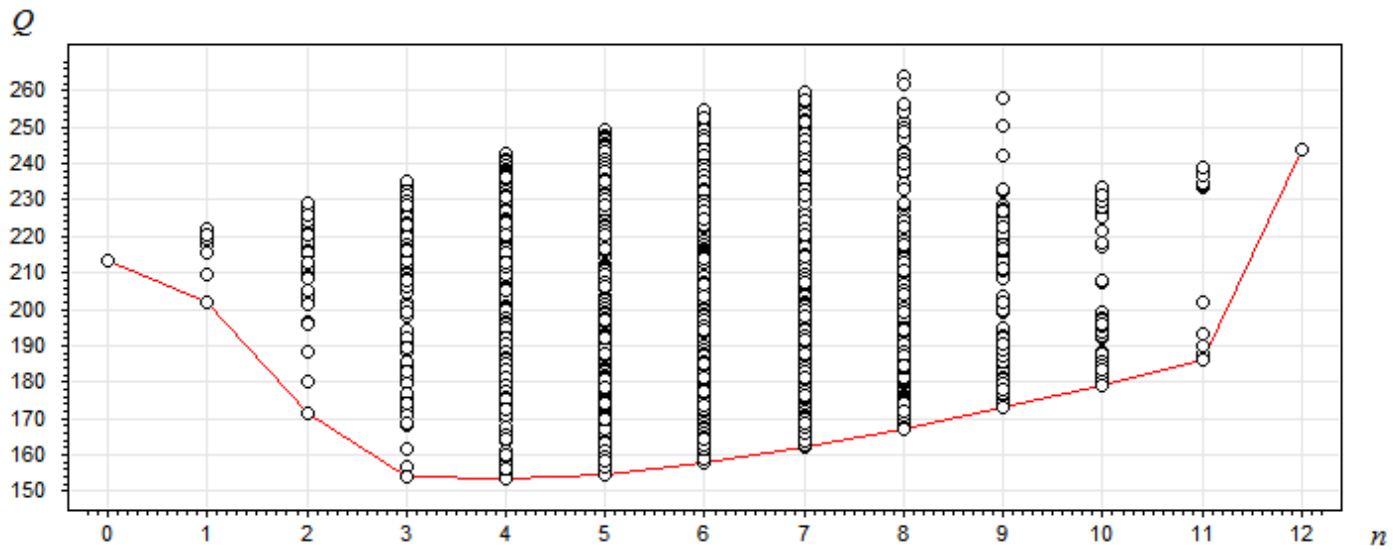
$Q(J) = Q(\mu_J, X^\ell)$ — выбранный внешний критерий.

$Q(J) \to \min$ — задача дискретной оптимизации.

Внутренний критерий и внешний критерий:



Алгоритм полного перебора (Full Search)



Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

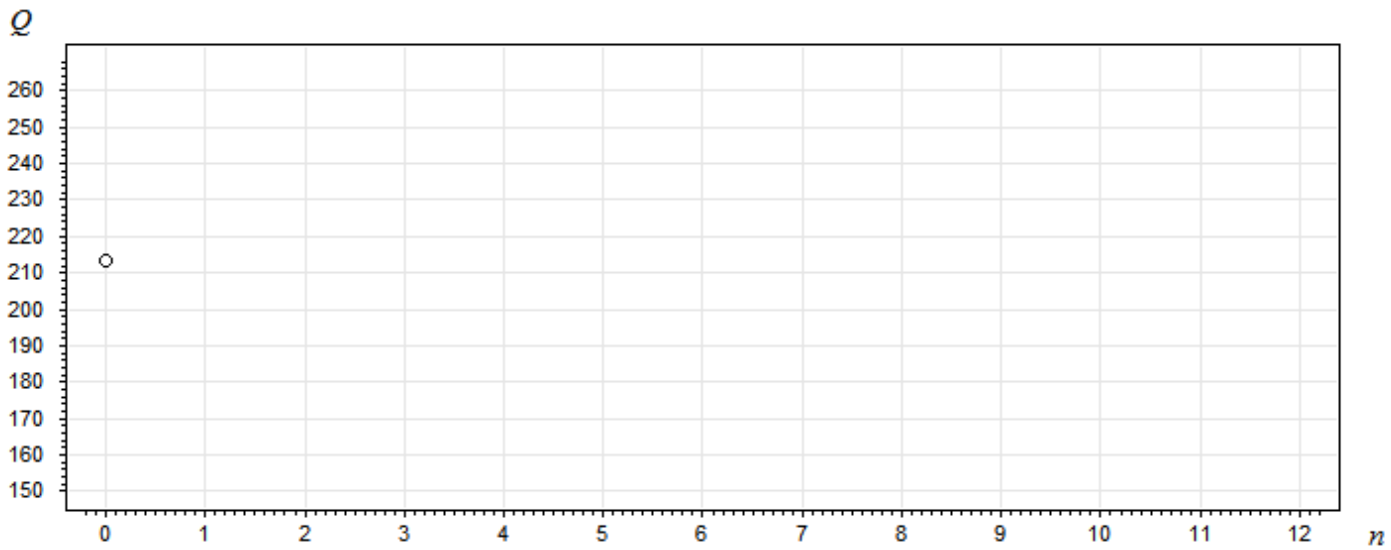
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 0$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

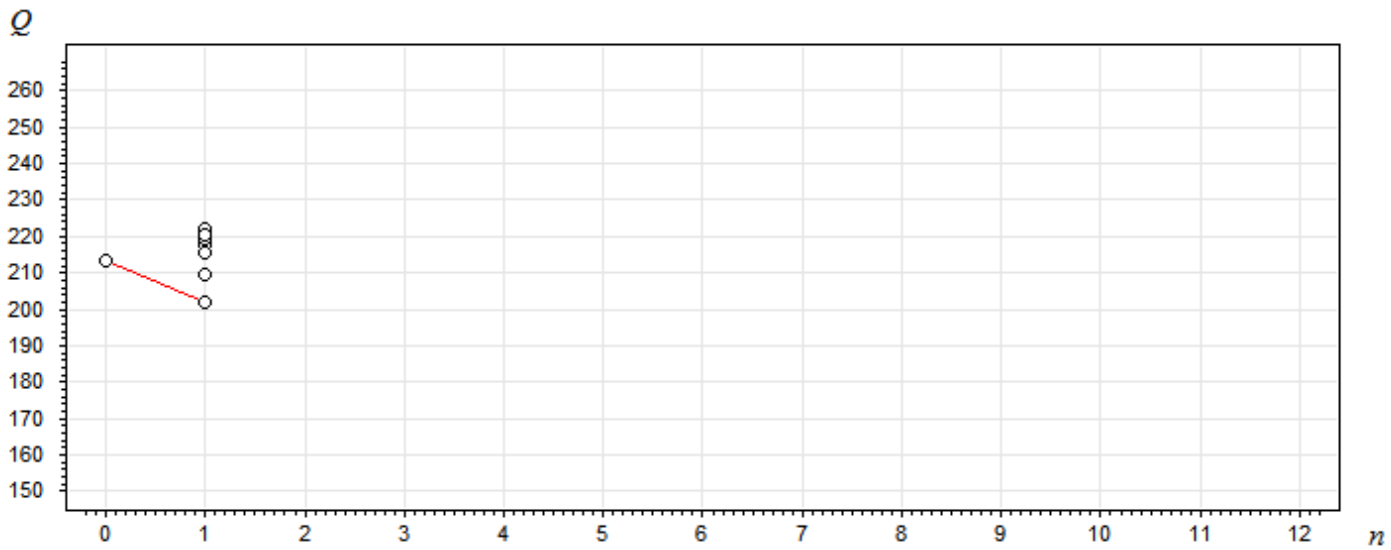
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 1$
$j^* = 1$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

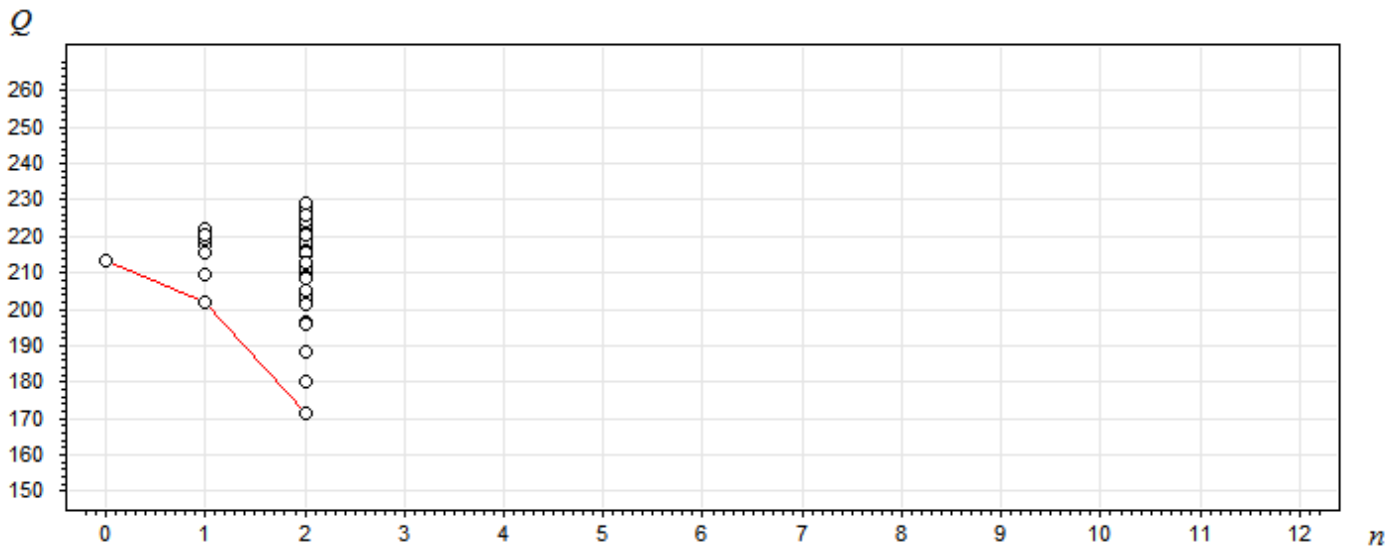
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 2$
$j^* = 2$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

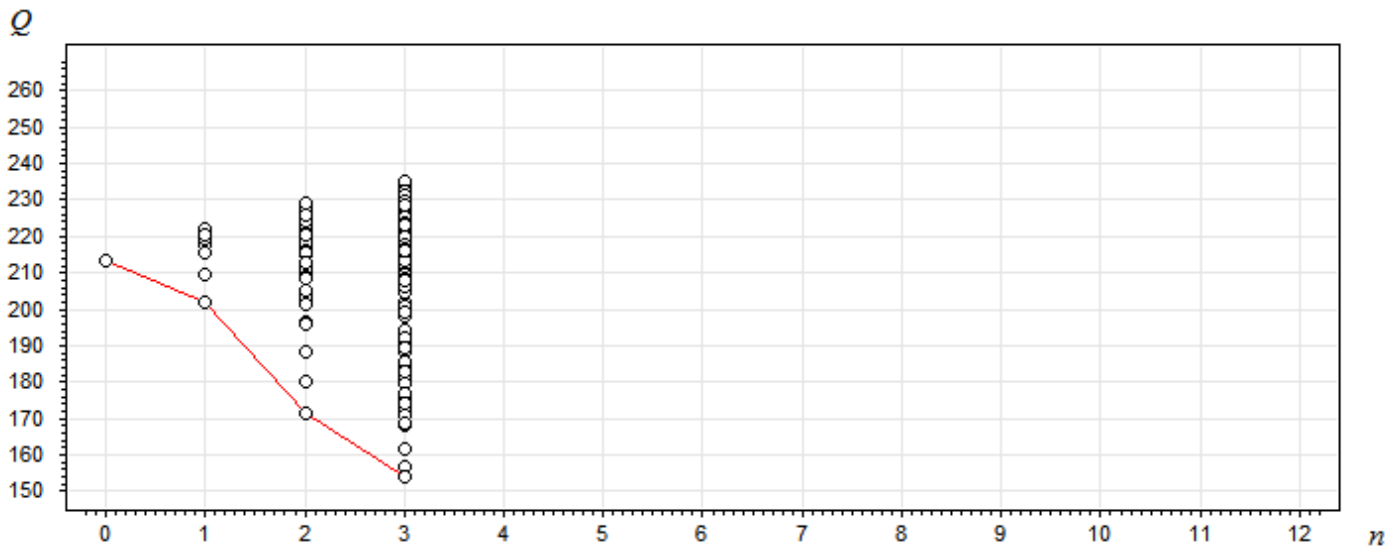
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 3$
$j^* = 3$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

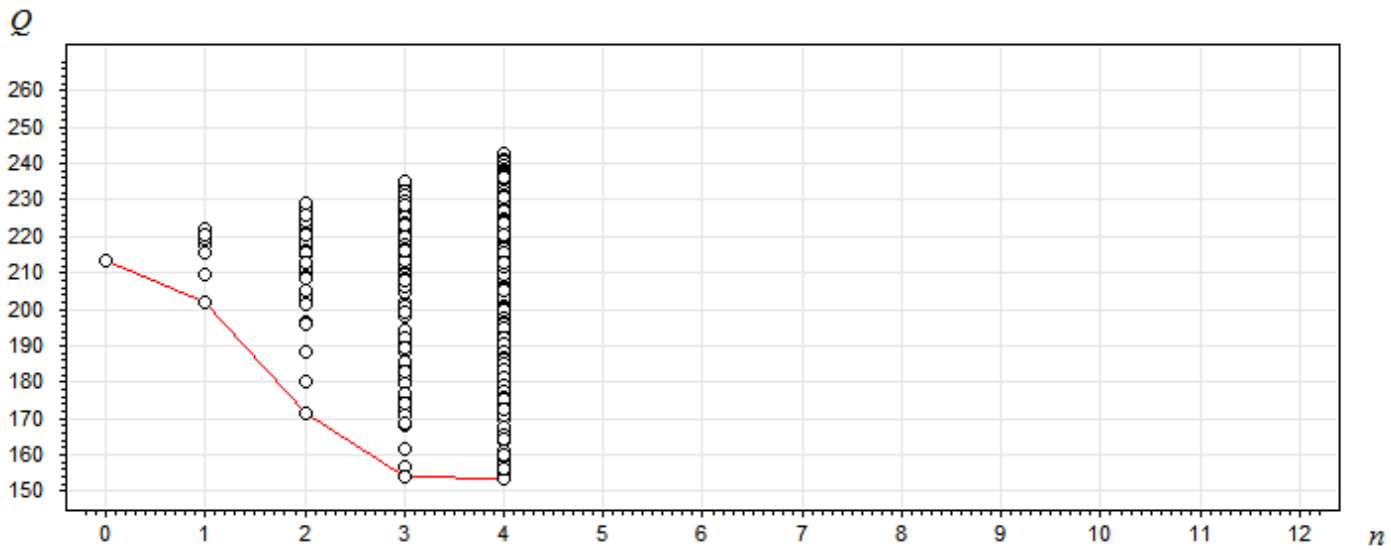
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 4$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

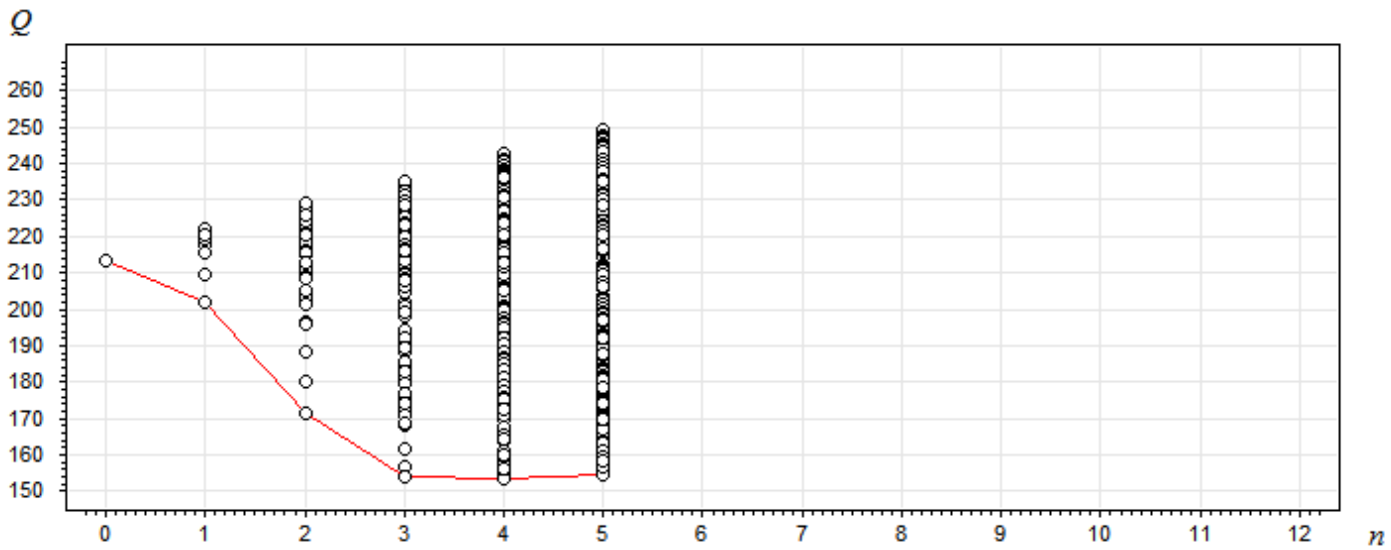
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 5$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

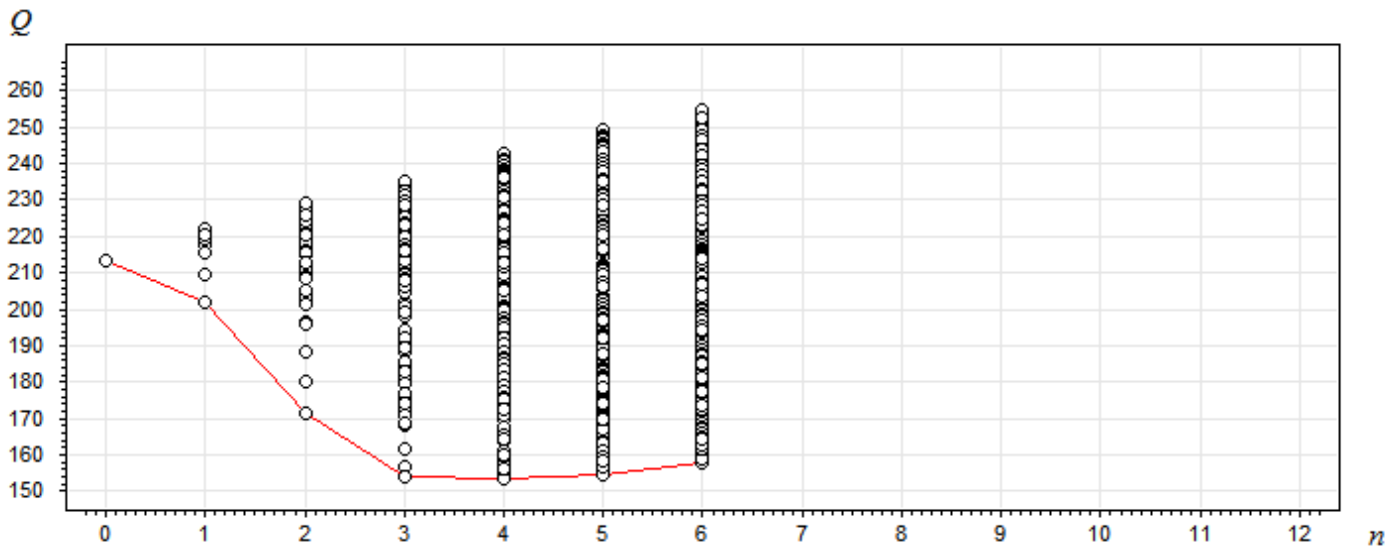
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 6$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

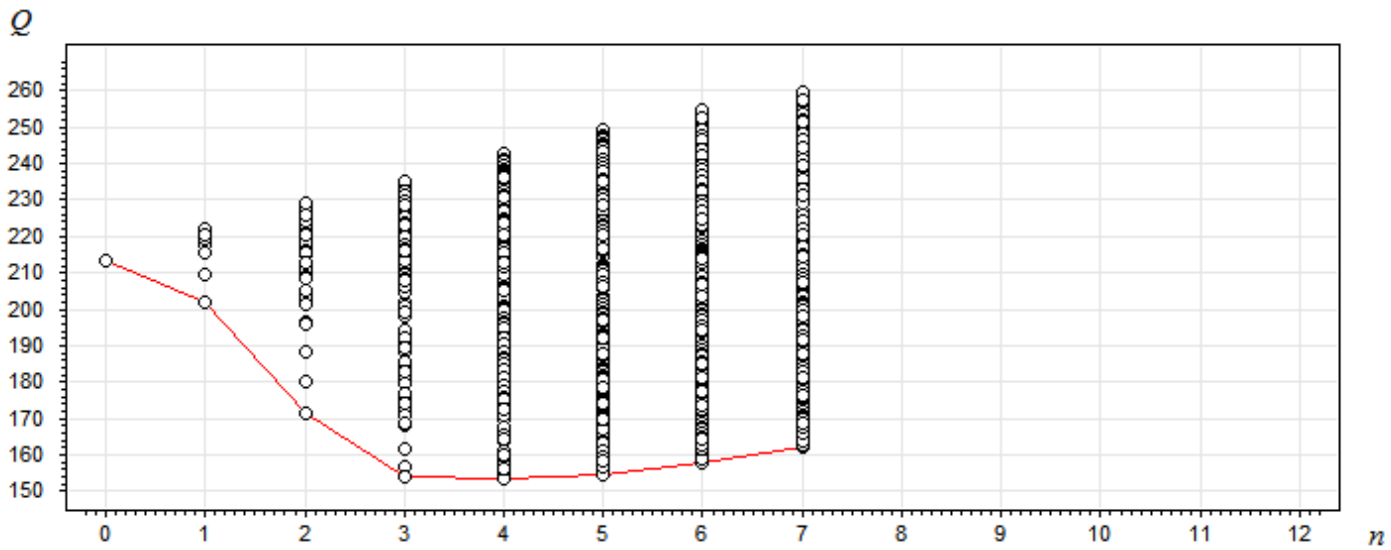
для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

  $J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

  если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

  если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)



$d = 3$
$j = 7$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $Q^* := Q(\varnothing)$;

для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов

$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$ — найти лучший набор сложности j;

если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

Преимущества:

- простота реализации;
- гарантированный результат;
- полный перебор эффективен, когда
  - информативных признаков не много, $j^* \lesssim 5$;
  - всего признаков не много, $n \lesssim 20..100$.

Недостатки:

- в остальных случаях ооооооочень долго — $O(2^n)$;
- чем больше перебирается вариантов, тем больше переобучение (особенно, если лучшие из вариантов существенно различны и одинаково плохи).

Способы устранения:

- эвристические методы сокращённого перебора.

Алгоритм жадного добавления (Add)

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

инициализация: $J_0 := \varnothing$; $Q^* := Q(\varnothing)$;

для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:

найти признак, наиболее выгодный для добавления:

$f^* := \arg\min_{f \in F \setminus J_{j-1}} Q\left(J_{j-1} \cup \{f\}\right)$;

добавить этот признак в набор:

$J_j := J_{j-1} \cup \{f^*\}$;

если $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;

если $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Преимущество: скорость $O(n^2)$, точнее $O(nj^*)$, вместо $O(2^n)$

Недостаток: склонность включать в набор лишние признаки

Способы устранения: Del, Add-Del, Beam Search

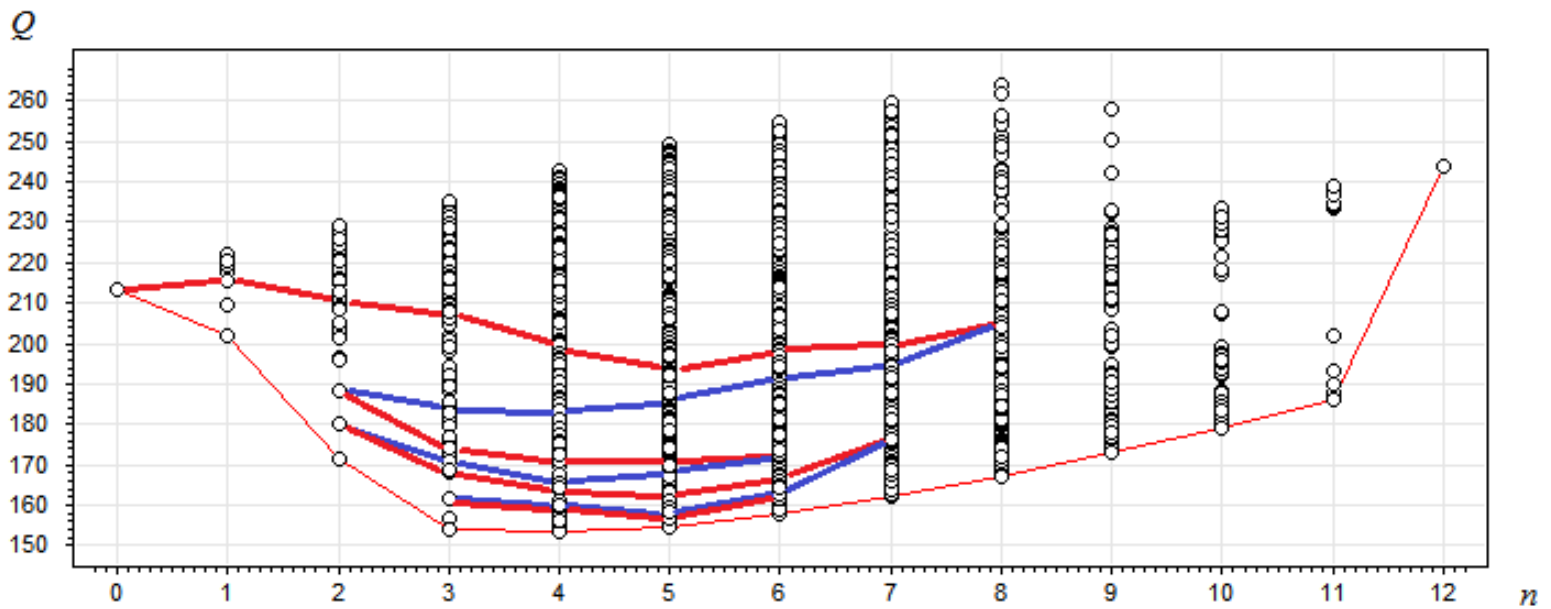
Алгоритм поочерёдного добавления и удаления (Add-Del)

Преимущества:

- как правило, лучше, чем Add и Del по отдельности;
- возможны быстрые инкрементные алгоритмы, пример — *шаговая регрессия* (step-wise regression).

Недостатки:

- работает дольше, оптимальность не гарантирует.



Алгоритм поочерёдного добавления и удаления (Add-Del)

инициализация: $J_0 := \varnothing$; $Q^* := Q(\varnothing)$; $t := 0$;

повторять

  пока $|J_t| < n$ добавлять признаки (итерации Add):

    $t := t + 1$ — началась следующая итерация;

    $f^* := \arg\min\limits_{f \in F \setminus J_{t-1}} Q\big(J_{t-1} \cup \{f\}\big)$; $J_t := J_{t-1} \cup \{f^*\}$;

    если $Q(J_t) < Q^*$ **то** $t^* := t$; $Q^* := Q(J_t)$;

    если $t - t^* \geqslant d$ **то прервать цикл**;

  пока $|J_t| > 0$ удалять признаки (итерации Del):

    $t := t + 1$ — началась следующая итерация;

    $f^* := \arg\min\limits_{f \in J_{t-1}} Q\big(J_{t-1} \setminus \{f\}\big)$; $J_t := J_{t-1} \setminus \{f^*\}$;

    если $Q(J_t) < Q^*$ **то** $t^* := t$; $Q^* := Q(J_t)$;

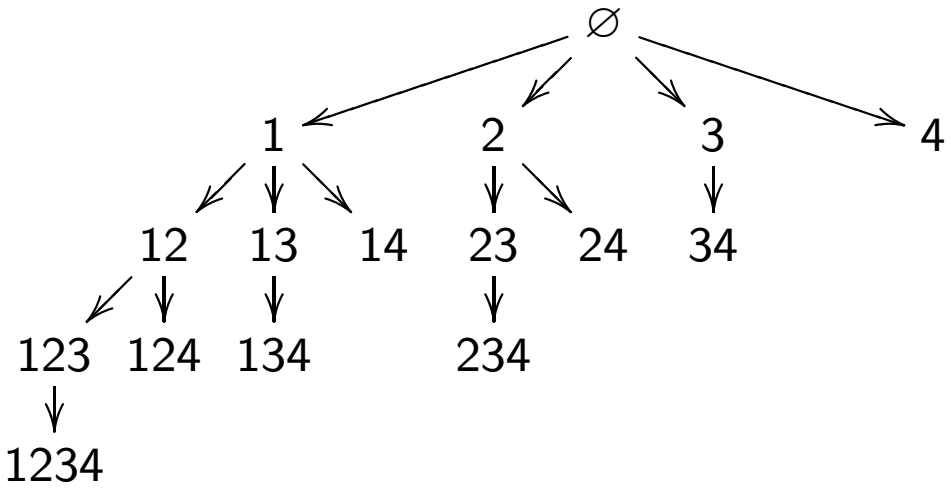
    если $t - t^* \geqslant d$ **то прервать цикл**;

пока значения критерия $Q(J_{t^*})$ уменьшаются;

вернуть J_{t^*};

Поиск в глубину (DFS, метод ветвей и границ)

Пример: дерево наборов признаков, $n = 4$



Основные идеи:

- нумерация признаков по возрастанию номеров — чтобы избежать повторов при переборе подмножеств;
- если набор J бесперспективен, то больше не пытаться его наращивать.

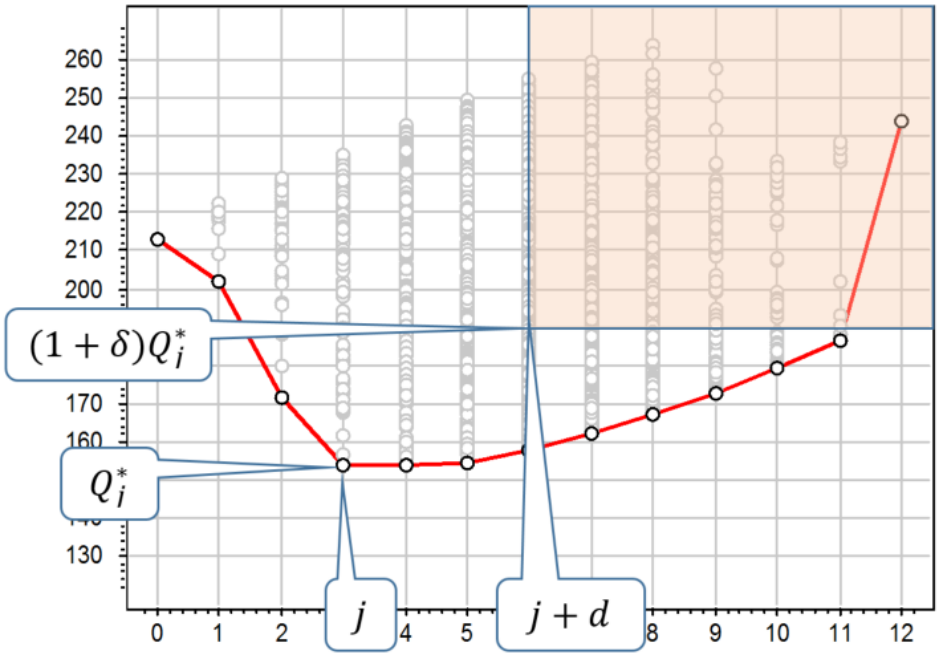
Поиск в глубину (DFS, метод ветвей и границ)

Обозначим Q_j^* — значение критерия на самом лучшем наборе мощности j из всех до сих пор просмотренных.

Оценка перспективности:
набор J не наращивается,
если найдётся j такой, что

$$\begin{cases} Q(J) \geqslant (1+\delta)Q_j^*; \\ |J| \geqslant j + d; \end{cases}$$

$d \geqslant 0$ и $\delta \geqslant 0$ — параметры.



Чем меньше d и δ, тем сильнее сокращается перебор.

Поиск в глубину (DFS, метод ветвей и границ)

Вход: множество F, критерий Q, параметры d и δ;

процедура *нарастить* $(J \subseteq F)$

  если найдётся j: $j \leqslant |J| - d$ и $Q(J) \geqslant (1+\delta)Q_j^*$, **то**

    набор J бесперспективный; **выход**;

  $Q_{|J|}^* := \min\{Q_{|J|}^*, Q(J)\}$;

  для всех $f_s \in F$ таких, что $s > \max\{t \mid f_t \in J\}$:

    нарастить $(J \cup \{f_s\})$;

инициализировать массив лучших значений критерия:

$Q_j^* := Q(\varnothing)$ для всех $j = 1, \ldots, n$;

упорядочить признаки по убыванию информативности;

нарастить $(\varnothing)$;

вернуть J, для которого $Q(J) = \min\limits_{j=1,\ldots,n} Q_j^*$;

Усечённый поиск в ширину (Beam Search)

Он же *многорядный итерационный алгоритм МГУА* (МГУА — метод группового учёта аргументов).

Философия — принцип *неокончательных решений* Габора: принимая решения, следует оставлять максимальную свободу выбора для принятия последующих решений.

Усовершенствуем алгоритм Add:
на каждой j-й итерации будем строить не один набор,
а множество из B_j наборов, называемое *j-м рядом*:

$$R_j = \{J_j^1, \ldots, J_j^{B_j}\}, \quad J_j^b \subseteq F, \quad |J_j^b| = j, \quad b = 1, \ldots, B_j.$$

где $B_j \leqslant B$ — параметр *ширины поиска*.

Ивахненко А. Г., Юрачковский Ю. П. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным, 1987.

Усечённый поиск в ширину (Beam Search)

Вход: множество F, критерий Q, параметры d, B;

первый ряд состоит из всех наборов длины 1:
$R_1 := \{\{f_1\}, \ldots, \{f_n\}\}$; $Q^* = Q(\varnothing)$;

для $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:

- отсортировать ряд $R_j = \{J_j^1, \ldots, J_j^{B_j}\}$
  по возрастанию критерия: $Q(J_j^1) \leqslant \ldots \leqslant Q(J_j^{B_j})$;
- **если** $B_j > B$ **то**
  - $R_j := \{J_j^1, \ldots, J_j^B\}$ — оставить B лучших наборов ряда;
- **если** $Q(J_j^1) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j^1)$;
- **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** $J_{j^*}^1$;
- породить следующий ряд:
  $R_{j+1} := \{J \cup \{f\} \mid J \in R_j,\ f \in F \setminus J\}$;

Усечённый поиск в ширину: дополнительные эвристики

- **Трудоёмкость:**
  $O(Bn^2)$, точнее $O(Bn(j^* + d))$.
- **Проблема дубликатов:**
  после сортировки $Q\left(J_j^1\right) \leqslant \ldots \leqslant Q\left(J_j^{B_j}\right)$ проверить на совпадение только соседние наборы с равными значениями внутреннего и внешнего критерия.
- **Адаптивный отбор признаков:**
  на последнем шаге добавлять к j-му ряду только признаки f с наибольшей информативностью $I_j(f)$:

$$I_j(f) = \sum_{b=1}^{B_j} [f \in J_j^b].$$

Эволюционный алгоритм поиска (идея и терминология)

$J \subseteq F$ — *индивид* (в МГУА «модель»);

$R_t := \left\{ J_t^1, \ldots, J_t^{B_t} \right\}$ — *поколение* (в МГУА — «ряд»);

$\beta = (\beta_j)_{j=1}^n$, $\beta_j = [f_j \in J]$ — *хромосома*, кодирующая J;

Бинарная операция *скрещивания* (crossover) $\beta = \beta' \times \beta''$:

- вариант 1: $\beta_j = \rho_j \beta'_j + (1 - \rho_j)\beta''_j$, $\rho_j \sim \text{uni}(0,1)$
- вариант 2: $\beta = (\beta'_1, \ldots, \beta'_s, \beta''_{s+1}, \ldots, \beta''_n)$, $s \sim \text{uni}(1, \ldots, n)$, надо задавать «естественное» ранжирование признаков

Унарная операция *мутации* $\beta = \sim\beta'$:

- $\beta_j = \rho_j(1 - \beta'_j) + (1 - \rho_j)\beta'_j$, $\rho_j \sim \text{bin}(p_m)$, где p_m — параметр *вероятности мутации*.

Эволюционный (генетический) алгоритм

Вход: множество F, критерий Q, параметры: d, p_m,
B — размер популяции, T — число поколений;

инициализировать случайную популяцию из B наборов:
$B_1 := B$; $R_1 := \left\{J_1^1, \ldots, J_1^{B_1}\right\}$; $Q^* := Q(\varnothing)$;
для $t = 1, \ldots, T$, где t — номер поколения:
- ранжирование индивидов: $Q(J_t^1) \leqslant \ldots \leqslant Q(J_t^{B_t})$;
- **если** $B_t > B$ **то** селекция: $R_t := \left\{J_t^1, \ldots, J_t^B\right\}$;
- **если** $Q(J_t^1) < Q^*$ **то** $t^* := t$; $Q^* := Q(J_t^1)$;
- **если** $t - t^* \geqslant d$ **то вернуть** $J_{t^*}^1$;
- породить $t{+}1$-е поколение путём скрещиваний и мутаций:
$R_{t+1} := \left\{\sim(J' \times J'') \;\middle|\; J', J'' \in R_t\right\} \cup R_t$;

Эвристики для управления процессом эволюции

- Увеличивать вероятности перехода признаков от более успешного родителя к потомку.
- Накапливать оценки информативности признаков. Чем более информативен признак, тем выше вероятность его включения в набор во время мутации.
- Применение совокупности критериев качества.
- Скрещивать только лучшие индивиды (элитаризм).
- Переносить лучшие индивиды в следующее поколение.
- В случае стагнации увеличивать вероятность мутаций.
- Параллельно выращивается несколько изолированных популяций (островная модель эволюции).

Обобщение: случайный поиск с адаптацией (СПА)

Вход: множество F, критерий Q, параметры: d,
B — размер популяции, T — число поколений;

равные вероятности признаков: $p_1 = \cdots = p_n := 1/n$;
инициализировать случайную популяцию из B_1 наборов:
$R_1 := \left\{ J_1^1, \ldots, J_1^{B_1} \sim \{p_1, \ldots, p_n\} \right\}$; $Q^* := Q(\varnothing)$;
для $t = 1, \ldots, T$, где t — номер поколения:
  ранжирование индивидов: $Q(J_t^1) \leqslant \ldots \leqslant Q(J_t^{B_t})$;
  если $B_t > B$ **то** селекция: $R_t := \left\{ J_t^1, \ldots, J_t^B \right\}$;
  если $Q(J_t^1) < Q^*$ **то** $t^* := t$; $Q^* := Q(J_t^1)$;
  если $t - t^* \geqslant d$ **то вернуть** $J_{t^*}^1$;
  увеличить p_j для признаков из лучших наборов;
  уменьшить p_j для признаков из худших наборов;
  породить $t{+}1$-е поколение из B_t наборов:
  $R_{t+1} := \left\{ J_{t+1}^1, \ldots, J_{t+1}^{B_t} \sim \{p_1, \ldots, p_n\} \right\} \cup R_t$;

Попытка обоснования. Теорема схемы

Схема — вектор $H = (h_1, \ldots, h_n)$, где $h_j \in \{0, 1, *\}$

$o(H)$ — *порядок схемы*, число не$*$ в схеме

$d(H)$ — *длина схемы*, расстояние между первым и последним не$*$, число мест, в которых кроссовер может нарушить схему

$f(H, t)$ — *степень приспособленности* схемы, среднее Q по всем векторам, подходящим под схему в поколении t

$\bar{f}(t) = f(*^n, t)$ — *средняя приспособленность* популяции

p_c — вероятность кроссовера (только второй вариант)

p_m — вероятность мутации

Теорема схемы [Холланд, 1975]

Число индивидов схемы H в популяции поколения t:

$$\mathrm{E}m(H, t+1) \geqslant m(H, t)\frac{f(H, t)}{\bar{f}(t)}\left(1 - p_c\frac{d(H)}{n-1} - p_m o(H)\right)$$

Интерпретация теоремы схемы

Число индивидов схемы H в популяции поколения t:

$$\mathrm{E}m(H,t+1) \geqslant m(H,t)\frac{f(H,t)}{\bar{f}(t)}\left(1-p_c\frac{d(H)}{n-1}-p_m o(H)\right)$$

- *Строительный блок* — схема H с низким порядком $o(H)$, короткой длиной $d(H)$, высокой приспособленностью $f(H,t)$
- Если приспособленность строительного блока выше средней в популяции, то число его индивидов будет расти экспоненциально в последующих популяциях
- **Гипотеза** (building block hypothesis): «строительные блоки объединяются, чтобы сформировать ещё лучшие блоки»

John Henry Holland. Adaptation in natural and artificial systems. 1992
David White. An overview of schema theory. 2014

Резюме. Методы отбора признаков

- Для отбора признаков могут использоваться любые эвристические методы дискретной оптимизации

$$Q(J) \to \min_{J \subseteq F}.$$

- $Q(J)$ должен быть внешним критерием, с характерным минимумом по сложности модели
- Большинство эвристик эксплуатируют две основные идеи:
  — признаки ранжируются по их полезности;
  — $Q(J)$ изменяется не сильно при малом изменении J.
- МГУА, ЭА и СПА очень похожи — на их основе можно изобретать новые «симбиотические» мета-эвристики.