Прикладной системный анализ IV

Часть 2. Классификация

Д.И.Пиршток

План занятия

Задачи классификации и регрессии

Подходы к моделированию

Теория принятия решений

Оценка результатов классификации

Задачи классификации и регрессии

Классификация: интуиция

Задача

Разработать алгоритм, позволяющий определить класс произвольного объекта из некоторго множества

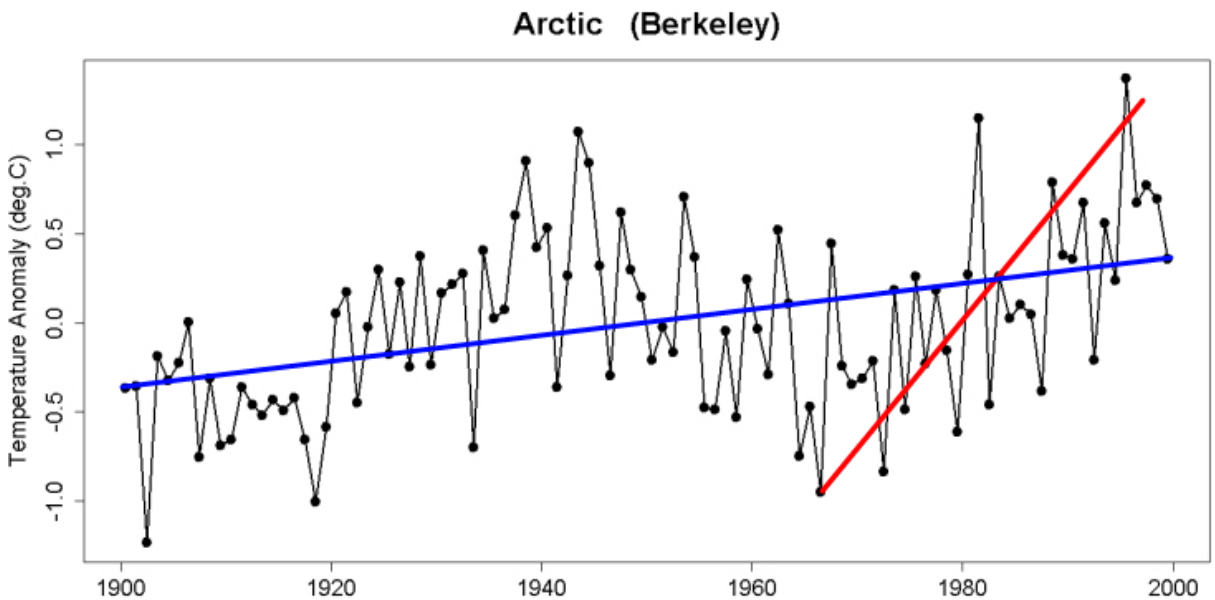
- Дана *обучающая выборка*, в которой для каждого объекта известен класс

Регрессия: интуиция

Задача

Разработать алгоритм, позволяющий предсказать числовую характеристику произвольного объекта из некоторого множества

- Дана *обучающая выборка*, в которой для каждого объекта известно значение числовой характеристики



Постановка задачи

Пусть дан набор объектов $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\},\ \mathbf{x}_i \in \mathcal{X},\ y_i \in \mathcal{Y},\ i \in 1, \ldots, N$, полученный из неизвестной закономерности $y = f(\mathbf{x})$. Необходимо выбрать из семейства параметрических функций

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathcal{Y}\}$$

такую $h^*(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta^*)$, которая наиболее точно апроксимирует $f(\mathbf{x})$.

Задачи

- Классификация: $|\mathcal{Y}| < C$
- Регрессия: $\mathcal{Y} = [a, b] \subset \mathbb{R}$

Как решать

M Выдвигаем гипотезу насчет **модели** - семейства параметрических функций вида

$$H = \{h(\mathbf{x}, \theta) : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathcal{Y}\},$$

которая могла бы решить нашу задачу (model selection)

L Выбираем наилучшие параметры модели θ^*, используя **алгоритм обучения**

$$A(X, Y) : (\mathcal{X}, \mathcal{Y})^N \to \Theta$$

(learning/inference)

D Используя полученную модель $h^*(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}, \theta^*)$, классифицируем неизвестные объекты (decision making)

Подходы к моделированию

Виды моделей

Генеративные модели. Смоделировать $p(\mathbf{x}|y_k)$ и $p(y_k)$, применить теорему Байеса

$$p(y_k|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|y_k)p(y_k)}{p(\mathbf{x})}$$

и использовать $p(y_k|\mathbf{x})$ для принятия решения
(NB, Bayes Networks, MRF)

Дискриминативные модели. Смоделировать $p(y_k|\mathbf{x})$ и использовать ее для принятия решения
(Logistic Regression, Decision Trees)

Функции решения. Смоделировать напрямую $h^*(\mathbf{x}) : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$
(Linear Models, Neural Networks)

Вероятностные модели VS Функции решения

- Отказ от классификации (reject option)
- Дисбаланс в выборке
- Ансамбли моделей
- Сильные предположения о природе данных
- Излишняя (вычислительная) сложность

Байесовский подход к моделированию

Идея. Вместо фиксированного, но неизвестного θ^* ищем апостериорное распределение $p(\theta|\mathcal{D})$
Дано. $p(y_i)$, $p(\theta)$, $p(\mathbf{x}|\theta)$

$$p(y_i|\mathbf{x},\mathcal{D}) = \frac{p(\mathbf{x}|y_i,\mathcal{D})p(y_i|\mathcal{D})}{\sum_j p(\mathbf{x}|y_j,\mathcal{D})p(y_j|\mathcal{D})} = \frac{p(\mathbf{x}|y_i,\mathcal{D})p(y_i)}{\sum_j p(\mathbf{x}|y_j,\mathcal{D})p(y_j)}$$

$$p(\mathbf{x}|y_i,\mathcal{D}) = \int p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta|\mathcal{D})d\theta$$

Апостериорное распределение

$$p(\theta|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\theta)p(\theta)}{\int p(\mathcal{D}|\theta)p(\theta)d\theta} = \frac{\prod_n p(\mathbf{x}_n|\theta)p(\theta)}{\int \prod_n p(\mathbf{x}_n|\theta)p(\theta)d\theta}$$

Обучение модели

$$\textit{LEARNING} = \textit{representation} + \textit{evaluation} + \textit{optimization}$$

Pedro Domingos

Evaluation – критерий, который оптимизируем

- эмпирический риск $\to$ min
- KL-дивергенция $\to$ min
- функция правдоподобия $\to$ max
- information gain $\to$ max

Optimization – как оптимизируем

- unconstrained (GD, Newton+)
- constrained (linear programming, quadratic programming)

Эмпирический риск

Функция потерь $\mathcal{L}(\mathbf{x}, y, \theta)$ - ошибка, которую для данного $\mathbf{x}$ дает модель $h(\mathbf{x}, \theta)$ по сравнению с реальным значением y

Эмпирический риск – средняя ошибка на обучающей выборке

$$Q(X, Y, \theta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(\mathbf{x}_n, y_n, \theta)$$

Задача – найти значение θ^*, минимизирующее эмпирический риск

$$\theta^* = \theta^*(X, Y) = \text{argmin}_\theta Q(X, Y, \theta)$$

Некоторые функции потерь

- Индикатор ошибки

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, y, \theta) = 0 \text{ if } h(\mathbf{x}, \theta) = y \text{ else } 1$$

- Функция Минковского

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, y, \theta) = |y - h(\mathbf{x}, \theta)|^q$$

Частные случаи: квадратичная $q = 2$, абсолютная ошибка $q = 1$

- Hinge

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, y, \theta) = \max(0, 1 - y \times h(\mathbf{x}, \theta))$$

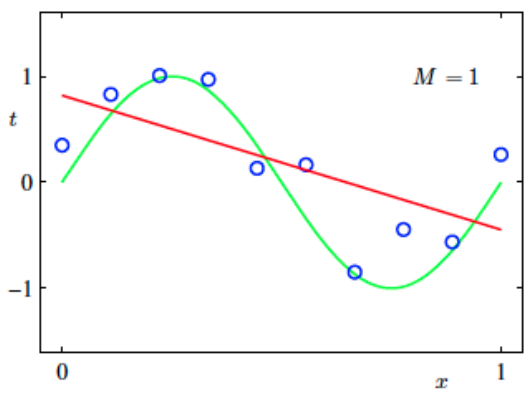
- Информационная

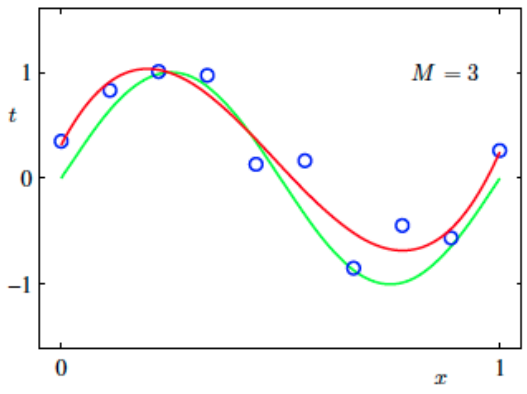
$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, y, \theta) = -\log_2 p(y|\mathbf{x}, \theta)$$

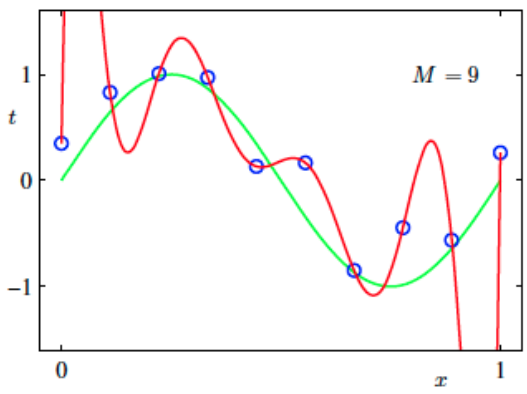
Проблема 1. Переобучение

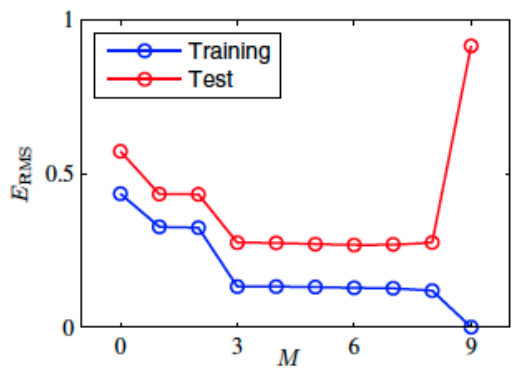
Задача

Аппроксимировать обучающую выборку полиномом M степени





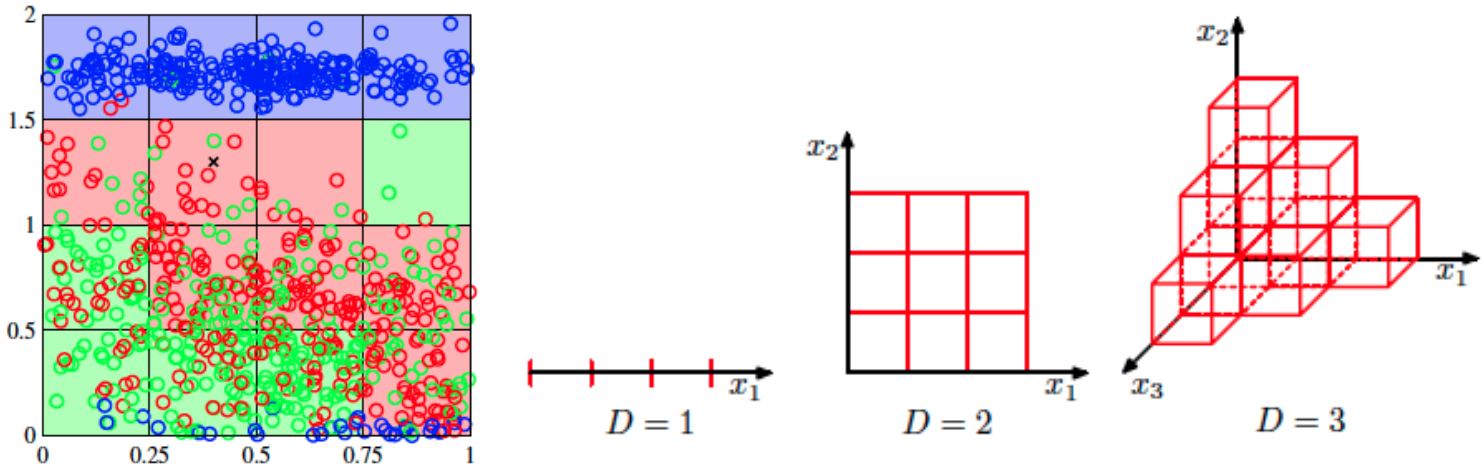




Проблема 2. Проклятие размерности

Задача

Классифицировать объекты.



Теория принятия решений

Классификация

Пусть
$\mathcal{R}_k$ – область, такая что все $\mathbf{x} \in \mathcal{R}_k$ относим к y_k
Дано
R_{kj} – риск, связанный с отнесением объекта класса y_k к классу y_j
Найти
$\forall k : \mathcal{R}_k$, такие, что математическое ожидание риска $E[R]$ минимально.

$$E[R] = \sum_k \sum_j \int_{\mathcal{R}_j} R_{kj} p(y_k|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) dx$$

Медицинская диагностика

Матрица риска $[R_{kj}]$

	sick	normal
sick	0	10
normal	1	0

Условные вероятности $p(y_k|x)$

$$p(\texttt{normal}|\texttt{moving}) = 0.9,\ p(\texttt{normal}|\texttt{not moving}) = 0.3$$

Вероятности $p(x)$

$$p(\texttt{moving}) = 0.7$$

Требуется определить $\mathcal{R}_{\texttt{sick}}$, $\mathcal{R}_{\texttt{normal}}$

Регрессия

Те же виды моделей: **генеративные**, **дискриминативные**, **функция решения**

Задана функция риска

$$R(y, h(\mathbf{x}))$$

Математическое ожидание $E[R]$

$$E[R] = \int\int R(y, h(\mathbf{x}))p(\mathbf{x}, y)d\mathbf{x}dy$$

Для квадратичной функции риска $R(y, h(\mathbf{x})) = [y - h(\mathbf{x})]^2$

$$h(x) = E_y[h|\mathbf{x}] = \int yp(y|\mathbf{x})dy$$

Оценка результатов классификации

Как оценить различные модели?

Идея

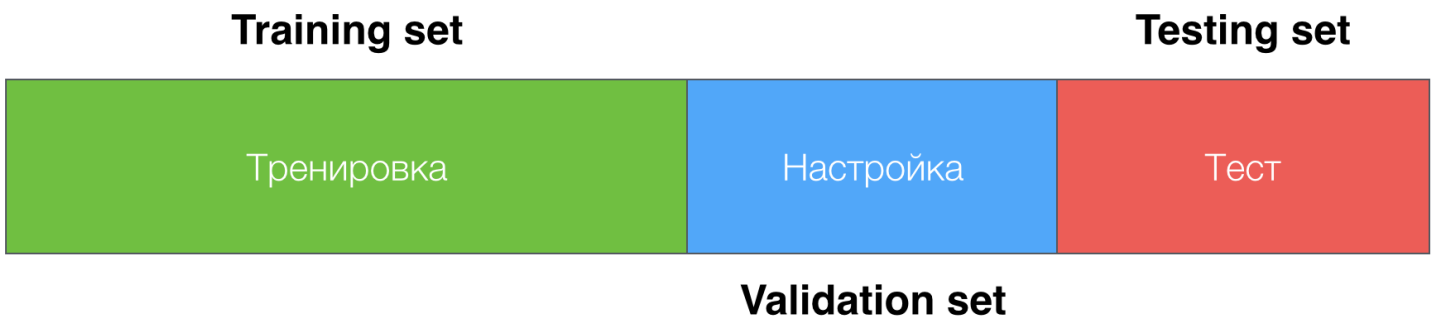
использовать долю неверно классифицированных объектов (error rate)

Важное замечание

error rate на обучающей выборке **НЕ** является хорошим показателем качества модели

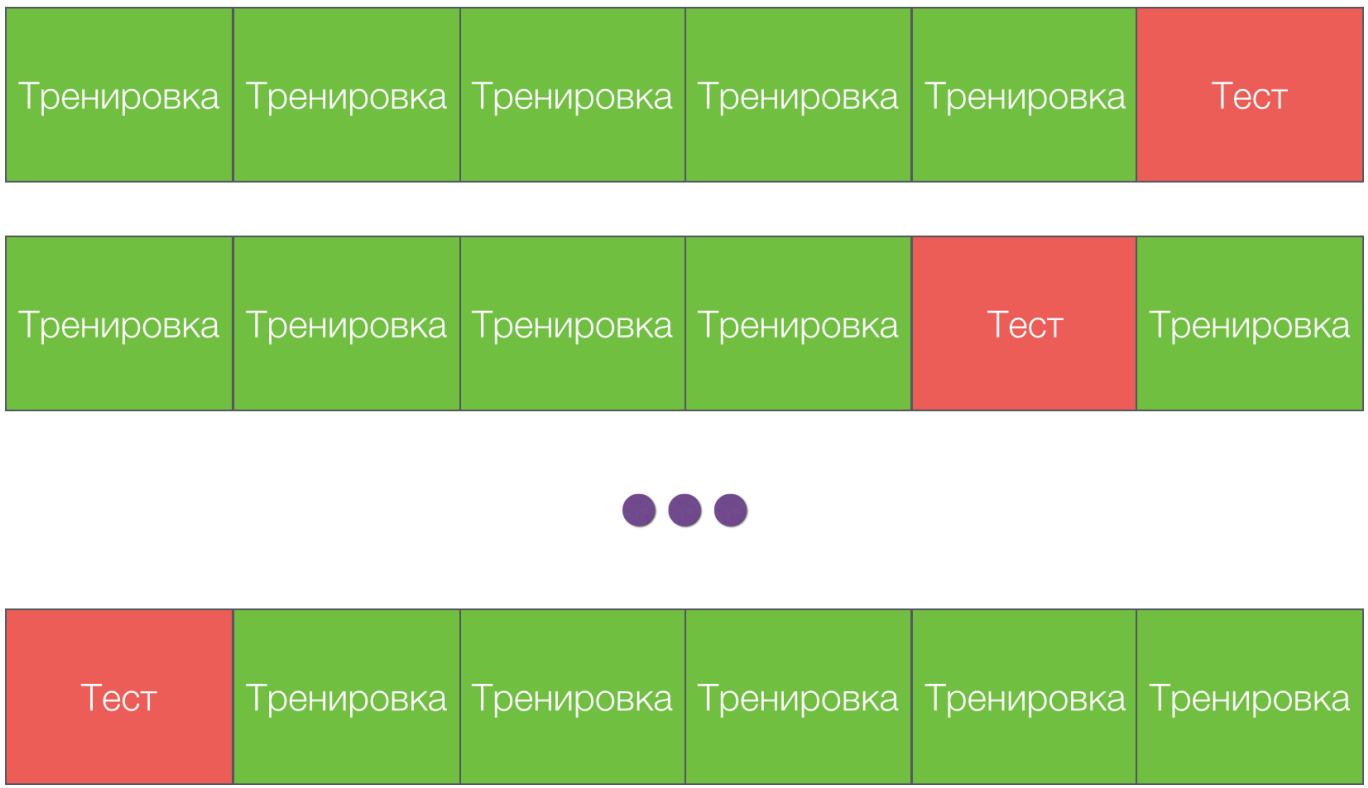
Решение 1: разделение выборки

Делим обучающую выборку на **тренировочную**, **валидационную** и **тестовую**



Решение 2: скользящий контроль

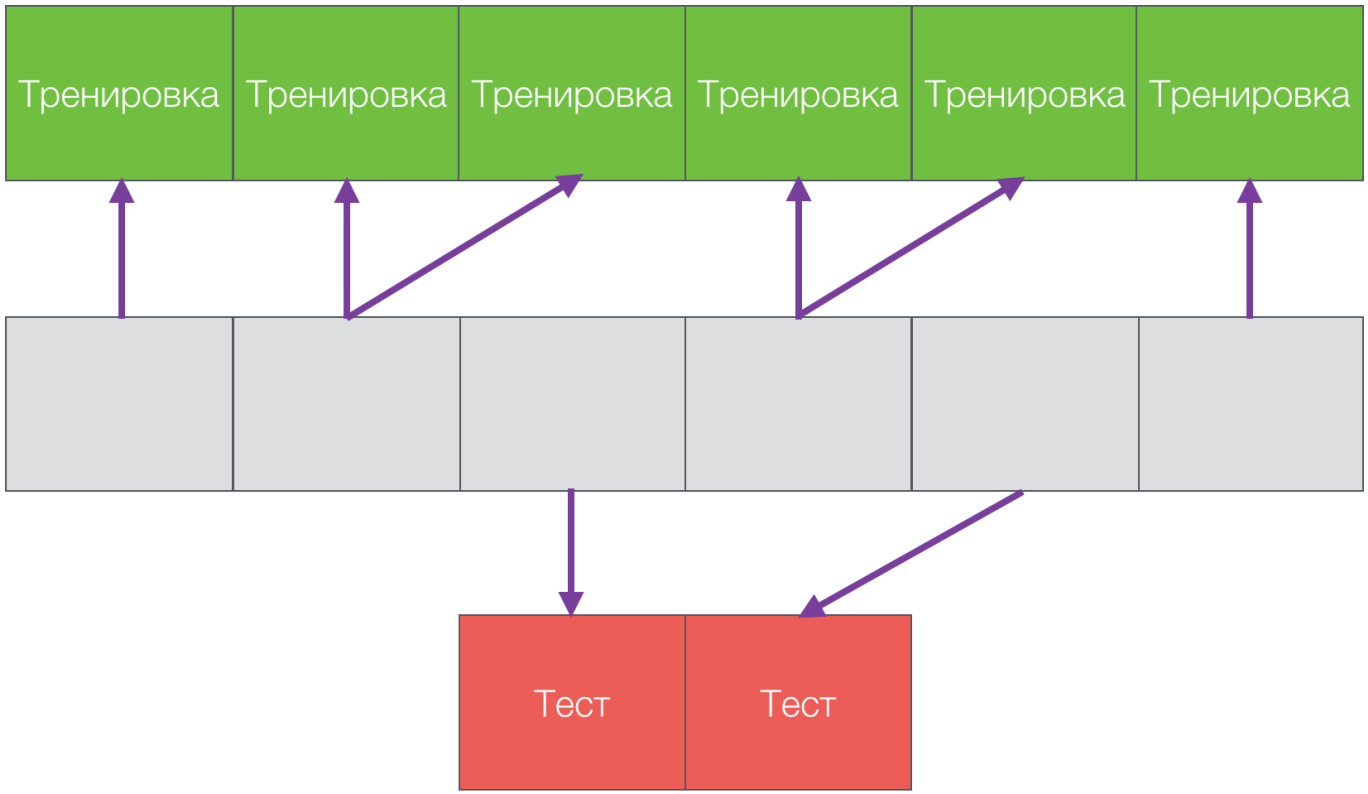
(n-times) (stratified) cross-validation



частный случай: leave-one-out

Решение 3: bootstrap

выбираем в тренировочную выбоку n объектов с возвращением



упражнение: найти математическое ожидание размера тестовой выборки.

Доверительный интервал для success rate

При тестировании на $N = 100$ объектах было получено 25 ошибок. Таким образом измеренная вероятность успеха (success rate) составила $f = 0.75$. Найти доверительный интервал для действительной вероятности успеха с уровнем доверия $\alpha = 0.8$.

Решение

Пусть p – действительная вероятность успеха в испытаниях бернулли, тогда

$$f \sim \mathcal{N}\left(p, p(1-p)/N\right).$$

Воспользовавшись табличным значением $P(-z \leq \mathcal{N}(0,1) \leq z) = \alpha$, имеем

$$P\left(-z \leq \frac{f-p}{\sqrt{p(1-p)/N}} \leq z\right) = \alpha,$$

откуда

$$p \in \left(f + \frac{z^2}{2N} \pm z\sqrt{\frac{f}{N} - \frac{f^2}{N} + \frac{z^2}{4N^2}}\right) / \left(1 + \frac{z^2}{N}\right) = [0.69, 0.80]$$

Метрики качества. Вероятностные модели.

Пусть y_i - действительный класс для объекта $\mathbf{x}_i$

- Information loss
$$-\frac{1}{N}\sum_i \log_2 p(y_i|\mathbf{x}_i)$$
- Quadratic loss
$$\frac{1}{N}\sum_j (p(y_j|\mathbf{x}_i) - a_j(\mathbf{x}_i))^2,$$

  где
$$a_j(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1, \text{ если } C_j = y_i \\ 0, \text{ иначе} \end{cases}$$

Метрики качества. Функции решения.

		Предсказанный	
		true	**false**
Действительный	**true**	TP	FN
	false	FP	TN

$$success\ rate = accuracy = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN}$$

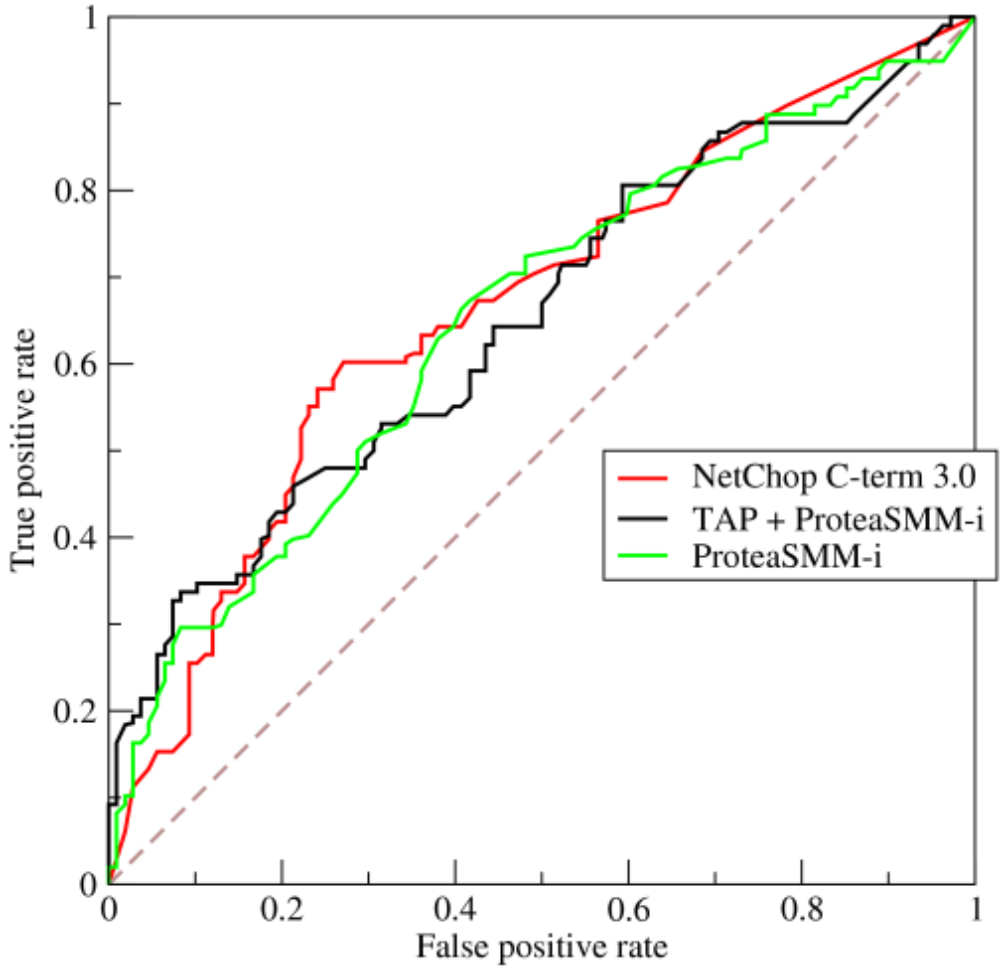
$$recall = TPR = \frac{TP}{TP + FN}; \quad precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

$$affinity = lift = \frac{accuracy}{p}$$

Receiver Operating Characteristic

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}; \quad FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$



Упражнение

Простые классификаторы

В генеральной совокупности существуют объекты 3 классов, вероятность появления которых $p_1 < p_2 < p_3$. Первый классификатор относит все объекты к классу с большей вероятностью (то есть к третьему). Второй классификатор случайно относит объект к одному из классов в соответствии с базовым распределением. Рассчитать precision и recall, которые эти классификаторы дают для каждого из 3 классов.

Метрики качества. Регрессия

$$MSE = \frac{1}{N}\sum(h(\mathbf{x}_i) - y_i)^2, \quad RMSE = \sqrt{MSE}$$

$$MAE = \frac{1}{N}\sum|h(\mathbf{x}_i) - y_i|, \quad RMAE = \sqrt{MAE}$$

$$RSE = \frac{\sum(h(\mathbf{x}_i) - y_i)^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

$$correlation = \frac{S_{hy}}{\sqrt{S_h S_y}}; \quad S_{yh} = \frac{\sum(h(i) - \overline{h(i)})(y_i - \bar{y})}{N-1}$$

$$S_h = \frac{\sum(h(i) - \overline{h(i)})^2}{N-1}; \quad S_y = \frac{\sum(y_i - \bar{y})^2}{N-1}$$

NFLT, MDL, AIC и все такое

No free lunch theorem

Не существует единственной лучшей модели, решающей все задачи

Minimum description length

Лучшая гипотеза о данных – та, которая ведет к самому краткому их описанию

Akaike information criterion (AIC)

$$model = \arg\max \ln p(\mathcal{D}|\theta_{ML}) - \|\theta\|$$