Оценивание качества классификации
Обобщающая способность
Методы отбора признаков

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

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: http://shad.yandex.ru/lectures

ШАД Яндекс • 10 марта 2020

Содержание

Анализ ошибок классификации

Задача классификации на два класса, $y_i \in \{-1, +1\}$.
Алгоритм классификации $a(x_i) \in \{-1, +1\}$

	ответ классификатора	правильный ответ
TP, True Positive	$a(x_i) = +1$	$y_i = +1$
TN, True Negative	$a(x_i) = -1$	$y_i = -1$
FP, False Positive	$a(x_i) = +1$	$y_i = -1$
FN, False Negative	$a(x_i) = -1$	$y_i = +1$

Доля правильных классификаций (чем больше, тем лучше):

$$\text{Accuracy} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\big[a(x_i) = y_i\big] = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{FP} + \text{FN} + \text{TP} + \text{TN}}$$

Недостаток: не учитывается ни численность (дисбаланс) классов, ни цена ошибки на объектах разных классов.

Функции потерь, зависящие от штрафов за ошибку

Задача классификации на два класса, $y_i \in \{-1, +1\}$.
Модель классификации: $a(x; w, w_0) = \text{sign}\big(g(x, w) - w_0\big)$.
Чем больше w_0, тем больше x_i таких, что $a(x_i) = -1$.

Пусть λ_y — штраф за ошибку на объекте класса y.
Функция потерь теперь зависит от штрафов:

$$\mathscr{L}(a, y) = \lambda_{y_i}\big[a(x_i; w, w_0) \neq y_i\big] = \lambda_{y_i}\big[(g(x_i, w) - w_0)y_i < 0\big].$$

Проблема

На практике штрафы $\{\lambda_y\}$ могут пересматриваться

- Нужен удобный способ выбора w_0 в зависимости от $\{\lambda_y\}$, не требующий построения w заново.
- Нужна характеристика качества модели $g(x, w)$, не зависящая от штрафов $\{\lambda_y\}$ и численности классов.

Определение ROC-кривой

Кривая ошибок ROC (receiver operating characteristic).
Каждая точка кривой соответствует некоторому $a(x; w, w_0)$.

- по оси X: доля *ошибочных положительных классификаций* (FPR — false positive rate):

$$\mathrm{FPR}(a, X^\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a(x_i; w, w_0) = +1]}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1]};$$

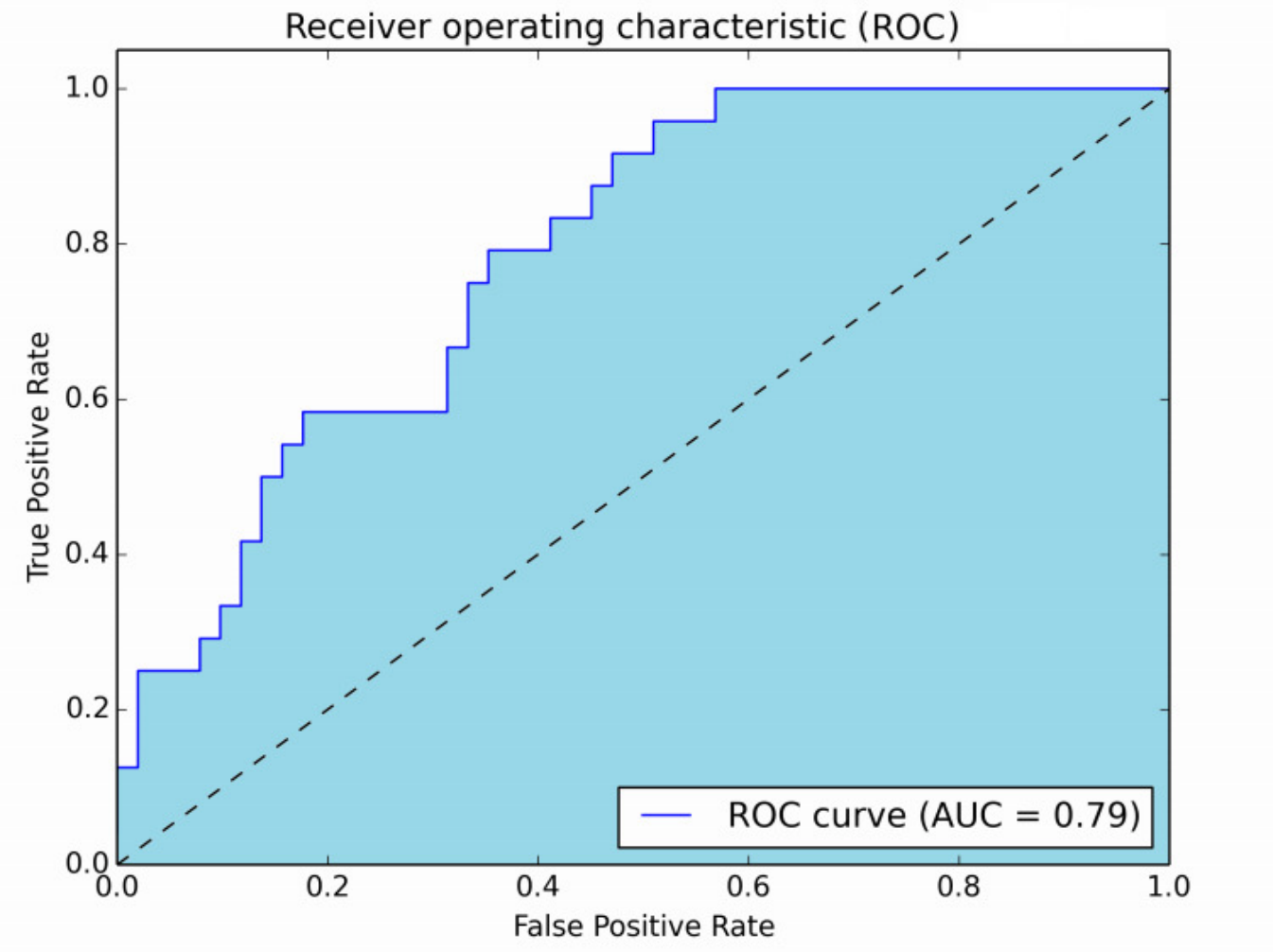
  $1 - \mathrm{FPR}(a)$ называется *специфичностью* алгоритма a.

- по оси Y: доля *правильных положительных классификаций* (TPR — true positive rate):

$$\mathrm{TPR}(a, X^\ell) = \frac{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a(x_i; w, w_0) = +1]}{\sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1]};$$

  $\mathrm{TPR}(a)$ называется также *чувствительностью* алгоритма a.

Пример ROC-кривой



Пример из Python scikits learn: `http://scikit-learn.org/dev`

Алгоритм эффективного построения ROC-кривой

Вход: выборка X^ℓ; дискриминантная функция $g(x, w)$;

Выход: $\{(\mathrm{FPR}_i, \mathrm{TPR}_i)\}_{i=0}^{\ell}$, AUC — площадь под ROC-кривой

$\ell_y := \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y]$, для всех $y \in Y$;

упорядочить выборку X^ℓ по убыванию значений $g(x_i, w)$;

поставить первую точку в начало координат:

$(\mathrm{FPR}_0, \mathrm{TPR}_0) := (0, 0)$; $\mathrm{AUC} := 0$;

для $i := 1, \ldots, \ell$

- **если** $y_i = -1$ **то**
  - $\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_-}$; $\mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1}$;
  - $\mathrm{AUC} := \mathrm{AUC} + \frac{1}{\ell_-}\mathrm{TPR}_i$;
- **иначе**
  - $\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1}$; $\mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_+}$;

Градиентная максимизация AUC

Модель: $a(x_i, w, w_0) = \text{sign}\big(g(x_i, w) - w_0\big)$.

AUC — это доля правильно упорядоченных пар (x_i, x_j):

$$\text{AUC}(w) = \frac{1}{\ell_-}\sum_{i=1}^{\ell}\big[y_i = -1\big]\text{TPR}_i = \\ = \frac{1}{\ell_-\ell_+}\sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}\big[y_i < y_j\big]\big[g(x_i, w) < g(x_j, w)\big] \to \max_w.$$

Явная максимизация аппроксимированного AUC:

$$1 - \text{AUC}(w) \leqslant Q(w) = \sum_{i,j:\, y_i<y_j} \mathscr{L}\big(\underbrace{g(x_j, w) - g(x_i, w)}_{M_{ij}(w)}\big) \to \min_w,$$

где $\mathscr{L}(M)$ — убывающая функция отступа,

$M_{ij}(w)$ — новое понятие отступа для пар объектов.

Алгоритм SG для максимизации AUC

Возьмём для простоты линейный классификатор:

$$g(x,w) = \langle x, w\rangle, \qquad M_{ij}(w) = \langle x_j - x_i, w\rangle, \qquad y_i < y_j.$$

Вход: выборка X^ℓ, темп обучения h, темп забывания λ;
Выход: вектор весов w;

инициализировать веса w_j, $j = 0, \ldots, n$;
инициализировать оценку: $\bar{Q} := \frac{1}{\ell_+\ell_-} \sum_{i,j} [y_i < y_j]\, \mathscr{L}(M_{ij}(w))$;

повторять
  выбрать пару объектов (i,j): $y_i < y_j$, случайным образом;
  вычислить потерю: $\varepsilon_{ij} := \mathscr{L}(M_{ij}(w))$;
  сделать градиентный шаг: $w := w - h\,\mathscr{L}'(M_{ij}(w))(x_j - x_i)$;
  оценить функционал: $\bar{Q} := (1-\lambda)\bar{Q} + \lambda\varepsilon_{ij}$;
пока значение $\bar{Q}$ и/или веса w не сойдутся;

Логарифм правдоподобия, log-loss

Вероятностная модель классификации, $y_i \in \{-1, +1\}$:

$$g(x, w) = \mathrm{P}(y = +1|x, w).$$

Проблема: ROC и AUC инвариантны относительно монотонных преобразований дискриминантной функции $g(x, w)$.

Критерий логарифма правдоподобия (log-loss):

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1] \ln g(x, w) + [y_i = -1] \ln\big(1 - g(x, w)\big) \to \max_w$$

Вероятностная модель многоклассовой классификации:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \mathrm{P}(y|x, w);$$

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln \mathrm{P}(y_i|x_i, w) \to \max_w$$

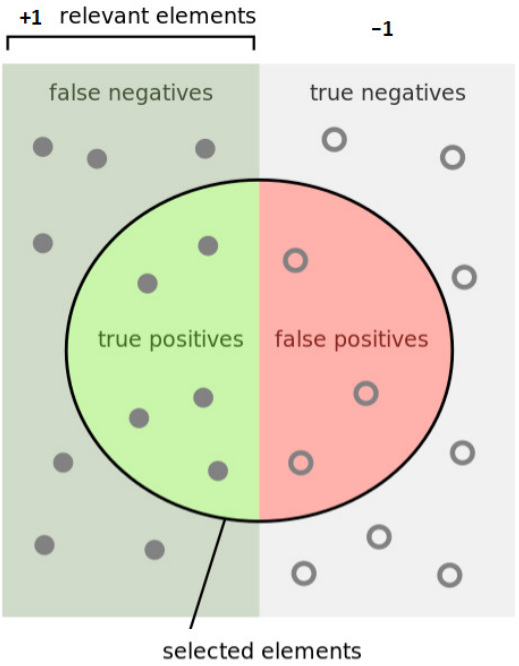
Оценки качества двухклассовой классификации

В информационном поиске:

$$\text{Точность, Precision} = \frac{TP}{TP+FP}$$

$$\text{Полнота, Recall} = \frac{TP}{TP+FN}$$

Precision — доля релевантных среди найденных
Recall — доля найденных среди релевантных

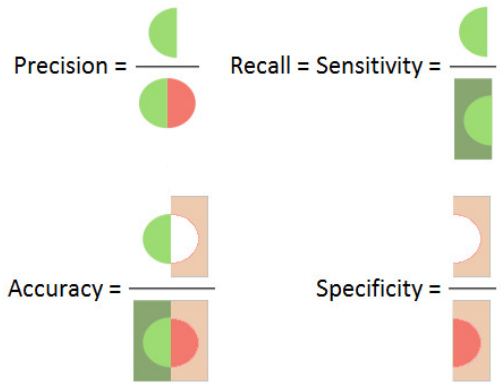


В медицинской диагностике:

$$\text{Чувствительность, Sensitivity} = \frac{TP}{TP+FN}$$

$$\text{Специфичность, Specificity} = \frac{TN}{TN+FP}$$

Sensitivity — доля верных положительных диагнозов
Specificity — доля верных отрицательных диагнозов



Точность и полнота многоклассовой классификации

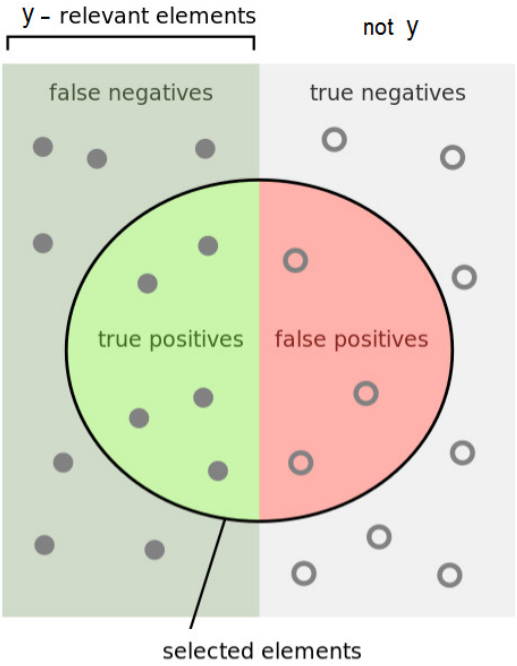
Для каждого класса $y \in Y$:
TP_y — верные положительные
FP_y — ложные положительные
FN_y — ложные отрицательные

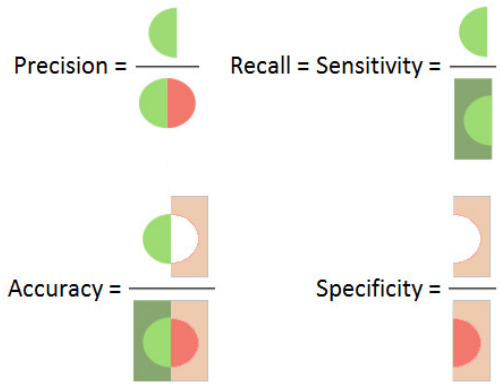
Точность и полнота с микроусреднением:

$$\text{Precision: } P = \frac{\sum_y \mathrm{TP}_y}{\sum_y (\mathrm{TP}_y + \mathrm{FP}_y)};$$

$$\text{Recall: } R = \frac{\sum_y \mathrm{TP}_y}{\sum_y (\mathrm{TP}_y + \mathrm{FN}_y)};$$

Микроусреднение не чувствительно к ошибкам на малочисленных классах





Точность и полнота многоклассовой классификации

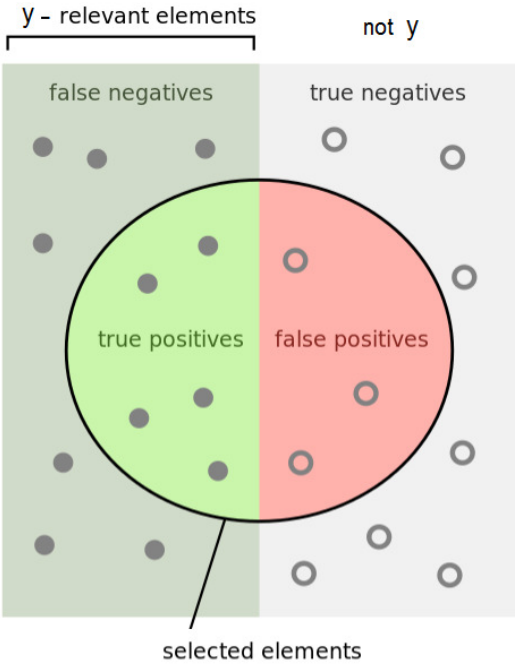
Для каждого класса $y \in Y$:
TP_y — верные положительные
FP_y — ложные положительные
FN_y — ложные отрицательные

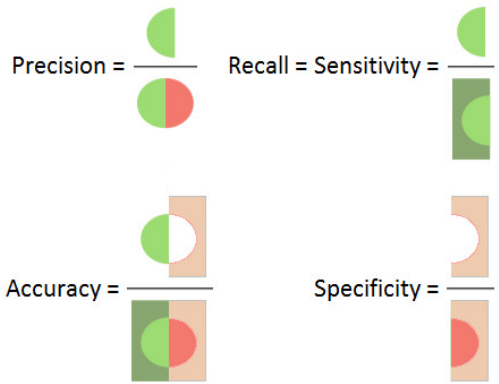
Точность и полнота с макроусреднением:

$$\text{Precision: } P = \frac{1}{|Y|}\sum_y \frac{\mathrm{TP}_y}{\mathrm{TP}_y + \mathrm{FP}_y};$$

$$\text{Recall: } R = \frac{1}{|Y|}\sum_y \frac{\mathrm{TP}_y}{\mathrm{TP}_y + \mathrm{FN}_y};$$

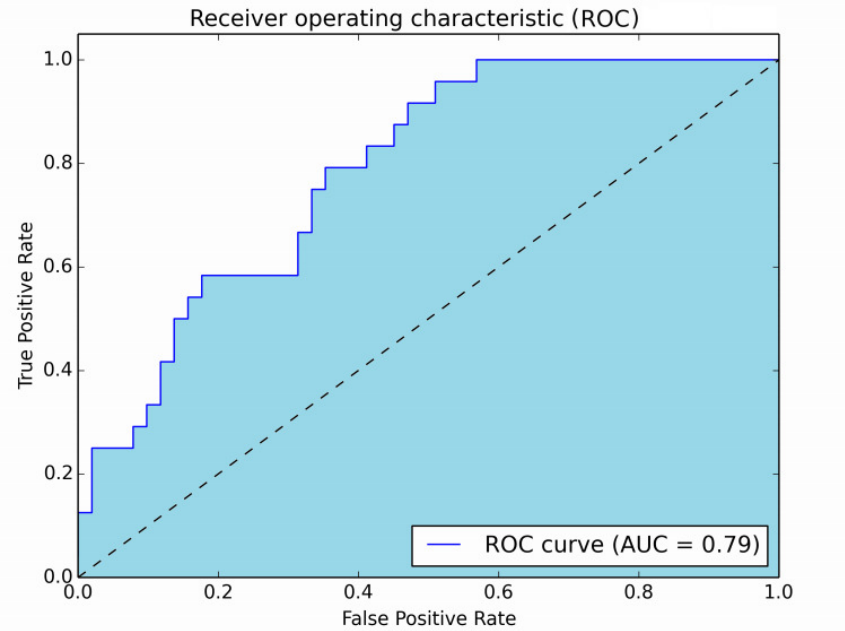
Макроусреднение чувствительно
к ошибкам на малочисленных классах

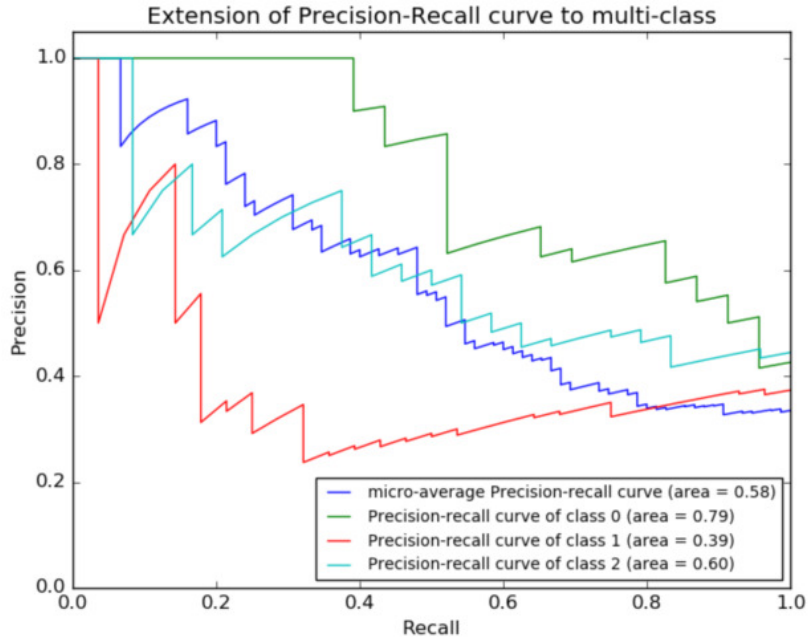




Кривые ROC и Precision-Recall

Модель классификации: $a(x) = \text{sign}\big(\langle x, w\rangle - w_0\big)$
Каждая точка кривой соответствует значению порога w_0





AUROC — площадь под ROC-кривой
AUPRC — площадь под кривой Precision-Recall

Примеры из Python scikit learn: `http://scikit-learn.org/dev`

Резюме. Оценки качества классификации

- Чувствительность и специфичность лучше подходят для задач с несбалансированными классами
- Логарифм правдоподобия (log-loss) лучше подходит для оценки качества вероятностной модели классификации.
- Точность и полнота лучше подходят для задач поиска, когда доля объектов релевантного класса очень мала.

Агрегированные оценки:

- AUC лучше подходит для оценивания качества, когда соотношение цены ошибок не фиксировано.
- AUPRC — площадь под кривой точность–полнота.
- $F_1 = \frac{2PR}{P+R}$ — F-мера, другой способ агрегирования P и R.
- $F_\beta = \frac{(1+\beta^2)PR}{\beta^2 P+R}$ — F_β-мера: чем больше β, тем важнее R.

Задачи выбора модели и метода обучения

Дано: X — пространство объектов; Y — множество ответов;
$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка, $y_i = y^*(x_i)$;
$A_t = \{a \colon X \to Y\}$ — модели алгоритмов, $t \in T$;
$\mu_t \colon (X \times Y)^\ell \to A_t$ — методы обучения, $t \in T$.

Найти: метод μ_t с наилучшей *обобщающей способностью*.

Частные случаи:

- выбор лучшей модели A_t (model selection);
- выбор метода обучения μ_t для заданной модели A (в частности, оптимизация *гиперпараметров*);
- отбор признаков (features selection):
  $F = \{f_j \colon X \to D_j \colon j = 1, \ldots, n\}$ — множество признаков;
  метод обучения μ_J использует только признаки $J \subseteq F$.

Как оценить качество обучения по прецедентам?

$\mathscr{L}(a, x)$ — функция потерь алгоритма a на объекте x;

$Q(a, X^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}(a, x_i)$ — *функционал качества* a на X^ℓ.

Внутренний критерий оценивает качество на обучении X^ℓ:

$$Q_\mu(X^\ell) = Q\big(\mu(X^\ell), X^\ell\big).$$

Недостаток: эта оценка смещена, т.к. μ минимизирует её же.

Внешний критерий оценивает качество «вне обучения», например, по отложенной (hold-out) контрольной выборке X^k:

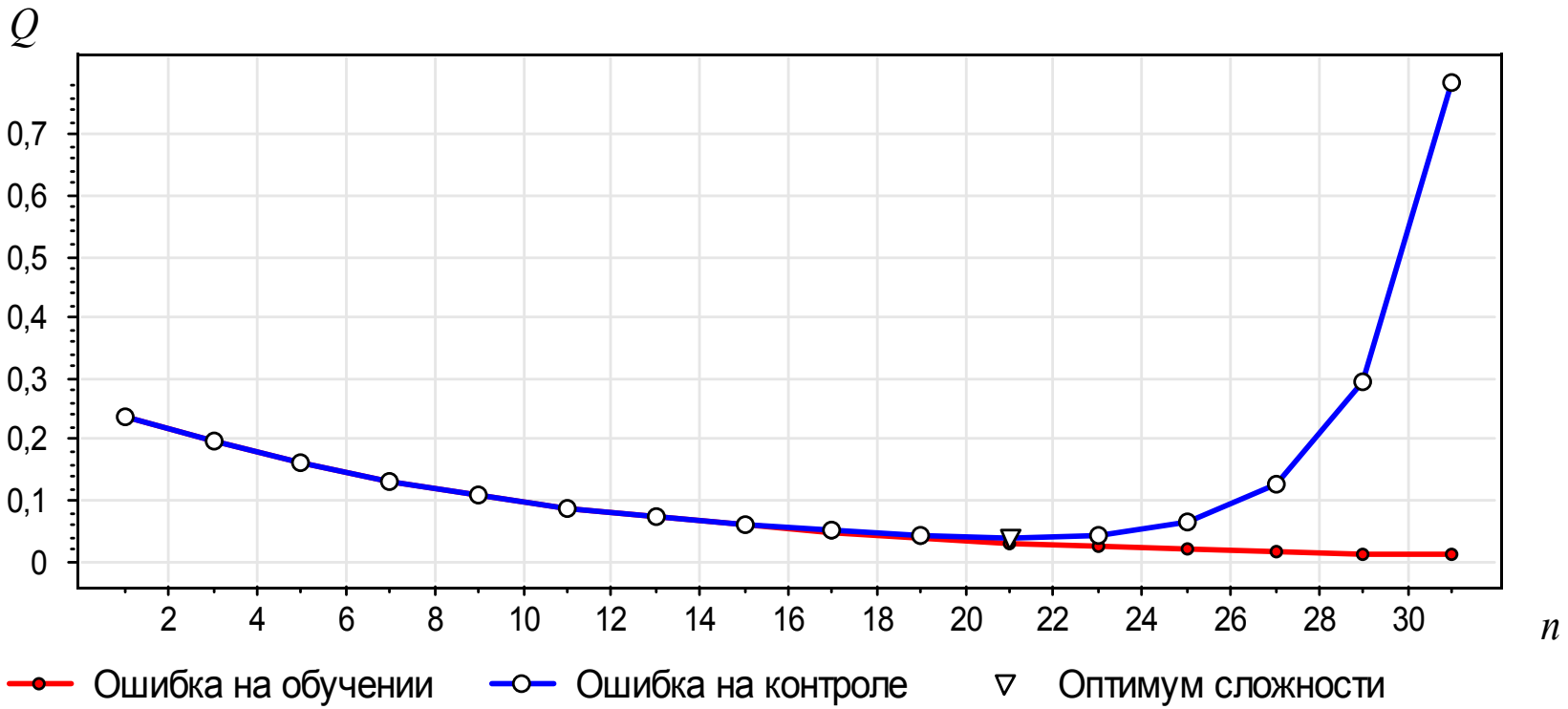
$$Q_\mu(X^\ell, X^k) = Q\big(\mu(X^\ell), X^k\big).$$

Недостаток: эта оценка зависит от разбиения $X^L = X^\ell \sqcup X^k$.

Основное отличие внешних критериев от внутренних

Внутренний критерий монотонно убывает с ростом сложности модели (например, числа признаков).

Внешний критерий имеет характерный минимум, соответствующий оптимальной сложности модели.



Кросс-проверка (cross-validation, CV)

Усреднение оценок hold-out по заданному N — множеству разбиений $X^L = X_n^\ell \sqcup X_n^k$, $n = 1, \ldots, N$:

$$\mathrm{CV}(\mu, X^L) = \frac{1}{|N|} \sum_{n \in N} Q_\mu(X_n^\ell, X_n^k).$$

Частные случаи — разные способы задания N.

1. Случайное множество разбиений.

2. *Полная кросс-проверка* (complete cross-validation, CCV):
N — множество всех $C_{\ell+k}^k$ разбиений.

Недостаток: оценка CCV вычислительно слишком сложна.
Используются либо малые k, либо комбинаторные оценки CCV.

Скользящий контроль и поблочная кросс-проверка

3. Скользящий контроль (leave one out CV): $k = 1$,

$$\mathrm{LOO}(\mu, X^L) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} Q_\mu(X^L \setminus \{x_i\}, \{x_i\}).$$

Недостатки LOO: ресурсоёмкость, высокая дисперсия.

4. Кросс-проверка по q блокам (q-fold CV): случайное разбиение $X^L = X_1^{\ell_1} \sqcup \cdots \sqcup X_q^{\ell_q}$ на q блоков (почти) равной длины,

$$\mathrm{CV}_q(\mu, X^L) = \frac{1}{q} \sum_{n=1}^{q} Q_\mu\left(X^L \setminus X_n^{\ell_n}, X_n^{\ell_n}\right).$$

Недостатки q-fold CV:

- оценка существенно зависит от разбиения на блоки;
- каждый объект лишь один раз участвует в контроле.

Многократная поблочная кросс-проверка

5. Контроль t раз по q блокам ($t \times q$-fold CV)
— стандарт «де факто» для тестирования методов обучения.

Выборка X^L разбивается t раз случайным образом на q блоков

$$X^L = X_{s1}^{\ell_1} \sqcup \cdots \sqcup X_{sq}^{\ell_q}, \quad s = 1, \ldots, t, \quad \ell_1 + \cdots + \ell_q = L;$$

$$\mathrm{CV}_{t \times q}(\mu, X^L) = \frac{1}{t} \sum_{s=1}^{t} \frac{1}{q} \sum_{n=1}^{q} Q_\mu\left(X^L \setminus X_{sn}^{\ell_n}, X_{sn}^{\ell_n}\right).$$

Преимущества $t \times q$-fold CV:

- увеличением t можно улучшать точность оценки (компромисс между точностью и временем вычислений);
- каждый объект участвует в контроле ровно t раз;
- оценивание доверительных интервалов (95% при $t = 40$).

Критерии непротиворечивости моделей

Идея: Если модель верна, то алгоритмы, настроенные по разным частям данных, не должны противоречить друг другу.

1. По одному случайному разбиению $X^\ell \sqcup X^k = X^L$, $\ell = k$:

$$D_1(\mu, X^L) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} \left|\mu(X^\ell)(x_i) - \mu(X^k)(x_i)\right|.$$

2. Аналог $\mathrm{CV}_{t\times 2}$: по t разбиениям $X^L = X_s^\ell \sqcup X_s^k$, $s = 1, \ldots, t$:

$$D_t(\mu, X^L) = \frac{1}{t} \sum_{s=1}^{t} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L} \left|\mu(X_s^\ell)(x_i) - \mu(X_s^k)(x_i)\right|.$$

Недостатки:

- длина обучения сокращается в 2 раза;
- трудоёмкость возрастает в 2 раза.

Критерии регуляризации

Регуляризатор — аддитивная добавка к внутреннему критерию, обычно штраф за сложность (complexity penalty) модели A:

$$Q_{\text{рег}}(\mu, X^\ell) = Q_\mu(X^\ell) + \text{штраф}(A),$$

Линейные модели: $A = \{a(x) = \text{sign}\langle w, x\rangle\}$ — классификация,

$A = \{a(x) = \langle w, x\rangle\}$ — регрессия.

L_2-регуляризация (ридж-регрессия):

$$\text{штраф}(w) = \tau\|w\|_2^2 = \tau\sum_{j=1}^{n} w_j^2.$$

L_1-регуляризация (LASSO):

$$\text{штраф}(w) = \tau\|w\|_1 = \tau\sum_{j=1}^{n} |w_j|.$$

L_0-регуляризация (AIC, BIC):

$$\text{штраф}(w) = \tau\|w\|_0 = \tau\sum_{j=1}^{n} \big[w_j \neq 0\big].$$

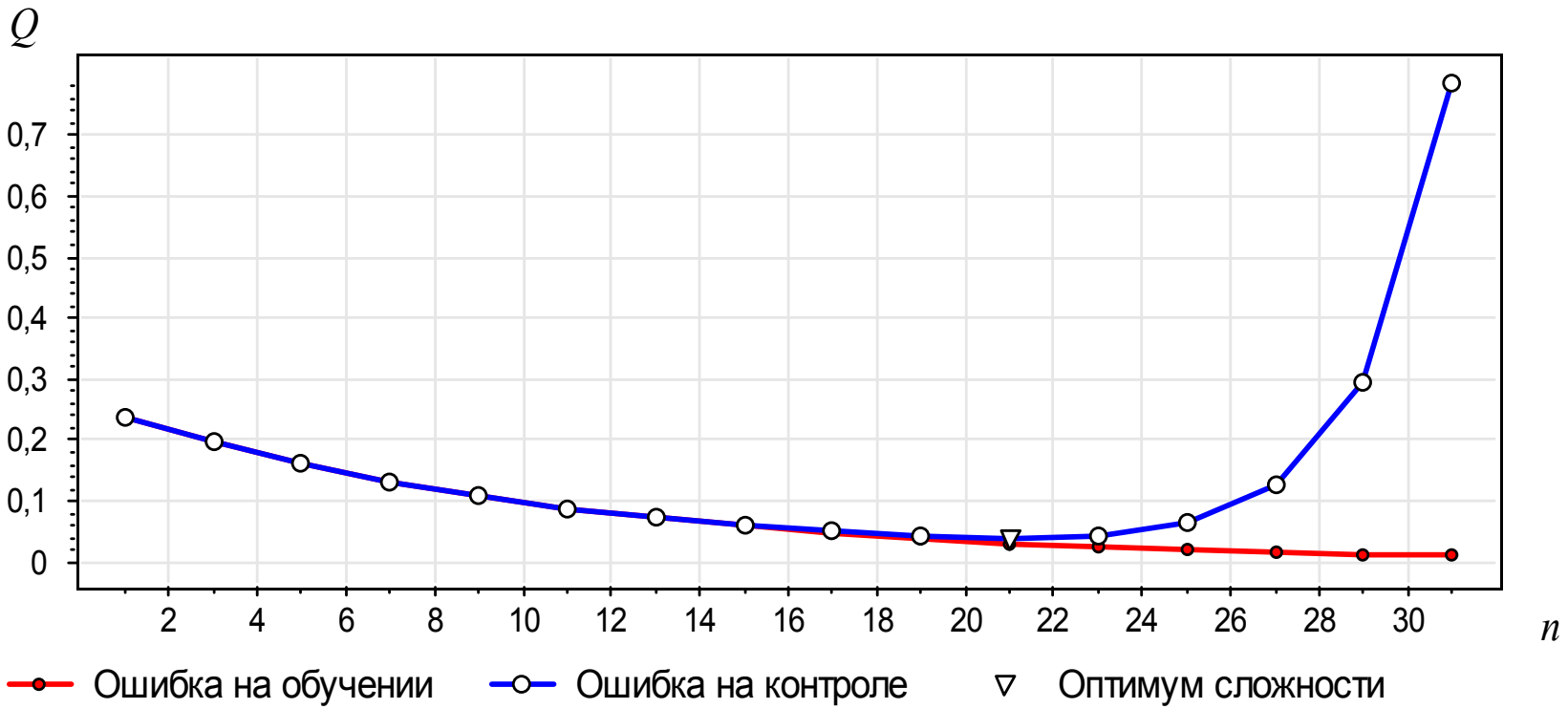
Задача отбора признаков по внешнему критерию

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

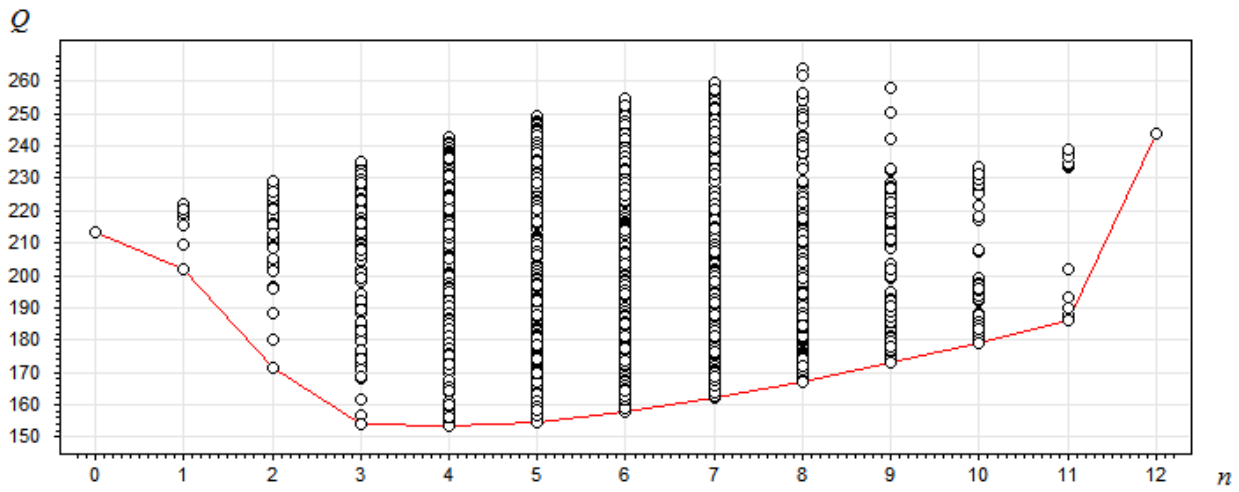
μ_J — метод обучения, использующий только признаки $J \subseteq F$;

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

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



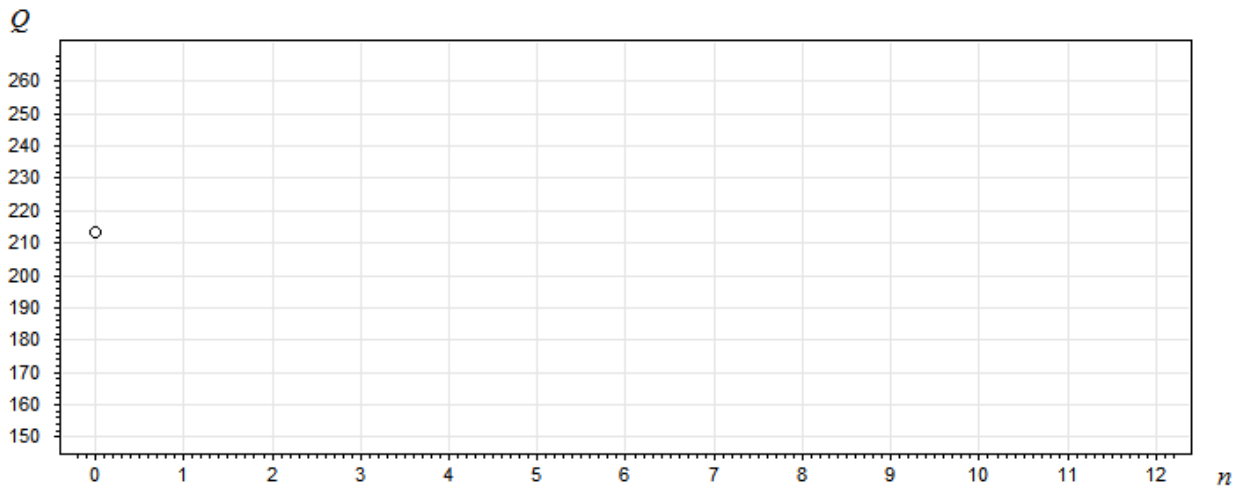
Алгоритм полного перебора (Full Search)



Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

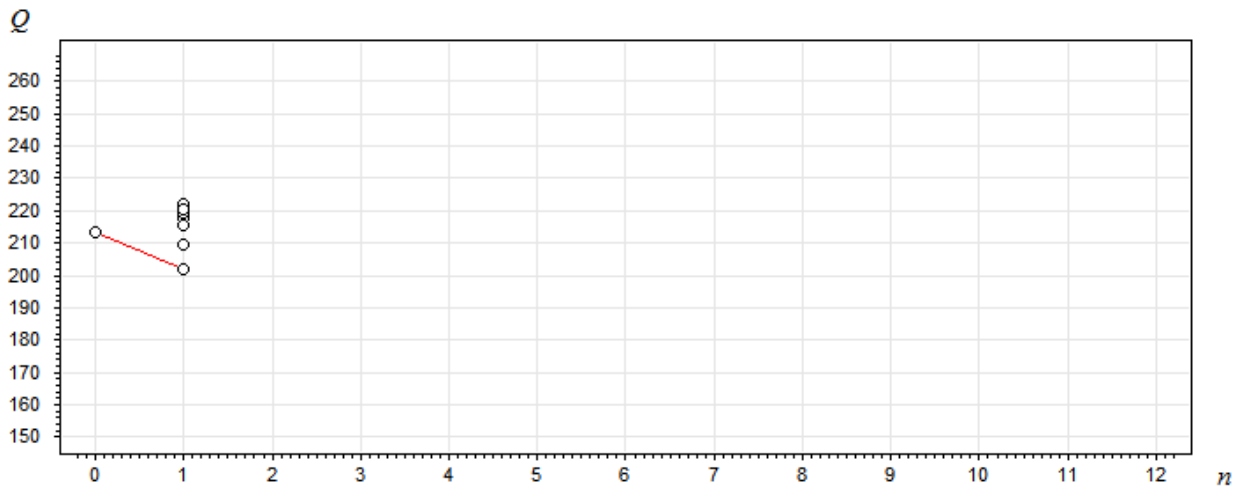


$d = 3$
$j = 0$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

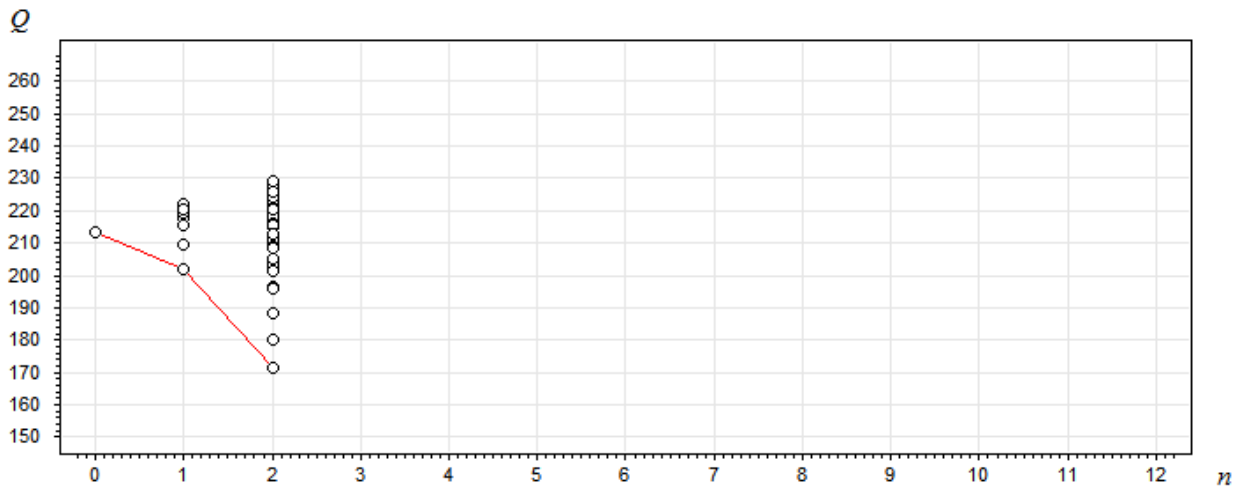


$d = 3$
$j = 1$
$j^* = 1$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

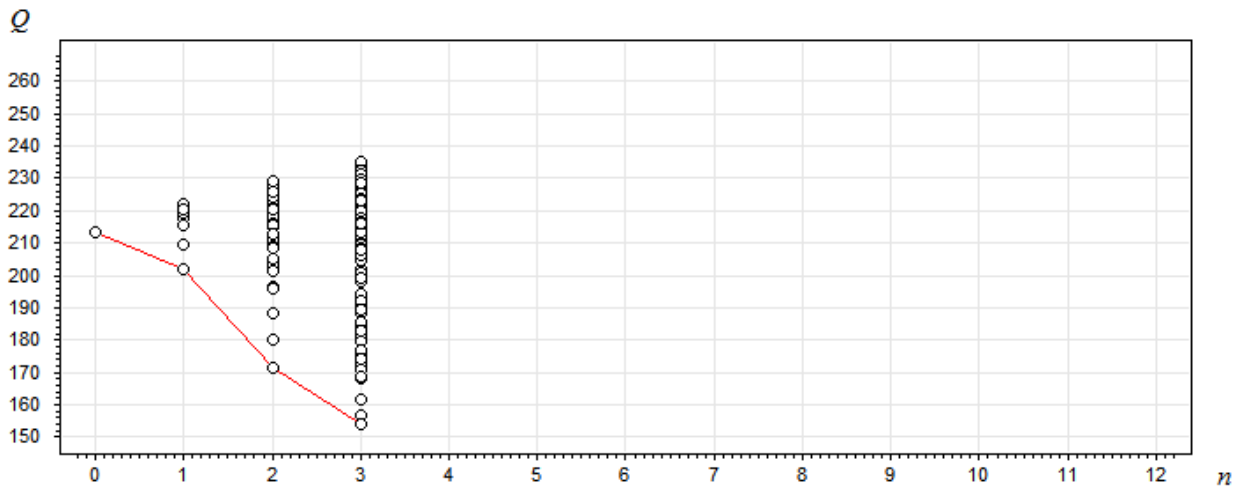


$d = 3$
$j = 2$
$j^* = 2$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

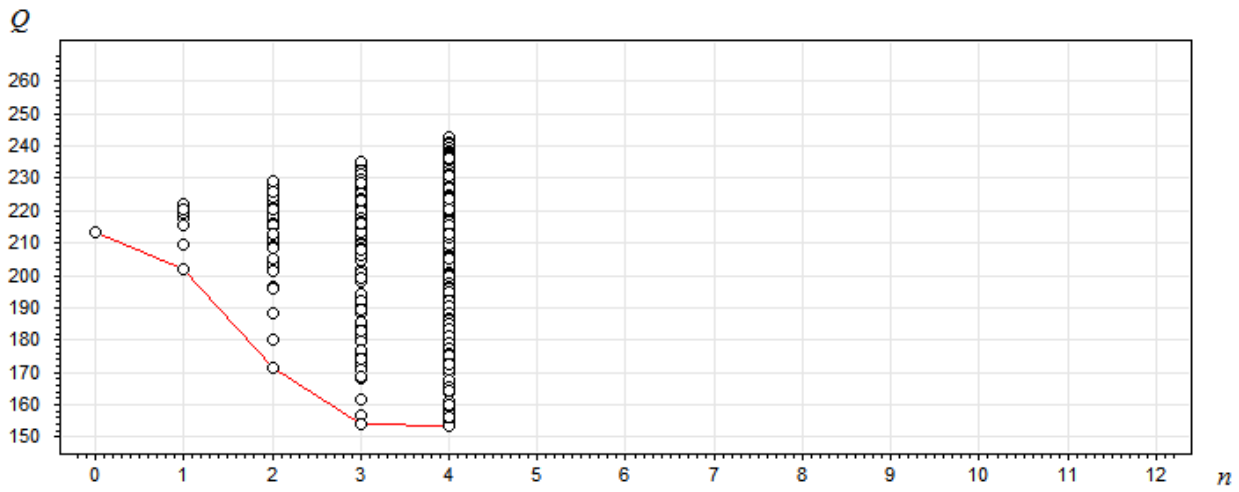


$d = 3$
$j = 3$
$j^* = 3$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

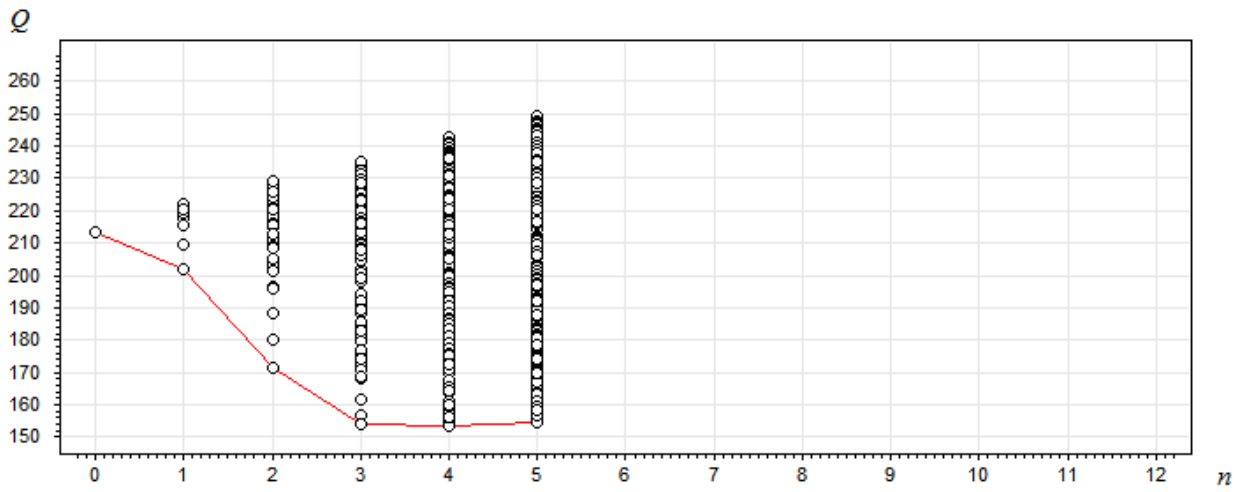


$d = 3$
$j = 4$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

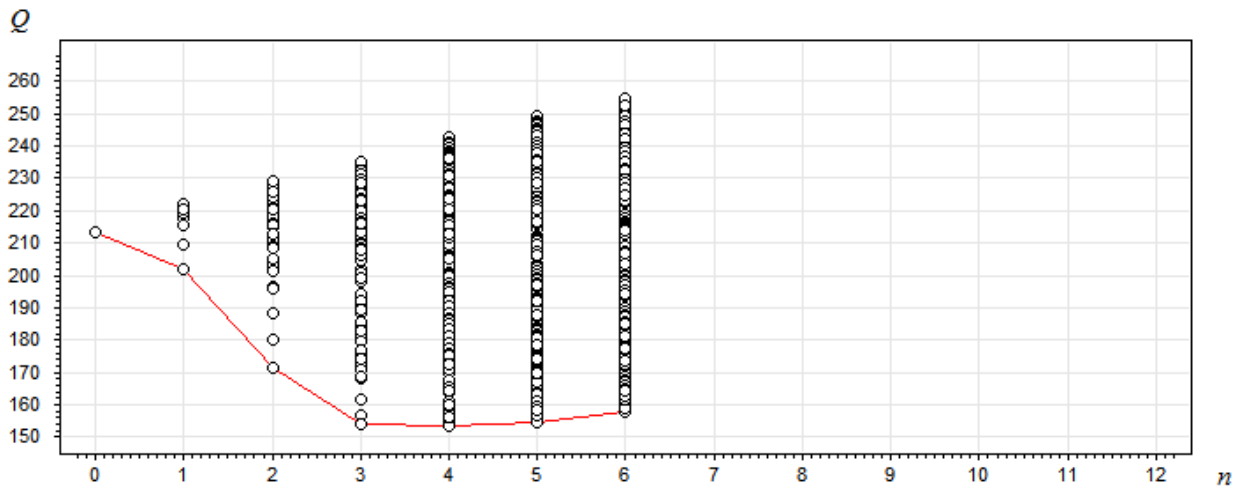


$d = 3$
$j = 5$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм полного перебора (Full Search)

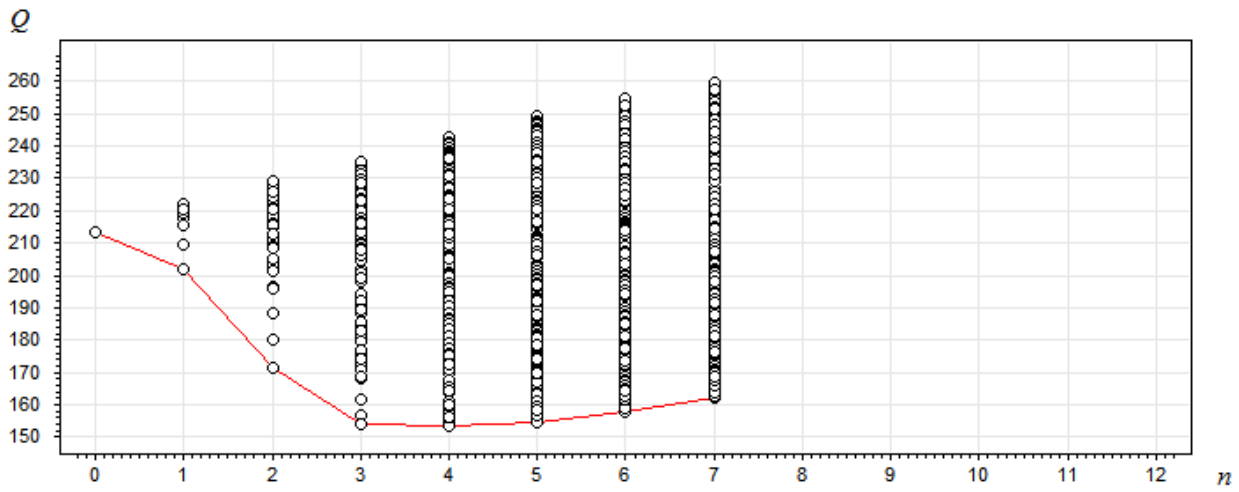


$d = 3$
$j = 6$
$j^* = 4$

Вход: множество F, критерий Q, параметр d;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **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;

1: $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти лучший набор сложности j:
$J_j := \arg\min_{J:\,|J|=j} Q(J)$;
4: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
5: **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;

1: $J_0 := \varnothing$; $Q^* := Q(\varnothing)$; — инициализация;
2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
3: найти признак, наиболее выгодный для добавления:
$f^* := \arg\min_{f \in F \setminus J_{j-1}} Q\left(J_{j-1} \cup \{f\}\right)$;
4: добавить этот признак в набор:
$J_j := J_{j-1} \cup \{f^*\}$;
5: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j^* := j$; $Q^* := Q(J_j)$;
6: **если** $j - j^* \geqslant d$ **то вернуть** J_{j^*};

Алгоритм жадного добавления (Add)

Преимущества:

- работает быстро — $O(n^2)$, точнее $O(n(j^* + d))$;
- возможны быстрые инкрементные алгоритмы, пример — *шаговая регрессия* (step-wise regression).

Недостатки:

- Add склонен включать в набор лишние признаки.

Способы устранения:

- Del — последовательное жадное удаление;
- Add-Del — чередование добавлений и удалений (см. далее);
- поиск в ширину (см. ещё далее).

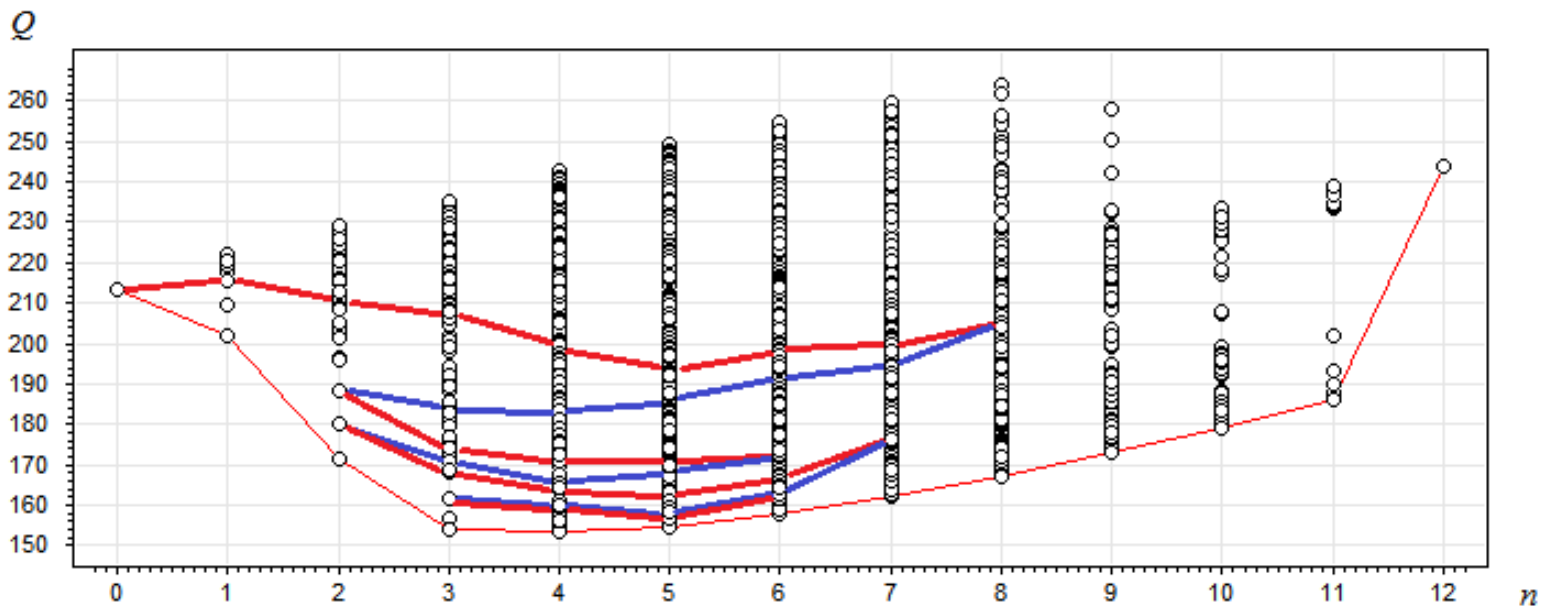
Алгоритм поочерёдного добавления и удаления (Add-Del)

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)

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

пока $|J_t| < n$ добавлять признаки (Add):
  $t := t + 1$; — началась следующая итерация;
  $f^* := \arg\min\limits_{f \in F \setminus J_{t-1}} Q\left(J_{t-1} \cup \{f\}\right)$; $J_t := J_{t-1} \cup \{f^*\}$;
  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 (Del):
  $t := t + 1$; — началась следующая итерация;
  $f^* := \arg\min\limits_{f \in J_{t-1}} Q\left(J_{t-1} \setminus \{f\}\right)$; $J_t := J_{t-1} \setminus \{f^*\}$;
  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 ширину (breadth-first search, BFS)

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*.

Поиск в ширину (breadth-first search, BFS)

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 всех $j = 1, \ldots, n$, 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**
    $R_j := \{J_j^1, \ldots, J_j^B\}$; — 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:
  $R_{j+1} := \{J \cup \{f\} \mid J \in R_j,\ f \in F \setminus J\}$;

Поиск в ширину: дополнительные эвристики

- **Трудоёмкость:**
  $O(Bn^2)$, точнее $O(Bn(j^* + d))$.
- **Проблема дубликатов:**
  после сортировки (шаг 3) проверить на совпадение только соседние наборы с равными значениями внутреннего и внешнего критерия.
- **Адаптивный отбор признаков:**
  на шаге 8 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»);

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

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

Бинарная операция *скрещивания* $\beta = \beta' \times \beta''$:

$$\beta_j = \begin{cases} \beta'_j, & \text{с вероятностью } 1/2; \\ \beta''_j, & \text{с вероятностью } 1/2; \end{cases}$$

Унарная операция *мутации* $\beta = {\sim}\beta'$

$$\beta_j = \begin{cases} 1 - \beta'_j, & \text{с вероятностью } p_m; \\ \beta'_j, & \text{с вероятностью } 1 - p_m; \end{cases}$$

где параметр p_m — *вероятность мутации*.

Эволюционный (генетический) алгоритм

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

1: инициализировать случайную популяцию из B наборов:
$B_1 := B$; $R_1 := \left\{J_1^1, \ldots, J_1^{B_1}\right\}$; $Q^* := Q(\varnothing)$;
2: **для всех** $t = 1, \ldots, T$, где t — номер поколения:
3: ранжирование индивидов: $Q(J_t^1) \leqslant \ldots \leqslant Q(J_t^{B_t})$;
4: **если** $B_t > B$ **то** селекция: $R_t := \left\{J_t^1, \ldots, J_t^B\right\}$;
5: **если** $Q(J_t^1) < Q^*$ **то** $t^* := t$; $Q^* := Q(J_t^1)$;
6: **если** $t - t^* \geqslant d$ **то вернуть** $J_{t^*}^1$;
7: 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: $p_1 = \dots = p_n := 1/n$;
инициализировать случайную популяцию из B_1 наборов:
$R_1 := \{J_1^1, \dots, J_1^{B_1} \sim \{p_1, \dots, p_n\}\}$; $Q^* := Q(\varnothing)$;
для всех $t = 1, \dots, T$, где t — номер поколения:
  ранжирование индивидов: $Q(J_t^1) \leqslant \dots \leqslant Q(J_t^{B_t})$;
  если $B_t > B$ **то** селекция: $R_t := \{J_t^1, \dots, J_t^B\}$;
  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:
  $R_{t+1} := \{J_{t+1}^1, \dots, J_{t+1}^{B_t} \sim \{p_1, \dots, p_n\}\} \cup R_t$;

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» алгоритмы.