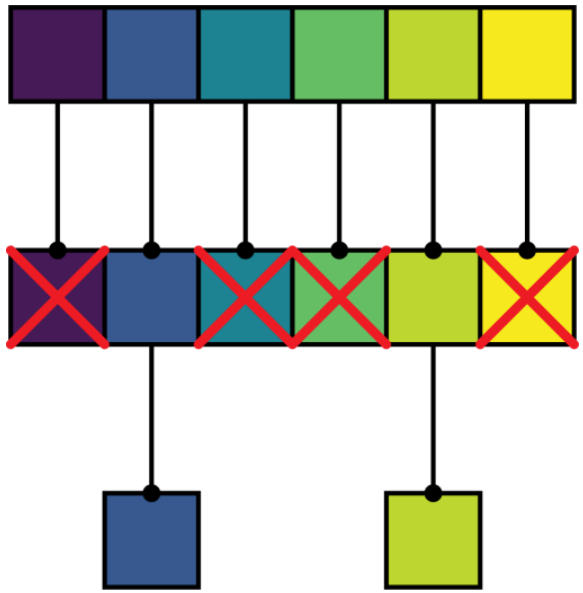
Отбор признаков

Виктор Китов

victorkitov.github.io

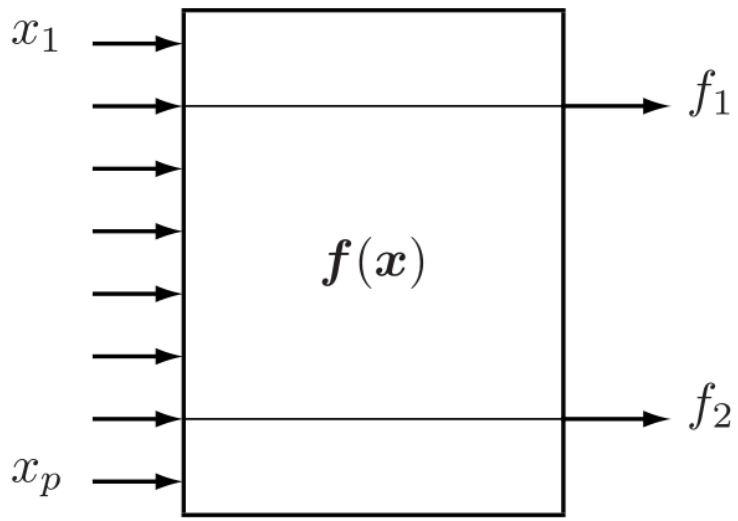


Курс поддержан фондом 'Интеллект'

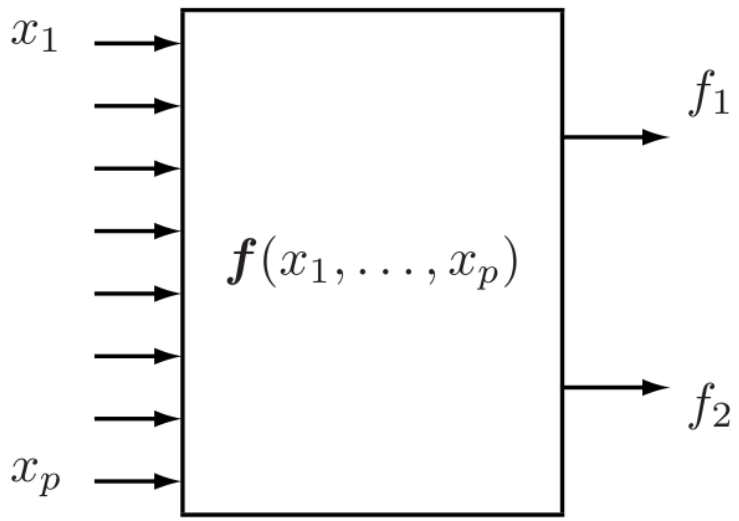
Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Задача отбора признаков

- Отбор признаков (feature selection) - выделение подмножества исходных признаков.
- Снижение размерности (dimensionality reduction) - преобразование исходных признаков в пространство меньшей размерности.



(a) feature selector



(b) feature extractor

Комментарии

- Применения отбора признаков:
  - $\uparrow$ точности прогнозов (убираем шумовые признаки)
  - $\uparrow$ вычислительной эффективности
  - $\uparrow$ интерпретируемости моделей
  - $\uparrow$ стабильности оценок параметров (лин. регрессия)
  - $\downarrow$ стоимости сбора данных (признаки оплачиваются!)
- Какие методы умеют самостоятельно отбирать признаки?

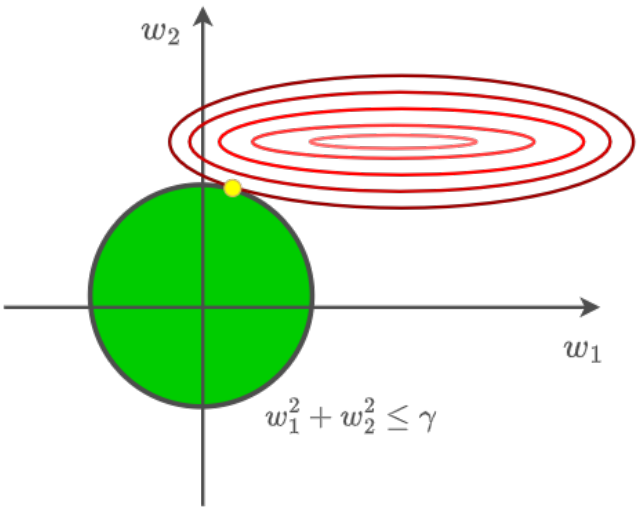
Встроенный отбор признаков

- линейная/нелинейная регрессия/классификация с L_1 регуляризацией

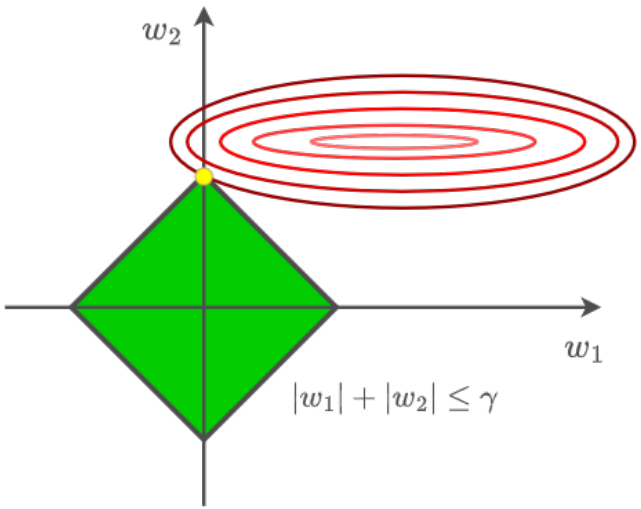
$$L(\mathbf{w}) \to L(\mathbf{w}) + \lambda||\mathbf{w}||_1 = L(\mathbf{w}) + \lambda \sum_{i=1}^{I} |w_i|$$

$$L(\mathbf{w}) + \lambda R(\mathbf{w}) \to \min_{\mathbf{w}} \iff \begin{cases} L(\mathbf{w}) \to \min_{\mathbf{w}} \\ R(\mathbf{w}) \leq \gamma \end{cases}$$

Оптимизация при L2 регуляризации



Оптимизация при L1 регуляризации



Встроенный отбор признаков

- решающие деревья и их ансамбли (бэггинг, RF, ERT, бустинг)
  - неинформативные признаки не выберутся
- orthogonal matching pursuit регрессия
  - жадное наращивание признаков, максимально скоррелированных с ошибкой прогноза

Типы признаков[1]

f-признак, $G = \{f_1, f_2, ...f_D\}$-полный набор, $\tilde{G} = G \backslash \{f\}$.

- **Сильно релевантный признак:**

$$p(y|f, \tilde{G}) \neq p(y|\tilde{G})$$

- **Слабо релевантный признак:**

$$p(y|f, \tilde{G}) = p(y|\tilde{G}), \text{ но } \exists S \subset \tilde{G} : p(y|f, S) \neq p(y|S)$$

- **Нерелевантный признак:**

$$\forall S \subset \tilde{G} : p(y|f, S) = p(y|S)$$

[1] Приведите примеры признаков каждого типа.

Типы признаков[1]

f-признак, $G = \{f_1, f_2, ...f_D\}$-полный набор, $\tilde{G} = G \backslash \{f\}$.

- **Сильно релевантный признак:**

$$p(y|f, \tilde{G}) \neq p(y|\tilde{G})$$

- **Слабо релевантный признак:**

$$p(y|f, \tilde{G}) = p(y|\tilde{G}), \text{ но } \exists S \subset \tilde{G} : p(y|f, S) \neq p(y|S)$$

- **Нерелевантный признак:**

$$\forall S \subset \tilde{G} : p(y|f, S) = p(y|S)$$

Цель отбора признаков

Найти минимальный $G' \subset G$ такой, что $P(y|G') \approx P(y|G)$, т.е. оставить только сильно релевантные и минимальный набор слабо релевантных признаков.

[1] Приведите примеры признаков каждого типа.

Категоризация методов отбора признаков

Полнота перебора вариантов:

- Полный перебор: сложность $O(2^D)$[2]
- Субоптимальный перебор: нет гарантии на глобальный оптимум
  - детерминированные
  - случайные (детерминированные со случайностью / полностью случайные)

Взаимосвязь с методом прогнозирования:

- независимые (filter methods)
- использующие метод прогнозирования и $\mathcal{L}$ (wrapper methods)
- интегрированные в метод прогнозирования (embedded methods)

[2] метод ветвей и границ не перебирает все варианты (при некоторых предположениях на $S(U)$), но сложность все равно $O(2^D)$

Содержание

Расчет важности признаков

- Оценим значимости каждого признака $I(f_1), I(f_2), ...I(f_D)$.
- Далее можем:
  - отбирать признаки по значимости
  - учитывать все признаки, но в разной степени, в зависимости от $I(\cdot)$[3].

[3] Как контролировать вклад признаков в прогноз для K-NN, линейных моделей, случайного леса?

Отбор признаков по значимости

- Упорядочим признаки по значимости $I(f)$:

$$I(f_1) \geq I(f_2) \geq ... \geq I(f_D)$$

  - выбрать топ m

$$\hat{F} = \{f_1, f_2, ...f_m\}$$

  - выбрать по порогу: $f_i : \ I(f_i) \geq threshold$
  - выбрать лучший набор из:
    $U = \{\{f_1\}, \{f_1, f_2\}, ...\{f_1, f_2, ...f_D\}\}$

$$\hat{F} = \arg\max_{F \in U} S(F)$$

- Комментарии:
  - легко реализовать, вычислительно простые методы
  - будет включено много слабо релевантных зависимых признаков

Корреляция

- Регрессия или бинарная классификация:

$$I(f) = \frac{\sum_i (f_i - \bar{f})(y_i - \bar{y})}{\left[\sum_i (f_i - \bar{f})^2 \sum_i (y_i - \bar{y})^2\right]^{1/2}} = \frac{a}{b}$$

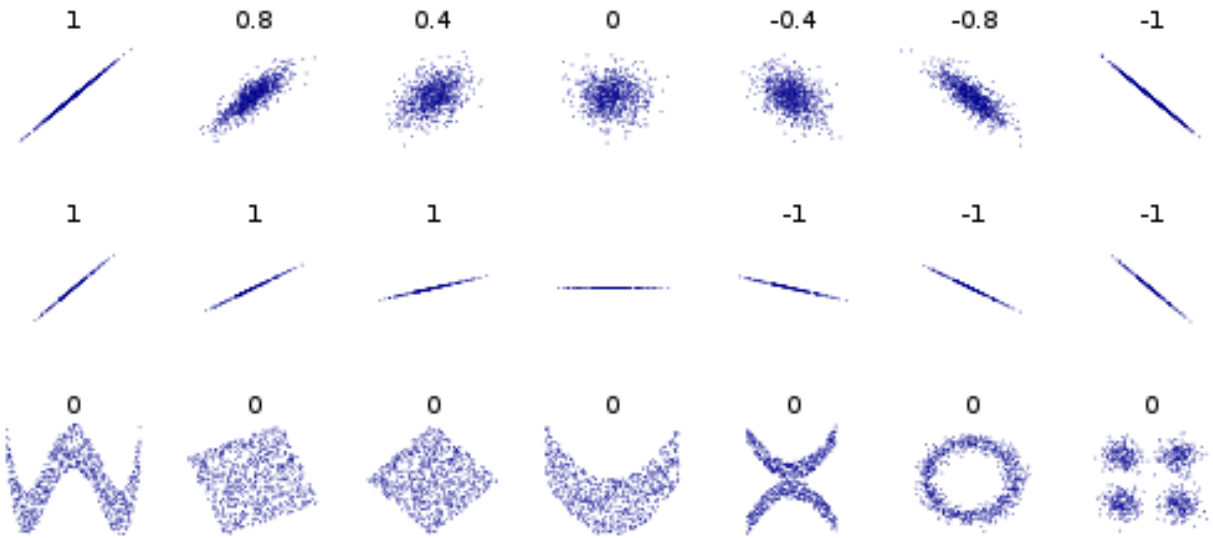
- Многоклассовая классификация:

$$I(f) = \frac{1}{C}\sum_{c=1}^{C} \frac{a_c}{b_c}, \quad I(f) = \max_c \left\{\frac{a_c}{b_c}\right\}$$

- Свойства:
  - легко вычисляется
  - выделяет только линейную зависимость
  - корреляция$\neq$причинно-следственная связь.

Корреляция выделяет только линейную зависимость

- Корреляция выделяет только линейную зависимость.



- Рассмотрим сл. признак f с симметричной (четной) плотностью распределения.
  - тогда $\mathbb{E}f = 0$, $\mathbb{E}f^3 = 0$
  - f и $y = f^2$ зависимы, но $\mathrm{corr}(f, y) = 0$!

Выделение монотонных зависимостей

- Рассмотрим наблюдения сл. величин:

$$X = (X_1, X_2, ...X_N), \quad Y = (Y_1, Y_2, ...Y_N)$$

- Заменим значения их рангами (ранговое кодирование):

$$X \to R(X), \quad Y \to R(Y)$$

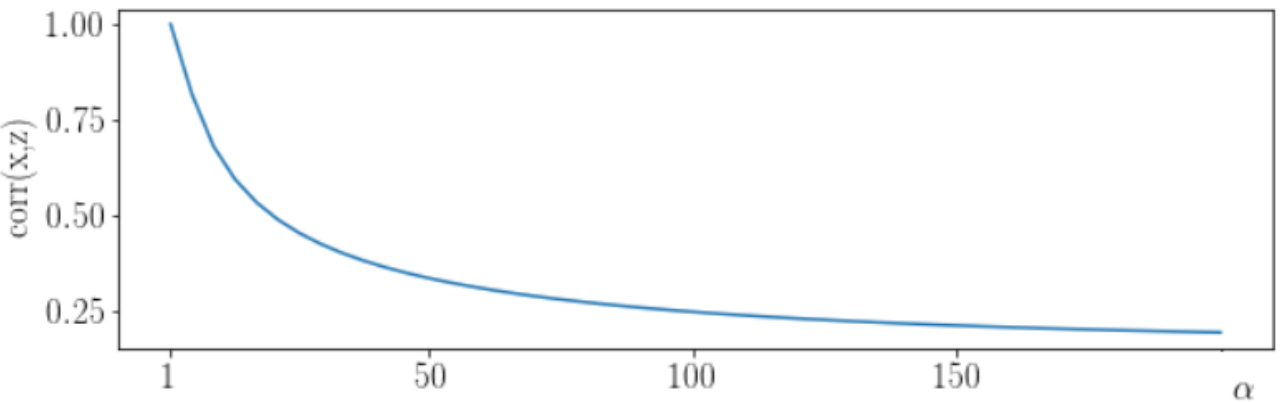
IQ, X_i	Hours of TV per week, Y_i	rank x_i	rank y_i
86	2	1	1
97	20	2	6
99	28	3	8
100	27	4	7
101	50	5	10
103	29	6	9
106	7	7	3
110	17	8	5
112	6	9	2
113	12	10	4

Ранговая корреляция Спирмена

- **Ранговая корреляция Спирмена:**

$$\text{corr}_{Spearman}(X,Y) = \text{corr}\left(R(X), R(Y)\right)$$

- Рассмотрим $X = [0, 0.01, 0.02, ...1]$, $Y = X^{\alpha}$.
- Существует монотонная зависимость между X и Y, но корреляция$\downarrow$ при $\alpha \uparrow$:

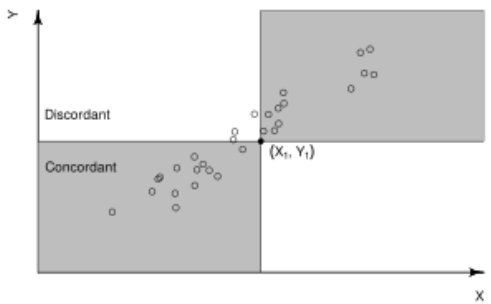


- При этом

$$\text{corr}_{Spearman}(X,Y) = \text{corr}\left([1,2,...],[1,2,...]\right) = 1$$

Ранговая корреляция Кендалла

- **Ранговая корреляция Кендалла:**
  - согласующиеся пары (concordant pairs)
    $C = \{[(X_i, Y_i), (X_j, Y_j)] : (X_j - X_i)(Y_j - Y_i) > 0\}$
  - несогласующиеся пары (discordant pairs)
    $D = \{[(X_i, Y_i), (X_j, Y_j)] : (X_j - X_i)(Y_j - Y_i) < 0\}$



$$\text{corr}_{Kendall}(X, Y) = \frac{|C| - |D|}{\begin{pmatrix} N \\ 2 \end{pmatrix}}$$

- Вместо самой корреляции можно судить о значимости признака по $p(\text{corr}(X, Y) = 0)$.
  - это *уровень значимости теста* с $H_0 : \text{corr}(X, Y) = 0$

Определения

- **Энтропия** сл. величины Y:

$$H(Y) := -\sum_y p(y) \ln p(y)$$

- **Условная энтропия** Y при условии сл. величины X:

$$H(Y|X) := -\sum_x p(x) \sum_y p(y|x) \ln p(y|x)$$

- **Расстояние Кульбака-Лейблера** между распределениями:
  - дискретные исходы, $P(x), Q(x)$ - вероятности исхода x:

$$KL(P||Q) := \sum_x P(x) \ln \frac{P(x)}{Q(x)}$$

  - непрерывные исходы, $p(x), q(x)$ - плотности вероятности:

$$KL(p||q) = \int p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

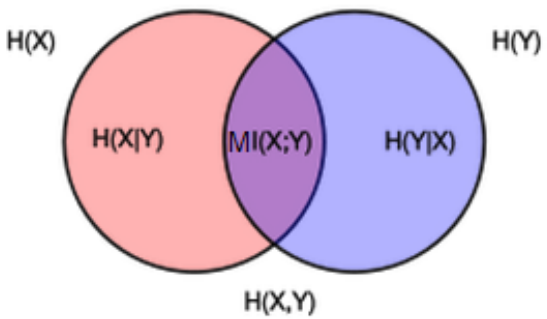
Взаимная информация

Взаимная информация измеряет насколько много общей информации между сл. вел. X и Y:

$$MI(X,Y) := \sum_{x,y} p(x,y) \ln \left[\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} \right] = KL\left(p(x,y)||p(x)p(y)\right)$$

Свойства:

- $MI(X,Y) = MI(Y,X)$
- $MI(X,Y) = KL(p(x,y)||p(x)p(y)) \geq 0$
- X, Y- независимы <=> $MI(X,Y) = 0$
- $MI(X,Y) = H(Y) - H(Y|X)$
- $MI(X,Y) \leq \min\{H(X), H(Y)\}$
- X однозначно определяет Y => $MI(X,Y) = H(Y) \leq H(X)$



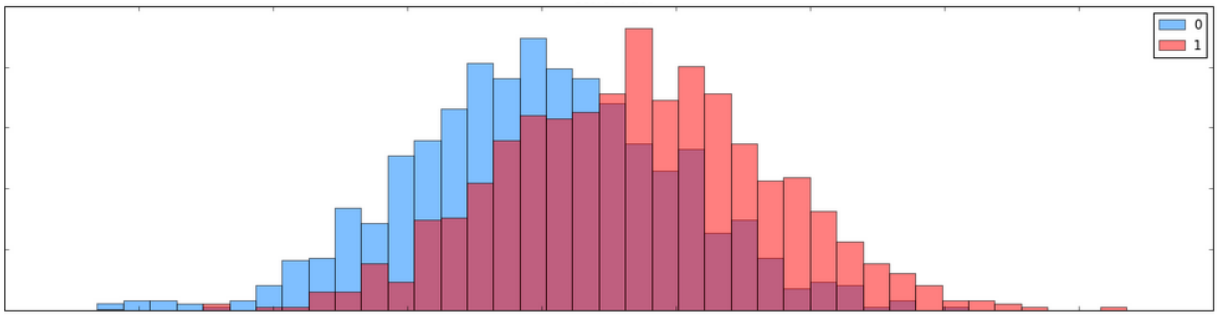
Нормированная взаимная информация

- Нормированная взаимная информация

$$NMI(X,Y) = \frac{MI(X,Y)}{H(Y)} \in [0,1]$$

  - $NMI(X,Y) = 0$ при независимости X и Y.
  - $NMI(X,Y) = 1$, когда X однозначно определяет Y.
- Свойства MI и NMI:
  - выделяют зависимости любого вида
  - требуют оценки $p(X), p(Y)$ и $p(X,Y)$.

Важность в задаче классификации



О взаимосвязи признака f и y можно судить по

$$\rho\left(p(f|y=i), p(f|y=j)\right)$$

пример: $\int |p(f|y=1) - p(f|y=0)|\, df$

Метрическая оценка $I(f)$: relief критерий для 1-NN

ВХОД:

Обучающая выборка $(x_1, y_1), (x_2, y_2), ...(x_N, y_N)$

Функция расстояния $\rho(x, x')$ # обычно Евклидова

для каждого объекта x_n, y_n:

найти ближайшего соседа $x_{s(n)}$ своего класса y_n

найти ближайшего соседа $x_{d(n)}$ чужого класса $\neq y_n$

для каждого признака $f_i \in \{f_1, f_2, ...f_D\}$:

рассчитать значимость $I(f_i) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{|x_n^i - x_{d(n)}^i|}{|x_n^i - x_{s(n)}^i|}$

ВЫХОД:

значимости признаков $I(f_1), ...I(f_D)$

Метрическая оценка $I(f)$: relief критерий для K-NN

ВХОД:

Обучающая выборка $(x_1, y_1), (x_2, y_2), ...(x_N, y_N)$

Функция расстояния $\rho(x, x')$ # обычно Евклидова

Число соседей K

для каждого объекта x_n, y_n:

найти K ближайших соседей своего класса y_n:

$x_{s(n,1)}, x_{s(n,2)}, ...x_{s(n,K)}$

найти K ближайших соседей чужого класса $\neq y_n$:

$x_{d(n,1)}, x_{d(n,2)}, ...x_{d(n,K)}$

для каждого признака $f_i \in \{f_1, f_2, ...f_D\}$:

рассчитать значимость $I(f_i) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \frac{|x_n^i - x_{d(n,k)}^i|}{|x_n^i - x_{s(n,k)}^i|}$

ВЫХОД:

значимости признаков $I(f_1), ...I(f_D)$

Важность признаков по линейной модели

- В линейных моделях важность x^i можно считать по $|w_i|$.
  - при условии, что признаки приведены к единой шкале
  - *clf.coef_* в scikit-learn
- Учитывает линейную зависимость, как корреляция.

Важность признаков: mean decrease in impurity

- Важность признаков по изменению критерия информативности (mean decrease in impurity, MDI).
  - рассмотрим признак f
  - пусть $T(f)$-множество всех вершин, использующих f в функции ветвления
  - эффективность разбиения в t:

$$\Delta\phi(t) = \phi(t) - \frac{n(t_L)}{n(t)}\phi(t_L) - \frac{n(t_R)}{n(t)}\phi(t_R)$$

  - значимость f:

$$\frac{1}{N}\sum_{t\in T(f)} N(t)\Delta\phi(t)$$

- Поощряет признаки с большим количеством уникальных значений.

Важность признаков: mean decrease in impurity

В sklearn: *model.feature_importances_*

- доступен для композиций деревьев: RF, ERT, boosting.
- недостатки:
  - вычисляется на обучающей выборке
    - если модель переобучается на признаке, важность высока, но вклад в точность прогнозов мал.

Permutation feature importance (PMI)

- Важность признаков по изменению критерия качества (permutation feature importance, PMI)
- Важность: разница/отношение качества прогнозов на:
  1. исходной выборке
  2. исходной выборке, где значения j-го признака перемешаны

$$L(X^j, Y) - L(X, Y) \quad \text{либо} \quad \frac{L(X^j, Y)}{L(X, Y)}$$

Применение PMI

- Значение рандомизированное => пересчитать несколько раз и усреднить.
- Стат. значимость: 95% доверит. интервал не содержит
  - 0 для $L(X^j, Y) - L(X, Y)$
  - 1 для $L(X^j, Y)/L(X, Y)$
- Высокая важность на валидации => признак усиливает обобщающую способность модели
- Высокая важность на обучении, но низкая на валидации => на заданном признаке модель переобучается

Особенность PMI

- Показывает важность для заданных $\widehat{y} = f(x),\ \mathcal{L}(\widehat{y}, y)$.
  - для плохой модели важный признак может оказаться неважным!
- Если признаки скоррелированы, то при перемешивании одного признака модель имеет доступ к информации через другой
  - поэтому важность скоррелированных признаков занижена
  - исключать скоррелированные признаки синхронно.

Содержание

Поиск набора признаков

- Рассмотрим субоптимальные методы поиска подмножества признаков
  - вместо полного перебора со сложностью $O(2^D)$
- Пусть $S(U)$ -критерий качества набора признаков U.
  - например, точность модели на U
  - либо качество работы на U+штраф за сложность.
    - информационные критерии[4]:

$$AIC = 2K - 2\log P(Y|X)$$
$$BIC = K\ln N - 2\log P(Y|X)$$

[4]Это меры качества или потерь?

2 Методы поиска набора признаков
- Метод последовательной модификации набора признаков
- Лучевой поиск (beam search)
- Генетические алгоритмы

Метод последовательного включения признаков

- Метод последовательного включения признаков (sequential forward selection) реализует последовательное жадное добавление признаков один за другим, максимально увеличивающие $S(U)$.
- ВХОД:
  - максимальное #признаков K
  - критерий качества $S(U)$ для наборов признаков U
- ВЫХОД:
  - локально оптимальный набор U, $|U| \leq K$.

Метод последовательного включения признаков

Алгоритм жадного добавления признаков:

- инициализируем: $U = \{\}$
- пока $|U| \leq K - 1$:
  - $f^* = \arg\max_{f \in F \setminus S} S(U \cup \{f\})$
    - если $S(U \cup \{f^*\}) < S(U)$: выход
    - $U = U \cup \{f^*\}$
- вернуть U

Сложность $O(D\,|U|)$ без учета сложности расчета $S(U)$.
Не добавляет слабо релевантные признаки.

Модификации алгоритма

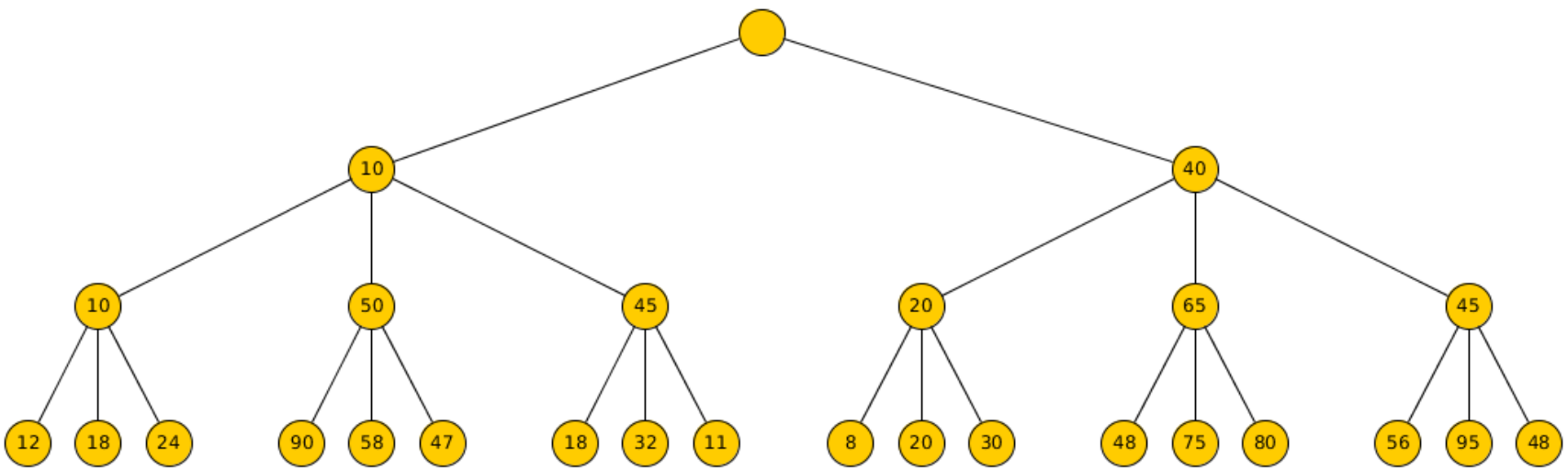
Модификации алгоритма:

- последовательное исключение признаков (sequential backward selection)[5]
- последовательное включение лучшей группы из $\leq p$ признаков
- последовательное исключение худшей группы из $\leq p$ признаков
- композиция подходов добавления/удаления:
  - на каждом шаге пробовать удалить или добавить, что лучше (аналог GD)
  - на каждом шаге добавить, потом циклически удалять, пока приводит к $\uparrow S(U)$

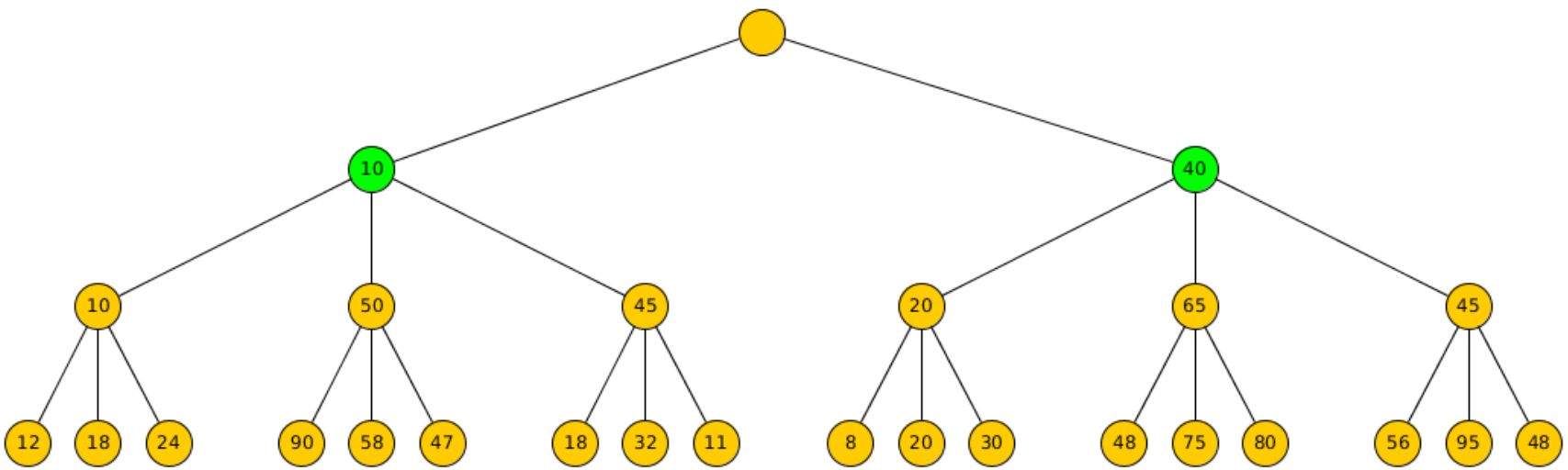
[5] Что вычислительно эффективнее? Последовательное включения или исключения, если только 50% признаков релевантны?

2 Методы поиска набора признаков
- Метод последовательной модификации набора признаков
- Лучевой поиск (beam search)
- Генетические алгоритмы

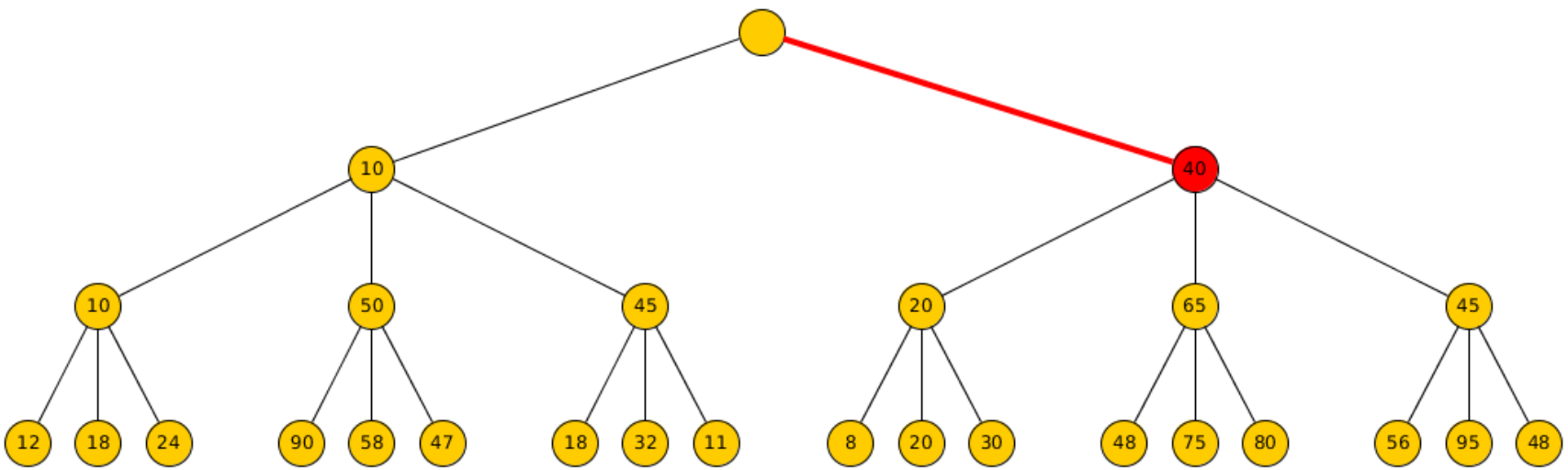
Жадный поиск (top-1)



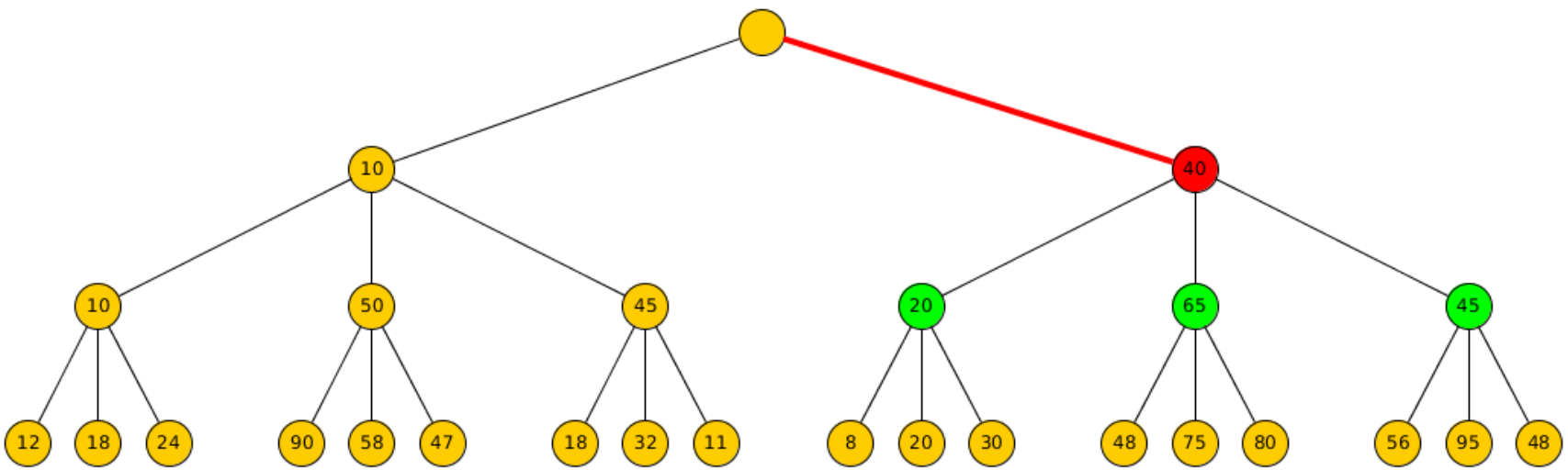
Жадный поиск (top-1)



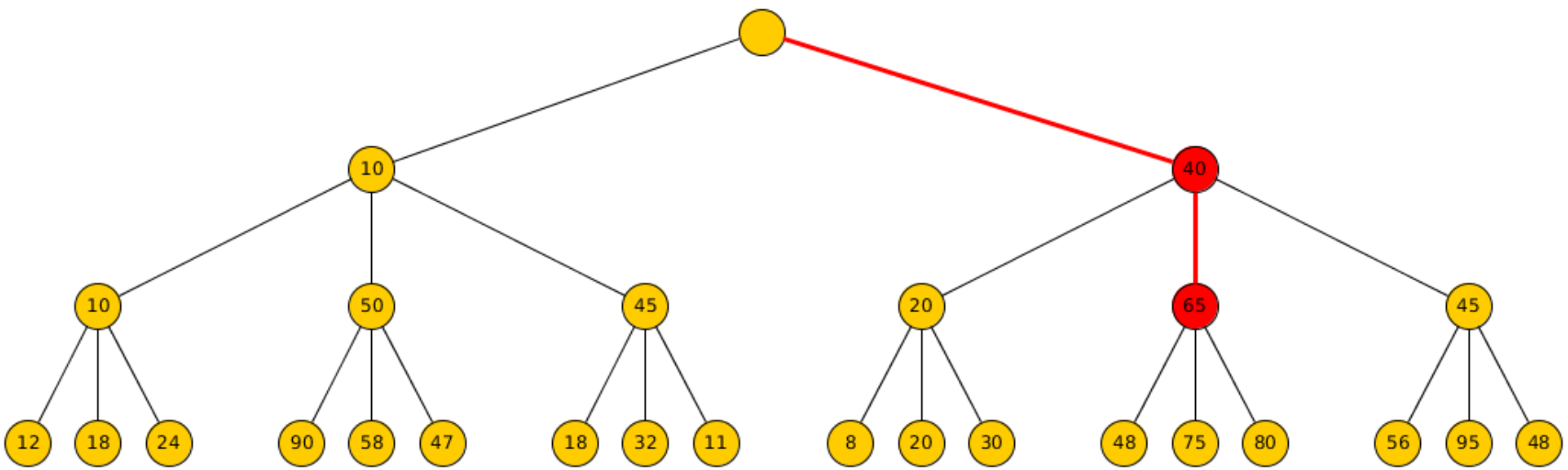
Жадный поиск (top-1)



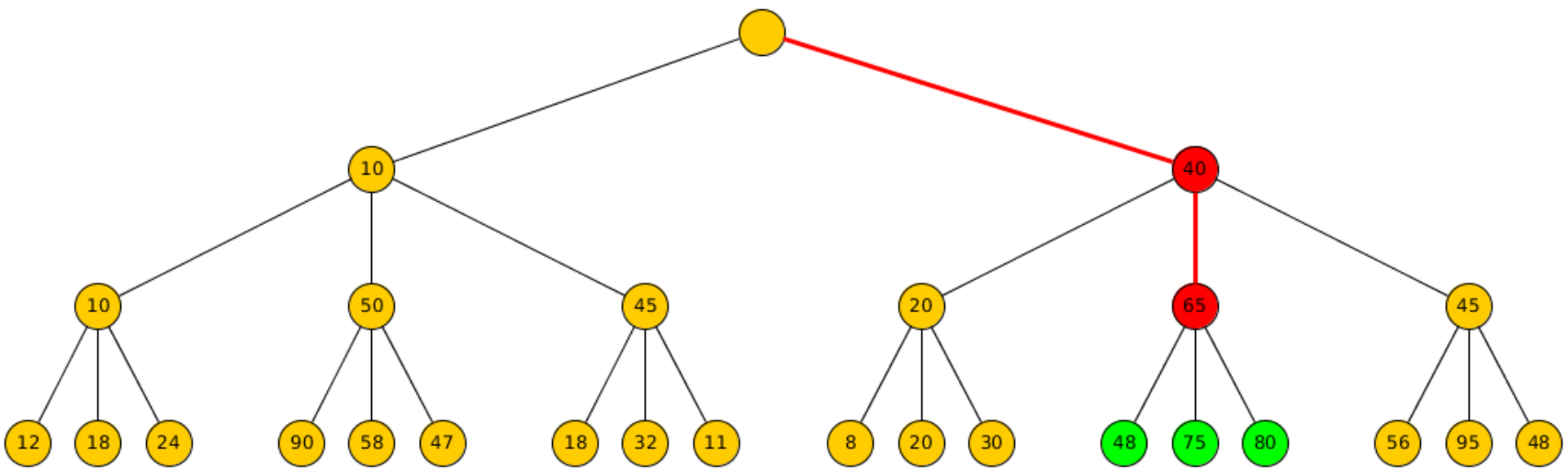
Жадный поиск (top-1)



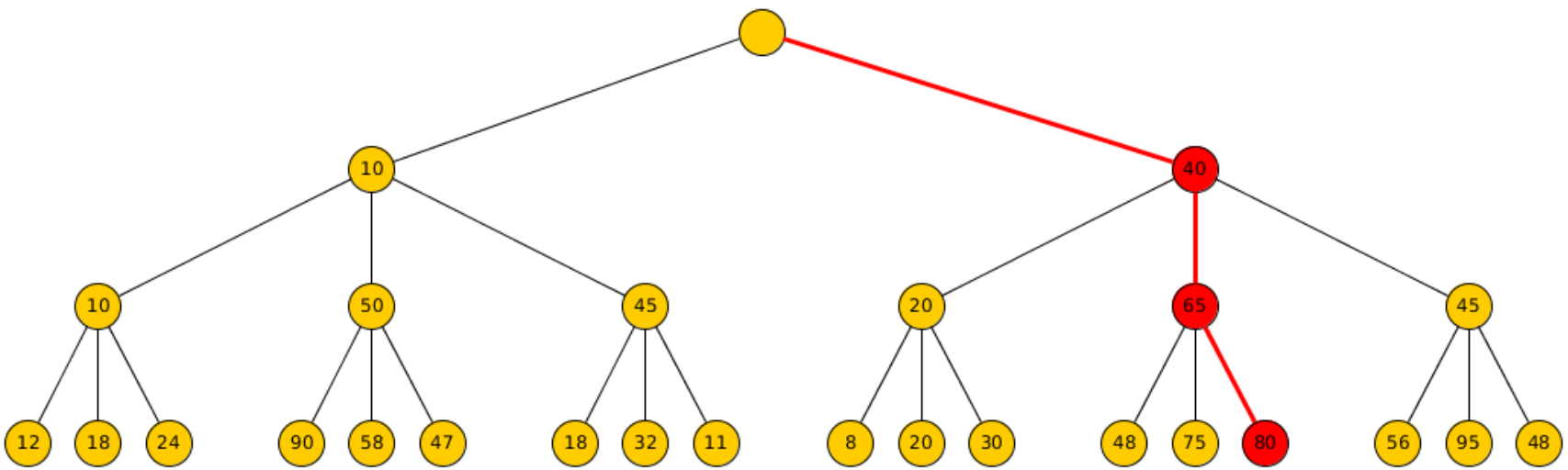
Жадный поиск (top-1)



Жадный поиск (top-1)



Жадный поиск (top-1)



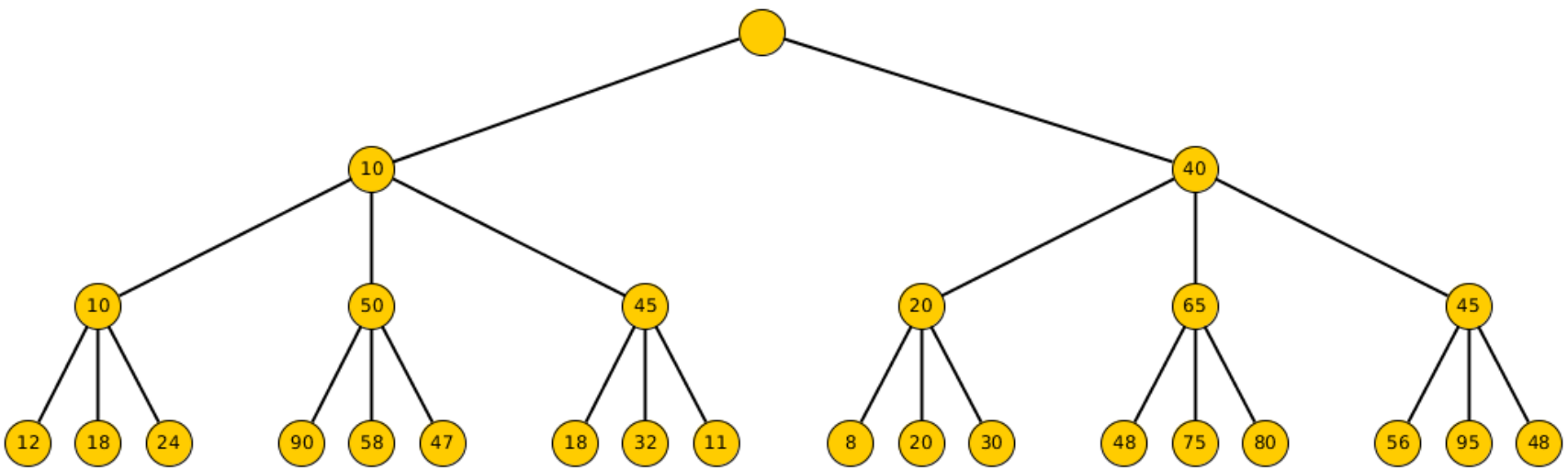
Лучевой поиск

- Лучевой поиск (beam search): при последовательном добавлении будем сохранять не один, а K лучших вариантов.
  - реализует жадный поиск в ширину (breadth first)
- Аналогично возможны обобщения последовательного исключения.

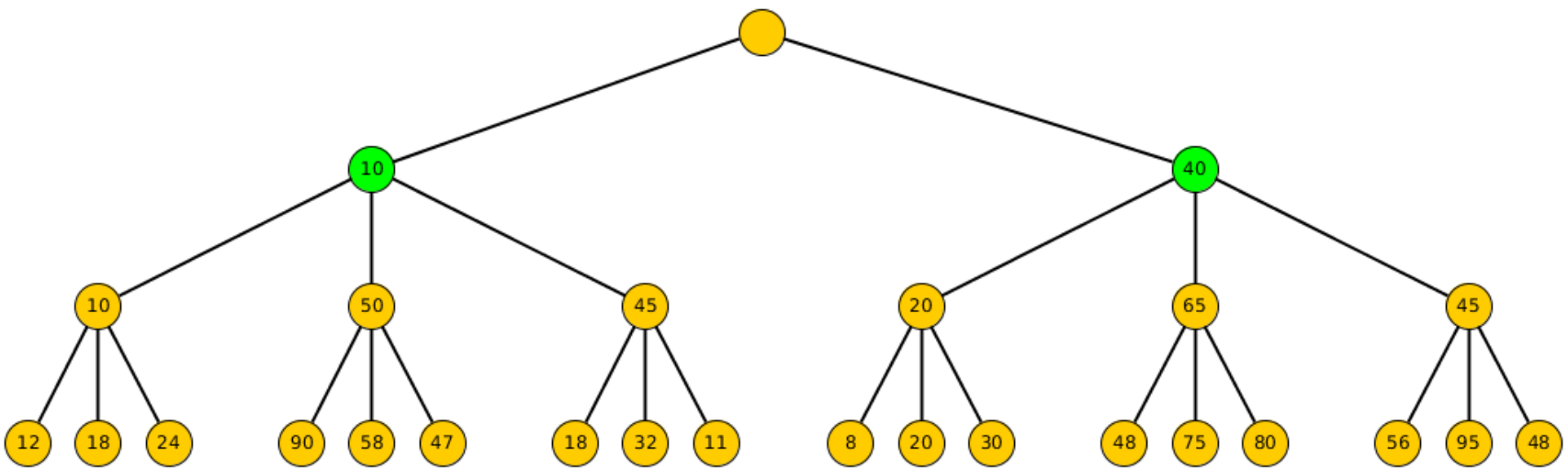
Принцип неоконченных решений Габора

Принимая решение, следует оставлять свободу выбора последующих решений.

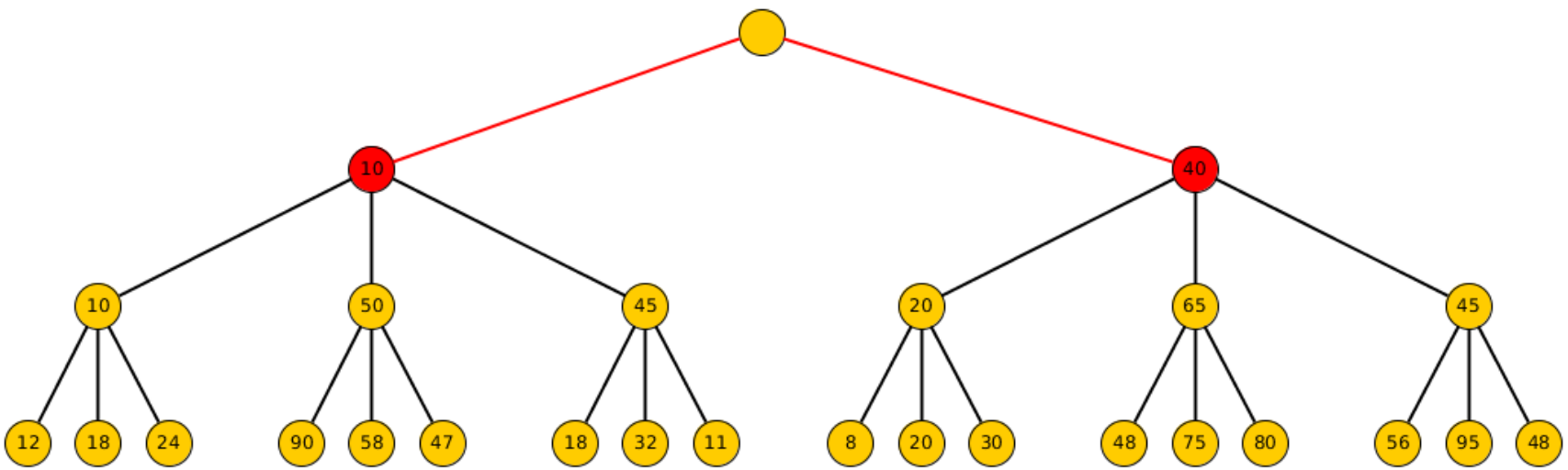
Лучевой поиск: $K = 2$



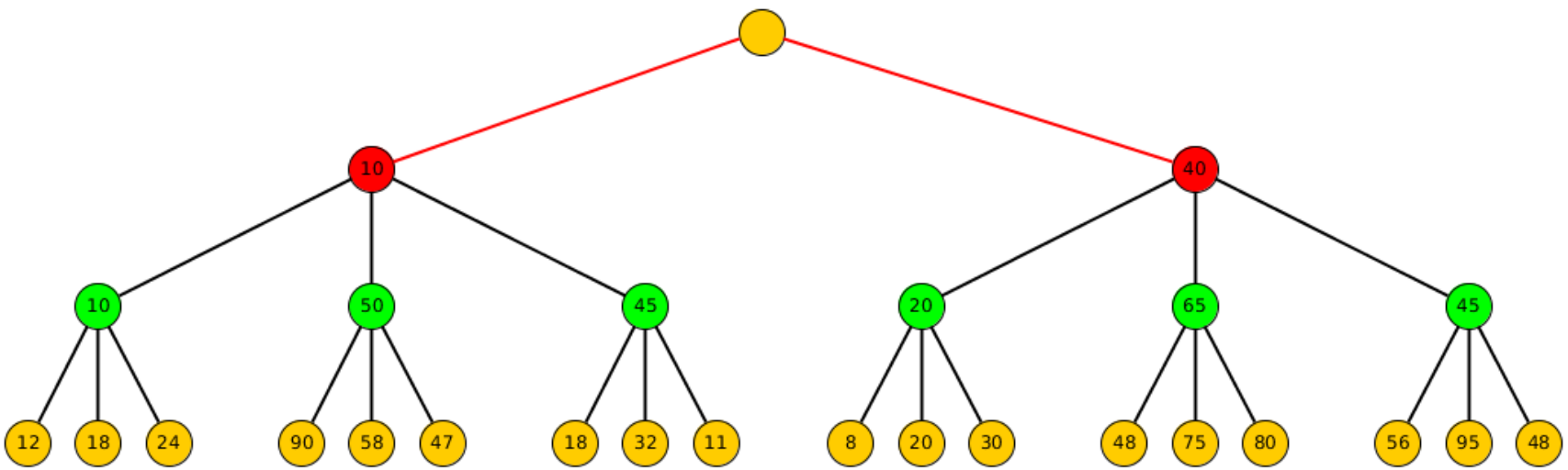
Лучевой поиск: $K = 2$



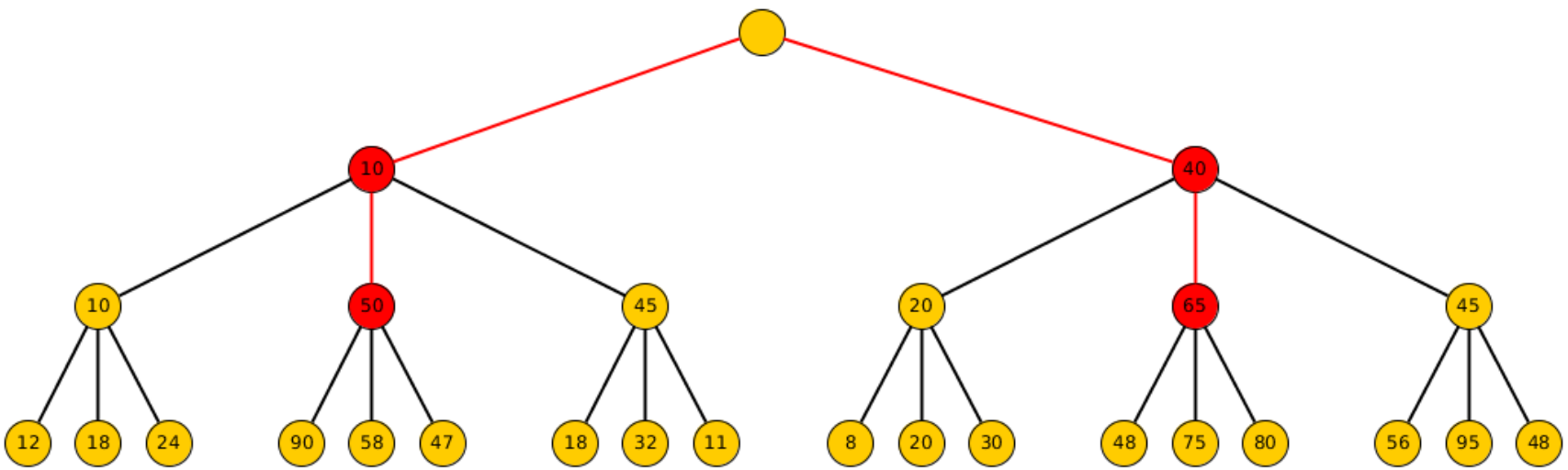
Лучевой поиск: $K = 2$



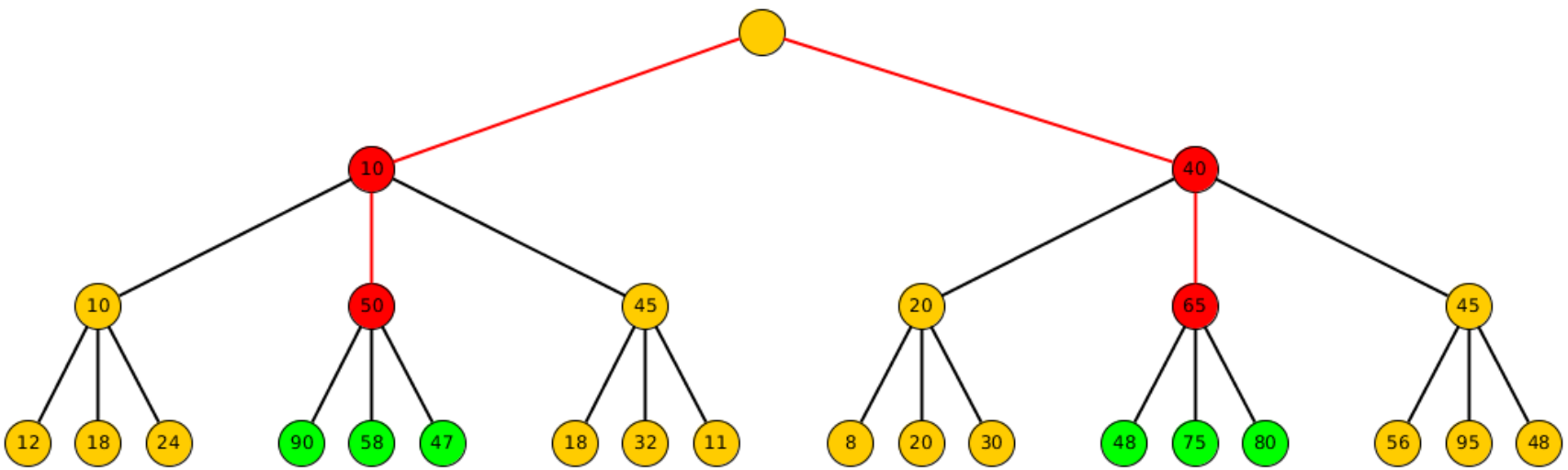
Лучевой поиск: $K = 2$



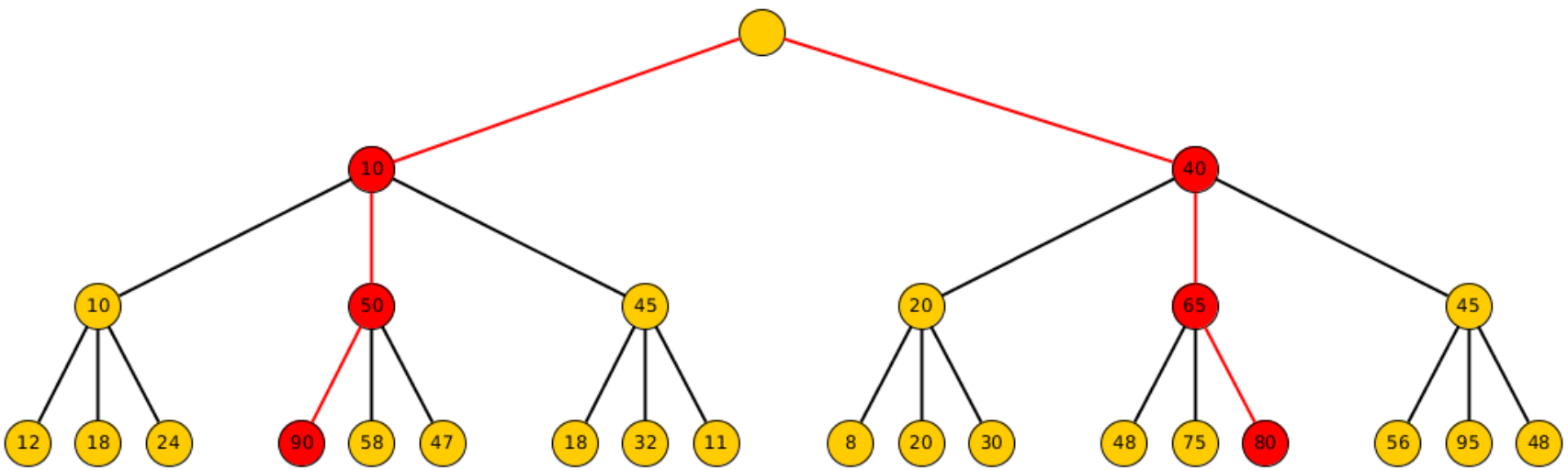
Лучевой поиск: $K = 2$



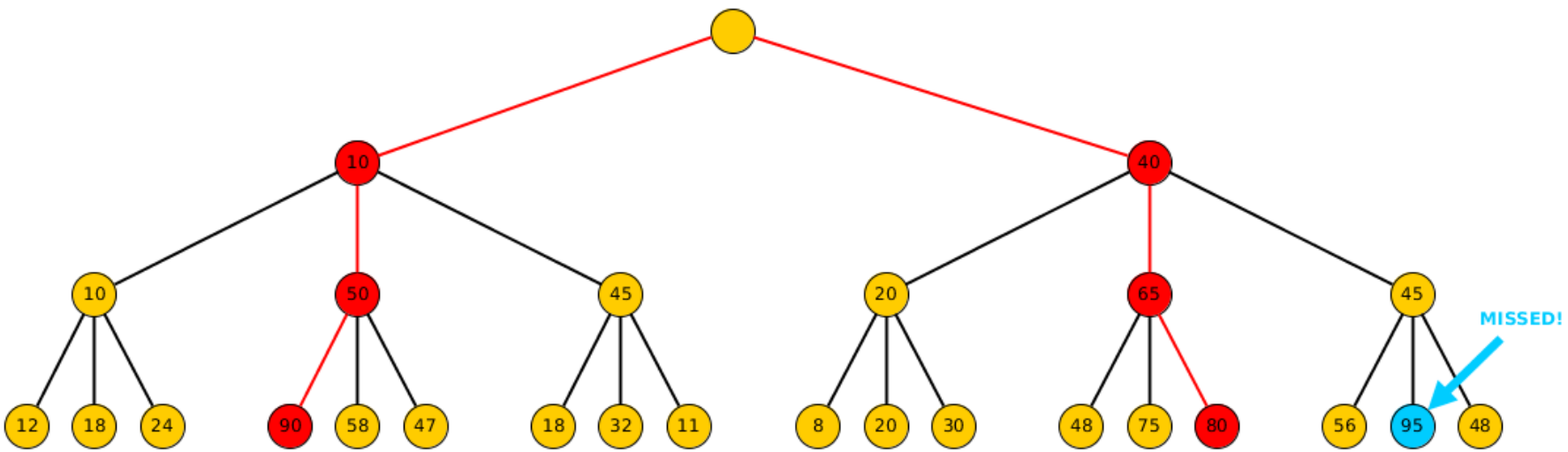
Лучевой поиск: $K = 2$



Лучевой поиск: $K = 2$



Лучевой поиск: $K = 2$



Комментарии

- Оптимизация: перебирать только признаки с максимальной информативностью.
- Для реализации нужна очередь с приоритетом (priority queue) с методами
  - push(elements, scores): загрузить варианты с их оценками качества
  - getKbest(K): выгрузить K лучших вариантов
- Сложность и полнота перебора:
  - Предположим, коэффициент ветвления B постоянный, а древо поиска сбалансированное глубины D.
  - Тогда сложность поиска $O(KBD)$.
  - При достаточно большом K ($K \geq B^{D-1}$) превращается в полный перебор.

2 Методы поиска набора признаков
- Метод последовательной модификации набора признаков
- Лучевой поиск (beam search)
- Генетические алгоритмы

Генетические алгоритмы

- Каждый набор признаков $U = \{f_{i(1)}, f_{i(2)}, ...f_{i(K)}\}$ кодируется бинарным вектором $b = [b_1, b_2, ...b_D]$, где $b_i = \mathbb{I}[f_i \in U]$
- Жадное добавление/исключение работает быстро, но как аналог GD сходится к локальному оптимуму.
- Полный перебор - сложность $O(2^D)$.
  - Как увеличить широту перебора, не скатываясь к полному перебору?

Генетические алгоритмы

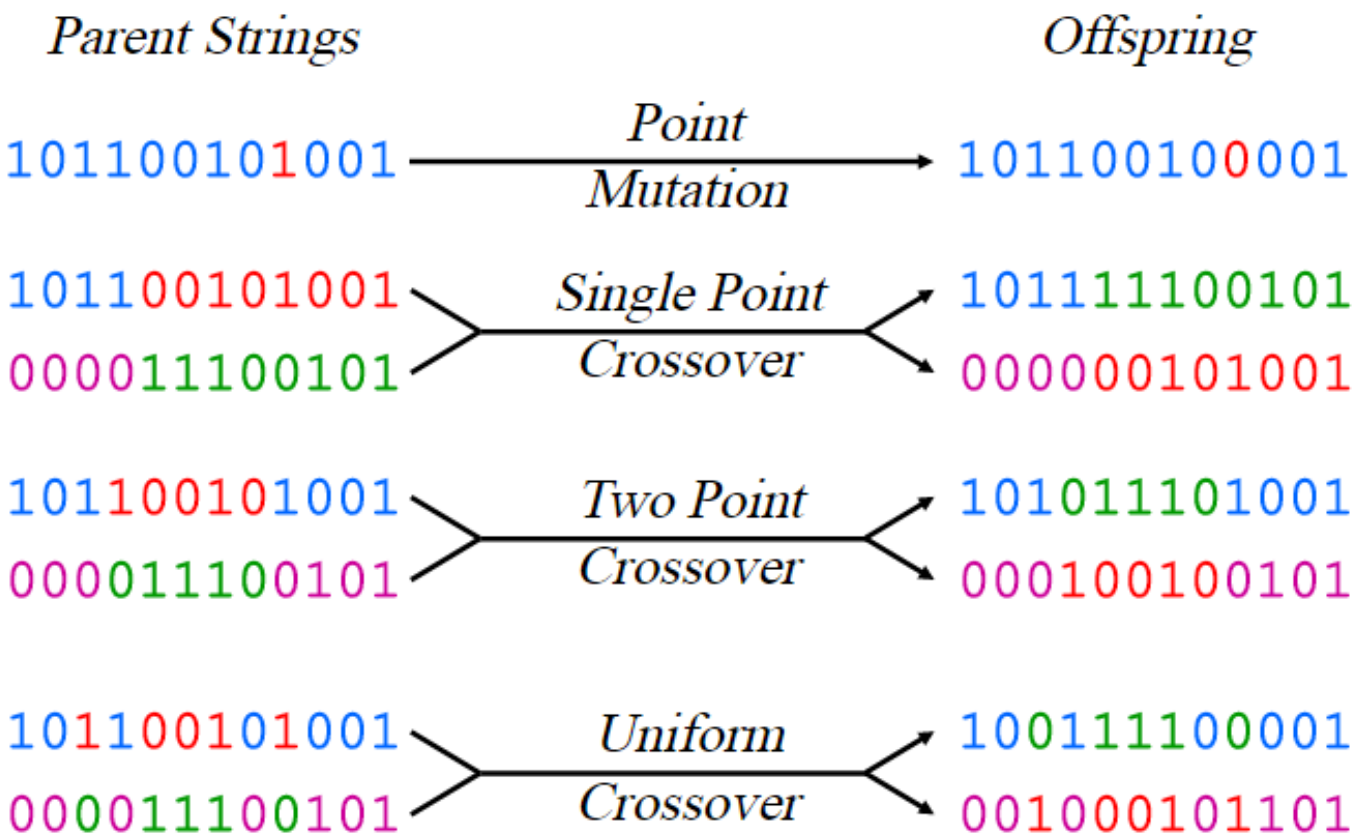
- Каждый набор признаков $U = \{f_{i(1)}, f_{i(2)}, ...f_{i(K)}\}$ кодируется бинарным вектором $b = [b_1, b_2, ...b_D]$, где $b_i = \mathbb{I}[f_i \in U]$
- Жадное добавление/исключение работает быстро, но как аналог GD сходится к локальному оптимуму.
- Полный перебор - сложность $O(2^D)$.
  - Как увеличить широту перебора, не скатываясь к полному перебору?

Гипотеза составного решения (building block hypothesis)

Хорошее решение состоит из комбинации других хороших решений.

- Генетические алгоритмы осуществляют поиск, комбинируя хорошие решения.

Операции скрещивания и мутации



Операции скрещивания и мутации[6]

- $mutation(b^1) = b$, где

$$b_i = \begin{cases} b_i^1 & \text{с вероятностью } 1-\alpha \\ \neg b_i^1 & \text{с вероятностью } \alpha \end{cases}, \ \alpha \in (0,1), \ \alpha \approx 0$$

- $crossover(b^1, b^2) = b$, где

uniform crossover: $b_i = \begin{cases} b_i^1 & \text{с вероятностью } \frac{1}{2} \\ b_i^2 & \text{иначе} \end{cases}$

single point crossover: $b_i = \begin{cases} b_i^1 & i \le i^* \\ b_i^2 & i > i^* \end{cases}$, i^* случайно

- Биологическая аналогия: модификации генетических цепочек.

[6] Какая модификация этих операций приведет к аналогу градиентного подъема?

Генетический алгоритм

ВХОД:

размер популяции B и расширенной популяции B'

параметры мутации и скрещивания

макс. число итераций T, мин. изменение качества ΔS

АЛГОРИТМ:

сгенерировать B наборов признаков $U_1, U_2, ...U_B$ случайно.

инициализировать $t=0$, $P^0 = \{S_1, S_2, ...S_B\}$, $S^0 = \max_{U \in P^0} S(U)$

пока $t <= T$ и $S^t - S^{t-1} > \Delta S$:

$t = t+1$

мутировать и скрещивать наборы из P^{t-1}:

$U'_1, U'_2, ...U'_{B'} = \text{modify}(P^{t-1}|\theta)$

упорядочить наборы по убыванию качества:

$S(U'^t_{i(1)}) \geq S(U'^t_{i(2)}) \geq ...S(U'^t_{i(B')})$

загрузить в следующую популяцию B лучших наборов:

$P^t = \{U'_{i(1)}, U'_{i(2)}, ...U'_{i(B)}\}$

оценить качество по лучшему набору $S^t = \max_{U \in P^t} S(U)$

ВЫХОД: лучший набор признаков $\hat{U} = \arg\max_{U \in P^t} S(U)$

Улучшения генетического алгоритма

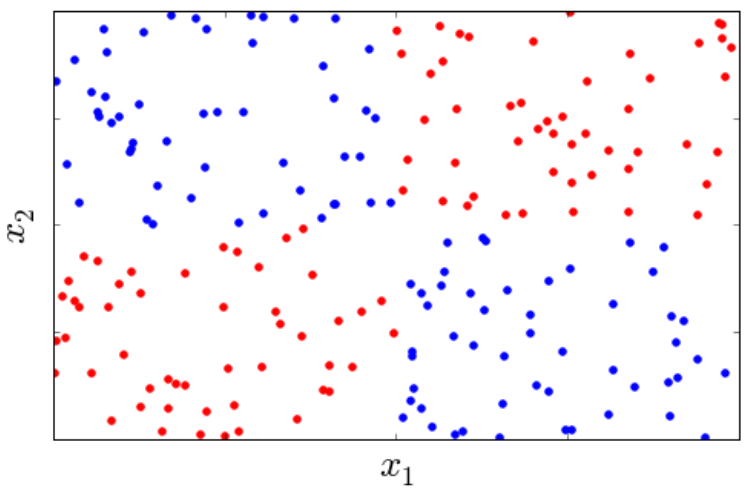
- **Добавлять и случайные наборы**: иначе вырождение популяции!
- **Ускорение**: мутация с $p \propto I(f)$.
- **Удлинить процесс оптимизации**:
  - прерывать процесс только если нет улучшения несколько итераций подряд.
  - при стагнации $\uparrow$ вероятность мутации
- **Бережнее изменять хорошие наборы/признаки**:
  - дополнять P^t лучшими наборами из P^{t-1}.
  - $\downarrow$ вероятность мутации для хороших признаков (часто встречающиеся в наборах P^{t-1}).
  - $\uparrow$ вероятность мутации для плохих признаков (редко встречающиеся в наборах P^{t-1}).
- **Увеличить широту поиска**:
  - скрещивание между > 2 наборами
  - вести несколько популяций из разных начальных условий, скрещивание лучших представителей между популяциями.

Важность признаков в контексте

Признаки могут влиять на y не по отдельности, а совместно:

$$p(y|x^1) = p(y), \quad p(y|x^2) = p(y)$$

$$p(y|x^1, x^2) \neq p(y)$$



Определение признаков, влияющих в контексте

Какие из методов могут определять признаки, влияющие в контексте?

- $corr(x^1, y),\ corr(x^1, y)$
- $MI(x^1, y),\ MI(x^1, y)$
- $MI(\left[x^1, x^2\right], y)$
- критерий relief
- последовательное включение одного признака
- последовательное исключение одного признака
- важности признаков по дереву
  - дерево с ранней остановкой
  - дерево с обрезкой [prunning]

Заключение

- Отбор признаков позволяет быстрее настраивать модели.
  - модели точнее, если много шумовых признаков
- Предпочтение методам со встроенным отбором признаков.
- Методы отбора признаков, упорядоченные по сложности:
  - отбирать признаки по значимости
  - последовательное включение/исключение 1 признака
  - последовательное включение/исключение группы признаков
  - лучевой поиск с поддержкой K лучших групп признаков
  - генетический алгоритм генерации наборов
  - полный перебор
- Последовательное включение/исключение, лучевой поиск, генетический алгоритм применимы и для др. задач дискретной оптимизации (например подбор архитектуры нейросети).