Обучение с учителем. Классификация. Дискриминантный анализ.

Е. Ларин, Ф. Ежов, И. Кононыхин

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Обучение с учителем

Выборка из генеральной случайной величины

- Для задачи регрессии: $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$
- Для задачи классификации: $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{A}^n$

Обучение с учителем: формальная постановка

- *Вход*: $\mathbf{X}$ — выборка $\boldsymbol{\xi}$, $\mathbf{y}$ — выборка η. Предполагаем, что существует неизвестное отображение $y^* : \boldsymbol{\xi} \to \eta$ (гипотеза непрерывности или компактности)
- *Задача*: По $\mathbf{X}$ и $\mathbf{y}$ найти такое отображение $\hat{y}^* : \boldsymbol{\xi} \to \eta$, которое приблизит отображение y^*.
- *Оценка*: Функция потерь $\mathfrak{L}(y^*(x), \hat{y}^*(x))$. Здесь x — реализация $\boldsymbol{\xi}$

Классификация

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{A}^n \tag{1}$$

Гипотеза компактности

«Близкие» объекты, как правило, принадлежат одному классу

Понятие близости может быть формализовано, например, так:

$$\rho(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}) = \left(\sum_{i=1}^{p} w_i |x_1^i - x_2^i|^k \right)^{\frac{1}{k}}$$

Классификация: генеральная постановка

Дано:

- $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^p$ — вектор признаков
- $\eta \in \mathbb{A}$ — классовая принадлежность

Предположение об их зависимсти можно записать в виде 2.

$$\eta = \Phi(\boldsymbol{\xi}, \varepsilon) \tag{2}$$

Обычно на ε накладываются условия

$$E\varepsilon = 0, \quad D\varepsilon = \sigma^2, \boldsymbol{\xi} \perp \varepsilon$$

Задача: найти Φ

Классификация: выборочная постановка

Дано:

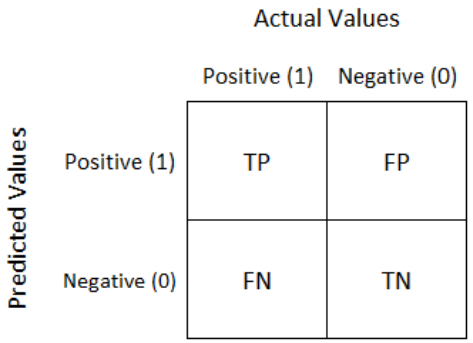
- $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ — матрица признаков
- $\mathbf{y} \in \mathbb{A}^n$ — вектор классовой принадлежности

Предположение имеет вид 3.

$$y_i = \Phi(\mathbf{x}_i, \varepsilon_i), \quad i = 1, \ldots, n \tag{3}$$

Задача: найти Φ

Классификация: оценка качества



На основе этой матрицы есть большое количество разных метрик: *accuracy*, *recall*, *precision*, F_β, *ROC–AUC*

Классификация: типы классов

- По количеству классов:
  - бинарная классификация
  - многоклассовая классификация
- По пересечению классов
  - пересекающиеся
  - непересекающаяся
  - нечёткие

Классификация: этапы обучения модели

- Выбор модели (класс рассматриваемых Φ из $\Im$)
- Выбор метрики
- Выбор метода обучения (способ подбора параметров для минимизации метрики на обучающем множестве)
- Выбор метода проверки (способ оценки качества модели)

Классификация: задача оптимизации

- $\hat{\beta}$ — параметры модели
- $\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta)$ — функционал классификации
- $\mathfrak{L}(\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta), \mathbf{y})$ — функция потерь (метрика)

$$\hat{\beta} = \arg\min_{\beta} \mathfrak{L}(\mathbf{\Phi}(\mathbf{x}, \beta), \mathbf{y})$$

Классификация: общий подход к решению

Как построить функционал Φ?
Общий подход — построить набор f_i, $i = 1, \ldots, K$. Каждая функция $f_i(\mathbf{x})$ показывает меру принадлежности $\mathbf{x}$ классу i.
Таким образом,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \arg\max_i(f_i(\mathbf{x})). \tag{4}$$

Дискриминантный анализ

Примем за функции f_i из 4 оценку вероятности принадлежности к i-му классу.

$$\Phi(\mathbf{x}) = \arg\max_i(P(C_i|\mathbf{x})).$$

C_i — класс, состоящий из одного события: $\mathbf{x}$ принадлежит i-му классу.

Дискриминантный анализ

Если известны априорные вероятности получения i-го класса (π_i), применим формулу Байеса

$$P(C_i|\mathbf{x}) = \frac{\pi_i P(\mathbf{x}|C_i)}{\sum_{j=1}^{K} \pi_j P(\mathbf{x}|C_j)}.$$

Отбросим знаменатель

$$f_i = P(C_i|\mathbf{x}) = \pi_i P(\mathbf{x}|C_i).$$

LDA

Предположение:

$$\mathtt{P}(\boldsymbol{\xi}|\eta = A_i) = \mathtt{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma})$$

Классифицирующая функция:

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\pi_i}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}}\right)$$

После упрощения:

$$h_i(\mathbf{x}) = -0.5\boldsymbol{\mu}_i\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_i^{\mathtt{T}} + \boldsymbol{\mu}_i\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \log\pi_i$$

QDA

Предположение:

$$\mathtt{P}(\boldsymbol{\xi}|\eta = A_i) = \mathtt{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$$

Классифицирующая функция:

$$f_i(\mathbf{x}) = \frac{\pi_i}{(2\pi)^{p/2}|\boldsymbol{\Sigma}_i|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}}\right)$$

После упрощения:

$$g_i(\mathbf{x}) = -0.5(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathtt{T}} - 0.5\log|\boldsymbol{\Sigma}_i| + \log\pi_i$$

Место Феди

Кросс-валидация

Кросс-валидация (aka перекрестная проверка, скользящий контроль) — процедура эмпирического оценивания обобщающей способности алгоритмов.
С помощью кросс-валидации "эмулируется"наличие тестовой выборки, которая не участвует в обучении модели, но для которой известны правильные ответы.

Кросс-валидация: виды

- Валидация на отложенных данных (Hold-Out Validation);
- Полная кросс-валидация (Complete Cross-Validation);
- k-fold Cross-Validation;
- t×k-fold Cross Validation;
- Кросс-валидация по отдельным объектам (Leave-One-Out);
- Случайные разбиения (Random Subsampling).

Кросс-валидация: Обозначения

Введем обозначения:

- $\mathbf{X}$ — матрица признаков, описывающие таргеты $\mathbf{y}$;
- $\mathbf{T}^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l, x_i \in \mathbf{X}, y_i \in \mathbf{y}$ — обучающая выборка;
- $\mathfrak{L}$ — функция потерь (мера качества);
- A — исследуемая модель;
- $\mu : (\mathbf{X} \times \mathbf{y}) \to A$ — алгоритм обучения.

Кросс-валидация: Hold-Out Validation

Обучающая выборка один раз случайным образом разбивается на две части $\mathbf{T} = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}$.

После чего решается задача оптимизации:
$HO(\mu, \mathbf{T}^t, \mathbf{T}^{l-t}) = \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^t), \mathbf{T}^{l-t}) \to min$.
Метод Hold-out применяется в случаях больших датасетов, т.к. требует меньше вычислительных мощностей по сравнению с другими методами кросс-валидации.
Недостатком метода является то, что оценка существенно зависит от разбиения, тогда как желательно, чтобы она характеризовала только алгоритм обучения.

Кросс-валидация: Complite cross-validation

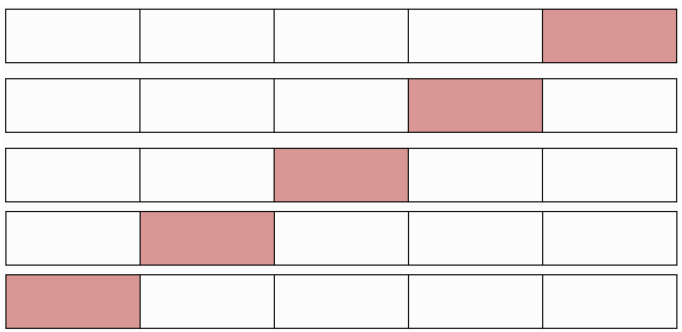
- Выбирается значение t;
- Выборка разбивается всевозможными способами на две части $\mathbf{T} = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}$.

После чего решается задача оптимизации:
$CVV_t = \frac{1}{C_l^{l-t}} \sum_{\mathbf{T}^l = \mathbf{T}^t \cup \mathbf{T}^{l-t}} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^t), \mathbf{T}^{l-t}) \to min.$
Здесь число разбиений C_l^{l-t} становится слишком большим даже при сравнительно малых значениях t, что затрудняет практическое применение данного метода.

Кросс-валидация: k-fold Cross-Validation

- $\mathbf{T}^l$ разбивается на $\mathbf{F_1} \cup \cdots \cup \mathbf{F_k}, |\mathbf{F_i}| \approx \frac{1}{k}$ частей;
- Производится k итераций:
  - Модель обучается на $k-1$ части обучающей выборки;
  - Модель тестируется на части обучающей выборки, которая не участвовала в обучении.

Каждая из k частей единожды используется для тестирования.



После чего решается задача оптимизации:
$CV_k = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^l \setminus \mathbf{F}_i), \mathbf{F}_i) \to min.$

Кросс-валидация: t×k-fold Cross Validation

Как k-fold Cross-Validation, только t раз.

Разбиение:

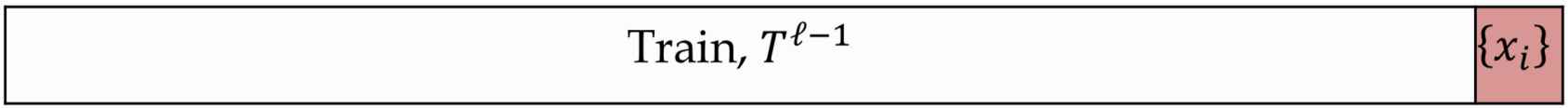
$\mathbf{T}^l = \mathbf{F}_{(1,1)} \cup \cdots \cup \mathbf{F}_{(k,1)} = \mathbf{F}_{(1,t)} \cup \cdots \cup \mathbf{F}_{(k,t)}, |\mathbf{F}_{(i,j)}| \approx \frac{l}{k},$

Задача оптимизации:

$CV_{t\times k} = \frac{1}{tk} \sum_{j=1}^{t} \sum_{i=1}^{k} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^l \setminus \mathbf{F}_{i,j}), \mathbf{F}_{i,j}) \to min$

Кросс-валидация: Leave-One-Out

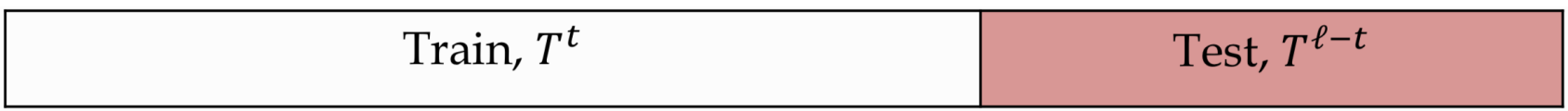
Выборка разбивается на $l - 1$ и 1 объект l раз.



$LOO = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} \mathfrak{L}(\mu(\mathbf{T}^l \setminus p_i), p_i) \to min$, где $p_i = (x_i, y_i)$.
Преимущества LOO в том, что каждый объект ровно один раз участвует в контроле, а длина обучающих подвыборок лишь на единицу меньше длины полной выборки.
Недостатком LOO является большая ресурсоёмкость, так как обучаться приходится L раз.

Кросс-валидация: Random subsampling (Monte-Carlo cross-validation)

Выборка разбивается в случайной пропорции. Процедура повторяется несколько раз.



Кросс-валидация: Выбор лучшей модели

Не переобученый алгоритм должен показывать одинаковую эффективность на каждой части.