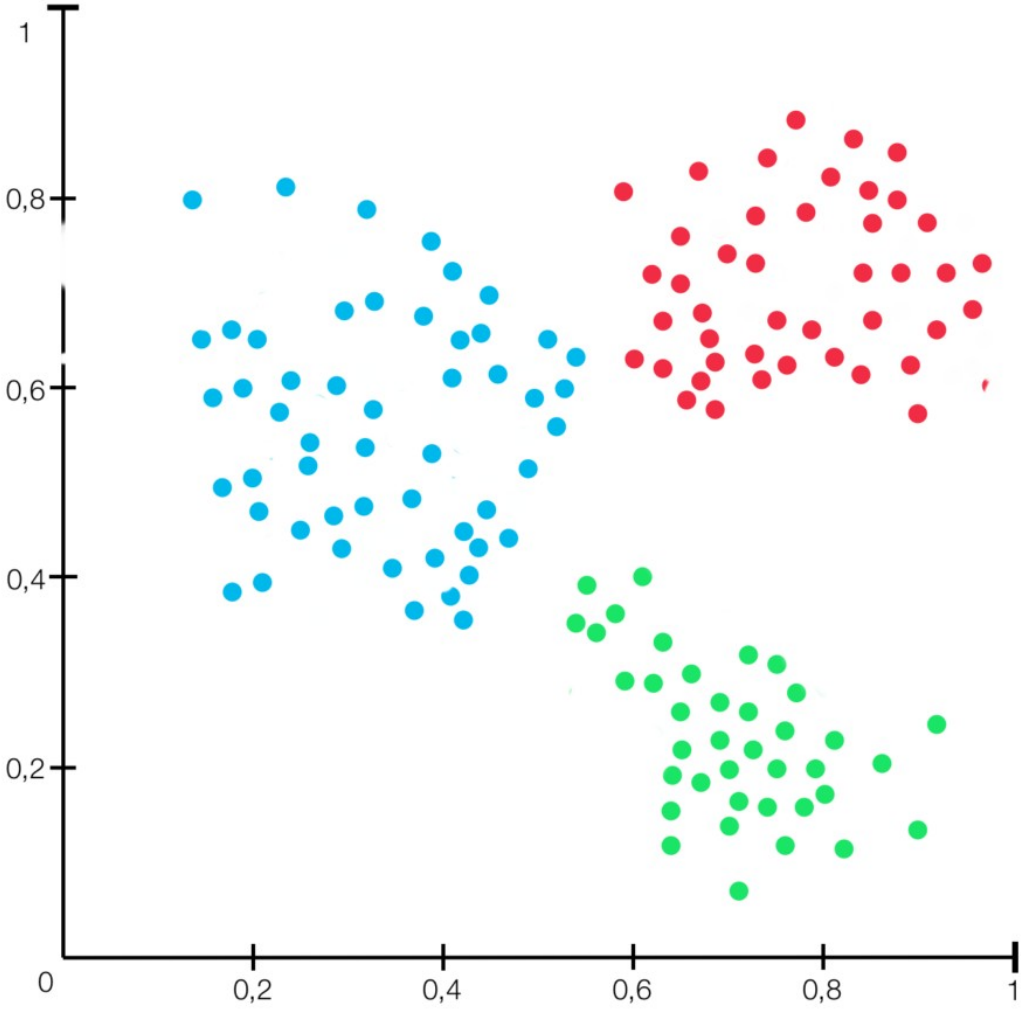
Постановка задач и выбор моделей в машинном обучении

Вадим Викторович Стрижов

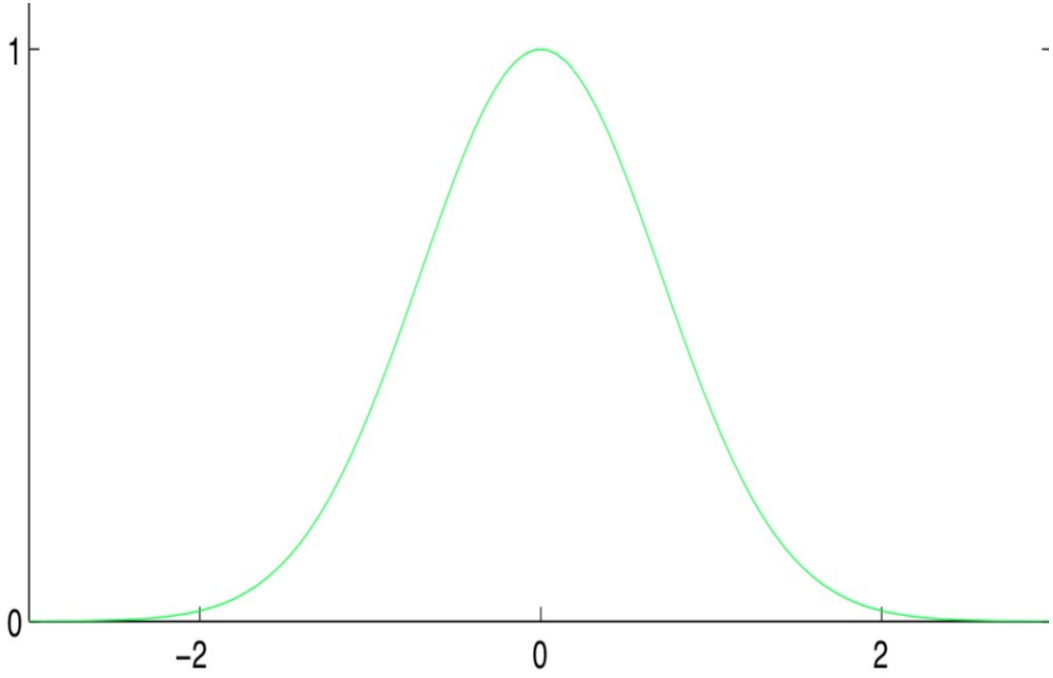
Московский физико-технический институт

Осенний семестр 2019

Metric feature generation



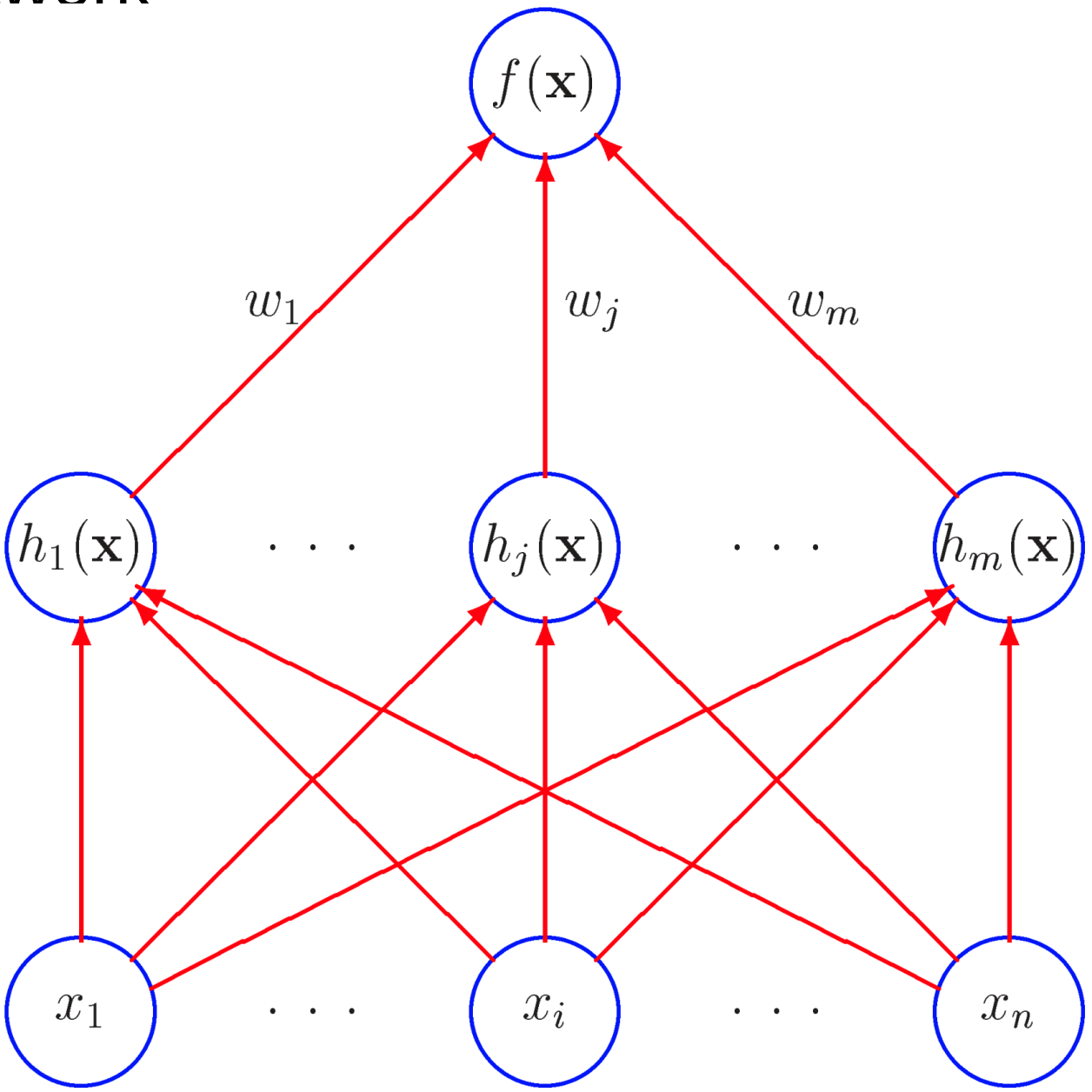
Radial function



$$h(x) = \exp\left(-\frac{(x-c)^2}{r^2}\right)$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1} w_j \, h_j(\mathbf{x})$$

Radial basis network



Цель исследования

Задача

Определить вид активности человека по форме сигнала акселерометра мобильного телефона.

Требуется

Построить простой, устойчивый, точный алгоритм многоклассовой классификации временных рядов.

Предлагается

Для повышения качества классификации уточнить метрическое пространство временных рядов.

Метод

Обучение матрицы ковариации множества временных рядов.

Постановка задачи

Дано: Выборка $\mathfrak{D} = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$ — множество объектов с известными метками классов. Каждый объект $\mathbf{x}_i \in \mathbf{X}$ —временной ряд, $\mathbf{X}$ — множество временных рядов фиксированной длины n, $y_i \in \{1, \ldots, K\}$.

Требуется

Построить алгоритм $\mathbf{a} : \mathbf{x} \to \{1, \ldots, K\}, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{X}$.

Модель имеет вид:

$$a = b \circ \mathbf{f} \circ G, \quad \text{где}$$

- G — процедура выравнивания временных рядов относительно центроида класса,
- $\mathbf{f}$ — алгоритм метрического обучения,
- b — алгоритм многоклассовой классификации.

Нахождение центроида

Определение

Пусть $\mathbf{X}_e$ — множество временных рядов выборки $\mathfrak{D}$, принадлежащих одному классу e. Центроидом множества объектов $\mathbf{X}_e = \{\mathbf{x}_i | y_i = e\}_{i=1}^{\ell}$ по расстоянию ρ называется вектор:

$$\mathbf{c}_e = \underset{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \sum_{\mathbf{x}_i \in \mathbf{X}_e} \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{c}).$$

$\rho(\cdot, \cdot)$ — стоимость выравнивающего пути между временными рядами.

Значение функции $\rho(\cdot, \cdot)$ вычисляется методом динамической трансформации шкалы времени.

Процедура выравнивания

Описание процедуры

- построить множество центроидов классов $\{\mathbf{c}_e\}_{e=1}^{K}$;
- по множеству центроидов найти пути наименьшей стоимости между каждым временным рядом $\mathbf{x}_i$ и центроидом его класса $\mathbf{c}_{y_i}$;
- по каждому пути восстановить выравненный временной ряд;
- привести множества выравненных временных рядов к нулевому среднему и нормировать на дисперсию.

Результатом является множество выравненных временных рядов.

Расстояние Махаланобиса

$$d_{\mathbf{A}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \mathbf{A}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)},$$

где $\mathbf{A}$ — симметричная неотрицательно определённая матрица.

Представим матрицу $\mathbf{A}$ в виде:

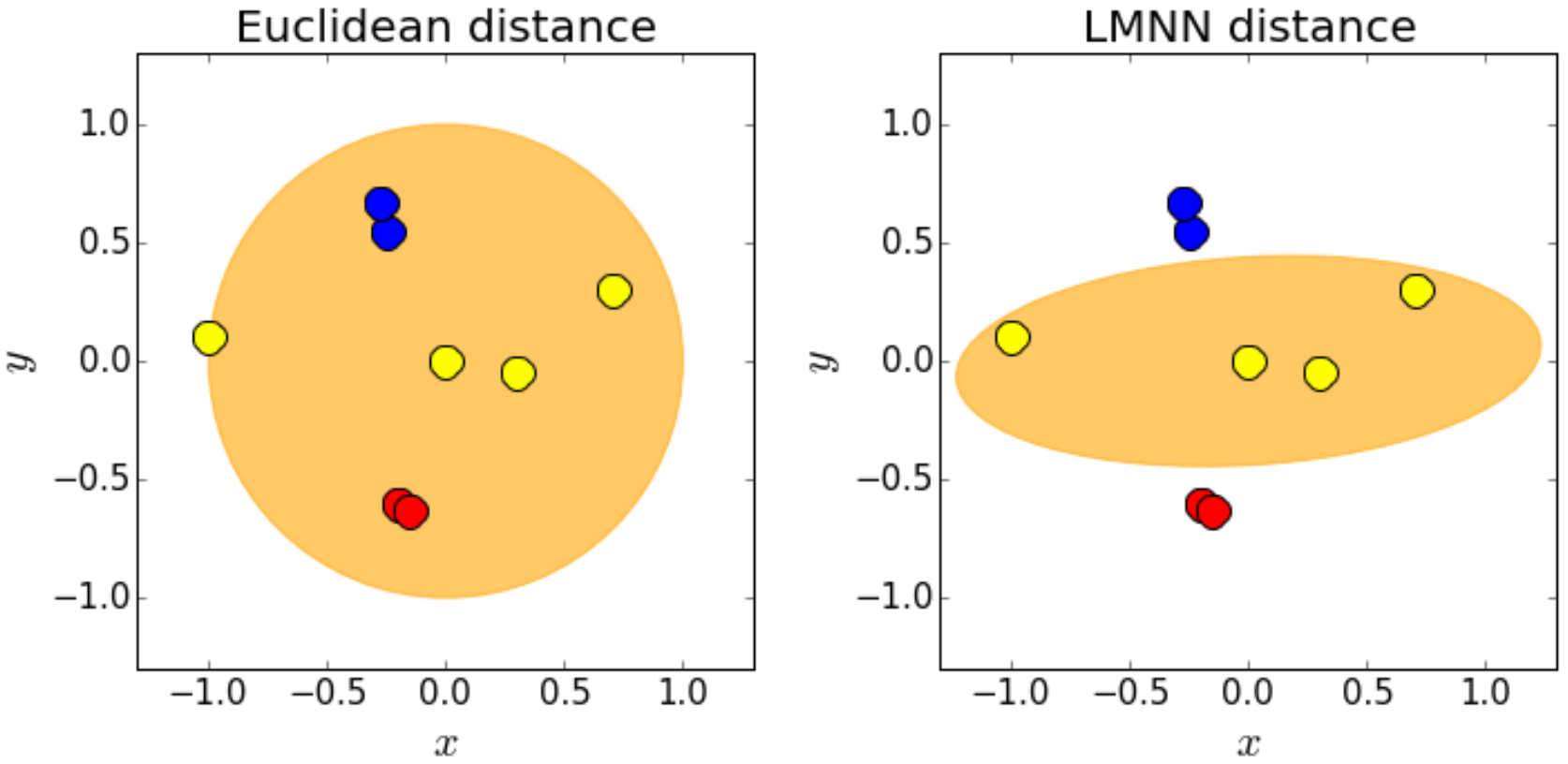
$$\mathbf{A} = \mathbf{L}^T \mathbf{L}.$$

Расстояние Махаланобиса - евклидово расстояние в новом пространстве объектов:

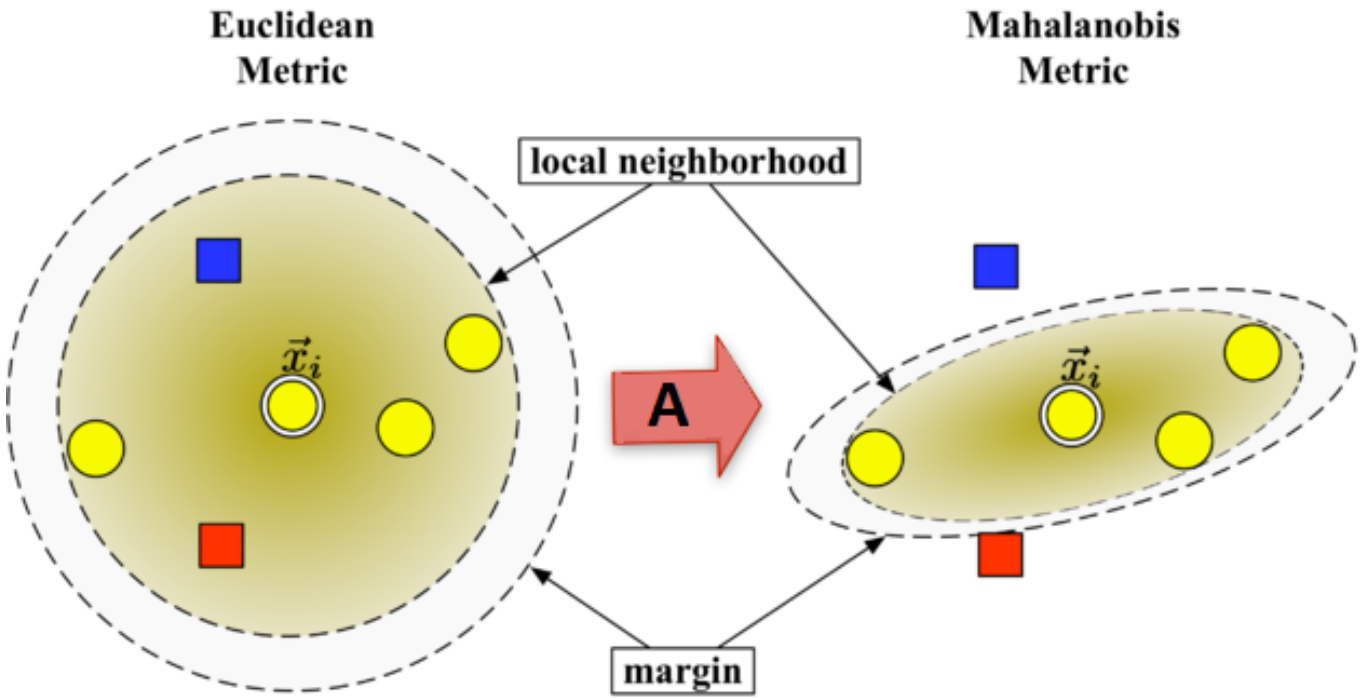
$$d_{\mathbf{A}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sqrt{(\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))^T (\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))} = \|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\|_2.$$

Метрическое обучение состоит в нахождение данного пространства, т.е. матрицы $\mathbf{L}$.

Алгоритм LMNN



Алгоритм LMNN (Weinberger, K. Q., 2006)



Объектом-нарушителем для $\mathbf{x}_i$ назовём объект $\mathbf{x}_l$ такой, что

$$\|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_l)\|^2 \leq \|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\|^2 + 1, \quad \text{где } j \rightsquigarrow i,\ y_i \neq y_l.$$

$j \rightsquigarrow i$ означает, что $\mathbf{x}_j$ является одним из k ближайших соседей для $\mathbf{x}_i$.

Алгоритм LMNN

- Для каждого объекта минимизируем расстояния до k ближайших соседей из того же класса:

$$Q_1(\mathbf{L}) = \sum_{j \rightsquigarrow i} \|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\|^2 \to \min_{\mathbf{L}}.$$

- Штрафуем объекты-нарушители:

$$Q_2(\mathbf{L}) = \sum_{j \rightsquigarrow i} [y_i \neq y_l] \left[1 + \|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\|^2 - \|\mathbf{L}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_l)\|^2\right]_+ \to \min_{\mathbf{L}}.$$

Функция ошибки

$$Q(\mathbf{L}) = \mu Q_1(\mathbf{L}) + (1-\mu) Q_2(\mathbf{L}) \to \min_{\mathbf{L}},$$

где $\mu \in (0, 1)$ - весовой параметр.

Классификация

- Пусть $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$ — временной ряд без метки класса.
- Выравним временной ряд $\mathbf{x}$ относительно всех центроидов классов. Получим K временных рядов

$$\hat{\mathbf{x}}_e = G(\mathbf{x}, \mathbf{c}_e), \quad \text{где} \quad e = \{1, \ldots, K\}.$$

- Отнесём временной ряд к классу, для которого минимально расстояние до соответствующего центроида.

Решающее правило

$$\hat{y} = \underset{e \in \{1,\ldots,K\}}{\operatorname{argmin}} \; d_{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}_e, \mathbf{c}_e).$$

В качестве расстояния используем оптимальную метрику Махаланобиса с фиксированной матрицей $\mathbf{A}$.

Вычислительный эксперимент

Реальные данные акселерометра

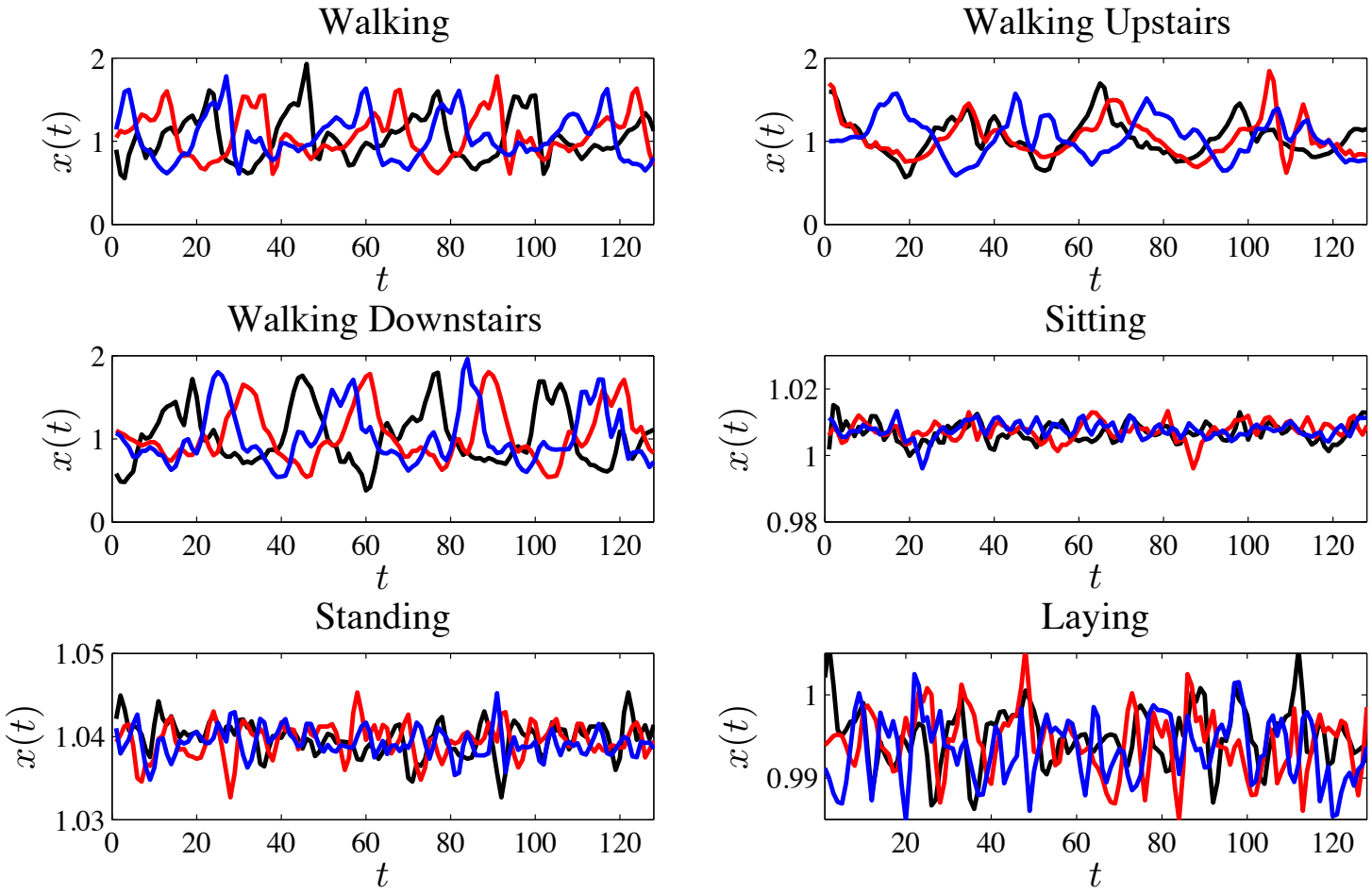
- Количество классов: $K = 6$.
- Длина временного ряда: 128.
- Количество временных рядов в каждом классе: 200.

Виды активности

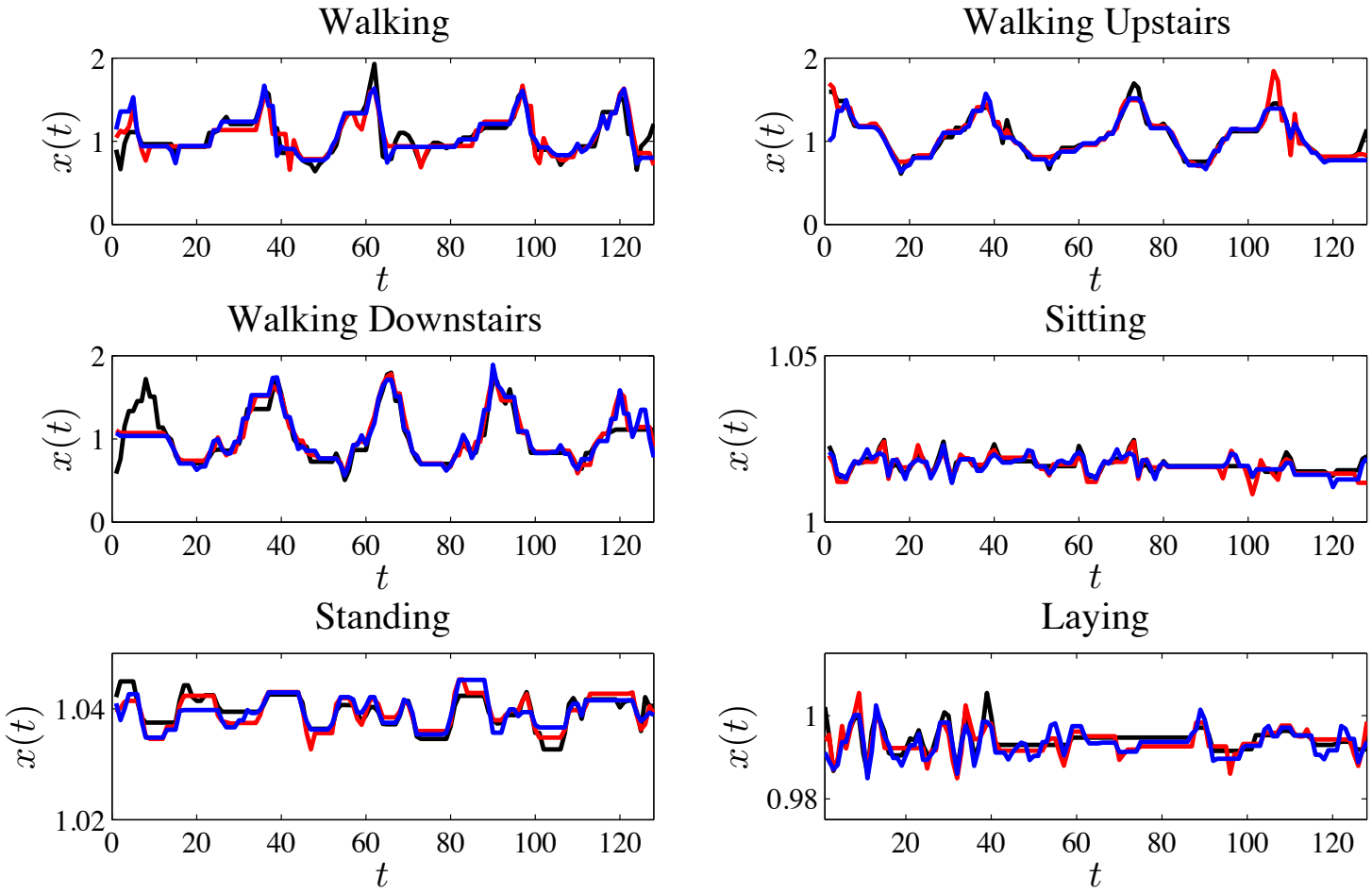
- ходьба;
- ходьба вверх;
- ходьба вниз;
- сидение;
- стояние;
- лежание.

https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/00240/

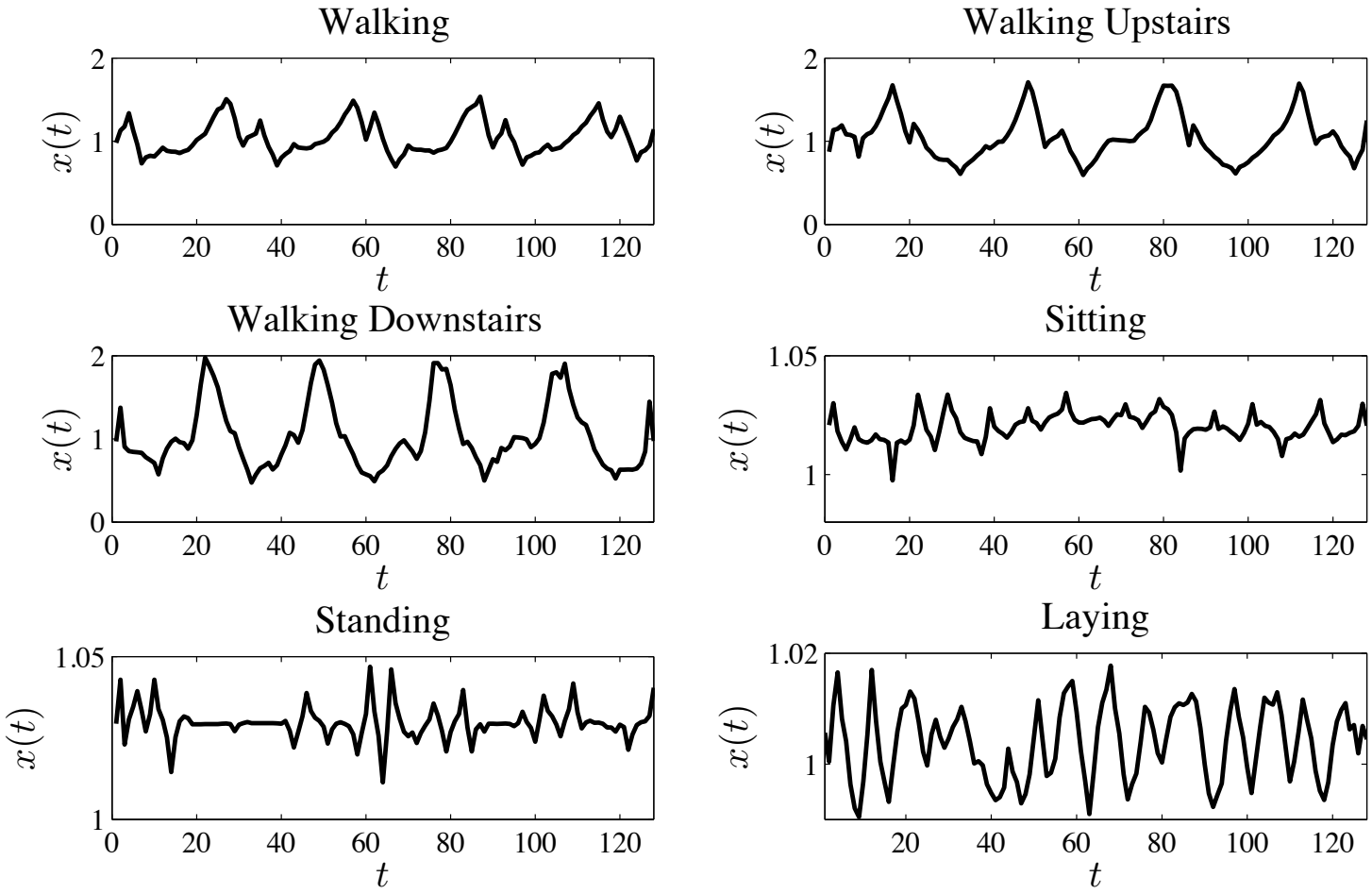
Временные ряды акселерометра



Выравненные временные ряды



Центроиды временных рядов акселерометра



Результаты эксперимента

Изменение качества классификации при использовании метрического обучения:

	Истинные метки классов					
	1	2	3	4	5	6
1	**0,355**	0,06	0,04	0	0	0
2	0,03	**0,43**	-0,095	0	0	0
3	0,02	0,025	**0,425**	0	0	0
4	0,015	-0,005	-0,025	**0,025**	0,025	0
5	-0,245	-0,25	-0,28	0	**-0,03**	-0,01
6	-0.175	-0,26	-0,06	-0,025	0,005	**-0,01**

Точность классификации

- евклидова метрика: 63.5%
- метрика Махаланобиса: 82.75%