Интеллектуальный анализ данных и распознавание образов.

Теоретические и практические проблемы

чл.-корр. РАН К. В. Рудаков,
к.ф.-м.н. К. В. Воронцов (http://www.ccas.ru/voron)

Семинар «Глобальные изменения климата»,
руководители: академик Г. И. Марчук, академик В. П. Дымников

3 марта 2010

Содержание

Задача обучения по прецедентам (определения и обозначения)

$\mathbb{X}$ — множество объектов; $\mathbb{Y}$ — множество ответов;
$\exists y\colon \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$ — неизвестная зависимость.

Дано: $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — *обучающая выборка*, $y_i = y(x_i)$

$$\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_1(x_\ell) & \ldots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_\ell \end{pmatrix}$$

Построить алгоритм — функцию $a\colon \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$, приближающую неизвестную $y(x)$ на всём множестве $x \in X$.

$$\begin{pmatrix} f_1(x'_1) & \ldots & f_n(x'_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_1(x'_k) & \ldots & f_n(x'_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ?_1 \\ \ldots \\ ?_k \end{pmatrix}$$

Примеры прикладных задач обучения по прецедентам

- Распознавание, классификация, принятие решений ($|\mathbb{Y}| < \infty$):
  - x — пациент; y — долгосрочный исход операции;
  - x — заёмщик; y — вероятность дефолта;
  - x — абонент; y — вероятность смены оператора связи;
  - x — фотопортрет; y — идентификатор личности;
  - x — фрагмент ДНК; y — функция: промотор / ген;
  - x — фрагмент белка; y — тип вторичной структуры;
  - x — текстовое сообщение; y — спам / не спам;
  - x — документ; y — тематика (позиция в каталоге).
- Регрессия и прогнозирование ($\mathbb{Y} = \mathbb{R}$ или $\mathbb{R}^m$):
  - x — структура хим. соединения; y — его свойство;
  - x — параметры технолог. процесса; y — свойство продукции;
  - x — история продаж; y — прогноз потребительского спроса;
  - x — характеристики недвижимости; y — цена;
  - x — пара $\langle$клиент,товар$\rangle$; y — рейтинг товара.

Классическое и информационное моделирование

$A = \{a(x) = \varphi(x, w) \colon w \in \Omega\}$ — модель алгоритмов

Классическое моделирование:

- знаний о предметной области достаточно $\Rightarrow \varphi$;
- число степеней свободы ($\dim \Omega$) невелико;
- на выходе — достаточно сложное решение.

Информационное моделирование:

- мало знаний о предметной области;
- число степеней свободы ($\dim \Omega$) велико;
- на выходе — простые решения или прогнозы.

Проблема переобучения

$\mu\colon (\mathbb{X} \times \mathbb{Y})^\ell \to A$ — метод обучения;
$\nu(a, X^\ell)$ — частота ошибок алгоритма a на выборке X^ℓ;
$X^k = (x'_i, y'_i)_{i=1}^k$ — независимая *контрольная выборка*.

Теория статистического обучения (Statistical Learning Theory) занимается оценками *вероятности переобучения*:

$$\mathsf{P}\left[\nu(\mu(X^\ell), X^k) - \nu(\mu(X^\ell), X^\ell) \geqslant \varepsilon\right].$$

Некоторые современные подходы к получению точных оценок:

- Margin based bounds [Bartlett, 1998]
- Rademacher complexity bounds [Koltchinskii, 2001]
- PAC-Bayes bounds [McAllester, 1999; Langford, 2005]
- Точные комбинаторные оценки [Воронцов, 2009]

Скользящий контроль

Скользящий контроль (cross-validation):
$X^L = \mathbb{X}_n^\ell \sqcup X_n^k$, $n = 1, \ldots, N$ — разбиения на обучение и контроль

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

Стандартная методология тестирования

- $t \times q$-fold cross-validation;
- Матрица «алгоритмы $\times$ задачи»;
- Выделение множества проверочных задач;
- Репозиторий реальных задач UCI: `archive.ics.uci.edu/ml`;
- Полигон алгоритмов классификации: `Poligon.MachineLearning.ru`.

Особенности реальных задач

Особенности исходных данных:

- неполные данные (пропуски);
- неточные данные (погрешности, выбросы);
- разнородные данные;
- малые выборки;
- сверхбольшие выборки;
- несбалансированные классы.

Требования к алгоритмам:

- динамическое дообучение;
- универсальные ограничения.

Некоторые методы классификации

- kNN — метод k ближайших соседей;
- ANN — искусственные нейронные сети;
- SVM — метод опорных векторов;
- RLR — логистическая регрессия с регуляризацией;
- RBF — метод радиальных базисных функций;
- КОРА, ТЕМП, ТЕСТ — логические алгоритмы;
- CART, C4.5, ADT — решающие деревья;
- HME — иерархические смеси алгоритмов;
- AdaBoost, TreeNet — композиции решающих деревьев;
- МГУА — метод группового учёта аргументов;
- MVR Composer — индуктивное порождение моделей.

Метод k ближайших соседей и его обобщения

Гипотеза компактности:

Схожие объекты, как правило, лежат в одном классе.

Пусть $\rho(x, x')$ — функция расстояния на $\mathbb{X}$.

$$a(u; X^\ell) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{y_{i(u)}=y} w(i, u),$$

где $w(i, u)$ — вес i-го соседа для классификации объекта u,
$i(u)$ — номер i-го соседа объекта u.

Важные проблемы:

- Выбор адекватной модели сходства ρ;
- «Проклятие размерности».

Задача построения разделяющей поверхности

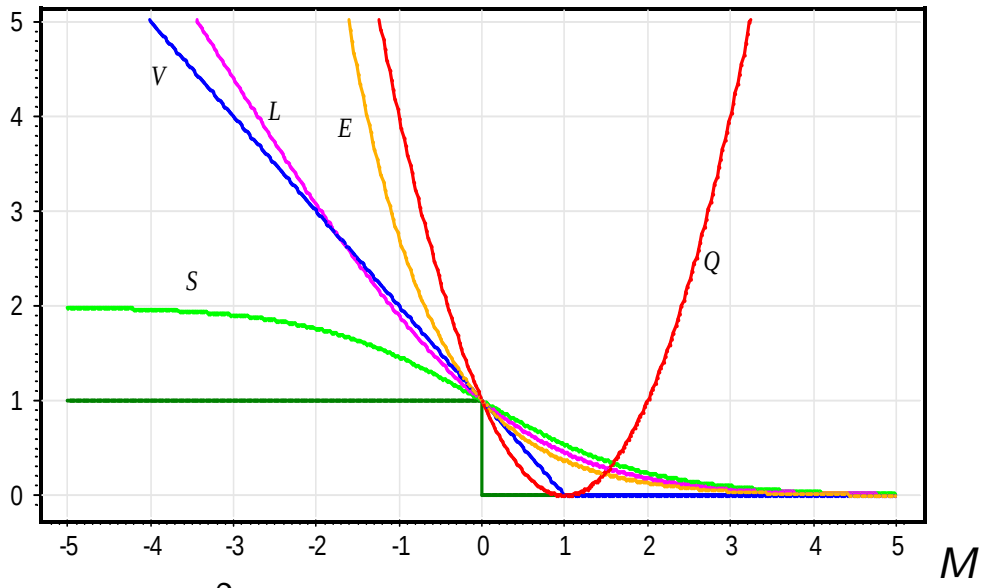
- Задача классификации с двумя классами, $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$:
  $a(x, w) = \operatorname{sign} f(x, w)$, где
  $f(x, w)$ — *дискриминантная функция*,
  w — вектор параметров.
- $f(x, w) = 0$ — разделяющая поверхность;
  $M_i(w) = y_i f(x_i, w)$ — *отступ* (margin) объекта x_i;
  $M_i(w) < 0 \iff$ алгоритм $a(x, w)$ ошибается на x_i.
- *Минимизация аппроксимированного эмпирического риска*:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \big[M_i(w) < 0\big] \quad \leqslant \quad \widetilde{Q}(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(M_i(w)\big) \to \min_w;$$

функция потерь $\mathscr{L}(M)$ невозрастающая, неотрицательная.

Непрерывные аппроксимации пороговой функции потерь

Часто используемые функции потерь $\mathscr{L}(M)$:



$Q(M) = (1-M)^2$ — квадратичная (ЛДФ);
$V(M) = (1-M)_+$ — кусочно-линейная (SVM);
$S(M) = 2(1+e^M)^{-1}$ — сигмоидная (нейронные сети);
$L(M) = \log_2(1+e^{-M})$ — логарифмическая (LR);
$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная (AdaBoost).

Метод опорных векторов SVM

Линейный классификатор:

$$a(x) = \operatorname{sign}\big(\langle w, x\rangle - w_0\big), \quad w, x \in \mathbb{R}^n,\ w_0 \in \mathbb{R}.$$

Задача максимизации зазора между классами приводит к *аппроксимации* и *регуляризации* эмпирического риска:

$$Q(w, w_0) = \sum_{i=1}^{\ell} \big(1 - M_i(w, w_0)\big)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 \ \to \ \min_{w, w_0}.$$

Свойства решения этой задачи:

- w зависит только от *опорных объектов* x_i;
- $a(x)$ зависит только от $\langle x, x_i\rangle \Rightarrow$ замена $\langle x, x_i\rangle$ на любое неотрицательно определённое *ядро* $K(x, x_i)$ приводит к нелинейному обобщению SVM.

Обобщение: байесовская регуляризация

$p(x, y|w)$ — вероятностная модель данных;
$p(w; \gamma)$ — априорное распределение параметров модели;
γ — вектор *гиперпараметров*;

Теперь не только появление выборки X^ℓ,
но и появление модели w также полагается случайным.

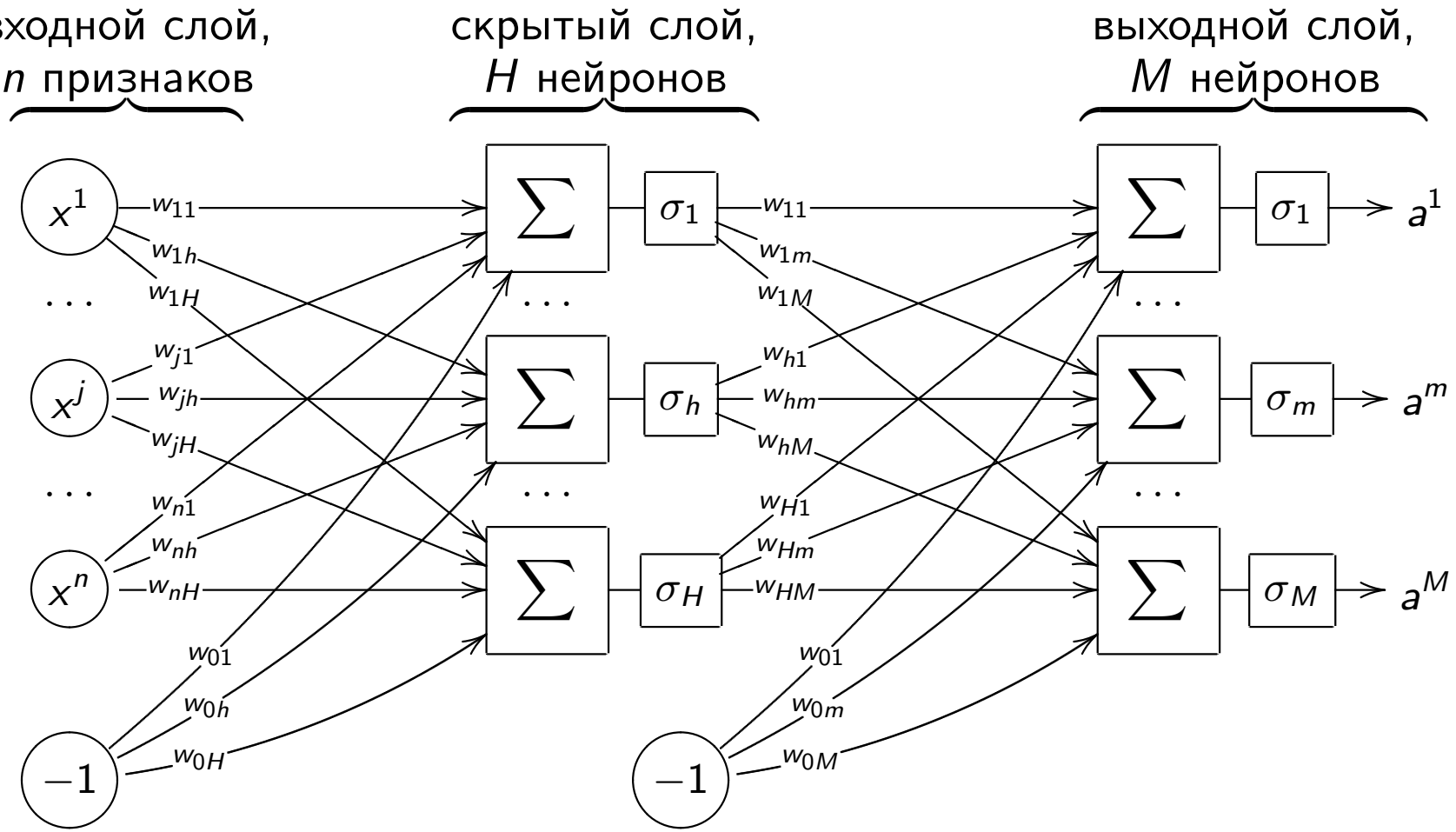
Совместное правдоподобие данных и модели:

$$p(X^\ell, w) = p(X^\ell|w)\, p(w; \gamma).$$

Принцип максимума совместного правдоподобия:

$$L(w, X^\ell) = \ln p(X^\ell, w) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln p(x_i, y_i|w) + \underbrace{\ln p(w; \gamma)}_{\text{регуляризатор}} \to \max_w.$$

Нейронные сети



Стандартные градиентные методы обучения

Достоинства итерационного метода BackPropagation:

- функции потерь и архитектура сети — любые;
- вычисление градиента — эффективно.

Недостатки:

- выбор числа нейронов, начального приближения, правил остановки является искусством.

Способы устранения недостатков:

- регуляризация (против переобучения);
- удаление неинформативных связей (OBD, OBS);
- рандомизация (против «застревания» в локальных min);
- последовательное наращивание сети.

Алгоритмические композиции

$b_t : \mathbb{X} \to R$ — базовые классификаторы;
$F : R^T \to \mathbb{Y}$ — корректирующая операция;
$a(x) = F\big(b_1(x), \ldots, b_T(x)\big)$ — композиция.

Взвешенное голосование (для случая $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$):

$$a(x) = \text{sign} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x);$$

Другие типы композиций:

- простое голосование (Simple Voting);
- решающий список (Decision List);
- решающее дерево (Decision Tree);
- смесь алгоритмов (Mixture of Experts).

Бустинг (boosting)

Взвешенное голосование (для случая $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$):

$$a(x) = \text{sign} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t b_t(x).$$

Бустинг основан на двух эвристиках:

- гладкая аппроксимация ($\mathscr{L}(M) = e^{-M}$ — AdaBoost);
- последовательное «жадное» построение $\alpha_t b_t$ при фиксации всех предыдущих $\alpha_1 b_1, \ldots, \alpha_{t-1} b_{t-1}$.

Преимущества и особенности бустинга:

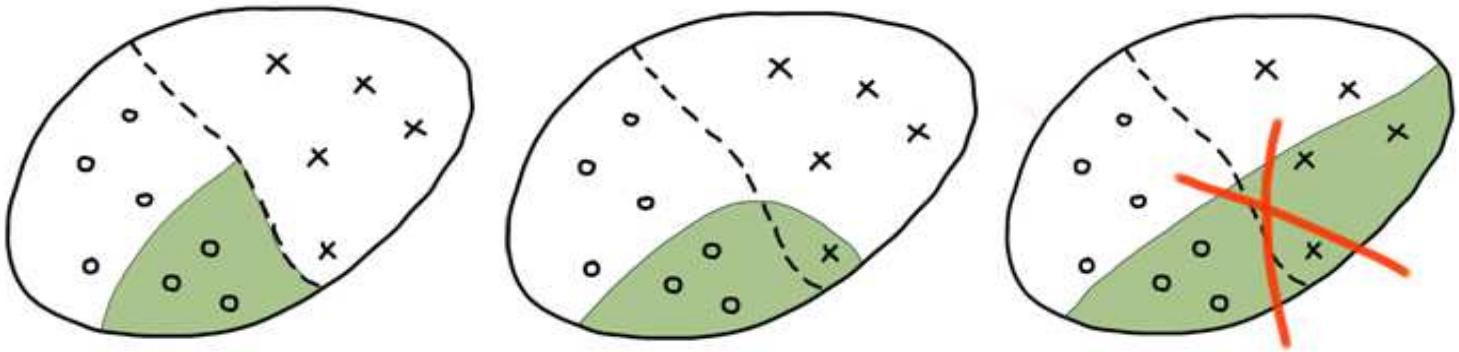
- есть доказательство сходимости;
- высокая обобщающая способность;
- бустинг над решающими деревьями — “best practice”;
- недостаток — избыточно большое T.

Понятия закономерности и информативности

Закономерность класса y — это предикат $r\colon \mathbb{X} \to \{0,1\}$:

- $r(x)$ описывается на естественном языке;
- $r(x) = 1$ преимущественно на объектах класса y:

$$p_y(r) = \#\{x_i\colon r(x_i)=1 \text{ и } y_i=y\} \to \max;$$
$$n_y(r) = \#\{x_i\colon r(x_i)=1 \text{ и } y_i\neq y\} \to \min.$$



Что значит «легко интерпретируемая формула»?

Пример 1: распознавание спама

Если текст содержит «Иностранные работники»
и искажённый телефонный номер,
то это спам.

Пример 2: прогноз исхода операции

Если возраст пациента > 65
и увеличение скорости кровотока в артерии $> 50\%$
и перепад концентрации лимфоцитов $< 20\%$,
то высок риск повторной операции.

Интерпретируемость: формула r зависит от небольшого числа признаков и выражается на естественном языке.

Виды закономерностей

Параметрическое семейство *конъюнкций пороговых термов*:

$$r(x) = \bigwedge_{j \in \omega} \left[\alpha_j \leqslant f_j(x) \leqslant \beta_j \right].$$

Конъюнкция — слишком жёсткое условие.

$$r(x) = \left[\sum_{j \in \omega} \left[\alpha_j \leqslant f_j(x) \leqslant \beta_j \right] \geqslant w_0 \right],$$

где $w_0 \in \{0, \ldots, |\omega|\}$ — минимальное число выполненных термов.

Синдромы ω объективно обнаруживаются во многих прикладных областях: медицинской диагностике, геологической разведке, кредитном скоринге и др.

Методы поиска закономерностей

Основная проблема — отбор признаков $\omega \subseteq \{1, \ldots, n\}$.
Это задача дискретной оптимизации.

Основные методы:

- поиск в глубину, метод ветвей и границ (КОРА);
- поиск в ширину (ТЭМП);
- стохастический локальный поиск (SLIPPER);
- генетические (эволюционные) алгоритмы (DMEL);
- случайный поиск с адаптацией.

Оптимизация параметров закономерностей α_j, β_j:

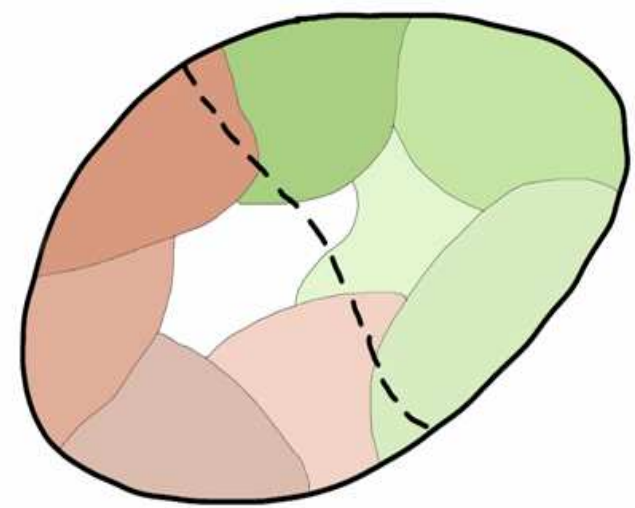
- полный перебор, выбор по критерию информативности.

Классификатор — композиция закономерностей

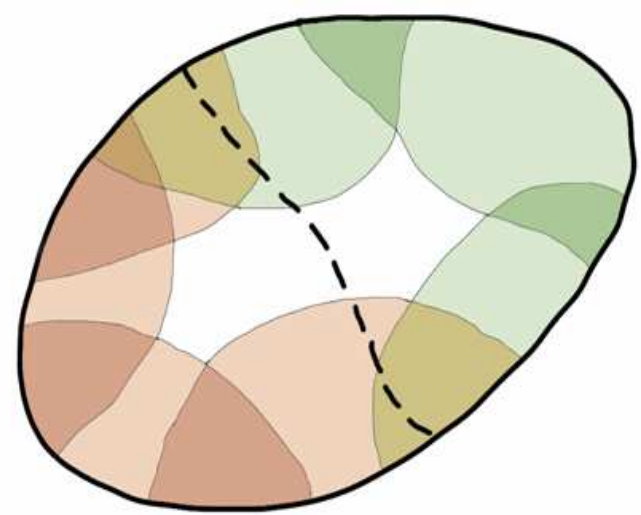
Каждое правило выделяет лишь небольшую область объектов.
Следовательно, правил нужно много: $r_1(x), \ldots, r_T(x)$;

$$a(x) = \text{sign} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t r_t(x).$$

покрытие
(комитет старшинства)



голосование
(комитет большинства)



Спасибо за внимание!

контакты:

Воронцов Константин Вячеславович
voron@forecsys.ru
www.MachineLearning.ru/wiki, «Участник:Vokov»