Zaawansowane uczenie maszynowe:
wykład 14

Paweł Cichosz

Selekcja atrybutów

Motywacja: ograniczenie ryzyka nadmiernego dopasowania, uproszczenie modeli i zwiększenie możliwości ich interpretacji.

Rodzaje metod:

- filtry (*attribute selection filters*): selekcja na podstawie pewnej miary predykcyjnej przydatności pojedynczych atrybutów lub (rzadziej) podzbiorów atrybutów, niezwiązanej z konkretną reprezentacją i algorytmem tworzenia modelu,
- opakowania (*attribute selection wrappers*): selekcja przez przeszukiwanie przestrzeni podzbiorów atrybutów, ocenianych na podstawie jakości modeli tworzonych z ich wykorzystaniem przez ustalony docelowy algorytm uczenia się.

Selekcja atrybutów przez filtrowanie

Korzyści: łatwość użycia, niezależność selekcji od docelowego algorytmu uczenia się.

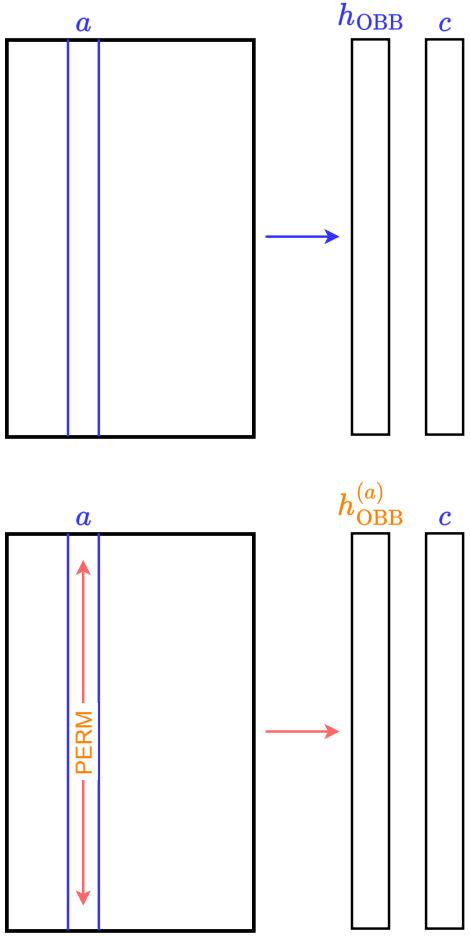
Proste filtry statystyczne: ocena predykcyjnej przydatności poszczególnych atrybutów na podstawie statystycznych miar zależności z atrybutem docelowym.

Algorytm CFS (*correlation-based feature selection*): ocena predykcyjnej przydatności podzbioru atrybutów $\mathbf{A}$ na podstawie ich zależności z atrybutem docelowym i zależności wzajemnych:

$$\frac{\sum_{a \in \mathbf{A}} \kappa(a, b)}{\sqrt{|\mathbf{A}| + \sum_{a_1, a_2 \in \mathbf{A}, a_1 \neq a_2} \kappa(a_1, a_2)}}$$

gdzie b – atrybut docelowy, κ – miara zależności (np. współczynnik korelacji, informacja wzajemna, symetryczna niepewność itp.).

Selekcja atrybutów przez filtrowanie



Las losowy: wpływ zaburzenia atrybutu przez losową permutację wartości na wzrost błędu OOB w lesie losowym (*ważność zmiennych*).

Algorytm *Boruta*: iteracyjny proces selekcji atrybutów wykorzystujący las losowy.

1. Tworzone randomizowane kopie każdego atrybutu (przez losową permutację).
2. Wyznaczana predykcyjna użyteczność wszystkich atrybutów za pomocą lasu losowego.
3. Predykcyjna użyteczność każdego atrybutu porównywna z maksymalną predykcyjną użytecznością jego randomizowanych kopii:

   atrybuty ważne: istotnie od najlepszej randomizowanej kopii,

   atrybuty nieważne: istotnie gorsze od najlepszej randomizowanej kopii.

Selekcja atrybutów przez opakowywanie

Korzyści: dostosowanie zestawu atrybutów do specyfiki docelowego algorytmu uczenia się.

Podzbiory atrybutów: generowane przez zastosowanie pewnej strategii przeszukiwania przestrzeni możliwych podzbiorów.

Ocena podzbiorów atrybutów:

- ograniczenie danych do atrybutów z podzbioru,
- zastosowanie procedury oceny jakości modeli opartej na próbkowaniu (najczęściej $n \times k$-krotna walidacja krzyżowa).

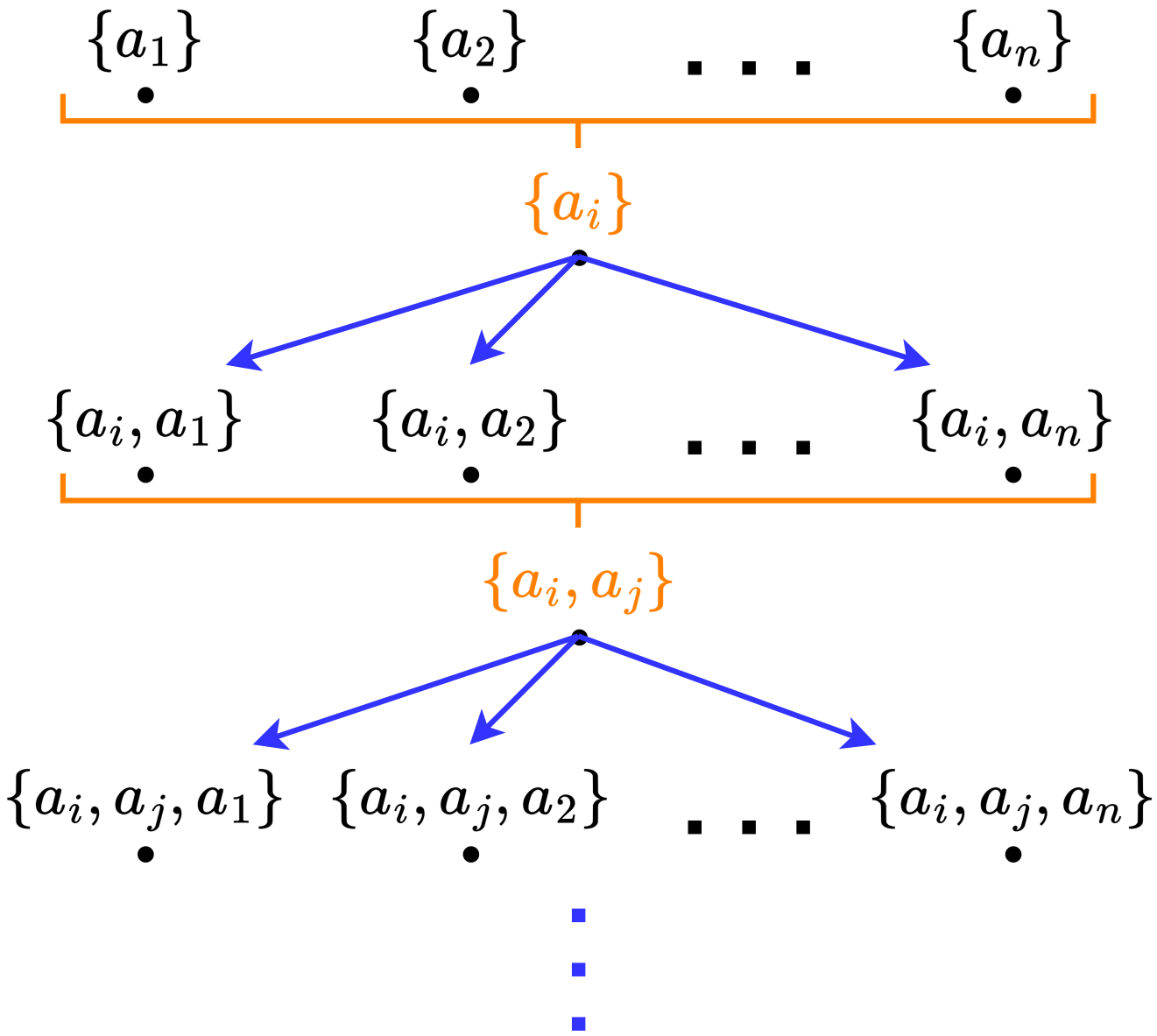
Przeszukiwanie przestrzeni podzbiorów

Proste strategie lokalnego przeszukiwania:

- w przód: dodawanie kolejnych atrybutów zaczynając od podzbiorów jednoelementowych, zatrzymanie gdy kilka kolejnych kroków nie przynosi poprawy jakości.
- wstecz: usuwanie kolejnych atrybutów zaczynając od pełnego zbioru, zatrzymanie gdy kilka kolejnych kroków nie przynosi poprawy jakości.
- mieszane: przeplatanie kroków w przód i wstecz.

Metaheurystyczne algorytmy przeszukiwania: np. wspinaczkowe, symulowane wyżarzanie, ewolucyjne.

Przeszukiwanie przestrzeni podzbiorów



Rekurencyjna eliminacja atrybutów

Podejście hybrydowe: o wyborze podzbioru decyduje ocena jakości modelu (jak przy opakowywaniu), lecz proces przeszukiwania ukierunkowany przez miarę przydatności atrybutów (jak przy filtrowaniu).

1. zainicjalizuj $\mathbf{A}$ jako zbiór wszystkich atrybutów;
2. **powtarzaj**:
   1. utwórz model h z użyciem atrybutów z $\mathbf{A}$;
   2. wyznacz wartość miary przydatności każdego $a \in \mathbf{A}$ dla modelu h;
   3. oceń jakość modelu;
   4. usuń z $\mathbf{A}$ ustaloną liczbę $s \geq 1$ najmniej przydatnych atrybutów;

   jak długo nie są spełnione kryteria stopu.

Selekcja atrybutów jako część procesu modelowania

- Dane używane do selekcji atrybutów wchodzą w skład zbioru trenującego (w szerszym sensie) nawet jeśli nie są bezpośrednio wykorzystywane do tworzenia modelu po selekcji atrybutów.
- W celu nieobciążonej oceny jakości modelu konieczny podzbiór niewykorzystywany ani do jego tworzenia, ani do selekcji atrybutów.

Transformacje skalujące

Motywacja: transformacje zalecane w przypadku algorytmów wykorzystujących miary niepodobieństwa i odległości (w tym SVM), stosujących regularyzację lub zakładających normalność atrybutów, mogą przyspieszać algorytmy gradientowe.

Centrowanie: sprowadzanie do rozkładu o średniej 0:

$$a'(x) = a(x) - m_T(a)$$

Standardyzacja: sprowadzanie do rozkładu o średniej 0 i odchyleniu standardowym 1:

$$a'(x) = \frac{a(x) - m_T(a)}{s_T(a)}$$

Transformacje skalujące

„Normalizacja” (1): skalowanie do przedziału $[0, 1]$:

$$a'(x) = \frac{a(x) - \min_{x' \in T} a(x)}{\max_{x' \in T} a(x) - \min_{x' \in T} a(x)}$$

„Normalizacja” (2): sprowadzanie do jednostkowej normy wektora wartości atrybutów:

$$a'(x) = \frac{a(x)}{\|\mathbf{a}(x)\|}$$

Normalizacja: sprowadzanie do rozkładu (zbliżonego do) normalnego – np. transformacja Boxa-Coxa.

Transformacje skalujące

Transformacja Boxa-Coxa:

$$a'_i(x) = \begin{cases} \frac{a_i^\lambda(x)-1}{\lambda} & \text{jeśli } \lambda \neq 0 \\ \ln a_i(x) & \text{jeśli } \lambda = 0 \end{cases}$$

pod warunkiem, że $a_i(x) > 0$ dla wszystkich x, w przeciwnym przypadku można to wymusić przesunięciem:

$$a'_i(x) = \begin{cases} \frac{(a_i(x)+b)^\lambda-1}{\lambda} & \text{jeśli } \lambda \neq 0 \\ \ln(a_i(x)+b) & \text{jeśli } \lambda = 0 \end{cases}$$

Dobór λ: np. maksymalizacja wiarygodności (prawdopodobieństwa przekształconych wartości atrybutu przy założeniu rozkładu normalnego).

Transformacje redukujące wymiarowość

Motywacja: ograniczenie ryzyka nadmiernego dopasowania.

Zasada działania: liniowe transformacje algebraiczne macierzy wartości atrybutów – tworzą mniejszą liczbę nowych atrybutów liniowo zależnych od pierwotnych atrybutów zapewniających możliwość ich przybliżonej rekonstrukcji.

Analiza składowych głównych (*prinicipal component analysis*, PCA): identyfikacja nowych atrybutów jako składowych głównych:

- nieskorelowane kombinacje liniowe atrybutów pierwotnych,
- każda kolejna maksymalizuje wariancję przy zachowaniu ortogonalności do poprzednich,
- wyznaczane na podstawie wektorów i wartości własnych macierzy kowariancji (lub korelacji) atrybutów (po wycentrowaniu).

Transformacje redukujące wymiarowość

Realizacja PCA: dla macierzy wartości atrybutów na zbiorze trenującym $\mathbf{a}(T)$:

centrowanie: wyznaczenie macierzy wartości wycentrowanych atrybutów $\mathbf{a}'(T)$ przez odjęcie średnich:

$$a'(x) = a(x) - m_T(a)$$

kowariancja/korelacja: wyznaczenie macierzy kowariancji lub korelacji (liniowej) R:

$$R[i,j] = \mathrm{cov}_T(a'_i, a'_j)$$

lub

$$R[i,j] = \mathrm{cor}_T(a'_i, a'_j)$$

(użycie korelacji zamiast kowariancji daje efekt równoważny sprowadzeniu atrybutów do jednakowej wariancji).

Transformacje redukujące wymiarowość

Realizacja PCA:

wektory własne: wyznaczenie wektorów i wartości własnych macierzy R,

składowe główne: wybór k wektorów własnych o największych wartościach własnych $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$,

macierz projekcji: macierz, której kolumnami są wybrane wektory własne:

$$V = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k]$$

projekcja: rzutowanie danych na wektory własne:

$$\mathbf{a}''(x) = V^{\mathsf{T}} \mathbf{a}'(x)$$

Transformacje redukujące wymiarowość

Rozkład według wartości osobliwej (*singular value decomposition*, SVD):
dogodna numerycznie alternatywna metoda realizacji PCA przez faktoryzację macierzy wartości atrybutów.

Pokrewne metody (poza zakresem wykładu):

wielowymiarowa analiza odpowiedniości (*multiple correspondence, analysis*, MCA): odpowiednik PCA dla atrybutów dyskretnych,

analiza ukrytej semantyki (*latent semantic analysis*, LSA):

ukryta alokacja Dirichleta (*latent Dirichlet allocation*, LDA):
redukcja wymiarowości reprezentacji dokumentów tekstowych (macierzy dokument-term) przez identyfikację „ukrytych atrybutów" („tematów").

Dyskretyzacja atrybutów ciągłych

Utworzenie atrybutu dyskretnego zastępującego oryginalny atrybut ciągły, o wartościach dyskretnych odpowiadających przedziałom wartości ciągłych:

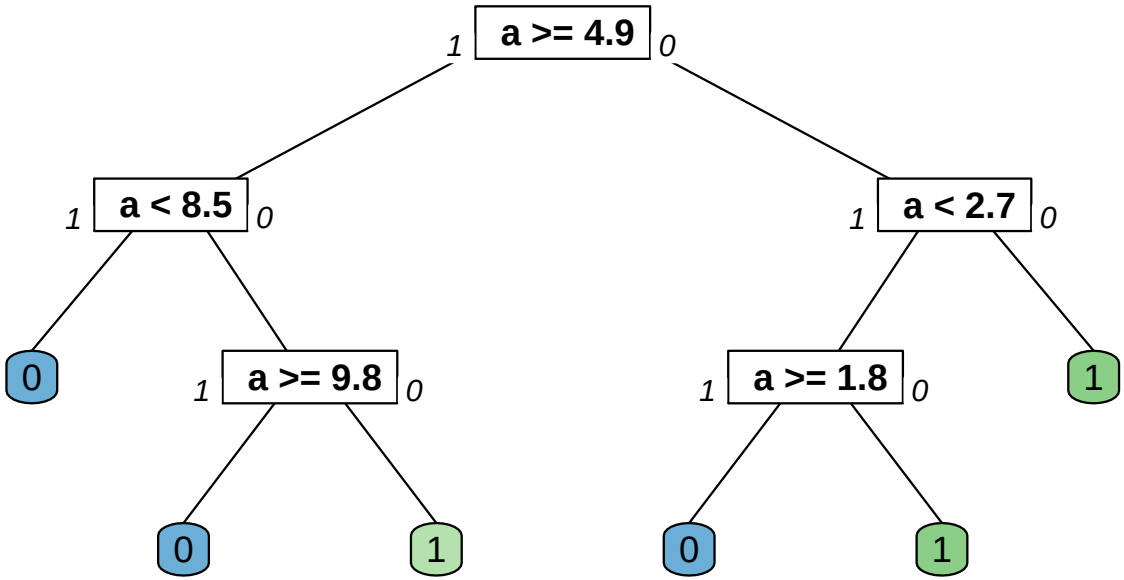
równa szerokość: podział na przedziały o równej szerokości,

równa częstość: podział na przedziały o równej częstości (liczbie przykładów),

nadzorowana: podział na przedziały z uwzględnieniem rozkładu klas.

Dyskretyzacja atrybutów ciągłych

Dyskretyzacja zstępująca: początkowo jeden przedział, następnie iteracyjnie wybierane punkty podziału na mniejsze przedziały maksymalnie „czyste klasowo”, np. na podstawie minimalizacji entropii (równoważne tworzeniu drzewa decyzyjnego z użyciem jednego atrybutu ciągłego).



Dyskretyzacja atrybutów ciągłych

Dyskretyzacja wstępująca: początkowo przedziały jednoelementowe, następnie iteracyjnie łączone pary przedziałów o maksymalnie podobnym rozkładzie klas, np. na podstawie maksymalizacji statystyki χ^2.

Kryteria stopu: liczba przedziałów, nieczystość/zgodność rozkładu klas, zasada minimalnej długości kodu (por. wykład 11).

Transformacje atrybutów dyskretnych

Agregacja: utworzenie atrybutu dyskretnego o mniejszej liczbie wartości zastępującego oryginalny atrybut dyskretny o większej liczbie wartości przez połączenie pewnych podzbiorów pierwotnych wartości.

Binarne kodowanie: atrybut dyskretny k-wartościowy $a : X \to \{v_1, v_2, \ldots, v_k\}$ zastępowany przez k atrybutów binarnych $a'_1, a'_2, \ldots, a'_k$ (tzw. *one-hot encoding*) lub $k-1$ atrybutów binarnych $a'_1, a'_2, \ldots, a'_{k-1}$ (tzw. *dummy variables*):

$$a'_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{jeśli } a(x) = v_i \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases}$$

przy czym:

- wartości v_i dla $i = 1, \ldots, k-1$ są reprezentowane przez $a'_i(x) = 1$ i $a'_j(x) = 0$ dla $j \neq i$,
- wartość v_k jest reprezentowana przez $a'_k(x) = 1$ i $a'_j(x) = 0$ dla $j \neq k$ w wariancie *one-hot encoding* oraz przez $a'_j(x) = 0$ dla wszystkich $j = 1, \ldots, k-1$ w wariancie *dummy variables*.

Transformacja atrybutów jako część procesu modelowania

- Parametry transformacji ustalone na danych trenujących przed tworzeniem modelu stosowane do nowych danych przed użyciem modelu do predykcji.
- Pełna reprezentacja modelu obejmuje parametry transformacji stosowanych przed zastosowaniem właściwego modelu do predykcji.