

# BI-ML1.21 přednáška 10

Daniel Vašata

FIT ČVUT

27. 11. 2024

Autoři: Karel Klouda, Daniel Vašata.  
Problémy, návrhy apod. hlase v [GitLabu](#).  
Verze souboru: 27. listopadu 2024 10:24.

## Co bude v dnešní přednášce

- Výběr příznaků obecně
- Filtrovací metody
- Obalové metody
- Vestavěné metody - Lasso

## Redukce počtu vysvětlujících proměnných

- V dnešní přednášce se budeme věnovat metodám, které mají za úkol snížit počet vysvětlujících proměnných.
- V zásadě jde o to, vybrat ze všech dostupných příznaků (které mohly být i extra napočítány) jistou podmnožinu, kterou použijeme pro trénování a predikci modelu.
- Obecně v této situaci mluvíme o **výběru příznaků** (angl. **feature selection** nebo také **subset selection**).
- Problematika výběru příznaků spadá do části [předzpracování dat](#). Dneska se podíváme jenom na některé základní metody a podrobněji se touto problematikou budete zabývat v magisterském kurzu **NI-PDD**.
- Z jistého pohledu se jedná o podoblast [redukce dimenzionality](#) (angl. [dimensionality reduction](#)). Do té ale spadají především metody, které napočítávají (lineárně nebo nelineárně) kompletně nové příznaky. Proto se redukce dimenzionality často uvádí jako separátní oblast.

## Účel výběru příznaků

Výběr příznaků může být výhodný z mnoha různých důvodů. Uvedme si některé z nich.

- Zahozením **nerrelevantních a redundantních příznaků** můžeme významně zlepšit schopnost generalizace modelu.
  - ▶ Příznaky, které jsou nerelevantní a nesouvisí s vysvětlovanou proměnnou, škodí typicky i modelům, které by si s nimi teoreticky dokázali poradit - jako např. lineární regrese (může tam použít koeficient 0) nebo rozhodovací strom (nepoužije tento příznak do žádného dělicího kritéria).
  - ▶ Redundantní příznaky jsou takové, které nesou stejnou informaci. Kromě toho, že zbytečně zvyšují dimenzi mohou některým modelům vyloženě škodit, jako např. problém kolinearity u lineární regrese.
- Pomáhá s **prokletím dimenzionality**. Jak víme, tak pro některé modely je velká dimenze prostoru příznaků problematická (např. KNN).
- Zlepšuje **vysvětlitelnost** modelu. U modelů, který využívají menší počet příznaků bývá jednodušší porozumět tomu, na základě čeho se rozhodují.
- Snižuje **výpočetní nároky** pro trénování a použití výsledného modelu.

## Filtrační metody

**Filtrační metody** (angl. **filter methods**) mohou být supervizované i nesupervizované.

Typicky koukají, jak hodně informace může být v daném příznaku a případně jak ta informace souvisí s vysvětlovanou proměnnou.

Pokud nemáme nebo nechceme využít vysvětlovanou proměnnou, můžeme:

- Vyhodit příznaky, které mají příliš nízký rozptyl a jsou tedy téměř konstantní.
- Vyhodit příznaky, které mají příliš chybějících hodnot.
- Vyhodit některé z příznaků, které spolu hodně korelují a jsou tedy redundantní.

Pokud chceme využít vysvětlovanou proměnnou, můžeme:

- Vyhodit příznaky, které mají nízkou korelaci s vysvětlovanou proměnnou.
- U binárních příznaků rozdělit vysvětlovanou na dvě populace a udělat test hypotézy o rovnosti středních hodnot (dvouvýběrový  $t$ -test). Pokud vyjde velká  $p$  hodnota, můžeme tento příznak vyhodit.
- U diskretních příznaků i diskretní vysvětlované proměnné udělat test hypotézy o nezávislosti těchto dvou diskretních veličin (např. chí kvadrát test nezávislosti). Opět, pokud vyjde velká  $p$  hodnota, je tento příznak kandidátem na vyhození.

## Obalové metody (1/2)

- **Obalové metody** (angl. **wrapper methods**) využívají nějaký pomocný model pro ohodnocování podmnožin příznaků.
- Cílem je vybrat takovou podmnožinu, pro kterou je výkonnost modelu největší.
- Pro každou kandidátní podmnožinu se model natrénuje a změří jeho výkonnost na validační množině (nebo křížovou validací).
- Jako finální podmnožina příznaků je použita taková, pro kterou je model nejvýkonnější.
- Výhodou obalových metod je, že preferují podmnožiny příznaků, které jsou pro daný model výhodné.
- To je ale zároveň nevýhoda, protože může snadno dojít k přeučení a také protože takto vybrané podmnožiny nemusí být vhodné pro jiné modely (např. pro ten finální, který chceme použít).
- Nevýhodou obalových metod je jejich výpočetní náročnost. I při použití jednoduchého pomocného modelu (jako např. lineární regrese) může být výpočetní čas značný.

## Obalové metody (2/2)

Z důvodů výpočetní náročnosti nejčastěji používané metody vybranou množinu příznaků konstruují iterativně nějakým „hladovým“ přístupem.

- **Dopředný výběr** (angl. **forward selection**) - začínáme s prázdnou množinou příznaků a postupně po jednom přidáváme vždy tak, aby ten jeden přidaný nejvíce zlepšil výkonnost modelu v dané iteraci.

Skončíme když máme požadovaný počet příznaků, případně když už nedochází ke zlepšování výkonnosti.

- **Zpětný výběr** (angl. **backward selection**) - začneme se všemi příznaky a postupně po jednom odebíráme tak, aby ten odebraný příznak vedl na nejvýkonnější model v dané iteraci.

Skončíme když máme požadovaný počet příznaků, případně když už nedochází ke zlepšování výkonnosti.

- Dopředný i zpětný výběr jsou v knihovně `sklearn` implementovány pomocí `sklearn.feature_selection.SequentialFeatureSelector`.

## Obalové metody (3/3)

- **Rekurzivní odebírání příznaků** (angl. **recursive feature elimination**) - probíhá podobně jako zpětný výběr, ale model se využívá trochu jiným způsobem.

Konkrétně se k vybírání příznaků používá vnitřní ohodnocení důležitosti jednotlivých příznaků modelem (který toho tedy musí být schopen).

U lineární (logistické) regrese to je například absolutní hodnota koeficientu u daného příznaku. U rozhodovacího stromu to může být informační zisk daného příznaku.

Nejprve model natrénujeme pro všechny příznaky. Potom najdeme příznak, který má nejmenší důležitost a ten vyhodíme. Pak model znovu natrénujeme na redukované množině a postup opakujeme.

- Rekurzivní odebírání příznaků je v knihovně `sklearn` implementováno pomocí `sklearn.feature_selection.RFE`.



## Vestavěné metody

- **Vestavěné metody** (angl. **embedded methods**) využívají model, který se trénuje pouze jednou na celých datech a při tom implicitně provede výběr příznaků.
- Tento implicitní výběr se projeví tak, že se model naučí některé příznaky vůbec nevyužívat.
- Např. u lineární regrese jsou příslušné koeficienty odhadnuty jako 0.
- Modelem, který je nejpoužívanější, je  $L_1$  regularizovaná lineární regrese (Lasso). V případě klasifikace to je pak  $L_1$  regularizovaná logistická regrese.
- Jako vybraná podmnožina příznaků se vezmou příznaky, u který jsou příslušné koeficienty **nenulové**.

## Model lineární regrese

Nejprve si připomeňme model lineární regrese.

- Model pro vysvětlovanou proměnnou  $Y$  v bodě  $\mathbf{x}$  je

$$Y = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + \varepsilon = \mathbf{x}^T \mathbf{w} + \varepsilon = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_p x_p + \varepsilon.$$

- Model pro trénovací množinu tvořenou  $N$  páry  $(Y_i, \mathbf{x}_i)$  je  $Y_i = \mathbf{x}_i^T \mathbf{w} + \varepsilon_i$ .
- Toto zapisujeme maticově jako  $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \varepsilon$ , kde

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1;1} & \cdots & x_{1;p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N;1} & \cdots & x_{N;p} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_N \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_N \end{pmatrix}.$$

- Při trénování metodou nejmenších čtverců minimalizujeme residuální součet čtverců

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2.$$

- Za předpokladu, že je matice  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  regulární, existuje jediné řešení minimalizující  $\text{RSS}(\mathbf{w})$ ,

$$\hat{\mathbf{w}}^{\text{OLS}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$

## Lasso - úvod

**Lasso** (zkr. angl. **Least Absolute Shrinkage and Selection Operator**) [Tibshirani (1996)] nebo taky  $L_1$  regularizace zavádí penalizační člen úměrný součtu absolutních hodnot složek vektoru koeficientů  $w$  s vynecháním interceptu.

Minimalizujeme tedy **regularizovaný reziduální součet čtverců**

$$\text{RSS}_\lambda^{\text{Lasso}}(w) = \|Y - Xw\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^p |w_i|,$$

který závisí na parametru  $\lambda \geq 0$ .

- Lasso jakožto jiná forma regularizace sdílí některé obecné vlastnosti s modelem hřebenové regrese.
- Pro  $\lambda = 0$  dostáváme  $\text{RSS}_0^{\text{Lasso}}(w) = \text{RSS}(w)$  a máme tedy obyčejnou metodu nejmenších čtverců.
- Pro  $\lambda > 0$  je vidět, že v minimu se bude cílit na takové vektory  $w$ , které mají co nejmenší složky.
- Hodnotu  $w_0$  interceptu nijak nepenalizujeme. Jedná se pouze o vertikální posun, který zajišťuje předpoklad  $E\varepsilon = 0$  modelu a je tedy vhodné ho neomezovat.

## Lasso - pokračování

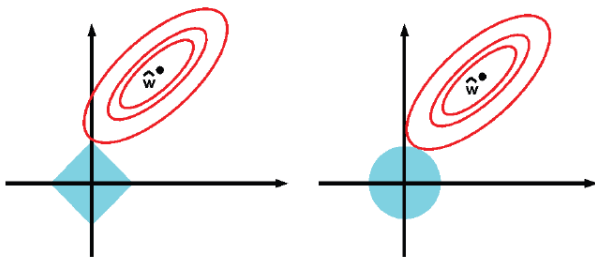
- Na rozdíl od modelu hřebenové regrese není regularizační člen  $\sum_{i=1}^p |w_i|$  diferencovatelný v bodech kde  $w_j = 0$ .
- V tomto případě není možné nalézt explicitní řešení a existují pouze iterativní metody, které najdou řešení

$$\hat{\mathbf{w}}_{\lambda}^{\text{Lasso}} = \arg \min_{\mathbf{w}} \text{RSS}_{\lambda}^{\text{Lasso}}(\mathbf{w}).$$

- Výhoda modelu Lasso je, že řešení je tzv. **řidké** (angl. **sparse solution**).
- To znamená, že odhady  $\hat{w}_{\lambda;j}^{\text{Lasso}}$  některých složek  $\mathbf{w}$  jsou rovny 0. Samozřejmě tím častěji, čím je  $\lambda$  větší.
- Tím se lasso zásadně liší od hřebenové regrese, kde tento efekt v podstatě nikdy nenastane.
- Formálně to dokázat není jednoduché (používá se teorie subgradientů), ale ukážeme si alespoň přesvědčivou ilustraci.

## Lasso - ilustrace fungování

Podívejme se na „vrstevnice“ funkcí, které se snažíme minimalizovat u lasso (vlevo) a hřebenové regrese (vpravo).



Červeně jsou znázorněny vrstevnice odpovídající neregularizované části  $\|Y - Xw\|^2$ , což je v zásadě parabolická jáma.

Modře je pak znázorněna oblast, která odpovídá regularizačnímu členu.

Vidíme, že u lasso existuje velká šance, že se vrstevnice dotýká některého z rohů, což znamená, že je jedna ze složek  $w$  rovna 0.

U hřebenové regrese se to samozřejmě také může stát, ale evidentně to je velmi nepravděpodobné.

## Lasso a hřebenová regrese - vázané optimalizace

Fakt z předchozí ilustrace může být ještě podpořen následující ekvivalentní formulací. Lze ukázat, že úloha minimalizace

$$\text{RSS}_\lambda^{\text{Lasso}}(\mathbf{w}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^p |w_i|,$$

je **ekvivalentní** úloze vázané minimalizace

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2,$$

za podmínky

$$\sum_{i=1}^p |w_i| \leq B, \quad \text{pro nějaké } B > 0.$$

Analogicky pro hřebenovou regresi platí, že minimalizace

$$\text{RSS}_\lambda^{\text{Ridge}}(\mathbf{w}) = \|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^p w_i^2,$$

je **ekvivalentní** úloze vázané minimalizace  $\text{RSS}(\mathbf{w})$  za podmínky

$$\sum_{i=1}^p w_i^2 \leq B, \quad \text{pro nějaké } B > 0.$$

## Porovnání nejmenších čtverců, hřebenové regrese a lasso

Pro porovnání metod regularizace se zaměříme na situaci, kdy jsou příznaky ortonormální. Tj. když  $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}$ .

- Metoda nejmenších čtverců v takovém případě vychází

$$\hat{\mathbf{w}}^{\text{OLS}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} = \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$

- Hřebenová regrese vychází

$$\hat{\mathbf{w}}_{\lambda}^{\text{Ridge}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}')^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} = (\mathbf{I} + \lambda \mathbf{I}')^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$

Protože

$$(\mathbf{I} + \lambda \mathbf{I}')^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+\lambda} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{1+\lambda} \end{pmatrix},$$

platí pro jednotlivé složky

$$\hat{w}_{\lambda;0}^{\text{Ridge}} = \hat{w}_0^{\text{OLS}} \quad \text{a} \quad \hat{w}_{\lambda;j}^{\text{Ridge}} = \frac{1}{1+\lambda} \hat{w}_j^{\text{OLS}}.$$

- Pro Lasso lze ukázat

$$\hat{w}_{\lambda;0}^{\text{Lasso}} = \hat{w}_0^{\text{OLS}} \quad \text{a} \quad \hat{w}_{\lambda;j}^{\text{Lasso}} = \text{sgn}(\hat{w}_j^{\text{OLS}}) \max\left(0, |\hat{w}_j^{\text{OLS}}| - \frac{\lambda}{2}\right).$$

Tomuto se říká soft thresholding.

## Závěrečné poznámky

- Lasso je v knihovně `sklearn` implementováno pomocí `sklearn.linear_model.Lasso`.
- Při využití pro výběr příznaků se dá použít implementace `sklearn.feature_selection.SelectFromModel`.
- U logistické regrese bychom regularizační člen přidali k mínus logaritmu věrohodnostní funkce (k binární relativní entropii) a pak bychom prováděli minimalizaci.
- Jednou z nevýhod lasso proti hřebenové regresi je, že v případě kolineárních příznaků má tendenci vybrat pouze některé z nich. To se v některých případech při predikci na nových datech ukazuje jako jistá nevýhoda oproti hřebenové regresi, která typicky využije všechny příznaky.
- Existuje tedy také model, který obsahuje oba způsoby regularizace.
- Tomuto modelu se říká **elastic net** a kombinuje výhody obou přístupů.