Seminarium IPIPAN, Maj 2016

Selekcja zmiennych w klasyfikacji z wieloma etykietami

Paweł Teisseyre

Instytut Podstaw Informatyki PAN

Plan prezentacji

- Klasyfikacja z wieloma etykietami.
- Selekcja zmiennych w klasyfikacji z wieloma etykietami.
- Ogólne podejście do estymacji prawdopodobieństwa aposteriori. Model Isinga i łańcuchy klasyfikatorów.
- Metoda CCnet: łańcuchy klasyfikatorów + sieć elastyczna:
  - dopasowanie modelu,
  - wybór parametrów sieci elastycznej,
  - wyniki teoretyczne: stabilność i oszacowanie błędu generalizacji.
- Eksperymenty:
  - wpływ selekcji zmiennych na jakość predykcji,
  - wpływ kolejności budowy modeli w łańcuchu na wybór zmiennych.

Klasyfikacja z wieloma etykietami

Klasyfikacja z jedną etykietą (binarną)

- Jedna zmienna odpowiedzi.
- Zbiór uczący: $(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})$, $\mathbf{x}^{(i)} \in R^p$, $y^{(i)} \in \{0, 1\}$.

Klasyfikacja z wieloma etykietami (binarnymi)

- Wiele zmiennych odpowiedzi.
- Zbiór uczący: $(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)})$, $\mathbf{x}^{(i)} \in R^p$, $\mathbf{y}^{(i)} \in \{0, 1\}^K$.

Klasyfikacja z jedną etykietą (binarną):

x_1	x_2	$\ldots$	x_p	y
1.0	2.2	$\ldots$	4.2	1
2.4	1.3	$\ldots$	3.1	1
0.9	1.4	$\ldots$	3.2	0
$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$
1.7	3.5	$\ldots$	4.2	0
3.9	2.5	$\ldots$	4.1	?

Tabela : Klasyfikacja binarna.

$y \in \{0, 1\}$- zmienna odpowiedzi (etykieta).

Klasyfikacja z jedną etykietą (dyskretną):

x_1	x_2	$\ldots$	x_p	y
1.0	2.2	$\ldots$	4.2	1
2.4	1.3	$\ldots$	3.1	2
0.9	1.4	$\ldots$	3.2	3
$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$
1.7	3.5	$\ldots$	4.2	1
3.9	2.5	$\ldots$	4.1	?

Tabela : Klasyfikacja wieloklasowa (multiclass).

$y \in \{1, 2, \ldots, G\}$- zmienna odpowiedzi (etykieta).

Klasyfikacja z wieloma etykietami:

x_1	x_2	$\ldots$	x_p	y_1	y_2	$\ldots$	y_K
1.0	2.2	$\ldots$	4.2	1	0	$\ldots$	1
2.4	1.3	$\ldots$	3.1	1	0	$\ldots$	1
0.9	1.4	$\ldots$	3.2	0	0	$\ldots$	1
$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$			$\vdots$
1.7	3.5	$\ldots$	4.2	0	1	$\ldots$	0
3.9	2.5	$\ldots$	4.1	?	?	$\ldots$	?

Tabela : Klasyfikacja wieloetykietowa (mutlilabel).

$\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_K)'$- wektor zmiennych odpowiedzi (etykiet).

Klasyfikacja z wieloma etykietami

Przykłady zastosowań:

- kategoryzacja tekstów (etykiety: różne tematy)
- anotacja obrazów cyfrowych i filmów (etykiety: różne obiekty na zdjęciu)
- marketing (etykiety: produkty kupowane przez klientów)
- genomika (etykiety: funkcje genów)
- medycyna (etykiety: choroby pacjentów)

Klasyfikacja wieloklasowa i wieloetykietowa

Przykład: (automatyczna anotacja obrazów)

- Klasyfikacja wieloklasowa: góra, las czy samochód?
- Klasyfikacja wieloetykietowa: góra (TAK), las (TAK), samochód (NIE).

Klasyfikacja wieloklasowa i wieloetykietowa

Transformacja potęgowa (label powerset):

X_1	Y_1	Y_2
1	0	0
2	0	0
3	1	0
4	1	0
5	1	1

Tabela : Przed redukcją.

X_1	Y
1	1
2	1
3	2
4	2
5	3

Tabela : Po redukcji.

Klasyfikacja wieloklasowa i wieloetykietowa

Transformacja potęgowa (label powerset):

- Zalety:
  1. Sprowadzamy nasze zadanie do zadania bardziej znanego.
  2. Znalezienie meta-klasy o największym prawdopodobieństwie aposteriori jest równoważne wyznaczeniu najbardziej prawdopodobnej kombinacji etykiet.
- Wady:
  1. Tracimy informację o odległościach między wektorami odpowiedzi.
  2. Duża liczba możliwych meta-klas.
  3. Mało obserwacji (przykładów uczących) dla pewnych meta-klas.
  4. W skrajnej sytuacji liczba meta-klas może być równa liczbie obserwacji.

Przykład: wielozachorowalność

BMI	Weight	Glucose	...	Diabetes	Hypotension	Liver disease	...
31	84	10	...	1	0	1	...
26	63	6	...	1	0	0	...
27	60	7	...	0	0	0	...

Zmienne x: charakterystyki pacjentów.

Etykiety y: wystąpienia chorób.

- Zadanie 1: przewidywanie które choroby wystąpią na podstawie pewnych charakterystyk pacjentów (PREDYCKJA).
- Zadanie 2: wyznaczenie które zmienne wpływają na występowanie poszczególnych chorób (SELEKCJA ZMIENNYCH).

Selekcja zmiennych

Problem:

- Selekcja zmiennych: które spośród zmiennych $\mathbf{x}$ wpływają na etykiety $\mathbf{y}$?
- Interesuje nas sytuacja p- bardzo duże; K- średnie (częsta sytuacja w zastosowaniach medycznych).
- W sytuacji wielu etykiet pojawiają się nowe problemy:
  - Każda etykieta może zależeć od innego zbioru zmiennych.
  - Etykiety mogą zależeć od zmiennych warunkowo (pod warunkiem innych etykiet).
  - Zmienne mogą wpływać na interakcje między etykietami.

Selekcja zmiennych

Popularna klasyfikacja:

1. **Filtry (filters)**: indywidualna ocena istotności każdej zmiennej. Na przykład: transformacja LP+ informacja wzajemna.
2. **Wrappery (wrappers)**: ocena istotności podzbiorów zmiennych.
3. **Metody z wbudowaną selekcją (embedded methods)**: selekcja zmiennych wykonywana podczas budowy modelu.

Klasyfikacja z wieloma etykietami

Naturalne podejście:

1. Oszacowanie prawdopodobieństwa aposteriori:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$$

2. Predykcja dla nowej obserwacji $\mathbf{x}_0$:

$$\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_0) = \arg \max_{\mathbf{y} \in \{0,1\}^K} \hat{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_0),$$

gdzie $\hat{p}(\mathbf{y}|\mathbf{x}_0)$ to oszacowane prawdopodobieństwo aposteriori w $\mathbf{x}_0$.

Ogólne podejście:

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Rozważamy rodzinę rozkładów: $\{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$.
- Estymujemy parametry używając metody NW:

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta}\{-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \theta)\}.$$

- Wersja z regularyzacją:

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta}\{-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \theta) + \lambda_1||\theta||_1 + \lambda_2||\theta||_2^2\}.$$

Zaleta regularyzacji ℓ_1: część współrzędnych $\hat{\theta}$ będzie równa 0 (selekcja zmiennych).

Ogólne podejście:

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Rozważamy rodzinę rozkładów: $\{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$.
- Estymujemy parametry używając metody NW:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta})\}.$$

- Wersja z regularyzacją:

$$\hat{\theta} = \arg\min_{\theta} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \theta) + \lambda_1 ||\theta||_1 + \lambda_2 ||\theta||_2^2\}.$$

Zaleta regularyzacji ℓ_1: część współrzędnych $\hat{\theta}$ będzie równa 0 (selekcja zmiennych).

Ogólne podejście:

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Rozważamy rodzinę rozkładów: $\{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$.
- Estymujemy parametry używając metody NW:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta})\}.$$

- Wersja z regularyzacją:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta}) + \lambda_1 ||\boldsymbol{\theta}||_1 + \lambda_2 ||\boldsymbol{\theta}||_2^2\}.$$

Zaleta regularyzacji ℓ_1: część współrzędnych $\hat{\theta}$ będzie równa 0 (selekcja zmiennych).

Ogólne podejście:

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Rozważamy rodzinę rozkładów: $\{p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$.
- Estymujemy parametry używając metody NW:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta})\}.$$

- Wersja z regularyzacją:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)}|\mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta}) + \lambda_1 ||\boldsymbol{\theta}||_1 + \lambda_2 ||\boldsymbol{\theta}||_2^2\}.$$

Zaleta regularyzacji ℓ_1: część współrzędnych $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ będzie równa 0 (selekcja zmiennych).

Przykład rodziny rozkładów $\{p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$:

Model Isinga [1] [2]**:**

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x},\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N(\mathbf{x})} \exp\left[\sum_{k=1}^{K} a_k^T \mathbf{x} y_k + \sum_{k<l} \beta_{k,l} y_k y_l\right], \qquad (1)$$

gdzie:

$$N(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y}\in\{0,1\}^K} \exp\left[\sum_{k=1}^{K} a_k^T \mathbf{x} y_k + \sum_{k<l} \beta_{k,l} y_k y_l\right] \qquad (2)$$

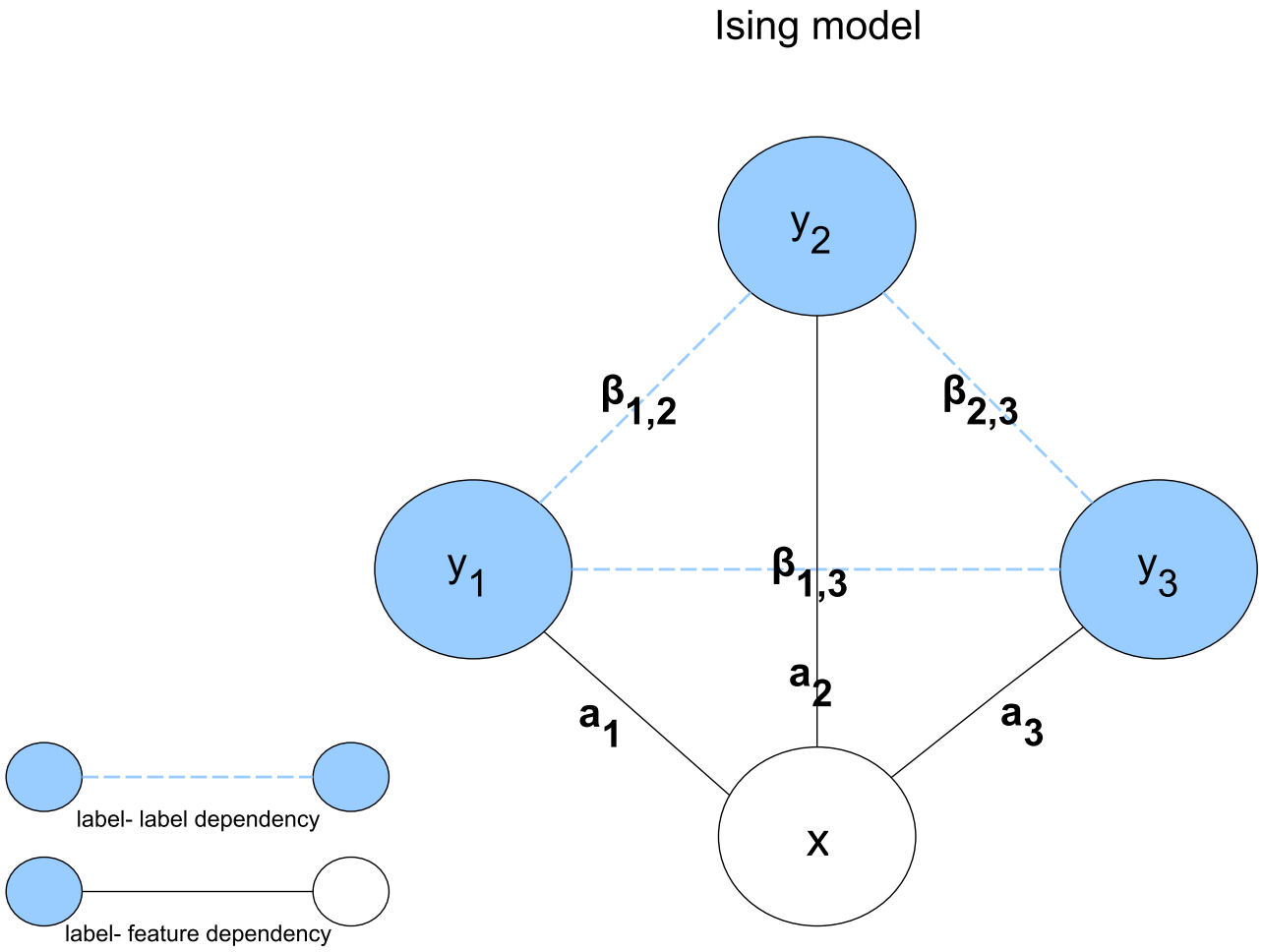
oraz $\boldsymbol{\theta} = (a_1, \ldots, a_K, \beta_{1,2}, \beta_{1,3}, \ldots, \beta_{K-1,K})^T$.

---

[1] E. Ising, Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Zeitschrift für Physik, 1925

[2] P. Teisseyre, Feature ranking for multi-label classification using Markov Networks, Neurocomputing, 2016.

Model Isinga



Rysunek : Sieć Markova odpowiadająca modelowi Isinga.

Dlaczego model Isinga?

- Chcemy znaleźć rozkład $g(\mathbf{y}|x)$, maksymalizujący entropię: $H_g(\mathbf{y}|x) = -\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x) \log(g(\mathbf{y}|x))$
- przy założeniach: $g(\mathbf{y}|x) \geqslant 0$, $\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x) = 1$
- oraz:

$$\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x) y_k = A_k(x), \quad k = 1, \ldots, K, \tag{3}$$

$$\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x) y_k y_l = B_{k,l}(x), \quad k < l, \tag{4}$$

gdzie $A_k(x)$ i $B_{k,l}(x)$ są ustalone i zależą od x.

Dlaczego model Isinga?

Twierdzenie

Niech $g(\mathbf{y}|x)$ będzie dowolnym rozkładem spełniającym (3), (4) i niech $p(\mathbf{y}|x)$ będzie rozkładem danym wzorem Isinga i spełniającym (3), (4). Wtedy: $H_g(\mathbf{y}|x) \leqslant H_p(\mathbf{y}|x)$.

Dlaczego model Isinga?

Dowód:

- Z definicji entropii:

$$H_g(\mathbf{y}|x) = -\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log(g(\mathbf{y}|x)) =$$
$$-\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log\left[\frac{g(\mathbf{y}|x)}{p(\mathbf{y}|x)}p(\mathbf{y}|x)\right] =$$
$$-KL(g,p) - \sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)) \leqslant -\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)),$$

  gdzie $KL(g,p)$ jest "odległością" Kullbacka-Leibnera między g i p i ostatnia nierówność wynika z $KL(g,p) \geqslant 0$ (nierówność informacyjna).

- Dalej pokażemy że:

$$-\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)) = -\sum_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)).$$

Dlaczego model Isinga?

Korzystając z definicji p i g oraz faktu że p i g muszą spełniać ograniczenia mamy:

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)) = \\
&-\sum_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}|x)\left[-\log(Z(x)) + \sum_{k=1}^{K} a_k^T x y_k + \sum_{k<j} \beta_{k,j} x y_k y_j\right] = \\
&-\sum_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}|x)\left[-\log(Z(x)) + \sum_{k=1}^{K} a_k^T x y_k + \sum_{k<j} \beta_{k,j} x y_k y_j\right] = \\
&-\sum_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}|x)\log(p(\mathbf{y}|x)),
\end{aligned}
$$

co kończy dowód.

Model Isinga:

Zalety:

- Naturalne uogólnienie modelu logistycznego.
- Łatwa interpretacja zależności między etykietami.
- Rozkład maksymalnej entropii.

Wady:

- Duża liczba parametrów.
- Bezpośrednia estymacja metodą największej wiarogodności jest trudna ze względu na stałą normującą $Z(\mathbf{x})$.
- Predykcja może być problemem w przypadku dużej liczby etykiet.

Metoda CCnet

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Zamiast modelować $p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ bezpośrednio, używamy wzoru łańcuchowego:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = p(y_1|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_1) \prod_{k=2}^{K} p(y_k|\mathbf{y}_{-k}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_k),$$

gdzie: $\mathbf{y}_{-k} = (y_1, \ldots, y_{k-1})^T$, $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \ldots, \boldsymbol{\theta}_K)^T$.

Metoda CCnet

- Problem:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(\mathbf{y}^{(i)} | \mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta}) + \lambda_1 ||\boldsymbol{\theta}||_1 + \lambda_2 ||\boldsymbol{\theta}||_2^2 \}.$$

- Rozwiązanie w postaci: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{\theta}}_K)^T$, gdzie:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_k = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}_k} \{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log p(y_k^{(i)} | \mathbf{y}_{-k}^{(i)}, \mathbf{x}^{(i)}, \boldsymbol{\theta}_k) + \lambda_1 ||\boldsymbol{\theta}_k||_1 + \lambda_2 ||\boldsymbol{\theta}_k||_2^2 \},$$

dla $k = 1, \ldots, K$.

Metoda CCnet

- Zakładamy że prawdopodobieństwa warunkowe są w postaci:

$$p(y_k|\mathbf{z}_k, \boldsymbol{\theta}_k) = \frac{\exp(\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k y_k)}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k)},$$

gdzie: $\mathbf{z}_k = (\mathbf{y}_{-k}, \mathbf{x})^T$.

- Rozważamy parametry regularyzacji $\lambda_{1,k}$ and $\lambda_{2,k}$ niezależnie, dla każdego k.

- Rozwiązanie w postaci: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{\theta}}_K)^T$, gdzie:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_k = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}_k} \{-\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k^{(i)} y_k^{(i)} - \log(1+\exp(\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k^{(i)}))] + \lambda_{1,k} ||\boldsymbol{\theta}_k||_1 + \lambda_{2,k} ||\boldsymbol{\theta}_k||_2^2\},$$

dla $k = 1, \ldots, K$.

Metoda CCnet

- Rozwiązanie w postaci: $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{\theta}}_K)^T$, gdzie:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_k = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}_k} \{ -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k^{(i)} y_k^{(i)} - \log(1+\exp(\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{z}_k^{(i)}))] + \lambda_{1,k} ||\boldsymbol{\theta}_k||_1 + \lambda_{2,k} ||\boldsymbol{\theta}_k||_2^2 \},$$

dla $k = 1, \ldots, K$.

- K problemów optymalizacji wypukłej: do rozwiązania można użyć algorytmu CCD (funkcja `glmnet` w `R`).

Wybór parametru regularyzacji

- Przyjmujemy $\lambda_{1,k} = \alpha\lambda_k$, $\lambda_{2,k} = (1-\alpha)\lambda_k$, gdzie: $\alpha \in [0,1]$.
- Dla ustalonego α znajdujemy optymalną wartość λ_k używając kryterium GIC (Generalized Information Criterion):

$$\hat{\lambda}_k = \arg\min_{\lambda_k}\{-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\log p(y_k^{(i)}|\mathbf{z}_k^{(i)}, \hat{\boldsymbol{\theta}}_k) + a(n)\cdot df\},$$

gdzie:

- $df := |\{r : \hat{\boldsymbol{\theta}}_{k,r} \neq 0\}|$,
- $a(n) = \log(n)$ (BIC) lub $a(n) = 2$ (AIC).

Łańcuchy klasyfikatorów

Estymacja prawdopodobieństwa aposteriori:

- Zamiast modelować $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ bezpośrednio, używamy wzoru łańcuchowego:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = p(y_1|\mathbf{x}) \prod_{k=2}^{K} p(y_k|\mathbf{y}_{-k}, \mathbf{x}),$$

gdzie: $\mathbf{y}_{-k} = (y_1, \ldots, y_{k-1})^T$.

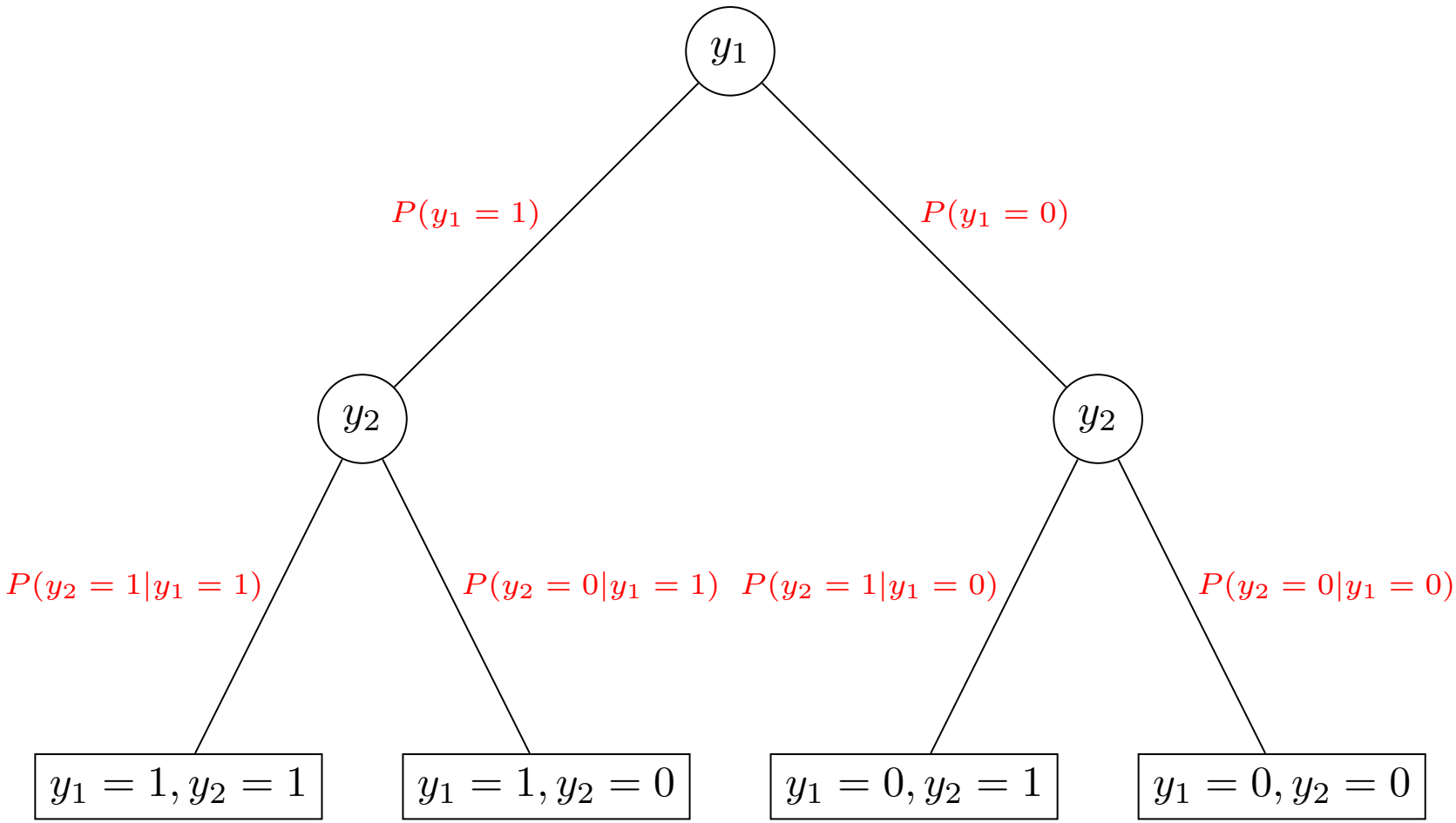
- Do oszacowania prawdopodobieństw warunkowych można użyć dowolnego klasyfikatora, traktując y_k jako zmienną odpowiedzi, natomiast $\mathbf{x}, y_1, \ldots, y_{k-1}$ jako zmienne objaśniające (atrybuty).
- W CCnet do oszacowania prawdopodobieństw warunkowych używamy regresji logistycznej z odpowiednią regularyzacją (sieć elastyczna).

Łańcuchy klasyfikatorów- predykcja

- Pełne przeszukiwanie (sprawdzenie wszystkich możliwych kombinacji etykiet) wymaga 2^K operacji.
- Przeszukiwanie zachłanne:
  - Znajdź: $\hat{y}_1 = \arg\max_{y \in \{0,1\}} p(y_1 = y|\mathbf{x})$,
  - Znajdź: $\hat{y}_2 = \arg\max_{y \in \{0,1\}} p(y_2 = y|\hat{y}_1, \mathbf{x})$,
  - Znajdź: $\hat{y}_3 = \arg\max_{y \in \{0,1\}} p(y_3 = y|\hat{y}_1, \hat{y}_2, \mathbf{x})$,
  - ...

  wymaga K operacji.
- Inne możliwości: beam search (Kumar et al. 2013).

Łańcuchy klasyfikatorów- predykcja



Wyniki teoretyczne

- Stabilność CCnet ze względu na wybraną funkcję straty: niewielka zmiana zbioru treningowego nie wpływa znacząco na wartość funkcji straty dla CCnet.
- Oszacowanie błędu generalizacji dla CCnet, dla wybranej funkcji straty: używamy pomysłu opisanego w pracy Bousquet & Elisseeff (JMLR 2002), który pozwala udowodnić oszacowanie błędu generalizacji używając stabilności.

Funkcje straty

Niech: $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) - \max_{\mathbf{y}' \neq \mathbf{y}} p(\mathbf{y}'|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$.

- Strata 0-1:

$$l(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 1 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < 0 \\ 0 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) \geqslant 0. \end{cases} \tag{5}$$

- Modyfikacja straty 0-1:

$$l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 1 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < 0 \\ 1 - g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta})/\gamma & \text{if } 0 \leqslant g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < \gamma \\ 0 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) \geqslant \gamma. \end{cases}$$

Funkcje straty

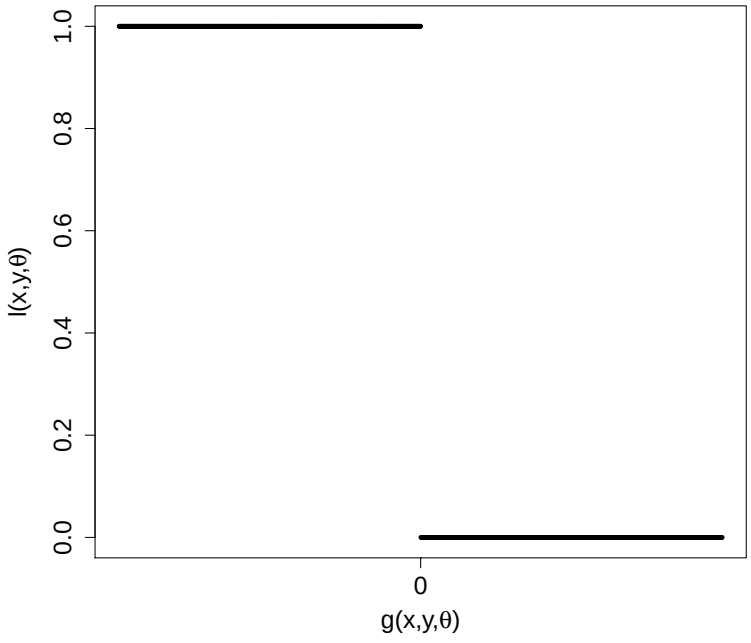
Niech: $g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) - \max_{\mathbf{y}' \neq \mathbf{y}} p(\mathbf{y}'|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$.

- Strata 0-1:

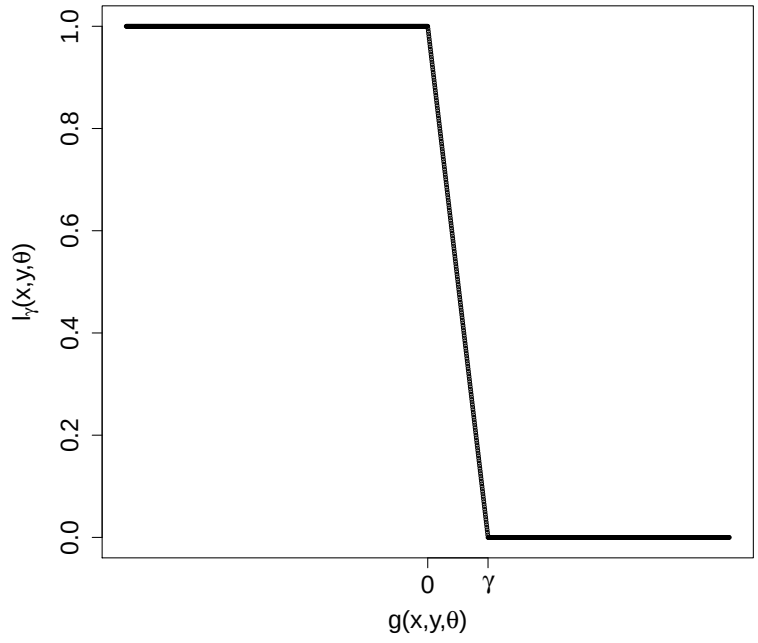
$$l(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 1 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < 0 \\ 0 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) \geqslant 0. \end{cases} \tag{5}$$

- Modyfikacja straty 0-1:

$$l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 1 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < 0 \\ 1 - g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta})/\gamma & \text{if } 0 \leqslant g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) < \gamma \\ 0 & \text{if } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}) \geqslant \gamma. \end{cases}$$



(a)



(b)

Rysunek : Porównanie funkcji strat: $l(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta})$ (a) oraz $l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\theta})$ (b).

Stabilność CCnet

- Oryginalny zbiór uczący: $\mathcal{D} = (\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}), i = 1, \ldots, n$
- Zmodyfikowany zbiór uczący: $\mathcal{D}^l$: obserwacja numer l z $\mathcal{D}$ została zamieniona przez niezależną kopię.
- Rozwiązania CCnet: $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ oraz $\hat{\boldsymbol{\theta}}^l$ wyliczone na podstawie zbiorów: $\mathcal{D}$ oraz $\mathcal{D}^l$.

Twierdzenie (stabilność CCnet)

Zakładamy że $||\mathbf{x}||_2 \leqslant L$ i niech $\lambda_2 > 0$. Dla $l = 1, \ldots, n$ mamy:

$$|l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\theta}) - l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\theta}^l)| \leqslant \frac{4K(L^2 + K)}{\lambda_2 n \gamma}.$$

Stabilność CCnet

- Oryginalny zbiór uczący: $\mathcal{D} = (\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}), i = 1, \ldots, n$
- Zmodyfikowany zbiór uczący: $\mathcal{D}^l$: obserwacja numer l z $\mathcal{D}$ została zamieniona przez niezależną kopię.
- Rozwiązania CCnet: $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ oraz $\hat{\boldsymbol{\theta}}^l$ wyliczone na podstawie zbiorów: $\mathcal{D}$ oraz $\mathcal{D}^l$.

Twierdzenie (stabilność CCnet)

Zakładamy że $||\mathbf{x}||_2 \leqslant L$ i niech $\lambda_2 > 0$. Dla $l = 1, \ldots, n$ mamy:

$$|l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\boldsymbol{\theta}}) - l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\boldsymbol{\theta}}^l)| \leqslant \frac{4K(L^2 + K)}{\lambda_2 n \gamma}.$$

Oszacowanie błędu generalizacji CCnet

- Błąd oczekiwany:

$$err(\hat{\theta}) = E_{\mathbf{x},\mathbf{y}} l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\theta}),$$

- Błąd na danych uczących:

$$Err(\hat{\theta}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l_\gamma(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}, \hat{\theta}).$$

Twierdzenie (oszacowanie błędu generalizacji)

Zakładamy że $||\mathbf{x}||_2 \leqslant L$ oraz $\lambda_2 > 0$. Mamy następujące oszacowanie z prawdopodobieństwem co najmniej $1 - \delta$:

$$err(\hat{\theta}) - Err(\hat{\theta}) \leqslant \frac{8K(L^2 + K)}{\lambda_2 n \gamma} + \left(\frac{16K(L^2 + K)}{\lambda_2 \gamma} + 1 \right) \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}.$$

Oszacowanie błędu generalizacji CCnet

- Błąd oczekiwany:

$$err(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = E_{\mathbf{x},\mathbf{y}} l_\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \hat{\boldsymbol{\theta}}),$$

- Błąd na danych uczących:

$$Err(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} l_\gamma(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}, \hat{\boldsymbol{\theta}}).$$

Twierdzenie (oszacowanie błędu generalizacji)

Zakładamy że $||\mathbf{x}||_2 \leqslant L$ oraz $\lambda_2 > 0$. Mamy następujące oszacowanie z prawdopodobieństwem co najmniej $1 - \delta$:

$$err(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - Err(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \leqslant \frac{8K(L^2 + K)}{\lambda_2 n \gamma} + \left(\frac{16K(L^2 + K)}{\lambda_2 \gamma} + 1 \right) \sqrt{\frac{\log(1/\delta)}{2n}}.$$

Eksperymenty

Porównanie metod:

1. *BRlogit*[3],
2. *BRtree*,
3. *BRnet*, dla $\alpha = 0, 0.5, 1$[4],
4. *CClogit*[5],
5. *CCtree*,
6. *CCnet*, dla $\alpha = 0, 0.5, 1$.

[3] Dembczynski et. al. 2012

[4] Liu 2015

[5] Kumar et. al. 2013; Montanes 2014; Dembczynski et. al. 2012

Eksperymenty

Miary oceny:

- Dokładność zbioru:

$$\text{Subset accuracy}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = I[\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}}].$$

- Miara Hamminga:

$$\text{Hamming measure}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} I[y_k = \hat{y}_k].$$

- Liczba wybranych zmiennych.
- Czas budowy modelu.

Eksperymenty

Dataset	CClogit	CCtree	CCnet ($\alpha = 1$)	CCnet ($\alpha = 0$)	CCnet ($\alpha = 0.5$)	BRlogit	BRtree	BRnet ($\alpha = 1$)	BRnet ($\alpha = 0$)	BRnet ($\alpha = 0.5$)
music	0.215	0.221	0.275	0.267	**0.282**	0.186	0.191	0.257	0.253	0.220
yeast	0.214	0.168	0.184	**0.226**	0.192	0.156	0.048	0.123	0.163	0.115
scene	0.473	0.467	0.629	**0.639**	0.592	0.385	0.337	0.416	0.543	0.356
birds	0.349	0.375	0.532	0.535	**0.538**	0.332	0.375	0.535	0.535	0.538
flags	**0.227**	0.139	0.216	0.196	0.196	0.124	0.072	0.165	0.139	0.144
medical	0.181	0.690	**0.760**	0.218	0.697	0.180	0.634	0.752	0.218	0.667
cal500	0.008	0.006	**0.020**	0.014	0.020	0.012	0.004	0.008	0.010	0.010
genbase	**0.989**	0.985	0.986	0.029	0.986	0.989	0.985	0.989	0.029	0.986
mediamill	0.223	0.096	0.197	**0.200**	0.197	0.192	0.057	0.155	0.160	0.156
enron	0.037	0.170	0.139	**0.210**	0.136	0.038	0.130	0.095	0.202	0.090
bookmarks	0.108	0.287	**0.754**	0.741	0.754	0.067	0.292	0.754	0.739	0.754
bibtex	0.361	0.404	0.780	**0.788**	0.777	0.359	0.414	0.780	0.787	0.777
avg rank	5.269	4.077	**7.769**	**7.769**	7.577	3.500	2.538	5.808	5.769	4.923

Tabela : Dokładność zbioru. Parametr λ wybrany za pomocą BIC. Pogrubione liczby odpowiadają najlepszej metodzie.

Eksperymenty

Dataset	CClogit	CCtree	CCnet ($\alpha = 1$)	CCnet ($\alpha = 0$)	CCnet ($\alpha = 0.5$)	BRlogit	BRtree	BRnet ($\alpha = 1$)	BRnet ($\alpha = 0$)	BRnet ($\alpha = 0.5$)
music	0.749	0.720	0.775	0.782	0.778	0.765	0.734	0.794	**0.796**	0.783
yeast	0.722	0.659	0.724	0.731	0.730	0.741	0.631	0.744	**0.744**	0.742
scene	0.843	0.838	0.884	0.900	0.873	0.846	0.831	0.887	**0.901**	0.878
birds	0.809	0.864	0.923	0.915	0.922	0.804	0.863	**0.924**	0.914	0.922
flags	0.706	0.658	**0.733**	0.719	0.728	0.716	0.669	0.731	0.725	0.721
medical	0.774	0.956	**0.968**	0.906	0.962	0.773	0.955	0.967	0.906	0.959
cal500	0.588	0.545	0.616	0.608	**0.616**	0.596	0.541	0.615	0.600	0.616
genbase	0.999	0.998	0.999	0.901	0.999	0.999	0.998	**0.999**	0.901	0.999
mediamill	0.825	0.703	0.816	0.820	0.816	**0.833**	0.688	0.822	0.825	0.823
enron	0.589	0.780	0.806	**0.834**	0.809	0.605	0.772	0.816	0.834	0.815
bookmarks	0.719	0.770	**0.969**	0.967	0.969	0.684	0.822	0.969	0.967	0.969
bibtex	0.895	0.902	0.975	0.976	0.975	0.898	0.913	0.975	**0.976**	0.975
avg rank	3.654	2.654	6.654	6.308	6.308	4.423	2.500	**8.192**	7.231	7.077

Tabela : Miara Hamminga. Parametr λ wybrany za pomocą BIC. Pogrubione liczby odpowiadają najlepszej metodzie.

Eksperymenty

Dataset	CClogit	CCtree	CCnet ($\alpha = 1$)	CCnet ($\alpha = 0$)	CCnet ($\alpha = 0.5$)	BRlogit	BRtree	BRnet ($\alpha = 1$)	BRnet ($\alpha = 0$)	BRnet ($\alpha = 0.5$)
music	71	69	36	71	45	71	71	**34**	71	39
yeast	103	95	70	103	85	103	103	**54**	103	59
scene	294	177	161	294	212	294	190	**160**	294	190
birds	260	34	44	260	**30**	260	33	45	260	30
flags	19	19	16	19	16	19	19	**6**	19	8
medical	1449	80	33	1200	47	1449	75	**31**	1200	45
cal500	68	68	5	68	4	68	68	2	68	**1**
genbase	1186	28	**13**	97	26	1186	29	14	97	26
mediamill	120	81	75	120	96	120	94	**72**	120	91
enron	1001	303	86	1001	96	1001	374	**78**	1001	86
bookmarks	2150	450	**56**	2150	92	2150	453	57	2150	93
bibtex	1836	171	**108**	1836	133	1836	169	109	1836	131
avg rank	9	5	**2**	8	4	9	5	**2**	8	3

Tabela : Liczba wybranych zmiennych. Parametr λ wybrany za pomocą BIC. Pogrubione liczby odpowiadają najlepszej metodzie.

Eksperymenty

Dataset	CClogit	CCtree	CCnet ($\alpha = 1$)	CCnet ($\alpha = 0$)	CCnet ($\alpha = 0.5$)	BRlogit	BRtree	BRnet ($\alpha = 1$)	BRnet ($\alpha = 0$)	BRnet ($\alpha = 0.5$)
music	0.96	0.59	0.55	0.94	0.47	**0.25**	0.54	0.61	0.74	0.56
yeast	3.57	5.69	3.06	4.32	3.75	**1.85**	7.50	3.33	4.43	3.38
scene	23.98	8.25	**2.08**	7.97	3.08	20.44	8.45	2.39	8.05	3.64
birds	7.94	2.18	1.18	3.22	1.29	7.68	2.18	**0.94**	3.72	1.43
flags	0.05	0.09	0.24	0.40	0.28	**0.04**	0.09	0.26	0.34	0.29
medical	1426.40	12.49	**5.45**	19.89	5.63	1419.75	11.40	5.59	20.54	5.48
cal500	0.24	0.91	0.66	1.05	0.71	**0.21**	1.31	0.63	1.04	0.67
genbase	1254.63	6.35	2.97	3.16	2.86	1257.29	6.03	**2.60**	3.31	2.78
mediamill	18.16	28.22	6.60	20.53	8.82	9.37	35.58	**6.07**	20.50	7.72
enron	197.43	25.30	8.19	44.82	10.37	188.95	28.81	**7.95**	42.51	11.43
bookmarks	3370.57	246.90	50.34	391.62	58.44	3100.20	249.42	**47.61**	385.67	58.53
bibtex	4911.14	209.11	70.49	525.61	82.10	5019.62	210.31	**67.61**	520.32	77.41
avg rank	7.46	6.62	2.77	7.62	4.15	5.77	6.85	**2.54**	7.38	3.85

Tabela : Czas budowy modelu. Parametr λ wybrany za pomocą BIC. Pogrubione liczby odpowiadają najlepszej metodzie.

Eksperymenty

Wnioski:

1. CCnet (z dowolną α) osiąga większą dokładność zbioru niż inne metody.
2. Wartość α nie ma bardzo dużego wpływu na dokładność i miarę Hamminga. Wartość $\alpha > 0$ jest zalecana ze względu na selekcję zmiennych.
3. BRnet osiąga największe wartości miary Hamminga.
4. Kara lasso (BRnet, $\alpha = 1$ oraz CCnet, $\alpha = 1$) pozwala na wybór najmniejszej liczby zmiennych.
5. Najmniejsze czasy dopasowania modelu obserwujemy dla kary lasso (BRnet, $\alpha = 1$ oraz CCnet, $\alpha = 1$).

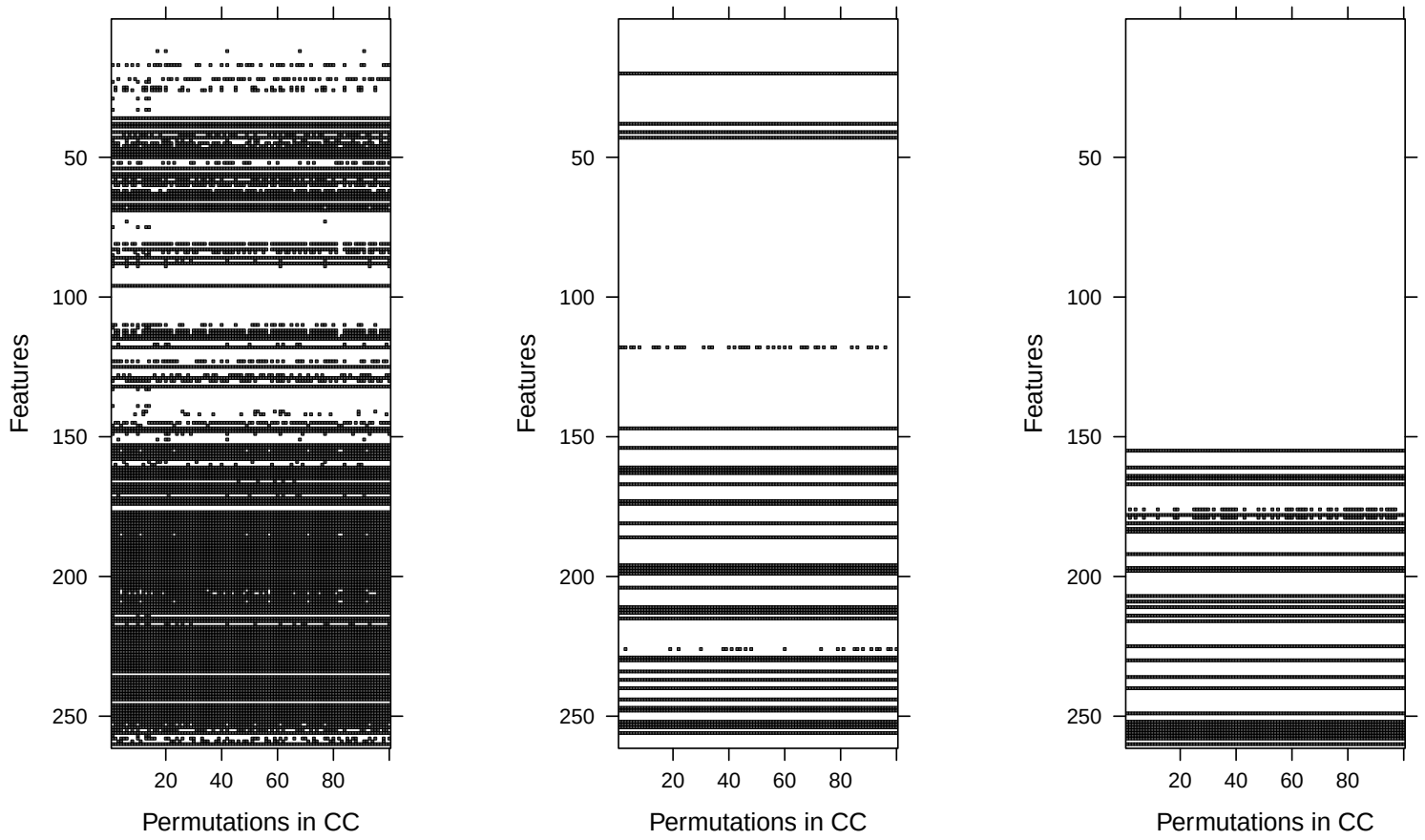
Eksperyment 2

Wybrany zbiór zmiennych:

$$S = \bigcup_{k=1}^{K} \{1 \leqslant r \leqslant p : \hat{\theta}_{k,r} \neq 0\}.$$

Cel eksperymentu:

- Kolejność dopasowania modeli w łańcuchu może wpływać na jakość modelu, a co za tym idzie na to które zmienne są wybierane.
- Sprawdzamy stabilność wyboru zmiennych ze względu na kolejność dopasowania modeli w łańcuchu.
- Powtarzamy dopasowanie CCnet dla różnych permutacji etykiet i dla każdej wyznaczamy zbiór S.



(a)CCnet+AIC (b)CCnet+BIC (c)CCtree

Rysunek : Wybrane zmienne dla różnych kolejności dopasowania modeli. Czarne kropki oznaczają wybrane zmienne.

Eksperyment 2

Dataset	p	mean of $\|S\|$	sd of $\|S\|$	$>75\%$	$>90\%$	$>95\%$
music	72	35	4	21	21	21
yeast	104	68	5	57	47	45
scene	295	163	11	117	96	81
birds	261	36	1	35	35	35
flags	20	16	1	14	12	11
medical	1450	30	1	29	29	29
cal500	69	6	2	2	2	2
genbase	1187	11	0	11	11	11
mediamill	121	71	3	61	55	54
enron	1002	74	6	54	46	44
bookmarks	2151	64	2	63	60	60
bibtex	1837	114	1	111	111	111

Tabela : Stabilność CCnet dla BIC.

Eksperyment 2

Dataset	p	mean of $\|S\|$	sd of $\|S\|$	$>75\%$	$>90\%$	$>95\%$
music	72	68	2	67	62	60
yeast	104	103	0	103	103	102
scene	295	243	6	205	171	145
birds	261	140	5	132	123	118
flags	20	19	0	19	18	17
medical	1450	175	16	121	112	112
cal500	69	59	4	56	46	43
genbase	1187	11	0	11	11	11
mediamill	121	82	3	70	67	62
enron	1002	711	37	639	520	462
bookmarks	2151	455	44	365	346	333
bibtex	1837	589	22	554	551	551

Tabela : Stabilność CCnet dla AIC.

Eksperyment 2

Dataset	p	mean of $\|S\|$	sd of $\|S\|$	>75%	>90%	>95%
music	72	67	1	65	56	52
yeast	104	98	2	100	80	74
scene	295	184	9	134	109	105
birds	261	31	1	30	30	30
flags	20	19	1	19	17	17
medical	1450	68	4	57	55	55
cal500	69	68	0	68	68	68
genbase	1187	25	1	25	24	24
mediamill	121	87	9	61	42	38
enron	1002	306	23	138	116	115
bookmarks	2151	442	20	241	212	211
bibtex	1837	174	6	154	154	154

Tabela : Stabilność CCtree.

Eksperyment 2

Wnioski:

1. Stabilność zależy od zbioru danych. Dla pewnych zbiorów (np. CCnet+ BIC, zbiór genbase) wybieramy dokładnie te same zmienne dla wszystkich permutacji etykiet.
2. CCnet z BIC działa stabilnie, większość zmiennych jest wybierana dla co najmniej 95% permutacji etykiet.
3. Ostateczny zbiór zmiennych istotnych może być wybierany poprzez uwzględnienie zmiennych które pojawiły się dla większości permutacji (np. dla najmniej 95% permutacji).

Narzędzia:

- Biblioteka `MULAN (JAVA)`: duża liczba zaimplementowanych metod, wykorzystuje bibliotekę `WEKA`.
- Biblioteka `MEKA (JAVA)`: posiada interfejs graficzny, wykorzystuje bibliotekę `WEKA`.
- Pakiet `mldr (R)`: transformacje BR, LP, wizualizacja danych z wieloma etykietami.

Referencje:

1. P. Teisseyre, *Joint multi-label classification and feature selection using classifier chains and elastic net regularization*, w recenzji, 2016.
2. P. Teisseyre, *Feature ranking for multi-label classification using Markov Networks*, Neurocomputing, 2016,
3. H. Liu et. al., *MLSLR: Multilabel Learning via Sparse Logistic Regression*, Information Sciences, 2015,
4. K. Dembczyński et. al., *On label dependence and loss minimization in multi-label classification*, Machine Learning, 2012,
5. E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Zeitschrift für Physik, 1925,
6. W. Bian et. al., *CorrLog: Correlated Logistic Models for Joint Prediction of Multiple Labels*, JMLR Proceedings, 2012.