Вероятностные тематические модели
Лекция 11. Некоторые прикладные и исследовательские задачи

К. В. Воронцов
vokov@forecsys.ru

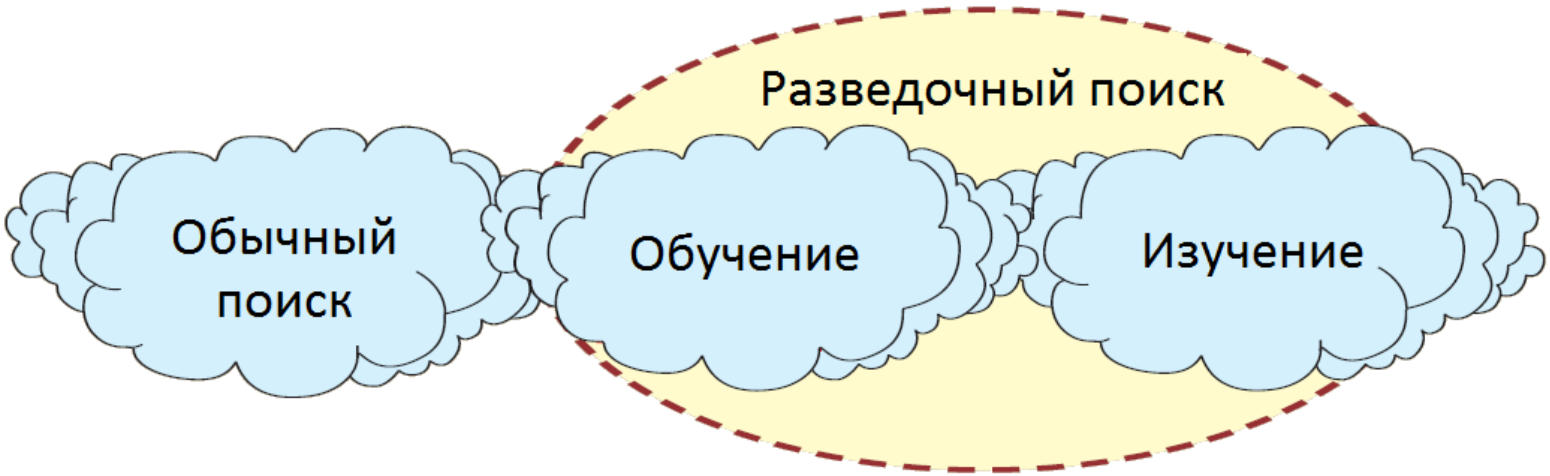
Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Вероятностные тематические модели (курс лекций, К.В.Воронцов)»

ВМК МГУ • весна 2017

Содержание

Концепция разведочного поиска (exploratory search)

- пользователь может не знать ключевых терминов,
- запросом может быть текст произвольной длины,
- информационной потребностью — систематизация знаний



навигация в сети,	самообразование,	исследование,
поиск фактов,	тематический поиск	экспертиза,
упоминаний,	систематизация	реферирование,
конкретных ответов	знаний	мониторинг тем

Gary Marchionini. Exploratory Search: from finding to understanding. 2006.

Разведочный тематический поиск

$q = (w_1, \ldots, w_{n_q})$ — текст запроса произвольной длины n_q

$\theta_{tq} = p(t|q)$ — тематический профиль запроса q
$\theta_{td} = p(t|d)$ — тематические профили документов $d \in D$

Косинусная мера близости документа d и запроса q:

$$\text{sim}(q, d) = \frac{\sum_t \theta_{tq}\theta_{td}}{\left(\sum_t \theta_{tq}^2\right)^{1/2}\left(\sum_t \theta_{td}^2\right)^{1/2}}.$$

Ранжируем документы коллекции $d \in D$ по убыванию $\text{sim}(q, d)$

Выдача тематического поиска — k первых документов.

Реализация: *инвертированный индекс* для быстрого поиска документов d по каждой из тем t запроса

Данные коллективного блога Хабрахабр.ру

Данные

- 132 157 статей
- Модальности:
  - 52 354 терминов (слов)
  - 524 авторов статей
  - 10 000 комментаторов (авторов комментариев к статьям)
  - 2546 тегов
  - 123 хаба (категории)

Предобработка текстов

- отброшены 5% наиболее частотных слов (общая лексика)
- удаление пунктуации
- нижний регистр, ё→е
- лемматизация pymorphy2

Методика оценивания качества разведочного поиска

Поисковый запрос

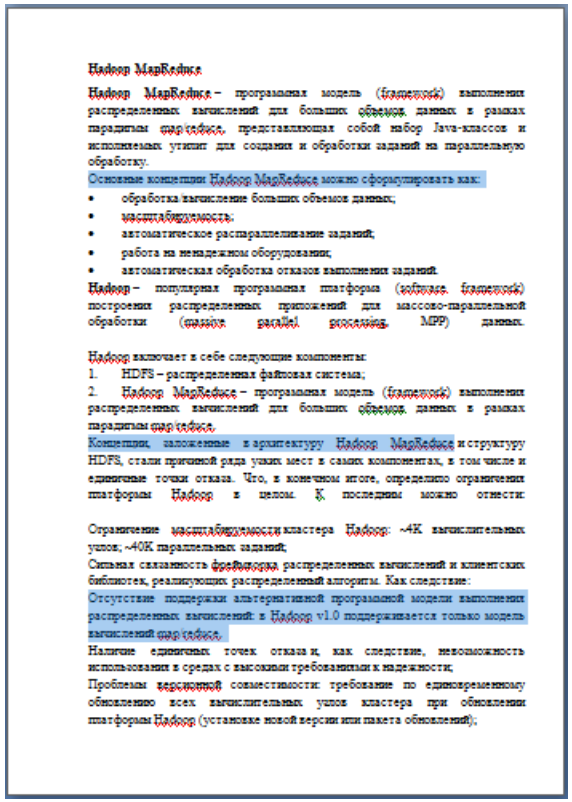
набор ключевых слов или фрагментов текста, около одной страницы A4

Поисковая выдача

документы d с распределением $p(t|d)$, близким к распределению $p(t|q)$ запроса

Два задания асессорам

1. найти как можно больше статей, пользуясь любыми средствами поиска (и засечь время)
2. оценить релевантность поисковой выдачи на том же запросе



Hadoop MapReduce

Hadoop MapReduce – программная модель (framework) выполнения распределенных вычислений для больших объемов данных в рамках парадигмы map/reduce, представляющая собой набор Java-классов и исполнимых утилит для создания и обработки заданий на параллельную обработку.

Основные концепции Hadoop MapReduce можно сформулировать как:

- обработка/вычисление больших объемов данных;
- масштабируемость;
- автоматическое распараллеливание заданий;
- работа на ненадежном оборудовании;
- автоматическая обработка отказов выполнения заданий.

Hadoop – популярная программная платформа (software framework) построения распределенных приложений для массово-параллельной обработки (massive parallel processing, MPP) данных.

Hadoop включает в себе следующие компоненты:

1. HDFS – распределенная файловая система;
2. Hadoop MapReduce – программная модель (framework) выполнения распределенных вычислений для больших объемов данных в рамках парадигмы map/reduce.

Концепции, заложенные в архитектуру Hadoop MapReduce и структуру HDFS, стали причиной ряда узких мест в самих компонентах, в том числе и единичные точки отказа. Что, в конечном итоге, определило ограничения платформы Hadoop в целом. К последним можно отнести:

Ограничение масштабируемости кластера Hadoop: ~4K вычислительных узлов; ~40K параллельных заданий;

Сильная связанность фреймворка распределенных вычислений и клиентских библиотек, реализующих распределенный алгоритм. Как следствие:

Отсутствие поддержки альтернативной программной модели выполнения распределенных вычислений: в Hadoop v1.0 поддерживается только модель вычислений map/reduce.

Наличие единичных точек отказа и, как следствие, невозможность использования в средах с высокими требованиями к надежности;

Проблемы версионной совместимости: требование по единовременному обновлению всех вычислительных узлов кластера при обновлении платформы Hadoop (установке новой версии или пакета обновлений);

Пример запроса для разведочного поиска

Пример: фрагмент запроса «Система IBM Watson»

IBM Watson — суперкомпьютер фирмы IBM, оснащённый вопросно-ответной системой искусственного интеллекта, созданный группой исследователей под руководством Дэвида Феруччи. Его создание — часть проекта DeepQA. Основная задача Уотсона — понимать вопросы, сформулированные на естественном языке, и находить на них ответы в базе данных. Назван в честь основателя IBM Томаса Уотсона.

IBM Watson представляет собой когнитивную систему, которая способна понимать, делать выводы и обучаться. Она также позволяет преобразовывать целые отрасли, различные направления науки и техники. Например, предсказывать появление эпидемий или возникновения очагов природных катастроф в различных регионах, вести мониторинг состояния атмосферы больших городов, оптимизировать бизнес-процессы, узнавать, какие товары будут в тренде в ближайшее время.

... ...

Релевантные тексты: примеры сервисов и приложений, основа которых — когнитивная платформа IBM Watson, используемые в IBM Watson технологии, вопрос-ответные системы, сопоставление IBM Watson с Wolfram-Alpha.

Нерелевантные тексты: общие вопросы искусственного интеллекта, другие коммерческие решения на рынке бизнес-аналитики.

Тематика запросов разведочного поиска

Примеры заголовков разведочных запросов к Хабру (объём каждого запроса — около одной страницы A4):

Алгоритмы раскраски графов	Система IBM Watson
Рекомендательная система Netflix	3D-принтеры
Методики быстрого набора текста	CERN-кластер
Космические проекты Илона Маска	AB-тестирование
Технологии Hadoop MapReduce	Облачные сервисы
Беспилотный автомобиль Google car	Контекстная реклама
Криптосистемы с открытым ключом	Марсоход Curiosity
Обзор платформ онлайн-курсов	Видеокарты NVIDIA
Data Science Meetups в Москве	Распознавание образов
Образовательные проекты mail.ru	Сервисы Google scholar
Межпланетная станция New horizons	MIT MediaLab Research
Языковая модель word2vec	Платформа Microsoft Azure

Стратегия регуляризации

Последовательное применение трёх регуляризаторов

1. декоррелирование тем:

$$R(\Phi) = -\tau \sum_{s,t \in T} \sum_{w \in W} \phi_{wt} \phi_{ws}$$

2. разреживание распределений $p(t|d)$:

$$R(\Theta) = -\alpha \sum_{d,t} \ln \theta_{td}$$

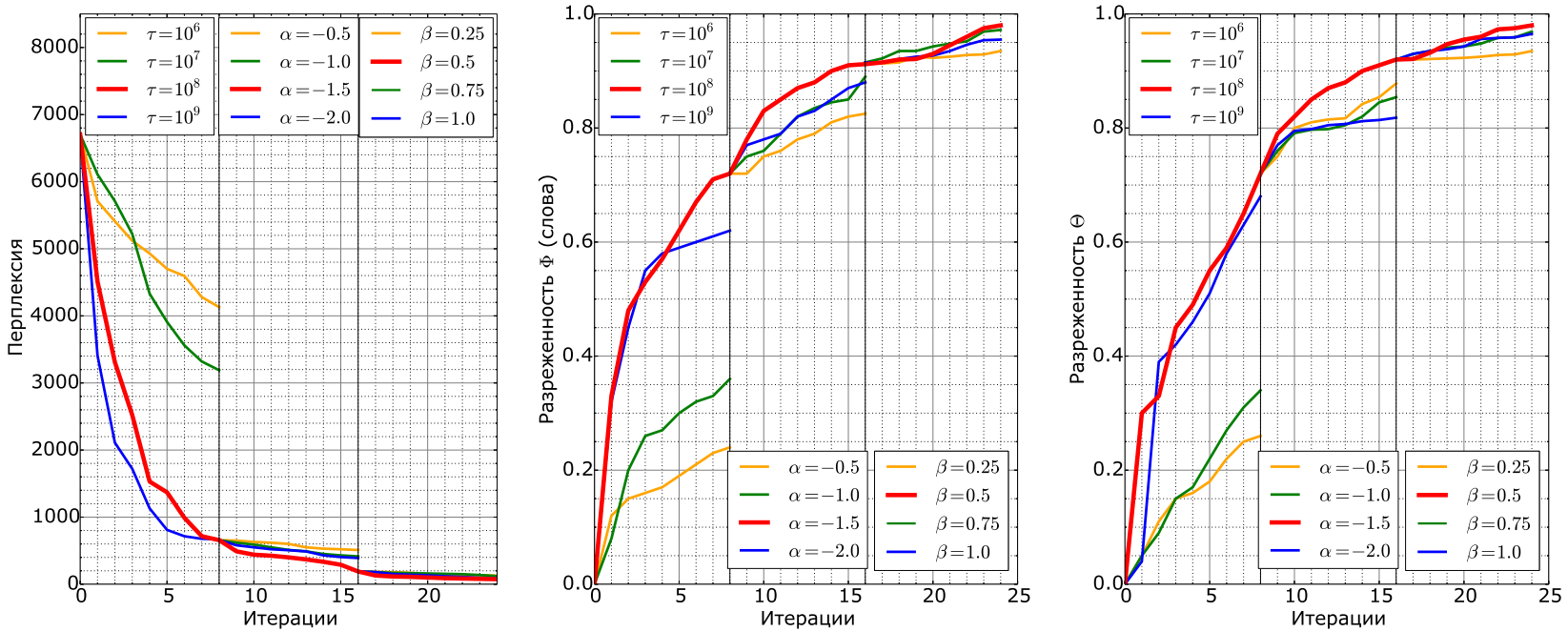
3. сглаживание распределений $p(w|t)$:

$$R(\Phi) = \beta \sum_{t,w} \ln \phi_{wt}$$

Подбор коэффициентов регуляризации

Последовательное добавление регуляризаторов:

- декоррелирование распределений терминов в темах (τ),
- разреживание распределений тем в документах (α),
- сглаживание распределений терминов в темах (β).



Оценки качества поиска

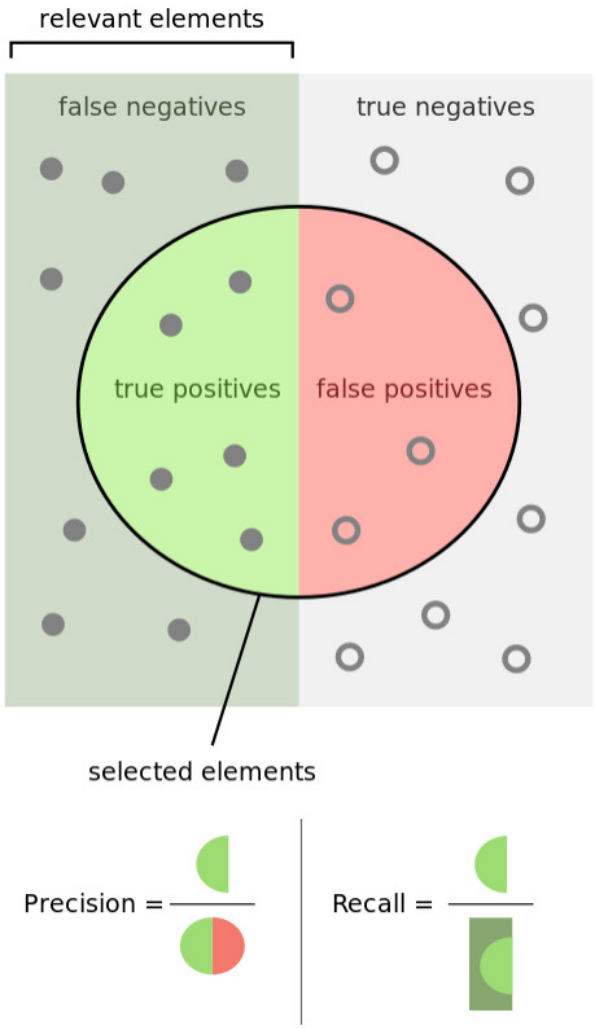
Precision — доля релевантных среди найденных
Recall — доля найденных среди релевантных

$$P = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}} \text{ — точность (precision)}$$

$$R = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \text{ — полнота, (recall)}$$

$$F_1 = \frac{P + R}{2PR} \text{ — F1-мера}$$

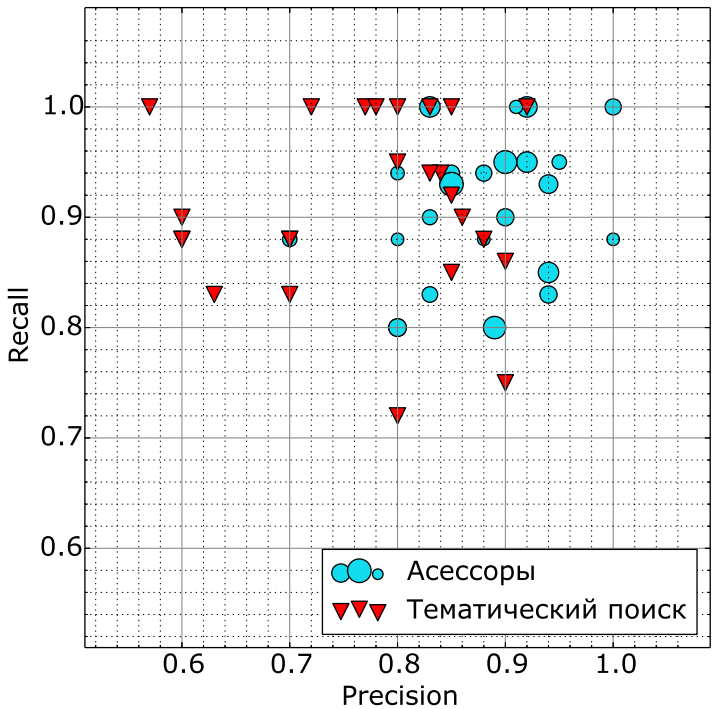
TP (true positive) — найденные релевантные
FP (false positive) — найденные нерелевантные
FN (false negative) — ненайденные релевантные



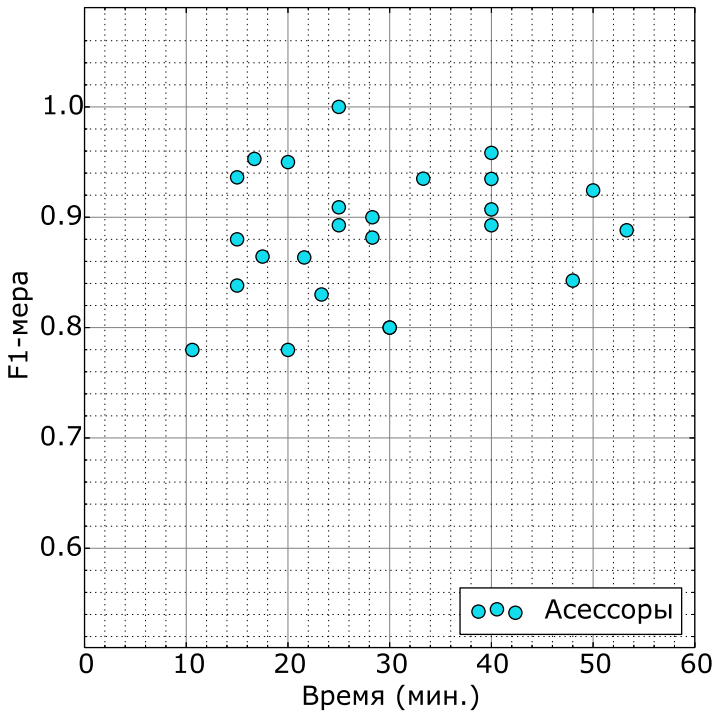
Результаты измерения точности и полноты по запросам

25 запросов, 3 асессора на запрос

точность и полнота поиска



время и F_1-мера (асессоры)



- среднее время обработки запроса асессором — 30 минут
- точность выше у асессоров, полнота — у поисковика

Выбор модальностей по критериям точности и полноты

Habrahabr. Число тем $|T| = 200$.
Модальности: Слова, Авторы, Комментаторы, Теги, Хабы.

	асессоры	С	К	ТХ	СТ	СХ	СТХ	все
Pr@5	0.82	0.63	0.54	0.59	0.74	0.73	0.73	**0.74**
Pr@10	0.87	0.67	0.56	0.58	0.77	0.74	0.75	**0.77**
Pr@15	0.86	0.65	0.53	0.55	0.67	0.67	0.68	**0.68**
Pr@20	0.85	0.64	0.53	0.54	0.66	0.67	0.68	**0.68**
Re@5	0.78	0.77	0.63	0.69	0.82	0.81	0.82	**0.82**
Re@10	0.84	0.79	0.64	0.71	0.88	0.82	0.87	**0.88**
Re@15	0.88	0.82	0.67	0.73	0.90	0.84	0.89	**0.90**
Re@20	0.88	0.85	0.68	0.74	0.91	0.85	0.89	**0.91**

- Наилучшее качество поиска — по всем модальностям
- Наиболее полезные модальности — слова и теги

Выбор модальностей по критериям точности и полноты

TechCrunch. Число тем $|T| = 450$.
Модальности: Слова, Биграммы, Категории, Авторы.

	асессоры	С	К	СБ	СБК	СБКА
Pr@5	0.83	0.71	0.55	0.77	0.80	**0.80**
Pr@10	0.88	0.72	0.58	0.78	0.81	**0.81**
Pr@15	0.87	0.73	0.59	0.79	0.83	**0.83**
Pr@20	0.86	0.72	0.56	0.77	0.82	**0.82**
Re@5	0.81	0.75	0.65	0.77	0.82	**0.83**
Re@10	0.85	0.77	0.66	0.80	0.85	**0.86**
Re@15	0.89	0.78	0.68	0.82	0.87	**0.91**
Re@20	0.90	0.82	0.69	0.83	0.89	**0.93**

- Наилучшее качество поиска — по всем модальностям
- Наиболее полезные модальности — слова и категории

Выбор числа тем по критериям точности и полноты

Habrahabr. Используем все 5 модальностей, меняем $|T|$

	асессоры	100	200	300	400	500
Pr@5	0.82	0.61	**0.74**	0.71	0.69	0.59
Pr@10	0.87	0.65	**0.77**	0.72	0.67	0.61
Pr@15	0.86	0.67	**0.68**	0.67	0.65	0.62
Pr@20	0.85	0.64	**0.68**	0.67	0.64	0.60
Re@5	0.78	0.62	**0.82**	0.80	0.72	0.63
Re@10	0.84	0.63	**0.88**	0.81	0.75	0.64
Re@15	0.88	0.67	**0.90**	0.82	0.77	0.67
Re@20	0.88	0.69	**0.91**	0.85	0.77	0.68

- Наилучшее качество поиска — при 200 темах
- Тематический поиск превосходит асессоров по полноте

Выбор числа тем по критериям точности и полноты

TechCrunch. Используем все 4 модальности, меняем $|T|$

	асессоры	350	400	450	475	500
Pr@5	0.83	0.65	0.72	0.75	**0.80**	0.68
Pr@10	0.88	0.66	0.73	0.76	**0.81**	0.69
Pr@15	0.87	0.68	0.74	0.78	**0.82**	0.68
Pr@20	0.86	0.65	0.74	0.77	**0.81**	0.67
R@5	0.81	0.65	0.75	0.78	**0.83**	0.79
R@10	0.85	0.66	0.78	0.79	**0.86**	0.80
R@15	0.89	0.68	0.79	0.79	**0.91**	0.83
R@20	0.90	0.69	0.79	0.80	**0.93**	0.85

- Наилучшее качество поиска — при 475 темах
- Тематический поиск превосходит асессоров по полноте

Выбор меры близости документа и запроса

Меры близости распределений:
Euclidean, Cosine, Manhattan, Kullback-Leibler

	Habrahabr, $\|T\| = 200$				*TechCrunch*, $\|T\| = 450$			
	E	C	M	KL	E	C	M	KL
Pr@5	0.61	**0.74**	0.68	0.72	0.63	**0.80**	0.67	0.71
Pr@10	0.65	**0.77**	0.69	0.75	0.66	**0.81**	0.68	0.73
Pr@15	0.62	**0.68**	0.63	0.70	0.64	**0.82**	0.64	0.72
Pr@20	0.62	**0.68**	0.62	0.70	0.64	**0.81**	0.63	0.71
Re@5	0.67	**0.82**	0.69	0.80	0.66	**0.83**	0.67	0.77
Re@10	0.68	**0.88**	0.70	0.85	0.67	**0.86**	0.68	0.78
Re@15	0.70	**0.90**	0.72	0.87	0.71	**0.91**	0.70	0.80
Re@20	0.70	**0.91**	0.73	0.88	0.71	**0.93**	0.71	0.81

- Наилучшее качество поиска — при косинусной мере

Все ли регуляризаторы были нужны?

Декоррелирование, Разреживание

	Habrahabr					*TechCrunch*				
	асессоры	все	ДР	Д	нет	асессоры	все	ДР	Д	нет
Pr@5	0.82	**0.74**	0.69	0.58	0.52	0.83	**0.80**	0.71	0.57	0.54
Pr@10	0.87	**0.77**	0.70	0.59	0.55	0.88	**0.81**	0.72	0.59	0.55
Pr@15	0.86	**0.68**	0.65	0.56	0.53	0.87	**0.82**	0.68	0.58	0.54
Pr@20	0.85	**0.68**	0.65	0.55	0.52	0.86	**0.81**	0.68	0.58	0.54
Re@5	0.78	**0.82**	0.75	0.63	0.59	0.81	**0.81**	0.76	0.65	0.60
Re@10	0.84	**0.88**	0.76	0.65	0.60	0.85	**0.86**	0.78	0.66	0.62
Re@15	0.88	**0.90**	0.77	0.66	0.61	0.89	**0.89**	0.81	0.64	0.63
Re@20	0.88	**0.91**	0.77	0.66	0.61	0.90	**0.92**	0.82	0.64	0.63

- Все регуляризаторы необходимы

Сравнение с поиском по векторам TF-IDF слов

Поиск по векторам TF-IDF$(w|d) = \frac{n_{dw}}{\ln N_w}$

	Habrahabr			*TechCrunch*		
	acecсоры	topic	tf-idf	assessors	topic	tf-idf
Pr@5	0.82	**0.74**	0.76	0.83	**0.80**	0.78
Pr@10	0.87	**0.77**	0.77	0.88	**0.81**	0.79
Pr@15	0.86	**0.68**	0.72	0.87	**0.82**	0.76
Pr@20	0.85	**0.68**	0.71	0.86	**0.81**	0.75
Re@5	0.78	**0.82**	0.76	0.81	**0.81**	0.77
Re@10	0.84	**0.88**	0.77	0.85	**0.86**	0.78
Re@15	0.88	**0.90**	0.80	0.89	**0.89**	0.80
Re@20	0.88	**0.91**	0.81	0.90	**0.92**	0.83

- Тематический поиск немного лучше TF-IDF
- При этом поисковый индекс на 2–3 порядка компактнее

Янина А. О., Воронцов К. В. Мультимодальные тематические модели для разведочного поиска в коллективном блоге. JMLDA, 2016.

Выводы

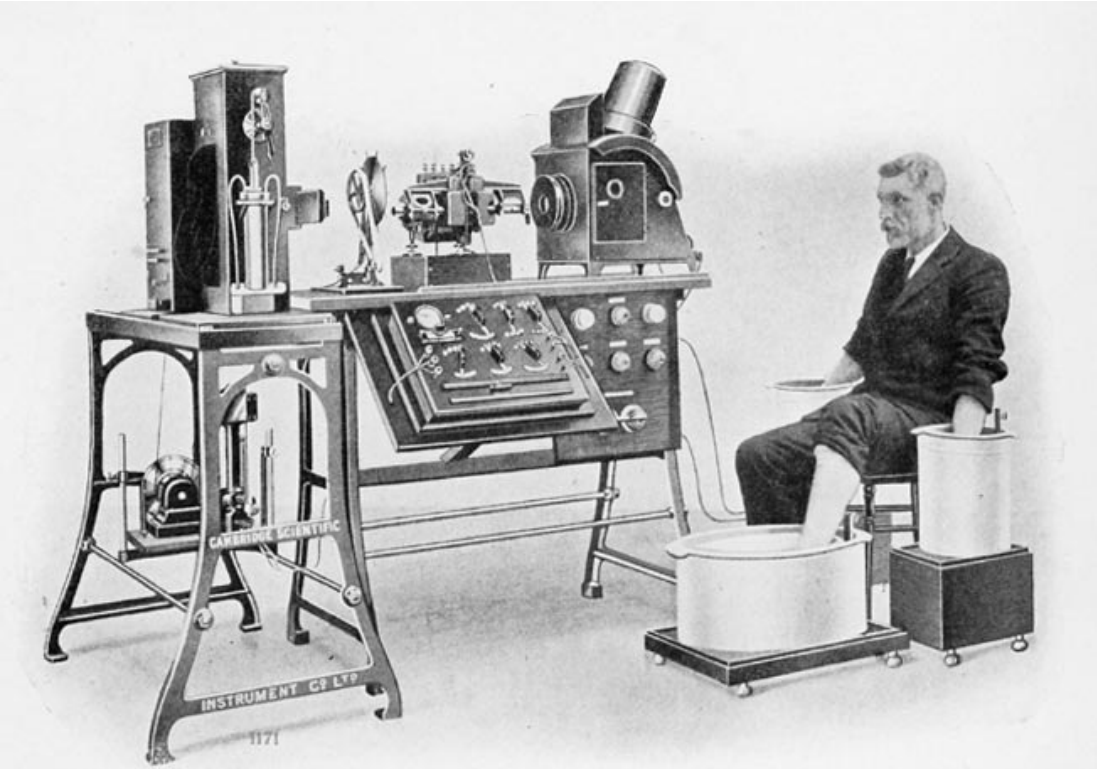
О данной задаче:

- для построения моделей использовался BigARTM
- аккуратная настройка модели даёт хороший поиск
- но для прорывного результата качество недостаточно

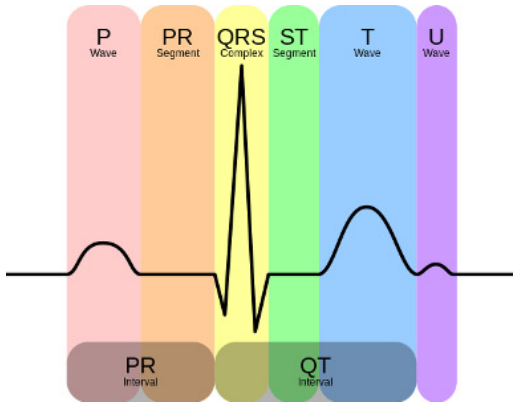
О прикладных исследованиях в машинном обучении:

- любое исследование — это сравнение вариантов
- комбинирование регуляризаторов — общий приём для учёта большого числа требований в одной модели
- многокритериальное обучение:
  1) выбрать поэтапную стратегию регуляризации
  2) подобрать коэффициент регуляризации на каждом этапе
- асессоры оценивали данные, а не модель, поэтому удалось сравнить много моделей

Электрокардиография



Photograph of a Complete Electrocardiograph, Showing the Manner in which the Electrodes are Attached to the Patient, In this Case the Hands and One Foot Being Immersed in Jars of Salt Solution

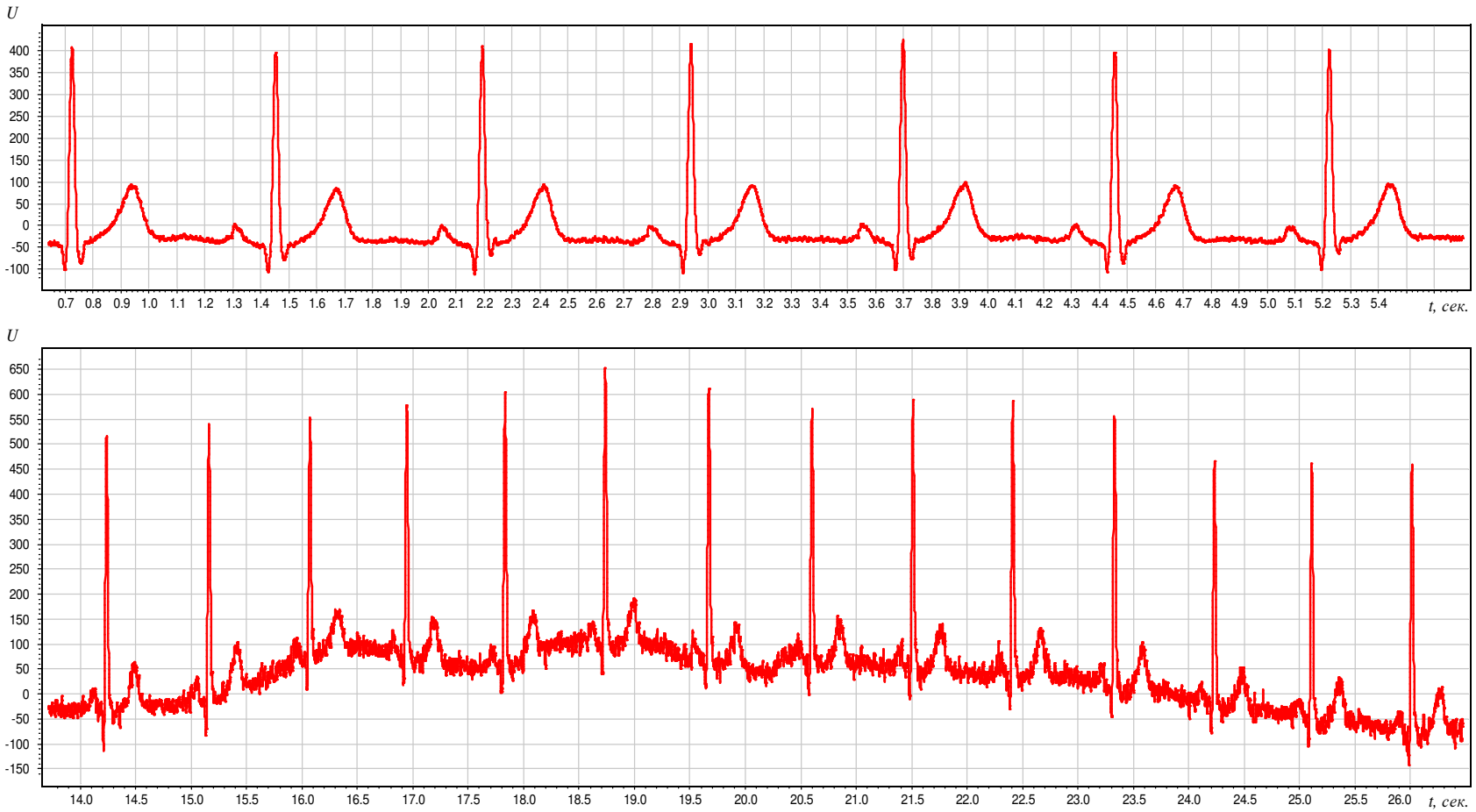


1872 — первые записи электрической активности сердца

1911 — коммерческий электрокардиограф (фото)

1924 — нобелевская премия по медицине, Виллем Эйнтховен

Примеры электрокардиограмм



В основе диагностики заболеваний сердца — многочисленные наблюдения за особенностями PQRST-комплекса

Теория информационной функции сердца [В.М.Успенский]

Возможна ли диагностика несердечных заболеваний по ЭКГ?

Предпосылки:

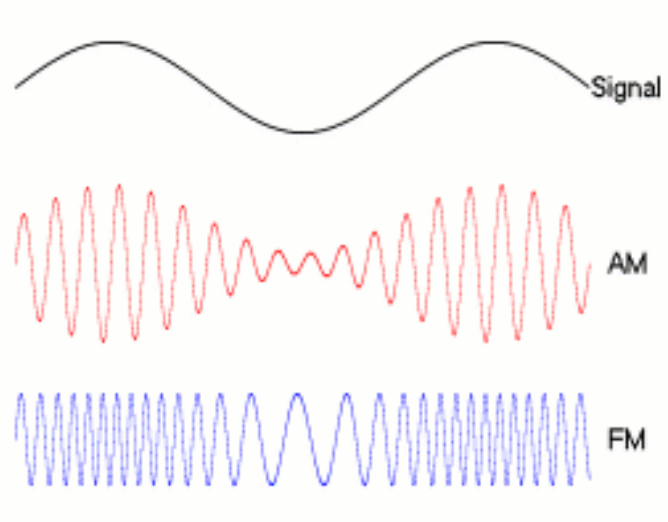
- Китайская традиционная медицина: *пульсовая диагностика*
- Р. М. Баевский: использование вариабельности сердечного ритма (*интервалов кардиоциклов*) в целях диагностики
- Цифровая электрокардиография высокого разрешения

Предположения:

- ЭКГ-сигнал несёт информацию о функционировании всех систем организма, не только сердца
- Информация о заболевании может проявляться на любой его стадии, поэтому возможна *ранняя* диагностика
- Каждое заболевание по-своему «модулирует» ЭКГ-сигнал

Аналогии в теорию передачи сигналов

Модуляция — процесс, при котором высокочастотная волна используется для переноса низкочастотного сигнала.



— низкочастотный сигнал

— амплитудная модуляция

— частотная модуляция

Демодуляция — процесс, обратный модуляции, преобразование модулированных колебаний высокой (несущей) частоты в исходный низкочастотный сигнал.

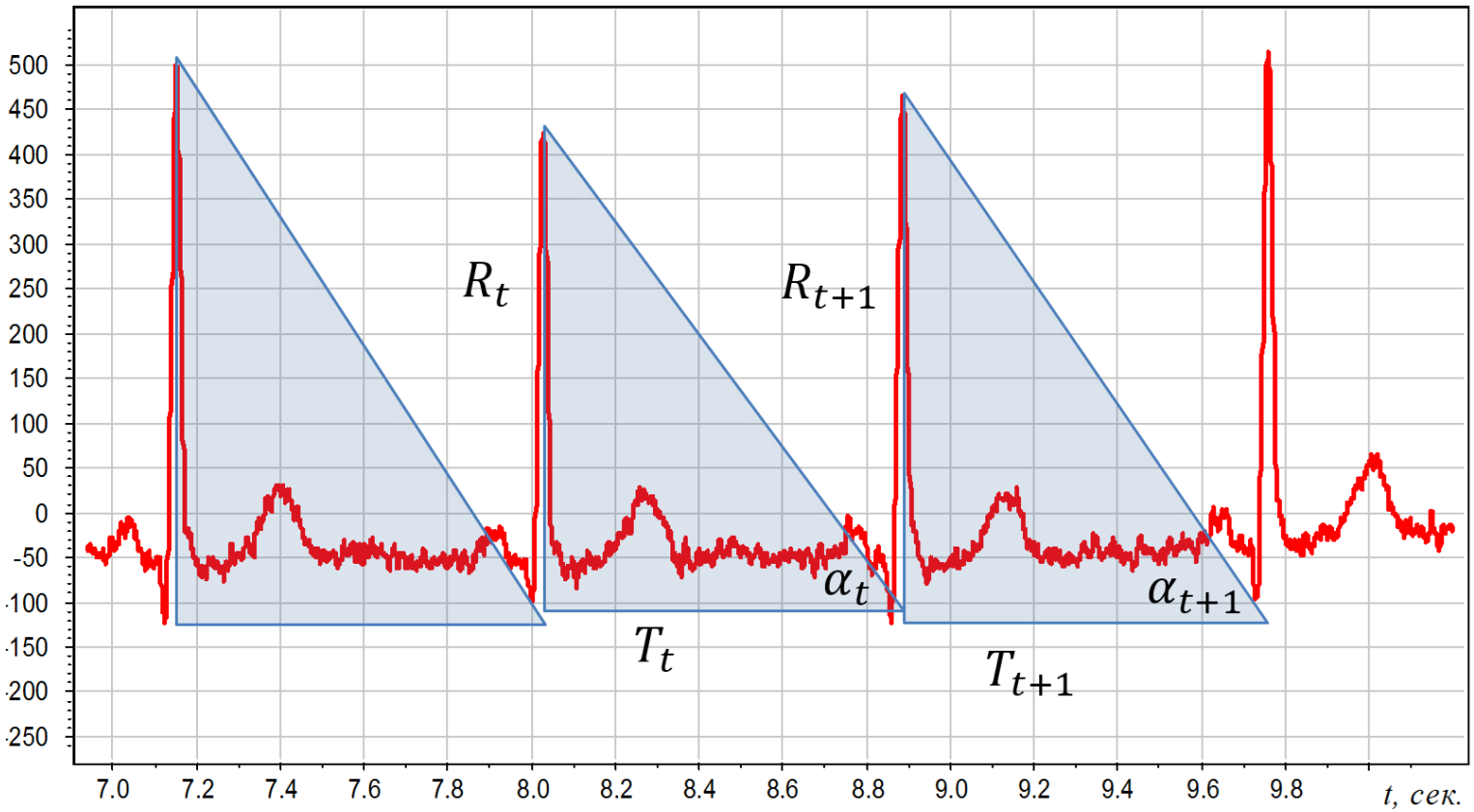
В случае ЭКГ несущая частота — биения сердца, $\sim 1\,\text{Гц}$
А что будет аналогом модуляции и демодуляции?

Вариабельность интервалов и амплитуд кардиоциклов

приращение амплитуд: $dR_t = R_{t+1} - R_t$

приращение интервалов: $dT_t = T_{t+1} - T_t$

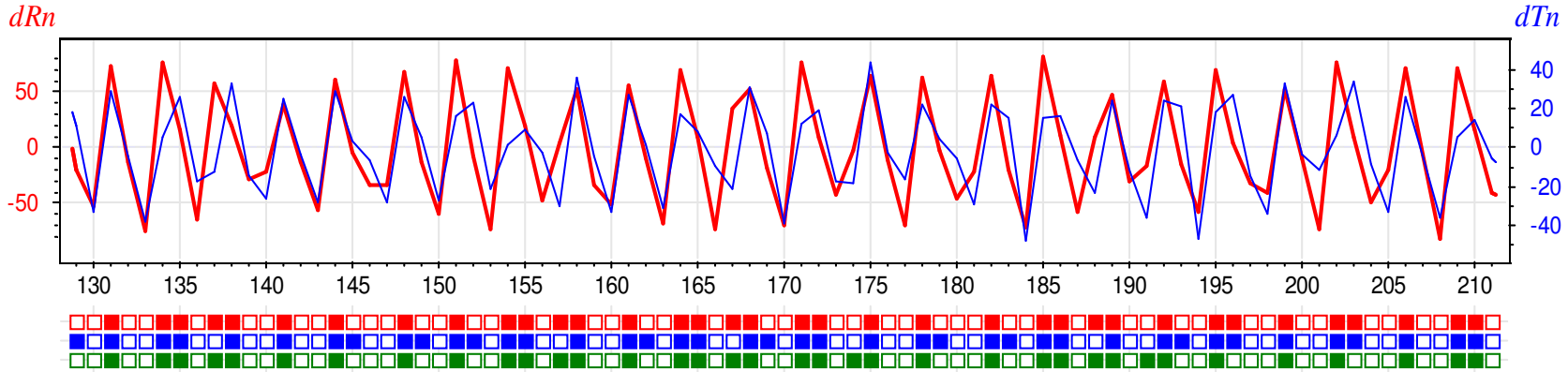
приращение углов: $d\alpha_t = \alpha_{t+1} - \alpha_t, \quad \alpha_t = \operatorname{arctg} \frac{R_t}{T_t}$



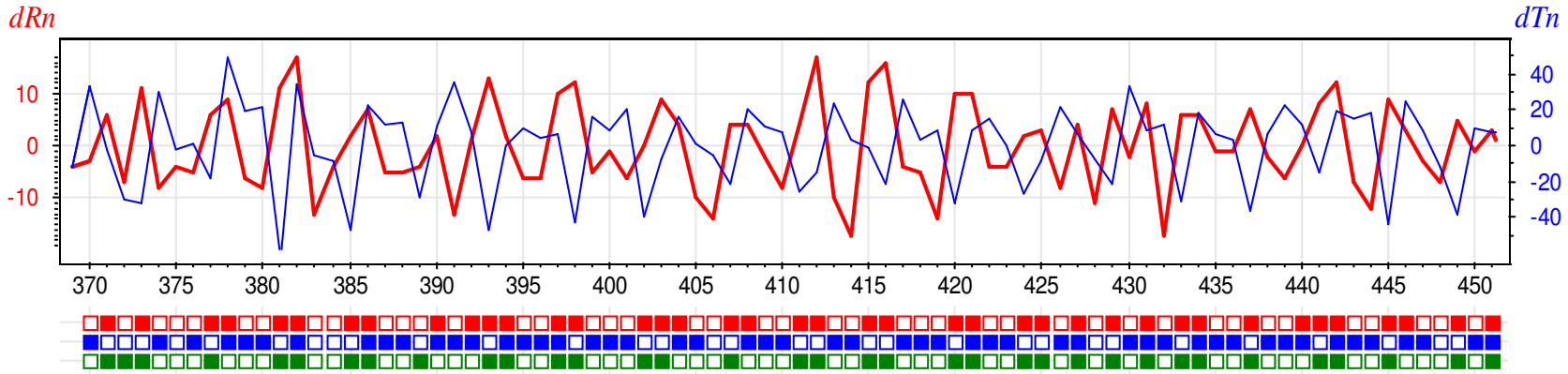
Есть ли различия в знаках приращений у больных и здоровых?

Приращения dR_t, dT_t, $d\alpha_t$ в последовательных кардиоциклах t

Здоровый:



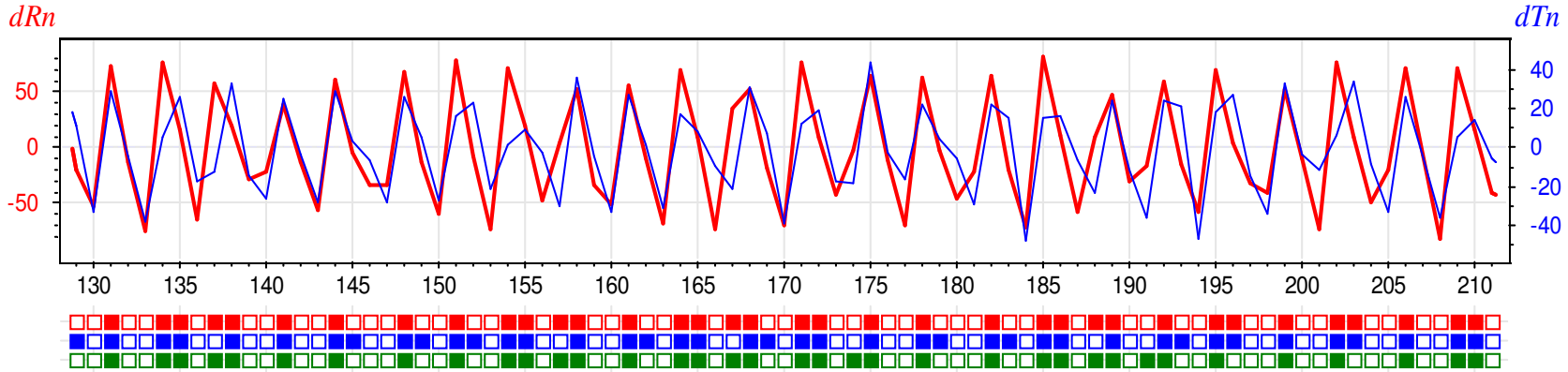
Больной (язвенная болезнь):



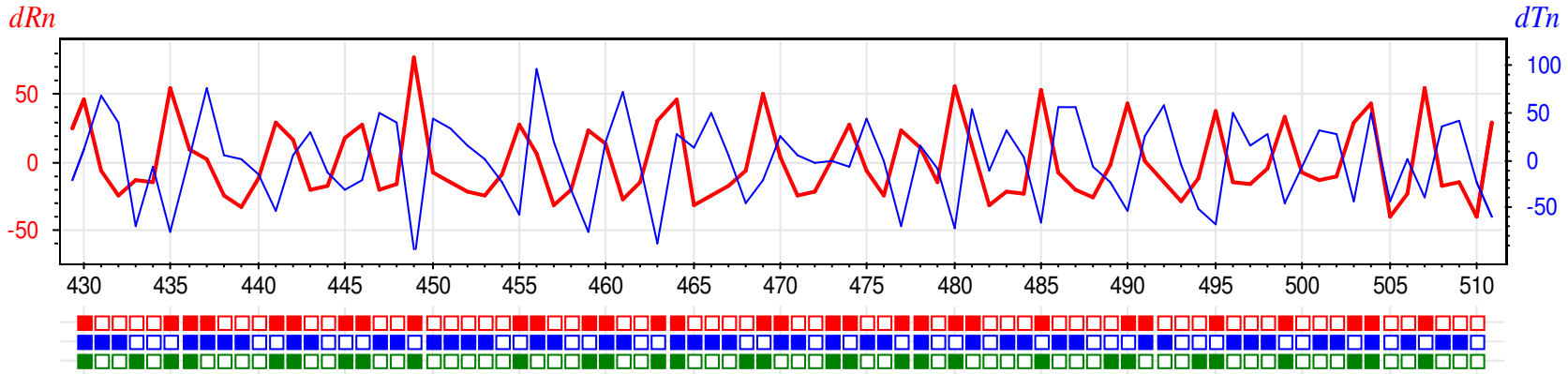
Есть ли различия в знаках приращений у больных и здоровых?

Приращения dR_t, dT_t, $d\alpha_t$ в последовательных кардиоциклах t

Здоровый:



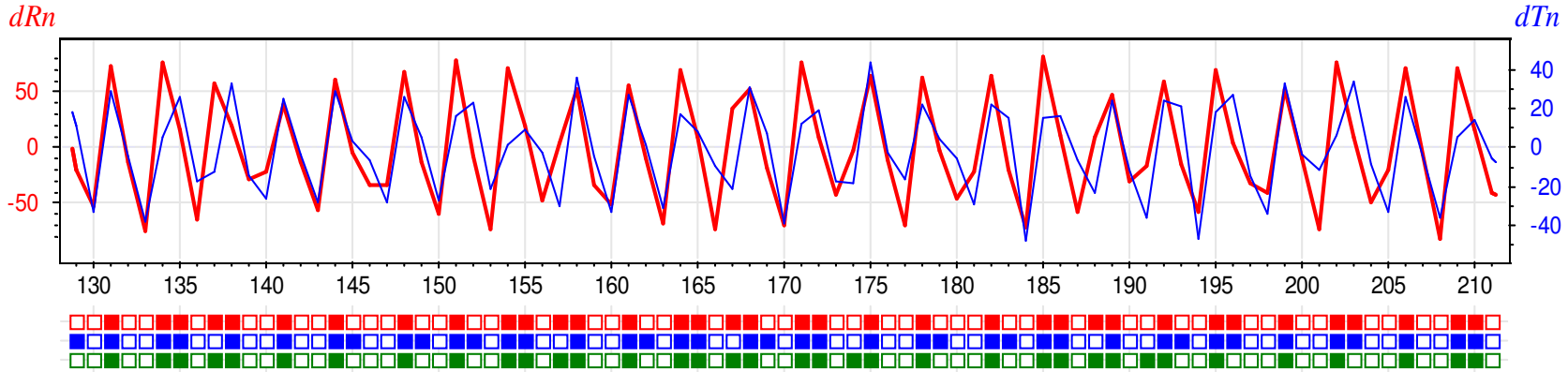
Больной (гипертония):



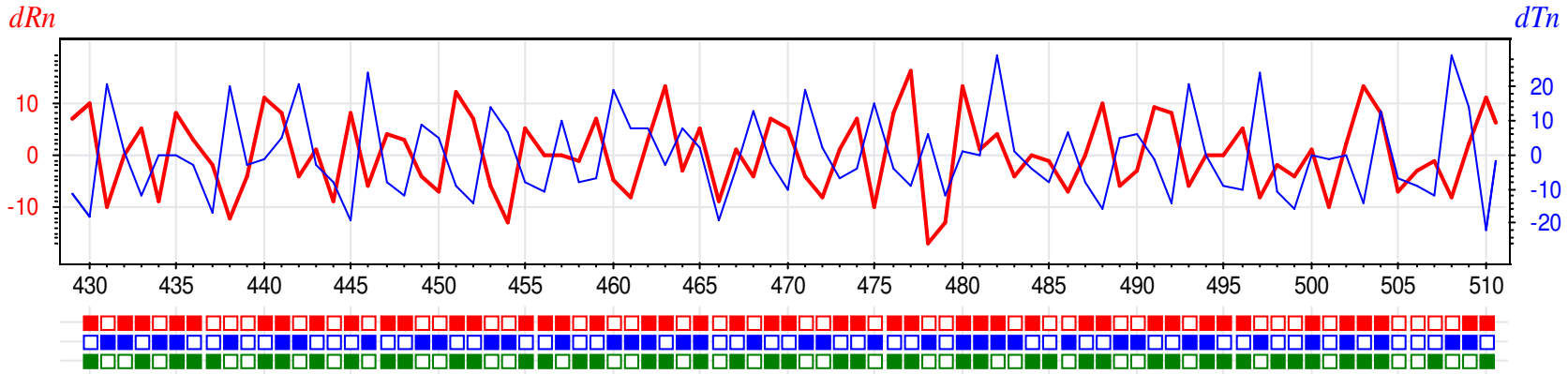
Есть ли различия в знаках приращений у больных и здоровых?

Приращения dR_t, dT_t, $d\alpha_t$ в последовательных кардиоциклах t

Здоровый:



Больной (рак):



Технология информационного анализа ЭКГ-сигналов

Этап I. Методы символьной динамики

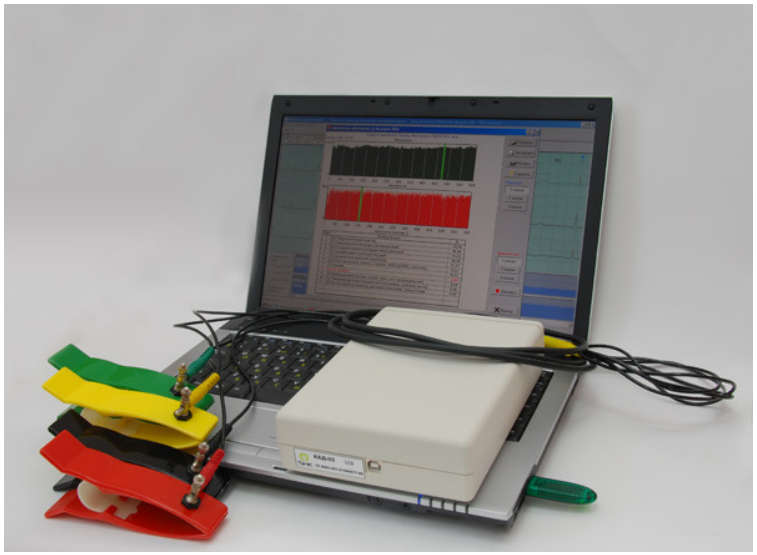
1. *Демодуляция* — вычисление амплитуд, интервалов и углов по кардиограмме длиной 600 кардиоциклов
2. *Дискретизация* — перевод в *кодограмму* — 599-символьную строку в 6-буквенном алфавите
3. *Векторизация* — перевод в вектор $6^3{=}216$ частот триграмм

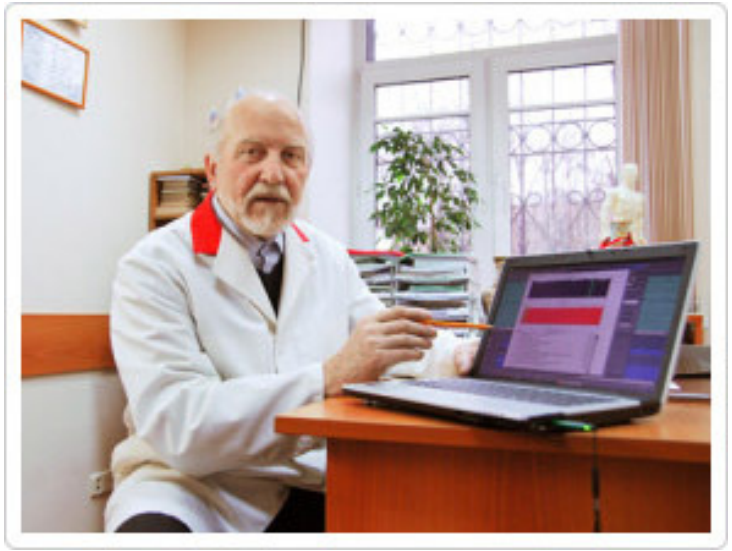
Этап II. Методы машинного обучения

1. Формирование обучающих выборок здоровых и больных
2. Формировании модели классификации
3. Оптимизация модели классификации
4. Оценивание качества диагностики

Диагностическая система «Скринфакс»

Цифровой электрокардиограф с улучшенной помехозащищённостью и расширенной полосой пропускания.





- более 15 лет исследований и накопления данных
- более 20 тысяч прецедентов (кардиограмма + диагнозы)
- более 40 заболеваний

Объём исходных данных (по заболеваниям)

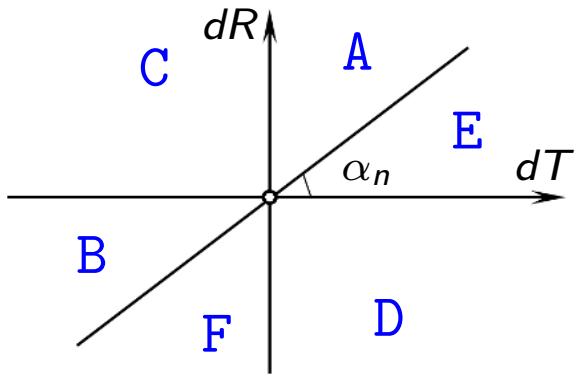
«абсолютно здоровые»	АЗ	193
гипертоническая болезнь	ГБ	1894
ишемическая болезнь сердца	ИБС	1265
сахарный диабет (СД1 и СД2)	СД	871
язвенная болезнь	ЯБ	785
миома матки	ММ	781
узловой (диффузный) зоб щитовидный железы	УЩ	748
дискинезия желчевыводящих путей	ДЖВП	717
хронический гастрит (гастродуоденит) гипоацидный	ХГ2	700
вегетососудистая дистония	ВСД	694
мочекаменная болезнь	МКБ	654
рак общий (онкопатология различной локализации)	РО	530
холецистит хронический	ХХ	340
асептический некроз головки бедренной кости	НГБК	324
хронический гастрит (гастродуоденит) гиперацидный	ХГ1	324
желчнокаменная болезнь	ЖКБ	278
аднексит хронический	АХ	276
аденома простаты	ДГПЖ	260
анемия железодефицитная	ЖДА	260

Дискретизация ЭКГ-сигнала

Вход: последовательность интервалов и амплитуд $(T_t, R_t)_{t=1}^{N+1}$

Правила кодирования:

$dR_t = R_{t+1} - R_t$	+	−	+	−	+	−
$dT_t = T_{t+1} - T_t$	+	−	−	+	+	−
$d\alpha_t = \alpha_{t+1} - \alpha_t$	+	+	+	−	−	−
s_t	A	B	C	D	E	F



Выход: *кодограмма* $x = (s_t)_{t=1}^{N}$ — последовательность символов алфавита $\{\mathtt{A}, \mathtt{B}, \mathtt{C}, \mathtt{D}, \mathtt{E}, \mathtt{F}\}$:

DBFEACFDAAFBABDDAADFAAFFEACFEACFBAEFFAABFFAAFFAAFFAAFFAAEBFAEBFEAAFCAAFFAAD
FCAFFAADFCADFCCDFDACFFACDFAEFFACFFEADFCAFBCADFFECFFAAFFAAFFAEFFCACFCAEFFCAD
DAADBFAAFFAEBFAABFACDFFAAFBAADFAADFDAAFCECFCEDFCEEFCAEFBECBBBAADBAACFFAAFFA
CFFCECFDAABDAEFFAAFFCEDBFAAFFAEFFAEFBACFBAEDFEAAFFCAFFDAAFFAEBDAADBBADFDAFF
EABFCCAFDEEBDECFFACFFAABFAADFBAAFFACFFFAEFFACFFACFFCECFBAAFFFAAFFFAAFFAADFB
AABFACDFDAEFFAADBAAEFFEAFBCECFDECCFBAAFFAADFDACDFAAFFAADFCAADFAEFBAAFFCADFE
AFFCECFCECFFAAFFABCFDAAAFFADBFCAEFFAABFACBFAAEBFAEBFCAFFBAAFFAAFFDACFDAABFB
CAFFAECFFACFFACDFCADFDAABFAAEDDABBFCACDBAAFFAAFFCADFAADFDACFFAEDFCACFCAEBCE

Векторизация ЭКГ-сигнала

x — *кодограмма*, последовательность символов $\{\mathtt{A},\mathtt{B},\mathtt{C},\mathtt{D},\mathtt{E},\mathtt{F}\}$:

$f_j(x)$ — частота триграммы $j = 1,\ldots,n$ (n=216) в кодограмме x:

1. FFA - 42	17. EFF - 10	33. CEC - 6	49. EAC - 3
2. FAA - 33	18. DAA - 10	34. ADB - 5	50. DDA - 3
3. AFF - 32	19. ECF - 9	35. FFE - 5	51. CAC - 3
4. AAF - 30	20. FFC - 9	36. EBF - 5	52. EDF - 3
5. ADF - 18	21. FEA - 9	37. CFD - 5	53. EFB - 3
6. FCA - 18	22. DFC - 8	38. AFB - 4	54. DBA - 3
7. ACF - 17	23. ABF - 8	39. AAE - 4	55. FCC - 2
8. AAD - 15	24. AAB - 8	40. CFC - 4	56. AFC - 2
9. CFF - 14	25. FCE - 8	41. CAE - 4	57. EAA - 2
10. AEF - 13	26. AEB - 7	42. DAC - 4	58. CED - 2
11. FDA - 13	27. DFD - 7	43. DBF - 4	59. CAA - 2
12. FAE - 12	28. ACD - 6	44. BFC - 4	60. BCA - 2
13. FAC - 12	29. CDF - 6	45. CFB - 4	61. BBA - 2
14. FBA - 11	30. DFA - 6	46. AED - 3	62. DFF - 2
15. BFA - 11	31. CAF - 6	47. FFF - 3	63. BDA - 2
16. BAA - 11	32. CAD - 6	48. FBC - 3	64. DAE - 2

Линейная модель классификации с двумя классами

$\{x_i\}_{i=1}^{\ell}$ — обучающая выборка кодограмм
y_i — класс объекта x_i: больной $y_i = 1$, здоровый $y_i = 0$

Основная эмпирическая гипотеза:

- у больных одни триграммы частые, у здоровых — другие

Линейная модель классификации:

$$\langle x, w \rangle = \sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x), \qquad a(x) = \begin{cases} 1, & \langle x, w \rangle \geqslant w_0 \\ 0, & \langle x, w \rangle < w_0 \end{cases}$$

где w_j — вес j-й триграммы:

- $w_j > 0$, если триграмма более характерна для больных
- $w_j < 0$, если триграмма более характерна для здоровых
- $w_j = 0$, если триграмма не информативна для этой болезни

Наивный байесовский классификатор и его модификации

Число объектов класса y, для которых триграмма j частая

$$S_y^j = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y] [f_j(x_i) \geqslant \theta]$$

Число объектов класса y, для которых триграмма j редкая

$$s_y^j = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = y] [f_j(x_i) < \theta]$$

Вес триграммы j больше, если S_1^j, s_0^j больше, S_0^j, s_1^j меньше:

$$w_j = S_1^j / S_0^j \qquad w_j = S_1^j s_0^j / S_0^j s_1^j$$

$$w_j = \log\left(S_1^j / S_0^j\right) \qquad w_j = \log\left(S_1^j s_0^j / S_0^j s_1^j\right)$$

$$w_j = \sqrt{S_1^j} - \sqrt{S_0^j} \qquad w_j = \sqrt{S_1^j s_0^j} - \sqrt{S_0^j s_1^j}$$

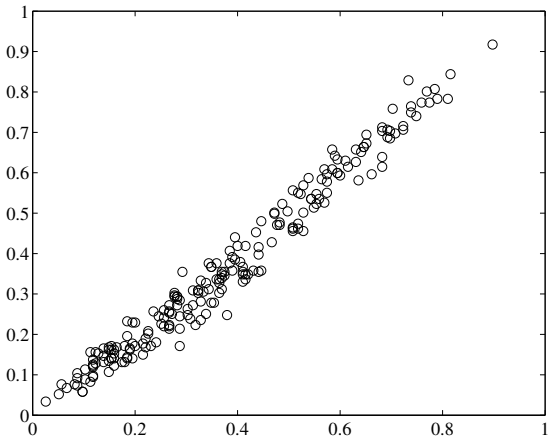
Методы машинного обучения

- **Наивный байесовский классификатор**
  - ☺ простой интерпретируемый линейный классификатор
  - ☹ качество классификации невысокое
- **Наивный байесовский классификатор + отбор признаков**
  - 😐 качество классификации получше
  - 😐 находит один диагностический эталон каждой болезни
- **Метод главных компонент + логистическая регрессия**
  - ☺ качество классификации высокое
  - ☹ не определяет диагностические эталоны болезней
- **SVM, нейронные сети, случайный лес**
  - ☺ качество классификации высокое
  - ☹ неоправданно сложное, неинтерпретируемое решение
- **Тематические модели классификации**
  - ☺ автоматически находит все диагностические эталоны
  - 😐 качество классификации среднее

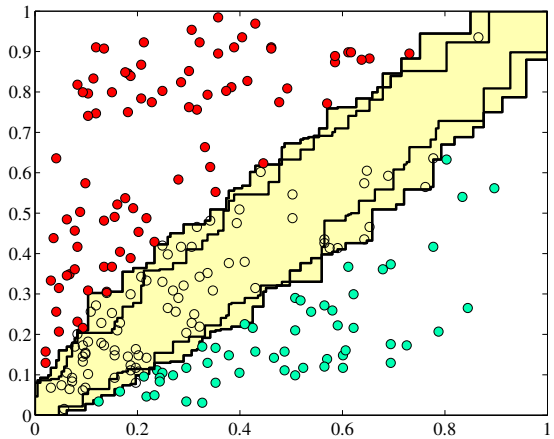
Существуют сочетания триграмм, специфичные для болезней

Точки на графиках соответствуют триграммам, $j = 1, \ldots, 216$
— ось X: доля здоровых с частой триграммой $f_j(x_i) \geqslant 2$
— ось Y: доля больных с частой триграммой $f_j(x_i) \geqslant 2$

НГБК (асептический некроз головки бедренной кости)



случайно перемешанные y_i

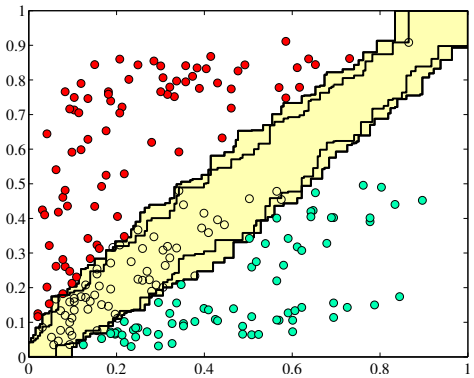


наблюдаемые y_i

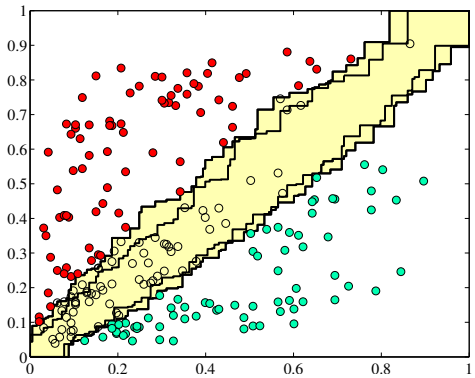
Слева: как распределятся точки, если объектам x_i назначить случайно переставленные метки классов y_i.
Жёлтая область: если случайно перемешать 20 раз, 1000 раз.

Существуют сочетания триграмм, специфичные для болезней

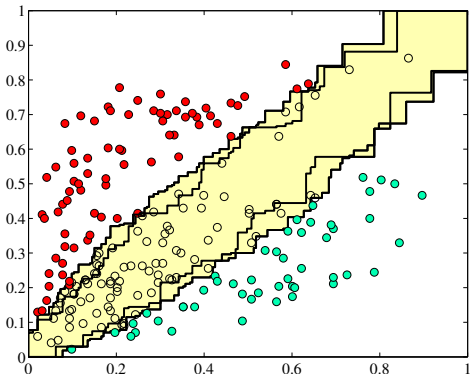
Для каждой болезни есть свои неслучайно частые триграммы



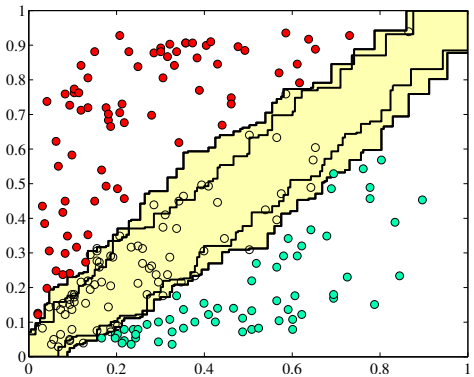
ишемия сердца



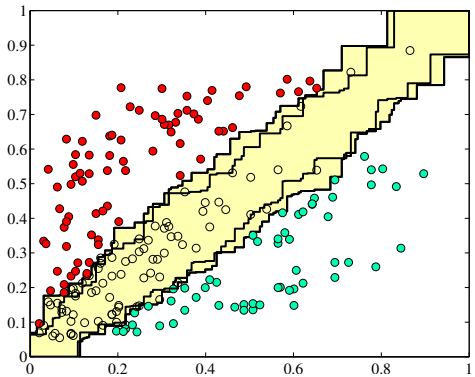
гипертония



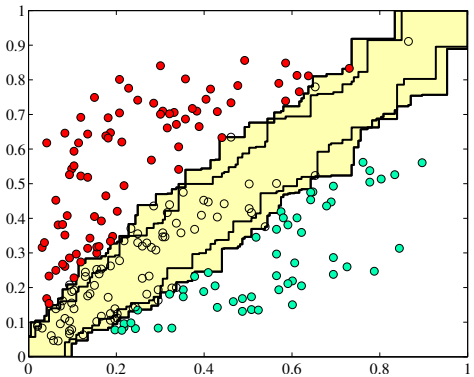
рак



желчнокаменная болезнь



миома матки

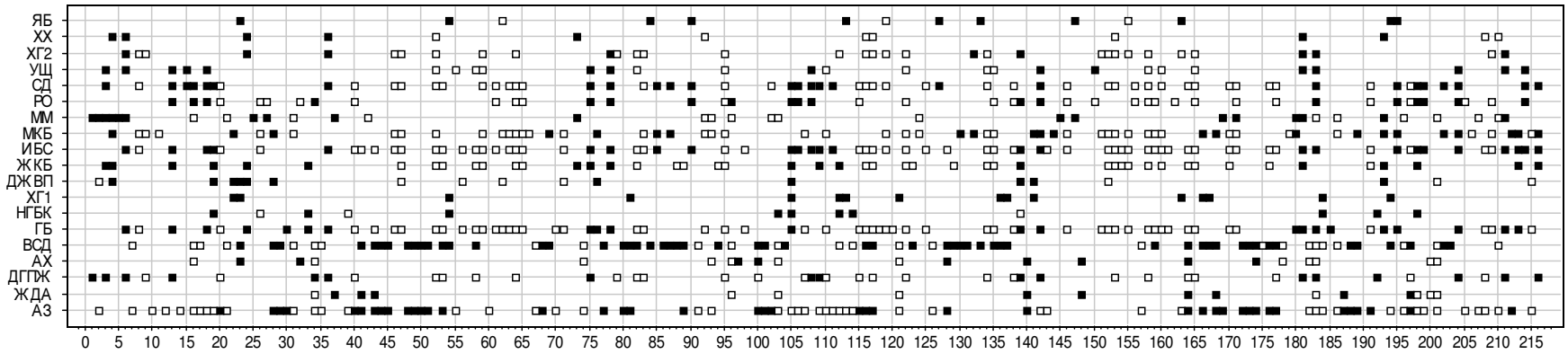


язвенная болезнь

Болезни отличаются наборами информативных триграмм

ось X: номера триграмм $j = 1, \ldots, n$, $n = 216$

ось Y: болезни (АЗ — абсолютно здоровые)



□ — неслучайно низкая частота триграммы

■ — неслучайно высокая частота триграммы

Вывод 1. Для каждой болезни есть триграммы с неслучайно высокой и неслучайно низкой частотой

Вывод 2. Болезни отличаются *диагностическими эталонами* — наборами специфичных триграмм с неслучайно высокой частотой

Терминология диагностики

Положительный диагноз — алгоритм предсказывает болезнь

Доля больных с верным положительным диагнозом:

$$\text{чувствительность} = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}[y_i = 1][a(x_i) = 1]}{\sum_{i=1}^{\ell}[y_i = 1]}$$

Доля здоровых с верным отрицательным диагнозом:

$$\text{специфичность} = \frac{\sum_{i=1}^{\ell}[y_i = 0][a(x_i) = 0]}{\sum_{i=1}^{\ell}[y_i = 0]}$$

Максимизируем чувствительность и специфичность

- они не зависят от соотношения мощностей классов
- они подходят для несбалансированных выборок

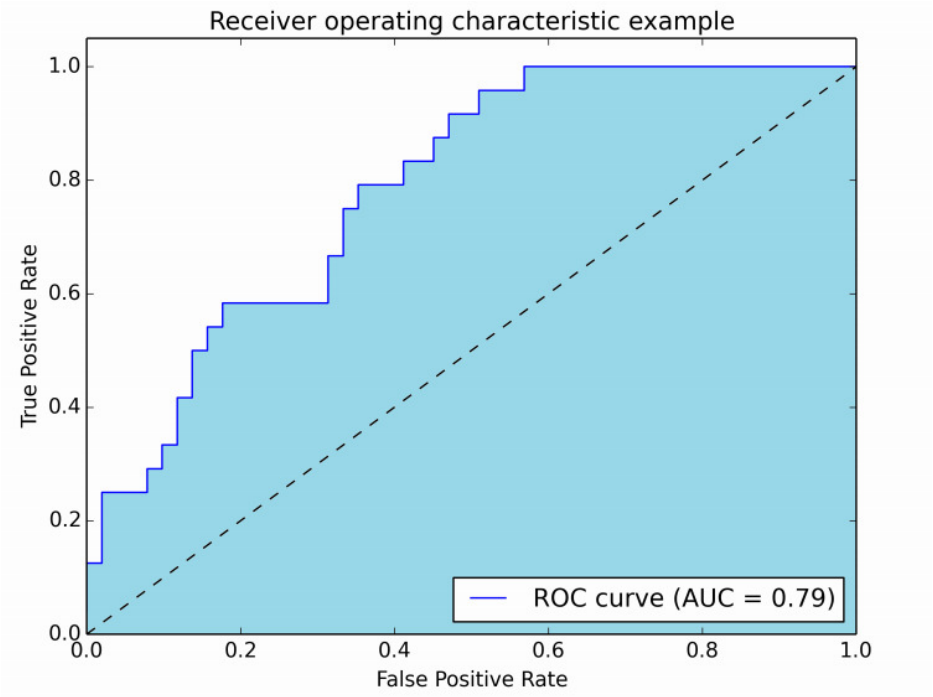
ROC-кривой и AUC — площадь под ROC-кривой

Модель классификации: $a(x) = [\langle x, w \rangle > w_0]$

по оси X: 1 – специфичность = FPR, False Positive Rate,

по оси Y: чувствительность = TPR, True Positive Rate

Каждая точка ROC-кривой соответствует значению порога w_0
(ROC — «receiver operating characteristic»),

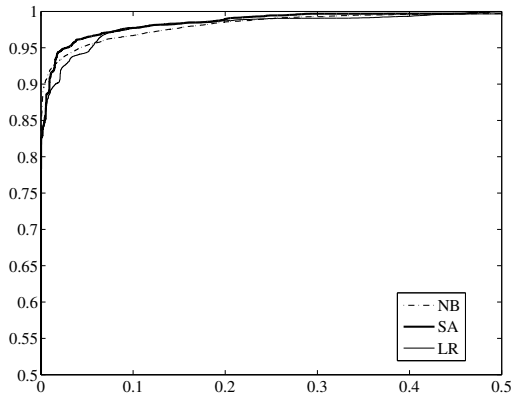


Результаты кросс-валидации

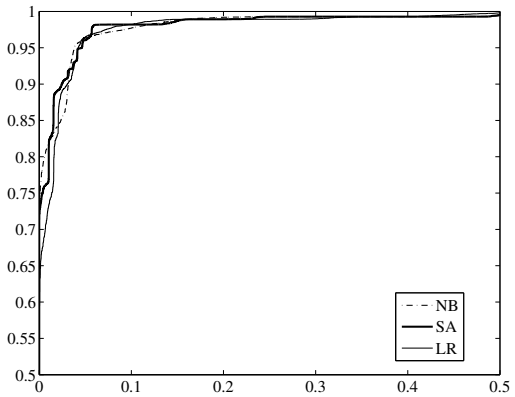
Обучающая выборка: оптимизация параметров модели
Тестовая выборка: Чувствительность, Специфичность, AUC
40×10-fold cross-validation — для доверительного оценивания

болезнь	выборка	AUC, %	С% при Ч=95%
некроз головки бедренной кости	327	99.19 ± 0.10	96.6 ± 1.76
желчнокаменная болезнь	277	98.98 ± 0.23	94.4 ± 1.54
ишемическая болезнь сердца	1262	97.98 ± 0.14	91.1 ± 1.86
гастрит	321	97.76 ± 0.11	88.3 ± 2.64
гипертоническая болезнь	1891	96.76 ± 0.09	84.7 ± 1.99
сахарный диабет	868	96.75 ± 0.19	85.3 ± 2.18
аденома простаты	257	96.49 ± 0.13	80.1 ± 3.19
рак	525	96.49 ± 0.28	82.2 ± 2.38
узловой зоб щитовидной железы	750	95.57 ± 0.16	73.5 ± 3.41
холецистит хронический	336	95.35 ± 0.12	74.8 ± 2.46
дискинезия ЖВП	714	94.99 ± 0.16	70.3 ± 4.67
мочекаменная болезнь	649	94.99 ± 0.11	69.3 ± 2.14
язвенная болезнь	779	94.62 ± 0.10	63.6 ± 2.55

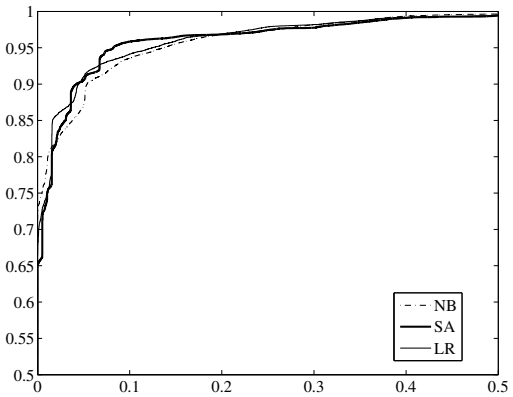
ROC-кривые в осях X:(1−специфичность), Y:чувствительность



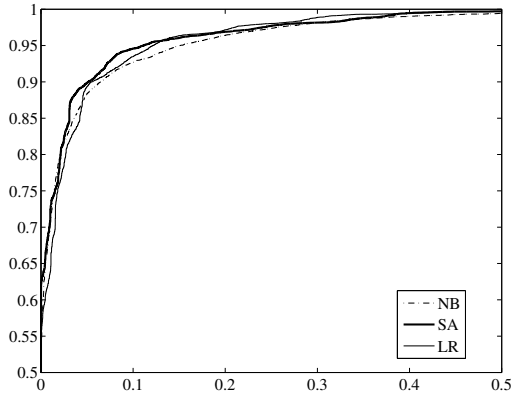
асептический некроз ГБК



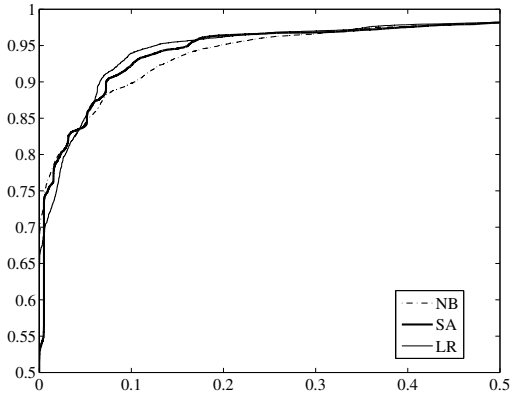
желчнокаменная болезнь



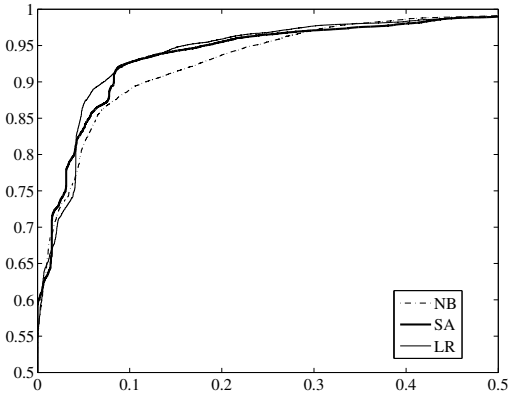
ишемическая болезнь



хронический гастрит 1



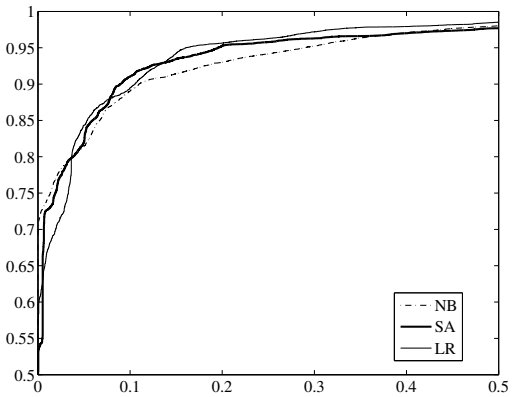
сахарный диабет



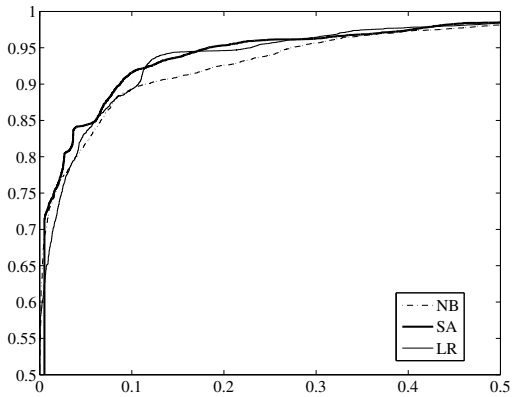
гипертония

NB — Naïve Bayes, SA — Syndrome Algorithm, LR — Logistic Regression

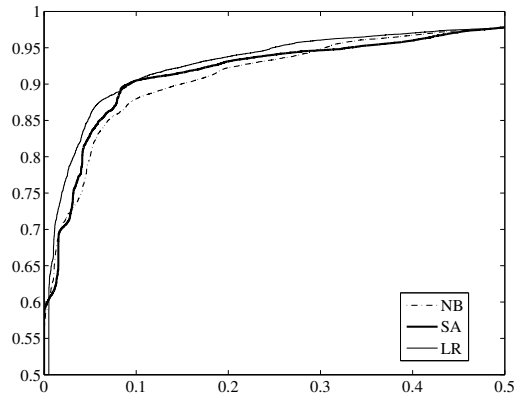
ROC-кривые в осях X:(1−специфичность), Y:чувствительность



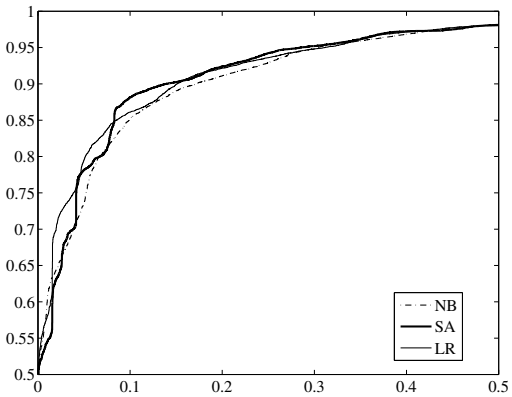
рак общий



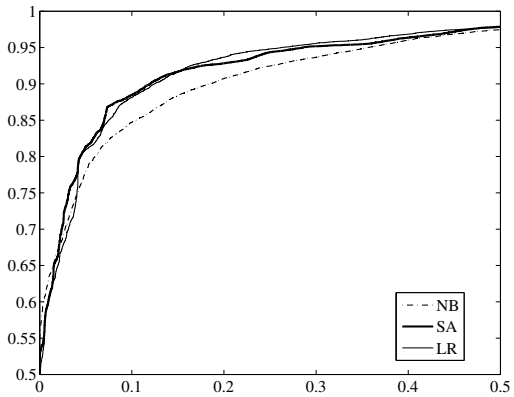
аденома простаты



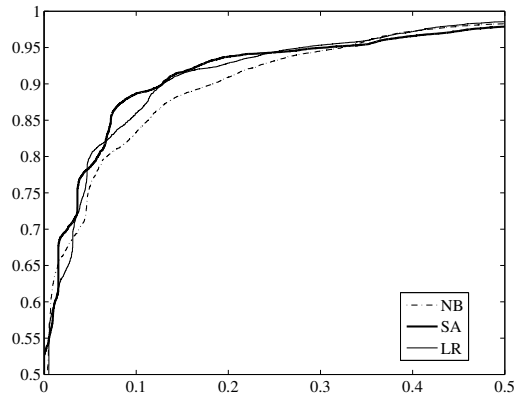
зоб щитовидной железы



хронический гастрит 2



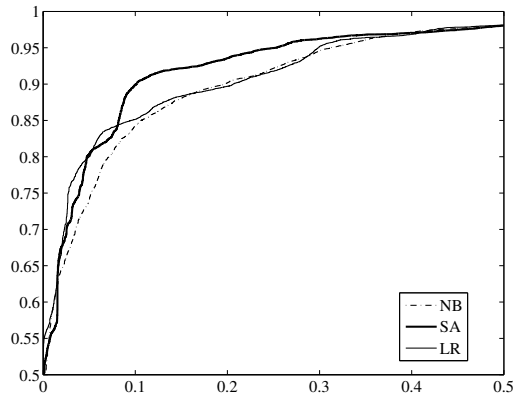
дискинезия ЖВП



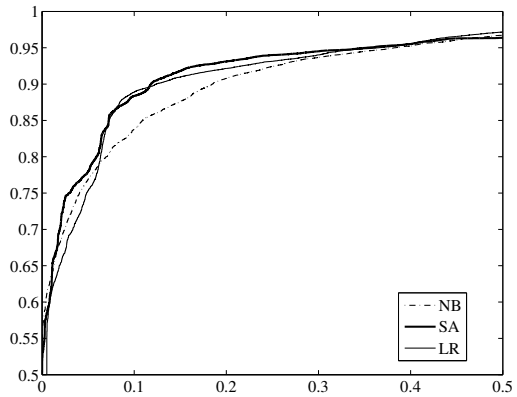
мочекаменная болезнь

NB — Naïve Bayes, SA — Syndrome Algorithm, LR — Logistic Regression

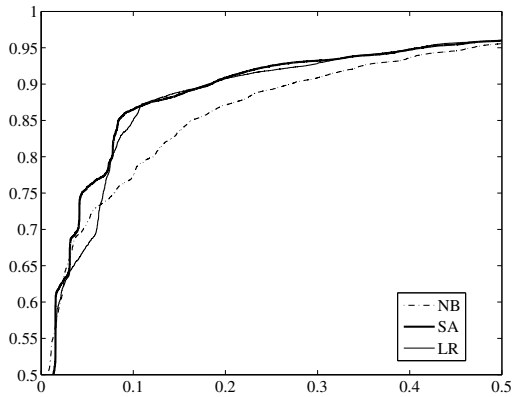
ROC-кривые в осях X:(1−специфичность), Y:чувствительность



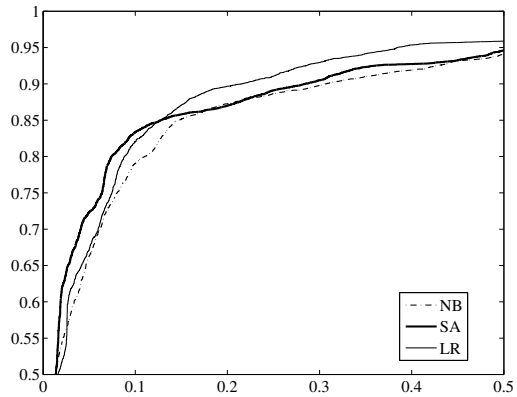
хронический холецистит



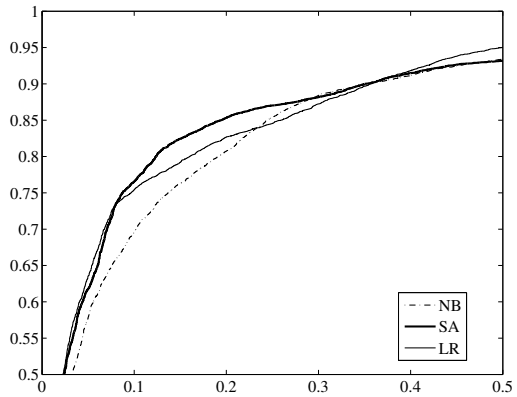
язвенная болезнь



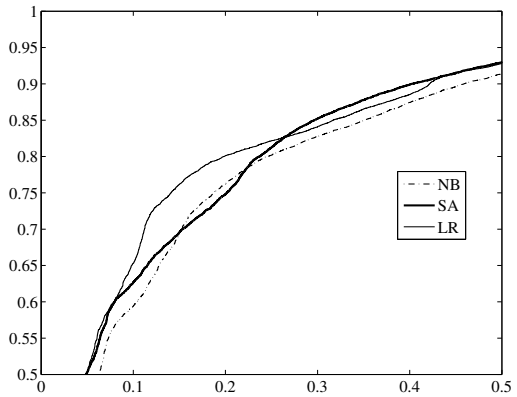
миома матки



хронический аднексит



анемия

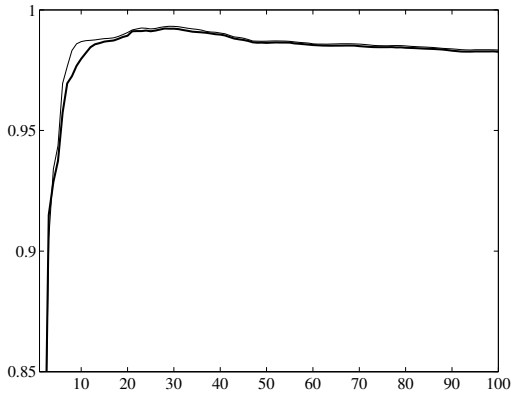


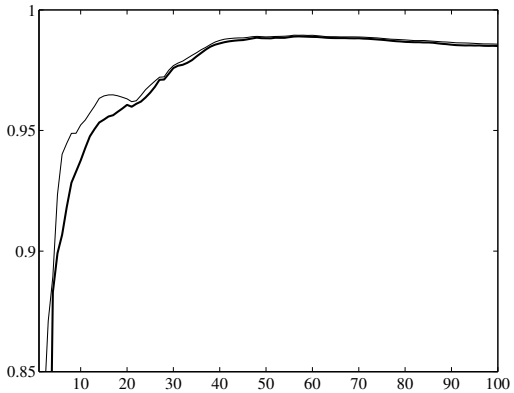
вегетососудистая дистония

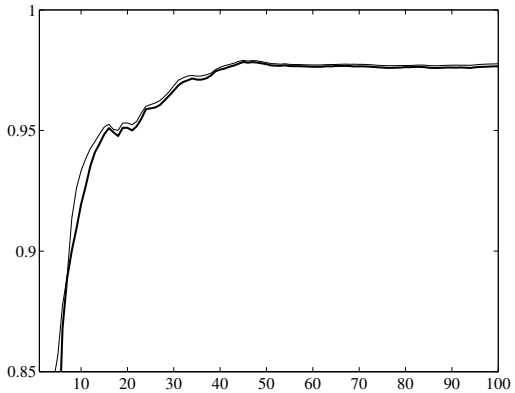
NB — Naïve Bayes, SA — Syndrome Algorithm, LR — Logistic Regression

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

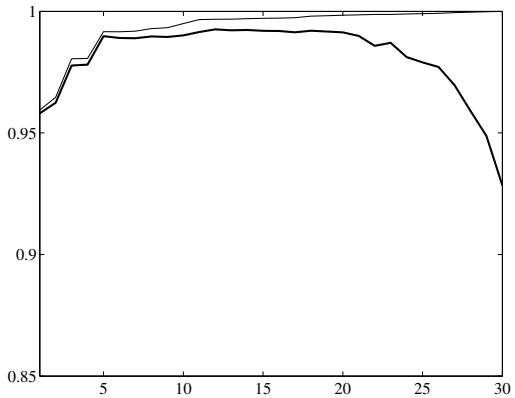
Синдромный алгоритм (наивный Байес на K признаках):

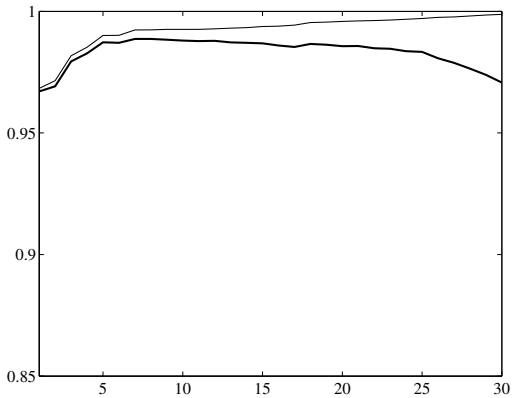


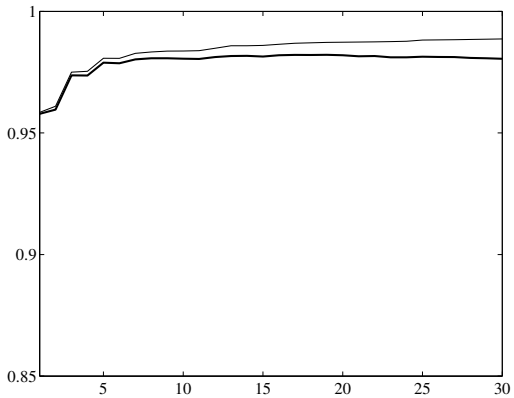




Логистическая регрессия (K — число главных компонент):





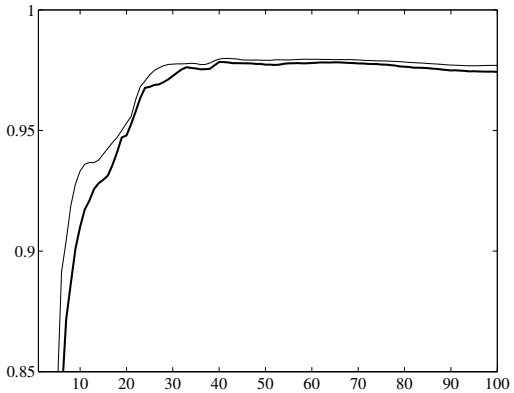


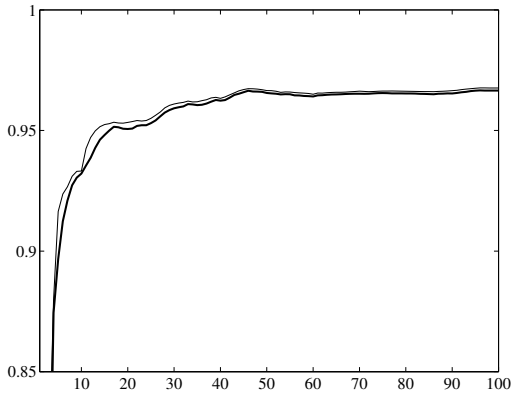
асептический некроз ГБК | желчнокаменная болезнь | ишемическая болезнь

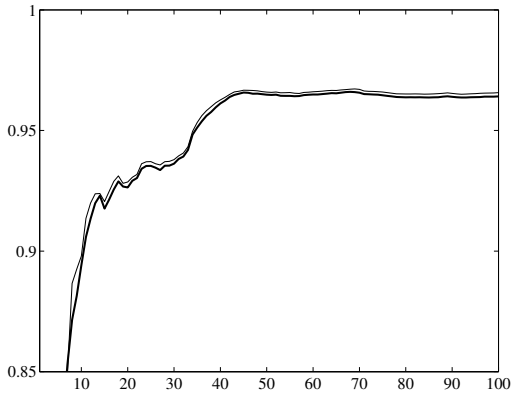
Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

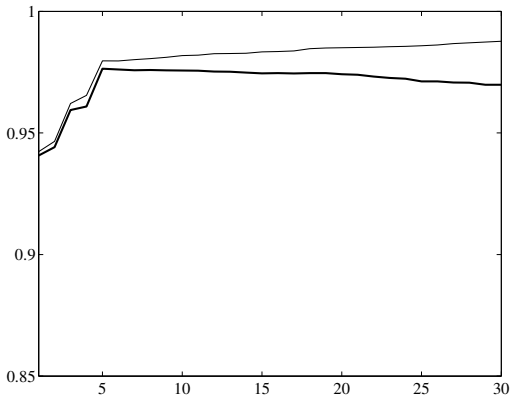
Синдромный алгоритм (K — число признаков):

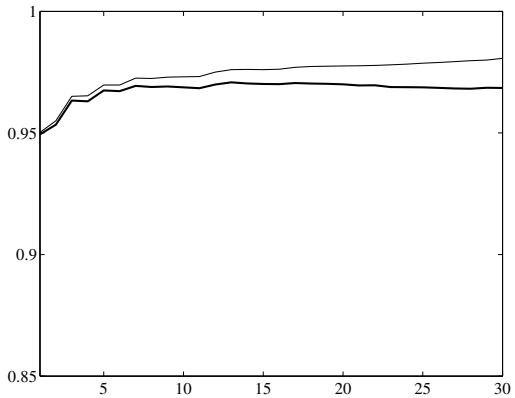


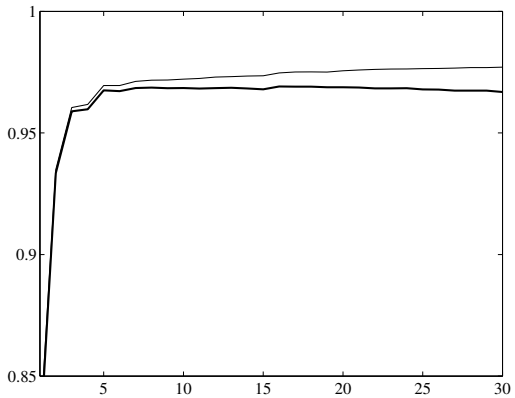




Логистическая регрессия (K — число главных компонент):





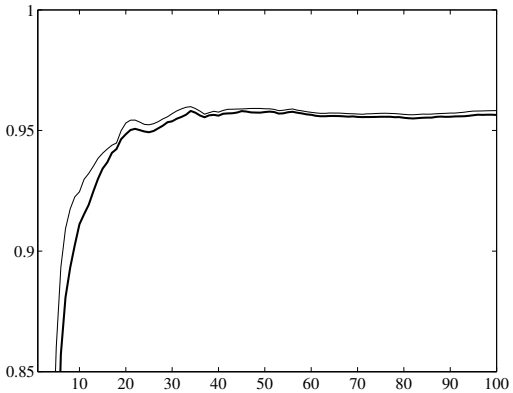


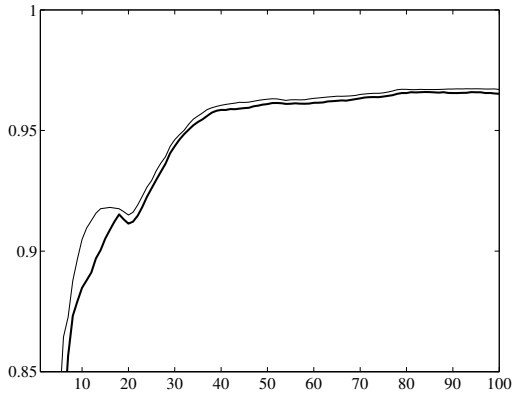
хронический гастрит 1 | сахарный диабет | гипертония

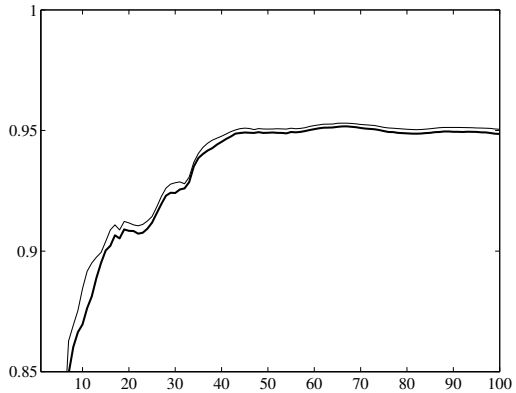
Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

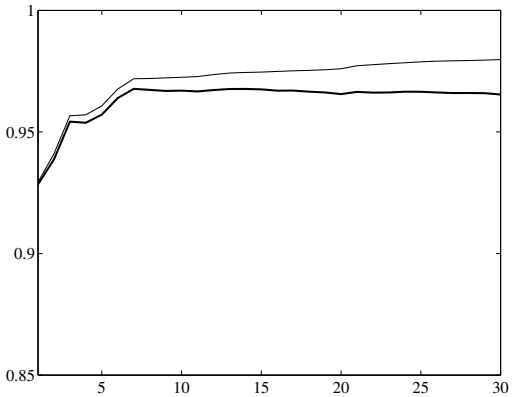
Синдромный алгоритм (K — число признаков):

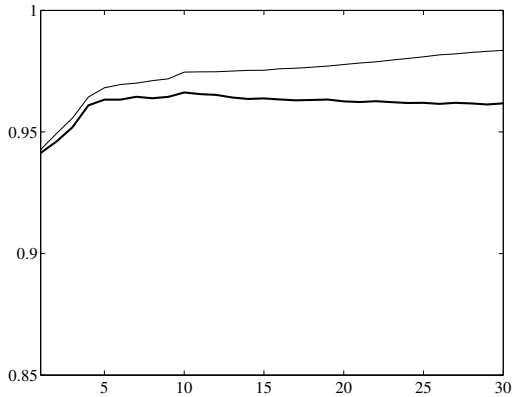


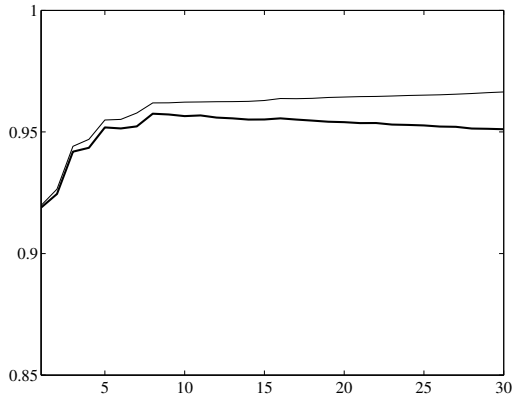




Логистическая регрессия (K — число главных компонент):





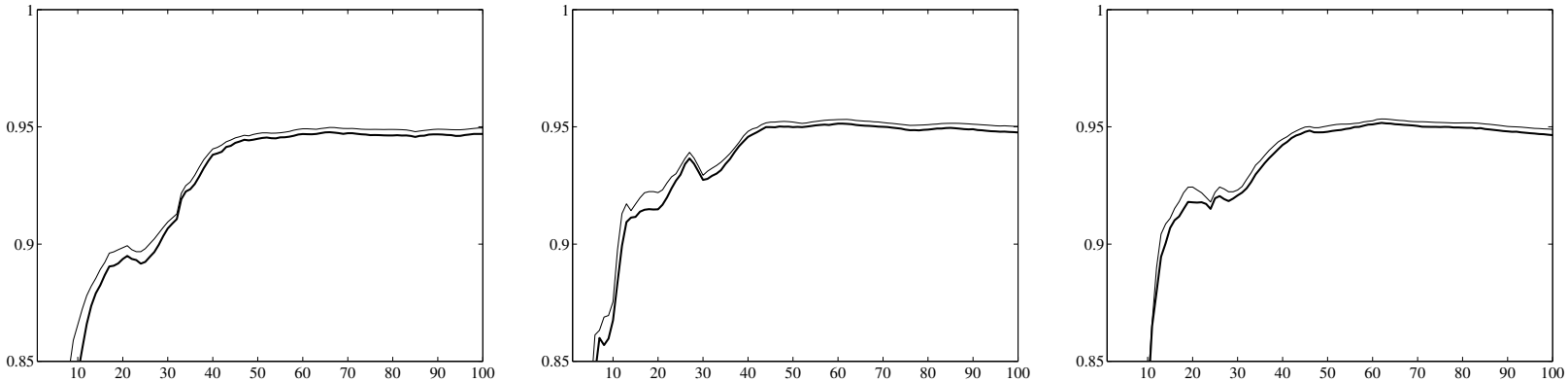


рак общий | аденома простаты | зоб щитовидной железы

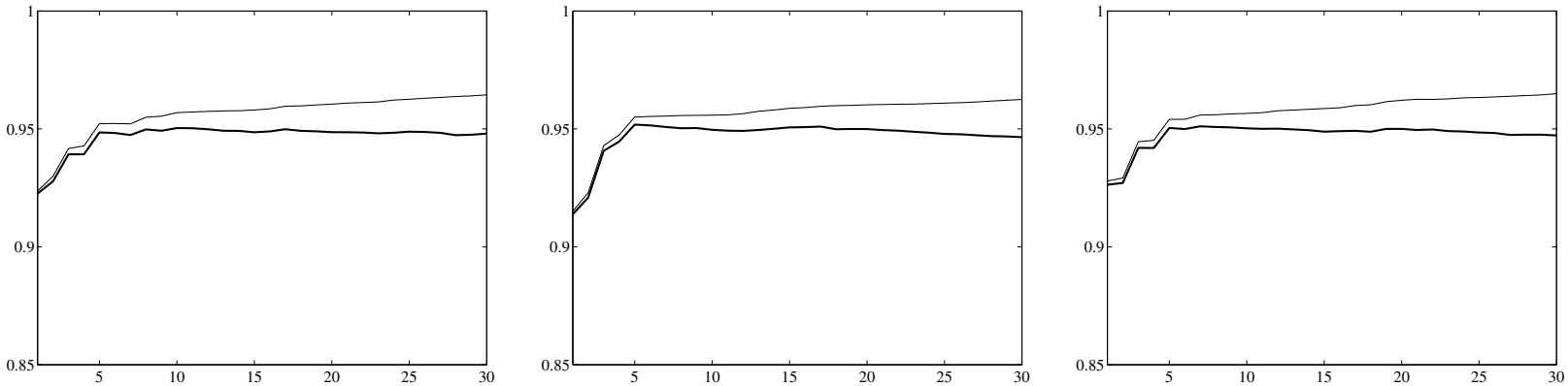
Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

Синдромный алгоритм (K — число признаков):



Логистическая регрессия (K — число главных компонент):

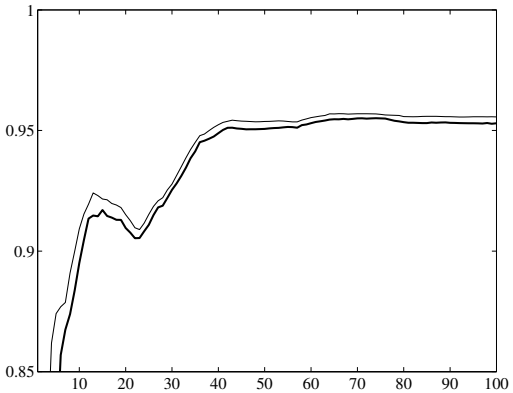


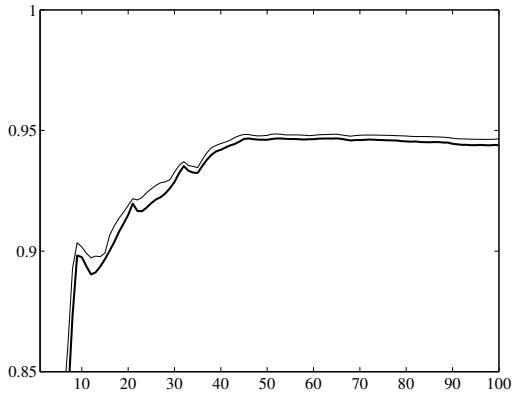
хронический гастрит 2 дискинезия ЖВП мочекаменная болезнь

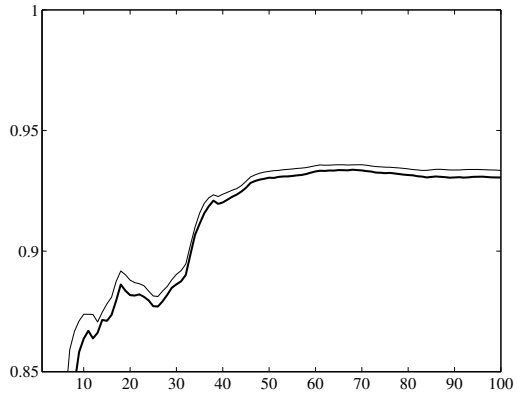
Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

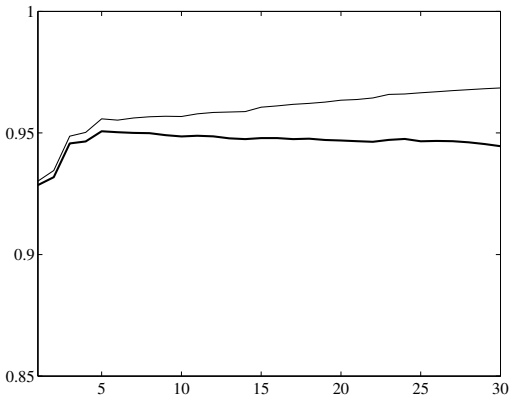
Синдромный алгоритм (K — число признаков):

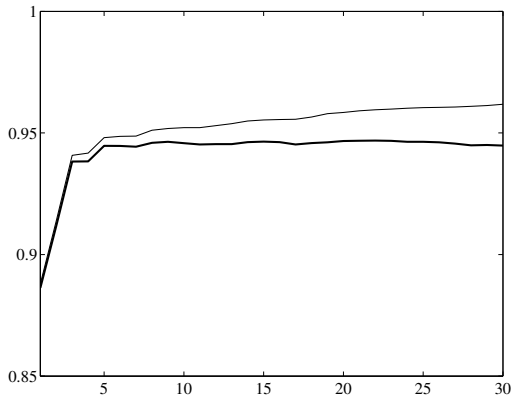


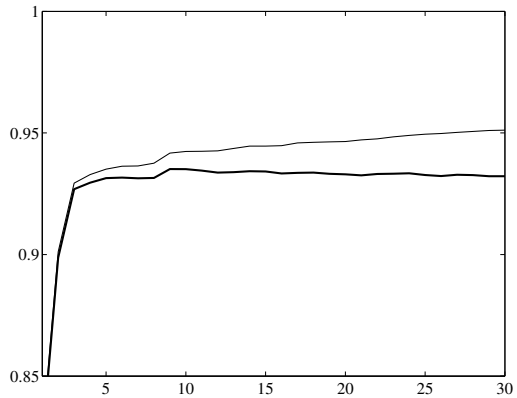




Логистическая регрессия (K — число главных компонент):





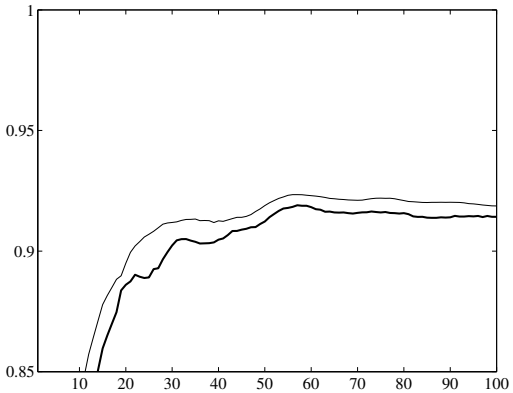
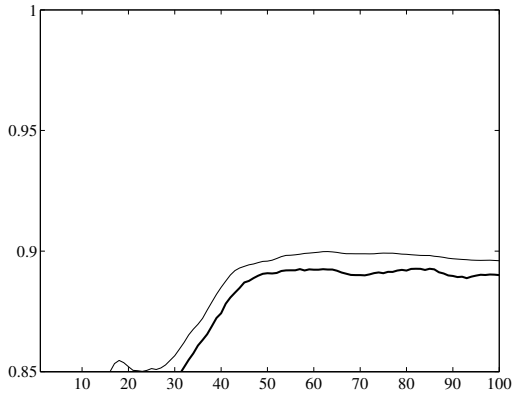
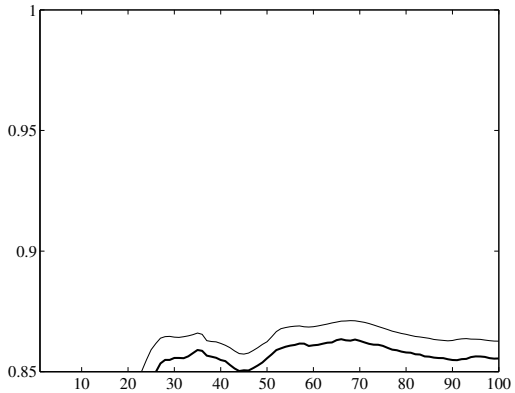


хронический холецистит | язвенная болезнь | миома матки

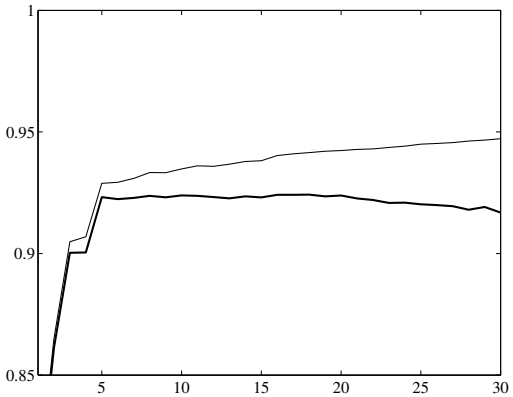
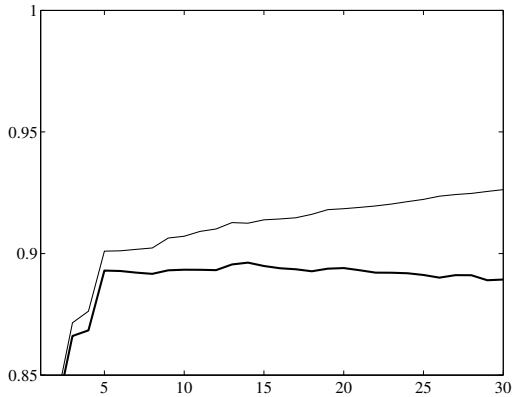
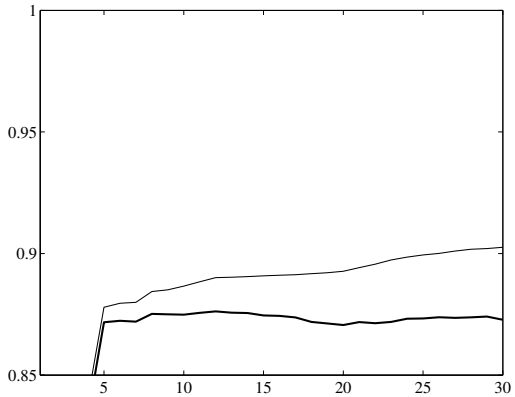
Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимости AUC от числа используемых признаков K

Синдромный алгоритм (K — число признаков):

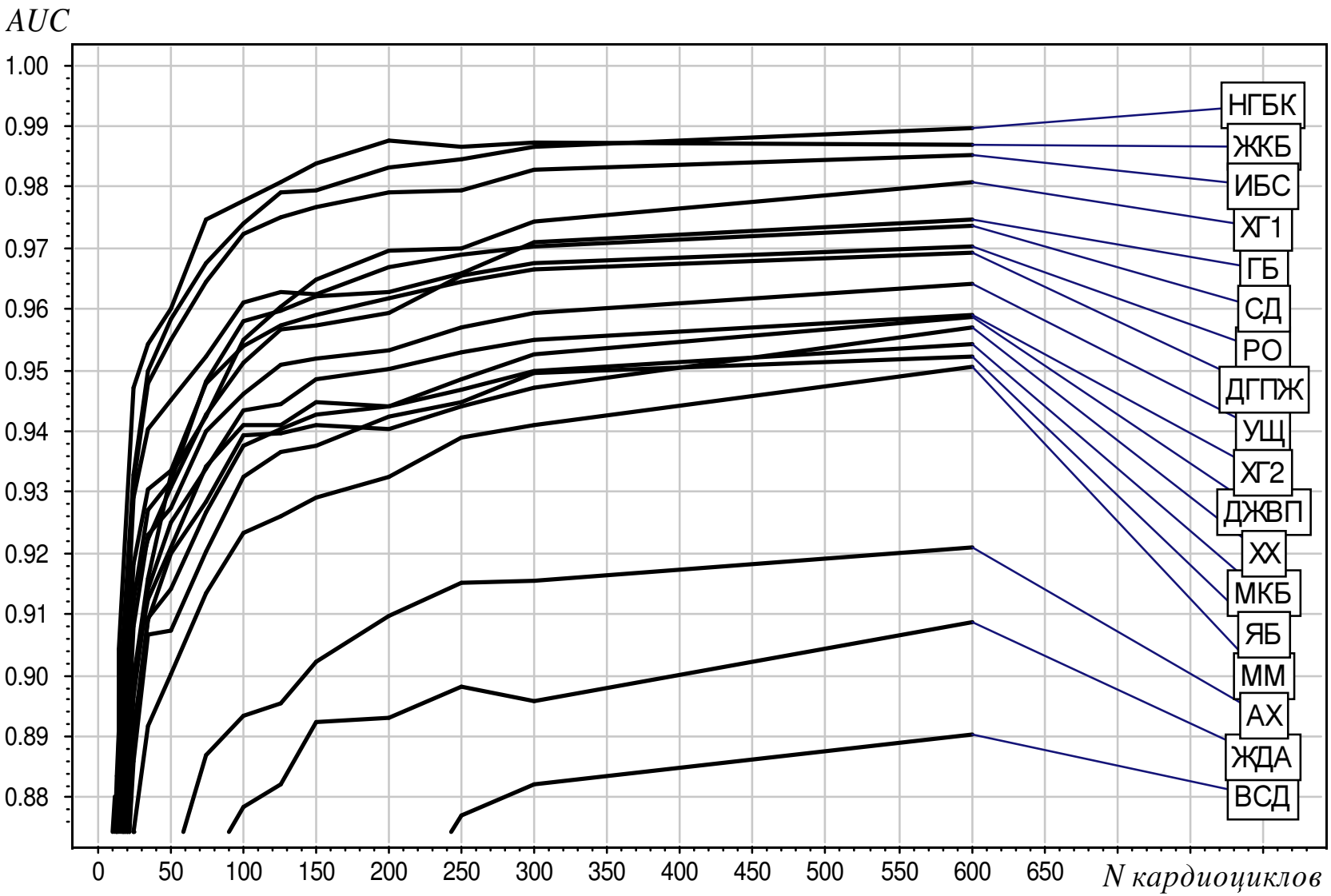
Логистическая регрессия (K — число главных компонент):

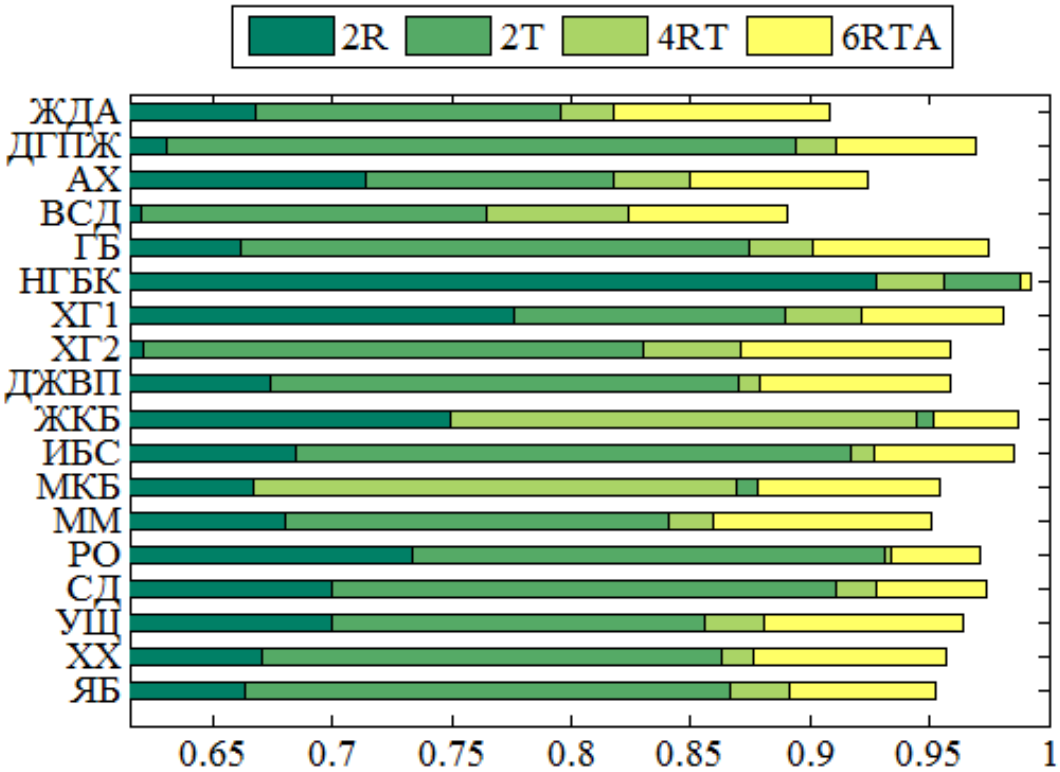
хронический аднексит | анемия | вегетососудистая дистония

Тонкая (верхняя) линия — на обучающей выборке
Толстая (нижняя) линия — на тестовой выборке

Зависимость AUC от длительности регистрации ЭКГ



Зависимость AUC от типа символьного кодирования



2R: 2-символьная, только приращения амплитуд

2T: 2-символьная, только приращения интервалов

4RT: 4-символьная, приращения интервалов и амплитуд

6RTA: 6-символьная, приращения интервалов, амплитуд и их отношений

Открытые данные по инфарктам миокарда: база данных PTB

Данные национального метрологического института Германии.

Число записей ЭКГ-сигналов: 320 больных, 74 здоровых.
Длительность регистрации ЭКГ: 100–200 кардиоциклов.

AUC при 6-символьном кодировании (6RTA) для трёх методов:
LR — логистическая регрессия,
RF — случайный лес,
SA — наивный Байес с отбором признаков

	LR	RF	SA
2-граммы	87.7	87.9	86.1
3-граммы	89.4	**89.6**	87.1
4-граммы	88.6	87.7	86.9

Bousseljot R., Kreiseler D., Schnabel A. Nutzung der EKG-Signaldatenbank CARDIODAT der PTB über das Internet. Biomedizinische Technik. 1995.

Применение тематического моделирования

Мультимодальная тематическая модель классификации:

- документ $\leftrightarrow$ кодограмма ЭКГ
- модальность №1: слово $\leftrightarrow$ триграмма
- модальность №2: класс $\leftrightarrow$ заболевание
- тема $\leftrightarrow$ диагностический эталон заболевания

диагностические эталоны **состояния нормы:**

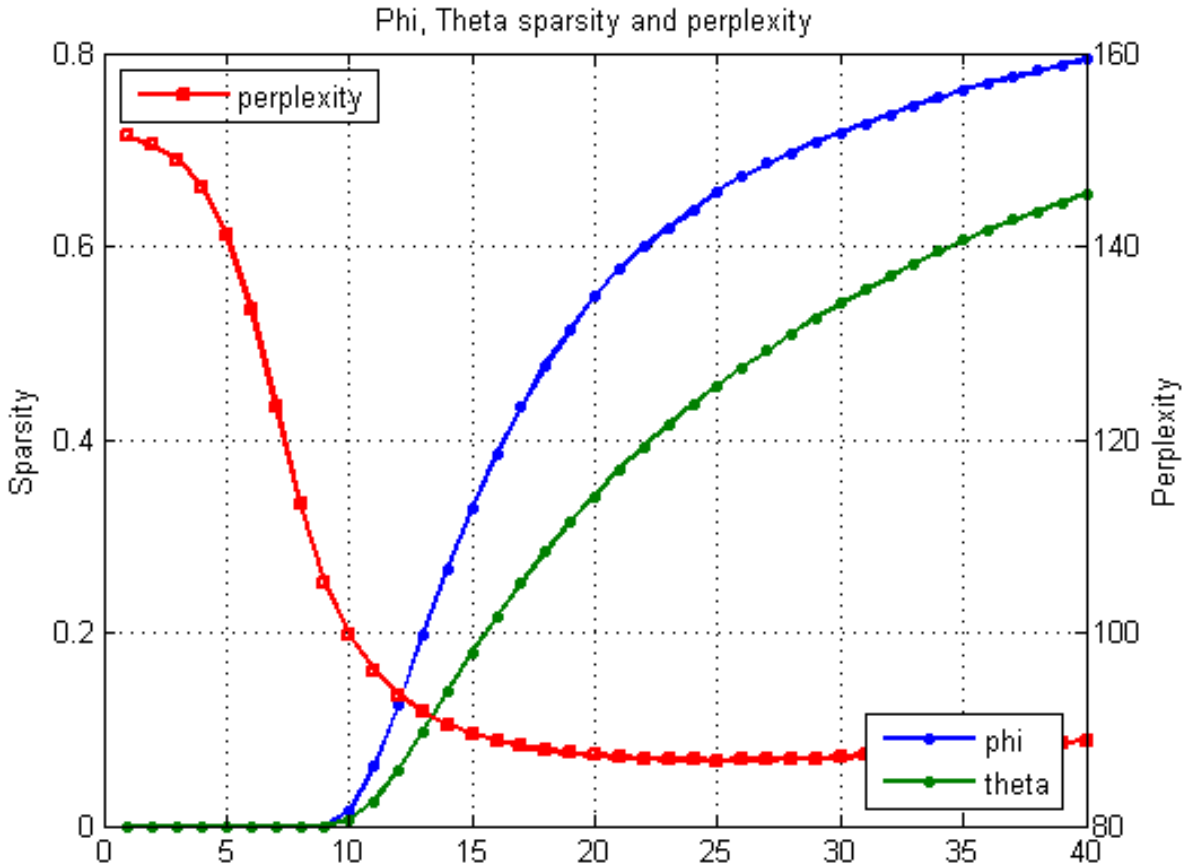
topic 1: AED, BCE, CED, DBD, DDC, EDF, EFC, FCA, FCE
topic 2: BCE, CAD, DBD, DDC, EDB, EDF, FCA, FCE
topic 3: AED, CED, DBD, DFC, EDB, EFC, FCE

диагностические эталоны **болезни (диабет):**

topic 1: AFC, CAF, AFA, FAE, AFB, BAF, BAD, EFC, EFA, CFC
topic 2: AFC, CAF, AFA, FAB, ABB, BAF, BCD, EFF

Мониторинг качества модели в EM-алгоритме

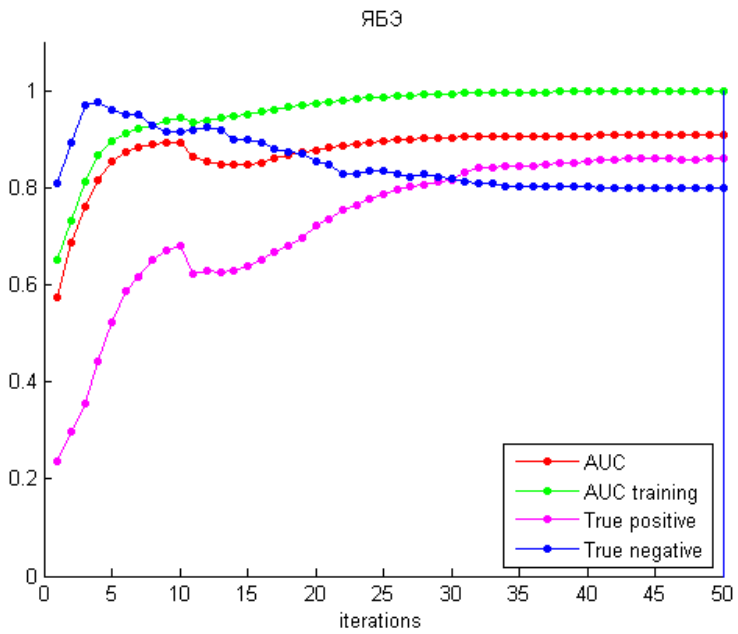
Разреженность матриц Φ, Θ и перплексия модели,
при разреживании с 10-й итерации (язвенная болезнь)



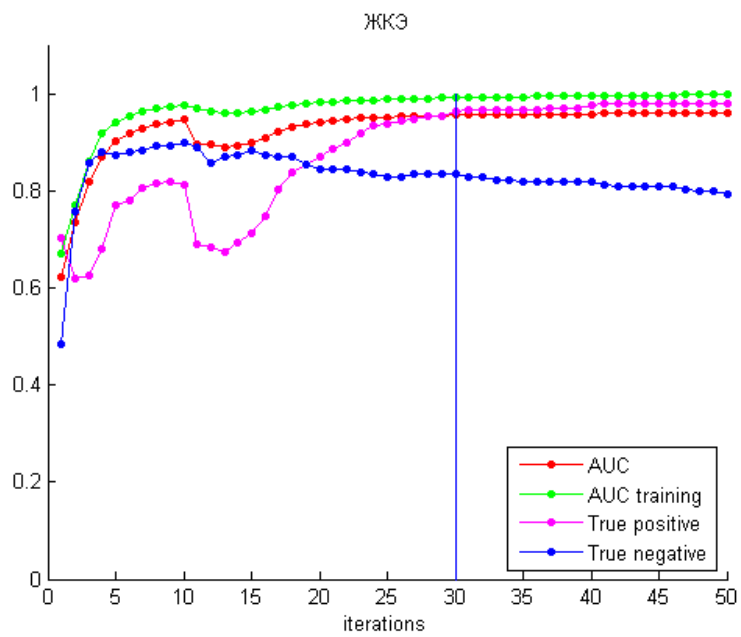
Мониторинг качества модели в EM-алгоритме

Включение разреживающего регуляризатора с 10-й итерации

Язвенная болезнь



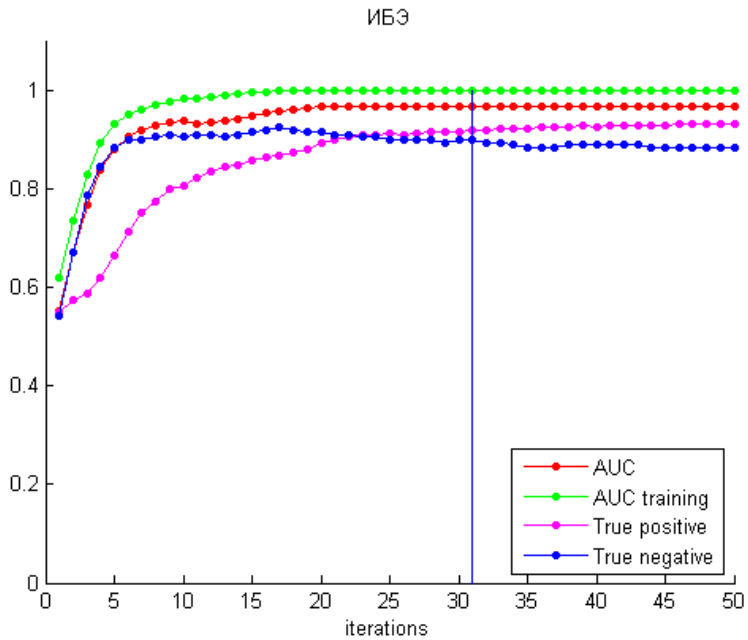
Желчнокаменная болезнь



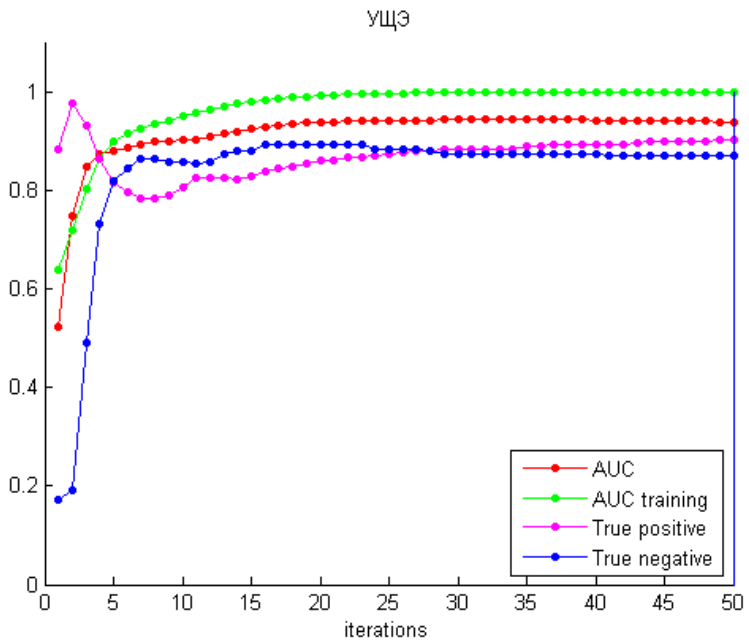
Мониторинг качества модели в EM-алгоритме

Включение разреживающего регуляризатора с 10-й итерации

Ишемическая болезнь сердца



Узловой зоб щитовидной железы



Выводы

О данной задаче:

- многие болезни можно диагностировать по ЭКГ
- с очень высокой чувствительностью и специфичностью
- достаточно 300–600 кардиоциклов (5–10 минут)

О прикладных исследованиях в машинном обучении:

- в основе — идеи специалиста о прикладной области
- изобретение удачных признаков — 90% успеха
- начинать с разведочного анализа и визуализации
- пробовать стандартные методы «из коробки»
- пробовать простые методы
- баланс сложности между недо- и пере-переобучением
- выбрать критерий качества и делать кросс-валидацию

Анализ данных о транзакциях клиентов банка

Дано:

D — множество клиентов (15 000)

W — категории = MCC-коды (Merchant Category Code) (328)

n_{dw} — сумма транзакций клиента d по категории w

Найти: темы — типы экономического поведения (потребления)

$\phi_{wt} = p(w|t)$ — структура потребления для темы t

$\theta_{td} = p(t|d)$ — типы потребления клиента d

Регуляризаторы:

- повышение различности тем
- разреживание $p(t|d)$
- учёт модальностей времени, типа транзакции, терминала
- обучение прогнозов объёма трат по метрике RMSLE_1

Интерпретация тематической модели

Прогноз объёма трат клиента d по категории w

$$n_{dw} = n_d \sum_{t \in T} p(w|t) p(t|d),$$

n_d — объём клиента d по всем категориям или его прогноз.

Проблема несбалансированности клиентов по объёмам:
приоритет получают «богатые» клиенты с наибольшими n_d

$$\sum_{d \in D} \sum_{w \in d} n_{dw} \ln \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \to \max_{\Phi, \Theta}$$

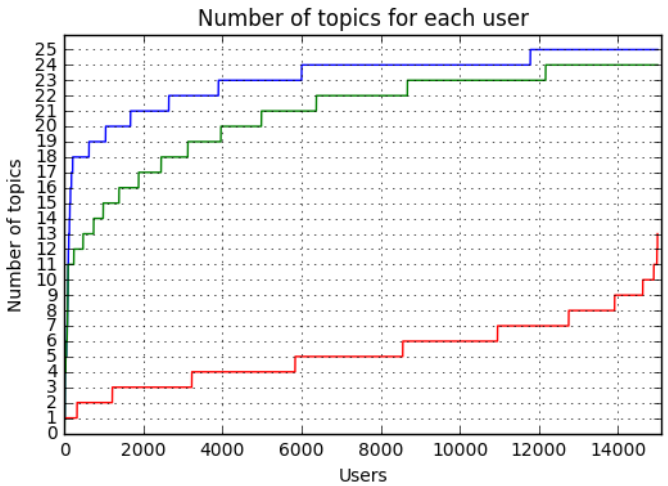
Два способа решения (первый сохраняет аддитивность объёмов):

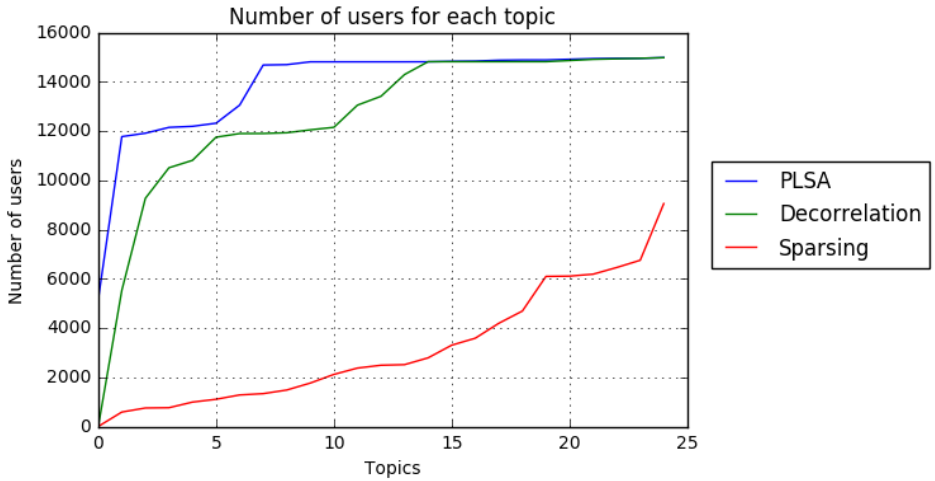
$$\sum_{d \in D} \sum_{w \in d} \frac{1}{n_d} n_{dw} \ln \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \to \max_{\Phi, \Theta};$$

$$\sum_{d \in D} \sum_{w \in d} \log n_{dw} \ln \sum_{t \in T} \phi_{wt} \theta_{td} \to \max_{\Phi, \Theta}$$

Построение модели ARTM, 25 тем

- 30 итераций PLSA — без регуляризаторов
- 10 итераций — повышение различности тем
- 10 итераций — разреживание $p(t|d)$





Декоррелирование Φ и разреживание Θ определяют минимальное число типов экономического поведения каждого клиента, достаточное для описания его расходов.

Пользуюсь картой только чтобы снять наличные

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
72	Финансовые институты — снятие наличности вручную
27	Финансовые институты — снятие наличности автоматически
0.23	Денежные переводы MasterCard MoneySend
0.1	Денежные переводы
0.012	Финансовые институты — снятие наличности вручную
0.0055	Легковой и грузовой транспорт: продажа, сервис, ремонт, лизинг
0.0027	Магазины игрушек

Наличные + авто, спорт, компьютеры

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
55	Финансовые институты — снятие наличности автоматически
44	Денежные переводы
0.111	Станции техобслуживания
0.105	Автозапчасти и аксессуары
0.094	Компьютерная сеть/информационные услуги
0.043	Спортивная одежда, одежда для верховой езды и езды на мотоцикле
0.024	Финансовые институты — снятие наличности вручную
0.020	СТО общего назначения
0.018	Горючее топливо — уголь, нефть, разжиженный бензин, дрова
0.015	Магазины мужской и женской одежды
0.015	Финансовые институты — снятие наличности вручную
0.013	Магазины спорттоваров
0.012	Садовые принадлежности (в том числе для ухода за газонами) в розницу
0.011	Паркинги и гаражи
0.011	Бакалейные магазины, супермаркеты
0.010	Различные магазины одежды и аксессуаров

Цивилизованный потребитель: разные магазины, связь, авто

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
27	Станции техобслуживания
20	Различные продовольственные магазины, рынки, полуфабрикаты
15	Звонки с использованием телефонов, считывающих магнитную ленту
12	Финансовые институты — снятие наличности автоматически
4.7	Горючее топливо — уголь, нефть, разжиженный бензин, дрова
4.1	Универсальные магазины
3.4	Автозапчасти и аксессуары
1.4	Аптеки
1.2	Магазины с продажей спиртных напитков на вынос
1.1	Бакалейные магазины, супермаркеты
0.57	Автошины
0.37	Прямой маркетинг — торговля через каталог
0.35	Товары для дома
0.33	Универмаги
0.32	Плавательные бассейны — распродажа
0.21	Места общественного питания, рестораны

Всего 24 категории с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 61 категория с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Продвинутые мамки

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
56	Бакалейные магазины, супермаркеты
8.6	Финансовые институты — снятие наличности автоматически
5.4	Аптеки
4.0	Звонки с использованием телефонов, считывающих магнитную ленту
2.2	Рестораны, закусочные
1.8	Обувные магазины
1.5	Различные продовольственные магазины — рынки, полуфабрикаты
1.4	Магазины спорттоваров
1.4	Детская одежда, включая одежду для самых маленьких
1.3	Магазины игрушек
1.3	Места общественного питания, рестораны
1.1	Магазины мужской и женской одежды
1.1	Магазины с продажей спиртных напитков на вынос
1.1	Магазины косметики
1.0	Садовые принадлежности в розницу
0.73	Одежда для всей семьи

Всего 41 категория с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 95 категорий с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Бизнес-леди: забыла про наличку — всё по карте

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
12	Магазины мужской и женской одежды
7.3	Оборудование, мебель и бытовые принадлежности
7.0	Места общественного питания, рестораны
5.6	Магазины по продаже часов, ювелирных изделий и изделий из серебра
5.3	Обувные магазины
4.7	Магазины косметики
4.6	Одежда для всей семьи
3.8	Универмаги
3.2	Готовая женская одежда
2.8	Практикующие врачи, медицинские услуги
1.8	Прямой маркетинг — торговля через каталог
1.5	Салоны красоты и парикмахерские
1.3	Детская одежда, включая одежду для самых маленьких
1.3	Аптеки
1.0	Изготовление и продажа меховых изделий
1.0	Центры здоровья

Всего 70 категорий с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 134 категории с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Продвинутый активный потребитель всего, и по карте

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
20	Финансовые институты — снятие наличности вручную
15	Универсальные магазины
13	Туристические агентства и организаторы экскурсий
11	Автозапчасти и аксессуары
8.8	Коммунальные услуги — электричество, газ, санитария, вода
4.2	Веломагазины — продажа и обслуживание
3.7	СТО общего назначения
0.9	Услуги курьера — по воздуху и на земле, агентство по отправке грузов
0.8	Рекламные услуги
0.7	Компьютеры, периферия, программное обеспечение
0.5	Образовательные услуги
0.4	Бакалейные магазины, супермаркеты
0.4	Практикующие врачи, медицинские услуги
0.3	Продажа мотоциклов
0.3	Оборудование, мебель и бытовые принадлежности
0.2	Автошины

Всего 35 категорий с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 93 категории с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Бизнес-класс: авиа, отели, казино, рестораны, ценные бумаги

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
28	Авиалинии, авиакомпании
19	Финансовые институты — торговля и услуги
9.5	Отели, мотели, базы отдыха, сервисы бронирования
8.6	Транзакции по азартным играм (плюс)
5.2	Финансовые институты — торговля и услуги
3.2	Места общественного питания, рестораны
3.1	Не-финансовые институты: ин.валюта, переводы, дорожн.чеки, квази-кэш
2.2	Пассажирские железнодорожные перевозки
1.7	Бизнес-сервис
1.4	Жилье — отели, мотели, курорты
1.3	Галереи/учреждения видеоигр
1.3	Транзакции по азартным играм (минус)
0.6	Ценные бумаги: брокеры/дилеры
0.5	Туристические агентства и организаторы экскурсий
0.3	Лимузины и такси
0.3	Беспошлинные магазины Duty Free

Всего 50 категорий с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 103 категории с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Провинциальный малый бизнес

ϕ_{wt},%	MCC-код (категория расходов)
27	Финансовые институты — снятие наличности автоматически
8.5	Лесо- и строительный материал
8.4	Бытовое оборудование
6.6	Плавательные бассейны — распродажа
5.5	Продажа электронного оборудования
4.1	Бакалейные магазины, супермаркеты
3.3	Универсальные магазины
3.0	Садовые принадлежности в розницу
2.6	Телекоммуникационное оборудование, включая продажу телефонов
2.4	Легковой и грузовой транспорт: продажа, сервис, ремонт, лизинг
2.2	Товары для дома
2.1	Пассажирские железнодорожные перевозки
1.5	Оборудование, мебель и бытовые принадлежности
1.3	Скобяные товары в розницу
1.2	Магазины спорттоваров
1.1	Аптеки

Всего 54 категории с $\phi_{wt} > 0.1\%$; 104 категории с $\phi_{wt} > 0.01\%$

Литература

- *Воронцов К. В.* Аддитивная регуляризация тематических моделей коллекций текстовых документов. Доклады РАН. 2014.
- *K.Vorontsov, A.Potapenko.* Tutorial on probabilistic topic modeling: Additive regularization for stochastic matrix factorization. AIST 2014.
- *K.Vorontsov, A.Potapenko.* Additive regularization of topic models. Machine Learning, 2015.
- *K.Vorontsov, O.Frei, M.Apishev, P.Romov, M.Suvorova, A.Yanina.* Non-bayesian additive regularization for multimodal topic modeling of large collections. 2015.
- *K.Vorontsov, A.Potapenko, A.Plavin.* Additive regularization of topic models for topic selection and sparse factorization. SLDS 2015.
- *O.Frei, M.Apishev.* Parallel non-blocking deterministic algorithm for online topic modeling. AIST 2016. (в печати)
- *M.Apishev, S.Koltcov, O.Koltsova, S.Nikolenko, K.Vorontsov.* Additive regularization for topic modeling in sociological studies of user-generated text content. MICAI 2016. (в печати)
- *А.О.Янина, К.В.Воронцов.* Мультимодальные тематические модели для разведочного поиска в коллективном блоге. ИОИ 2016. (в печати)