Introduzione al Machine Learning: Training, validazione e test

Vincenzo Bonifaci

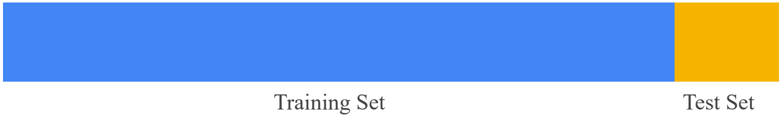
DATA ANALYTICS

ROMA TRE UNIVERSITÀ DEGLI STUDI

DMF DIPARTIMENTO DI MATEMATICA E FISICA

Training set e test set

Separiamo a caso i dati di esempio a nostra disposizione in due insiemi:



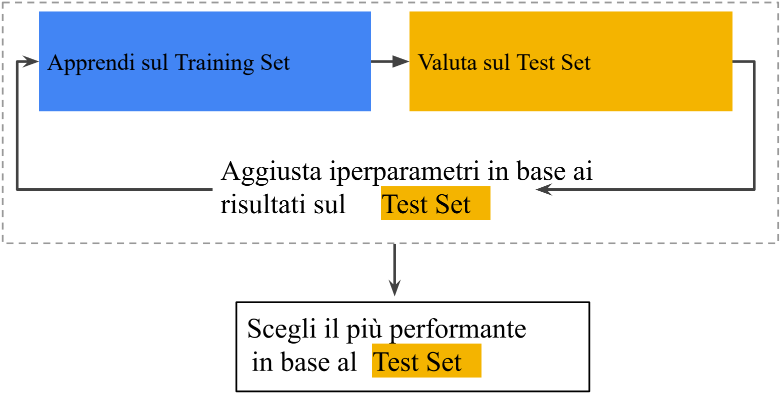
Impostazione degli iperparametri

Molti metodi di apprendimento richiedono di specificare iperparametri:

- η e T negli algoritmi basati su Gradient Descent
- K nei metodi K-Nearest Neighbor
- λ nei metodi con regolarizzazione
- ...

Quale metodologia per selezionare i valori degli iperparametri?

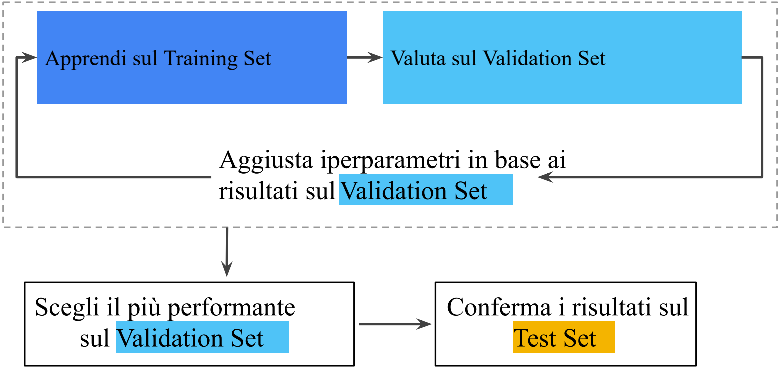
Un possibile schema di lavoro?



Il validation set (o dev set)

Separiamo a caso i dati di esempio a nostra disposizione in tre insiemi:

Uso di un validation set



Dimensionamento dei vari insiemi

- Validation set e test set devono essere sufficientemente grandi da poter stimare con la precisione desiderata il rischio atteso
- Compatibilmente col punto precedente, il training set deve essere il più grande possibile; sarà sempre il più grande dei tre insiemi

Dimensionamento dei vari insiemi in pratica

- Per dataset piccoli o medi ($\approx 100 - 10{,}000$ osservazioni) è spesso usata una suddivisione 70%-30% oppure 60%-20%-20%:
  70% per il training set, 30% per il test set, o
  60% per il training set, 20% per il validation set, 20% per il test set
- Per dataset grandi ($\approx 100{,}000 - 1{,}000{,}000$ osservazioni e oltre) può essere sufficiente mantenere validation set e test set intorno alle 10,000 o 100,000 osservazioni

Esempio: 1,000,000 osservazioni
98% training set, 1% validation set, 1% test set può essere accettabile

Riduzione delle feature

Perché ridurre le feature?

Supponiamo di avere d variabili di input e m osservazioni

Ridurre il numero di feature (d) può essere importante per:

- Tenere sotto controllo la varianza (specialmente quando $d > m$)
- Migliorare l'interpretabilità del modello

Metodi di riduzione delle feature

- *Selezione*: selezioniamo un sottoinsieme di $d' < d$ feature
- *Shrinkage (regolarizzazione)*: penalizziamo i modelli in cui tante feature hanno grande influenza sulla predizione

NB. Qui illustreremo i metodi nel contesto della regressione lineare, ma i principi sono generali

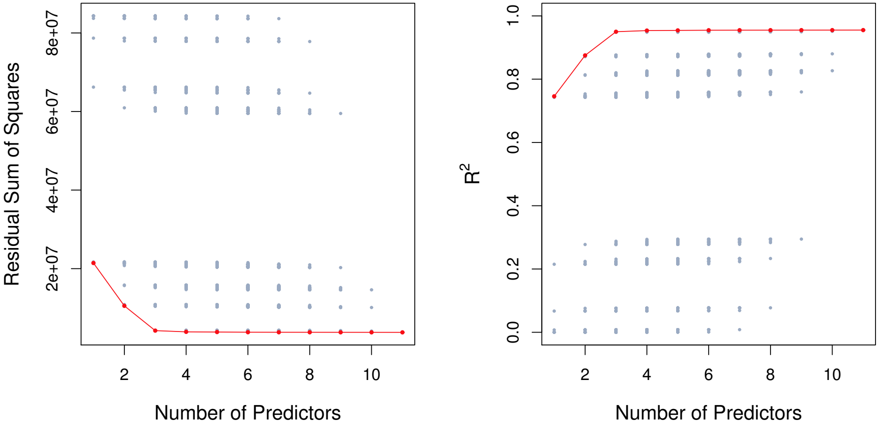
Best Subset Selection

1. $h_0 \leftarrow$ miglior ipotesi costante, cioé con 0 predittori
   Per esempio, nella regressione lineare,

$$h_0(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} y^{(i)}$$

2. Per $k = 1, 2, \ldots, d$,
   - Apprendi tutte le $\binom{d}{k}$ ipotesi consistenti di k predittori
   - $h_k \leftarrow$ ipotesi col miglior rischio empirico tra queste
3. Restituisci l'ipotesi $h \in \{h_0, h_1, \ldots, h_d\}$ col minimo rischio atteso stimato sul validation set

Esempio di Best Subset Selection



Best Subset vs. selezione passo-passo

- Il numero totale di ipotesi considerate è 2^d: inapplicabile se d è molto grande
- Se d è grande, lo spazio di ricerca è enorme e può dare luogo ad overfitting
- Per questo motivo, un'alternativa è costituita dai metodi di *selezione passo-passo*

Selezione passo-passo in avanti

- Inizia con un'ipotesi senza predittori
- Aggiungi un predittore alla volta: quello che fornisce il massimo incremento della qualità del fit
- Restituisci l'ipotesi col minimo rischio atteso stimato (sul validation set) tra tutte le $d + 1$ ipotesi costruite

Selezione passo-passo in avanti

Forward Stepwise Selection

1. $h_0 \leftarrow$ miglior ipotesi costante, con 0 predittori
   - Per $k = 0, \ldots, d-1$, considera tutte le $d-k$ ipotesi con un predittore in più di h_k
   - $h_k \leftarrow$ ipotesi col miglior rischio empirico tra queste
2. Restituisci l'ipotesi $h \in \{h_0, h_1, \ldots, h_d\}$ col minimo rischio atteso stimato sul validation set (o con la validazione incrociata)

Vantaggi e svantaggi di Forward Stepwise Selection

- Ipotesi esplorate: $d + 1$ anziché 2^d
- Non garantisce il miglior modello tra i 2^d possibili

Esempio: `Credit dataset`

k	Best Subset	Forward Stepwise
1	`rating`	`rating`
2	`rating, income`	`rating, income`
3	`rating, income, student`	`rating, income, student`
4	`cards, income, student, limit`	`rating, income, student, limit`

Regolarizzazione

Come cercare automaticamente un equilibrio tra bias e varianza?

Una *funzione di regolarizzazione* è una funzione $R : \mathcal{H} \to \mathbb{R}_+$

$R(h)$ è una qualche misura di complessità dell'ipotesi h

Regularized Loss Minimization (RLM)

Dato un insieme di esempi S, cerca una regola di predizione h che minimizzi il rischio empirico di h su S, più $R(h)$:

$$\min_{h \in \mathcal{H}} \mathrm{RE}_S(h) + R(h)$$

Se l'ipotesi h è codificata dai coefficienti $w \in \mathbb{R}^{d+1}$, scriveremo anche $R(w)$
(in tal caso R è vista come funzione definita su $\mathbb{R}^{d+1}$ anziché su $\mathcal{H}$)

Regressione Ridge

$w = (w_0, w_1, \ldots, w_d)$ include il termine costante w_0
$\omega = (w_1, w_2, \ldots, w_d)$ non lo include

Regolarizzazione ℓ_2 (di Tikhonov)

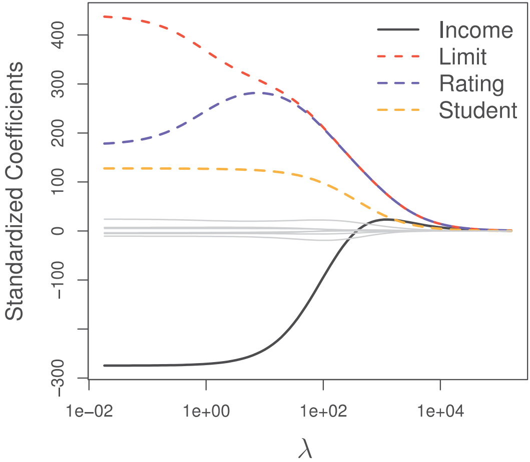
$$R(w) = \lambda(w_1^2 + w_2^2 + \ldots + w_d^2) = \lambda \|\omega\|_2^2 \qquad (\lambda \geq 0)$$

$\Rightarrow$ Regressione Ridge

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} L_S(h_w) + \lambda \|\omega\|^2 = \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \frac{1}{m} \|Xw - y\|^2 + \lambda \|\omega\|^2$$

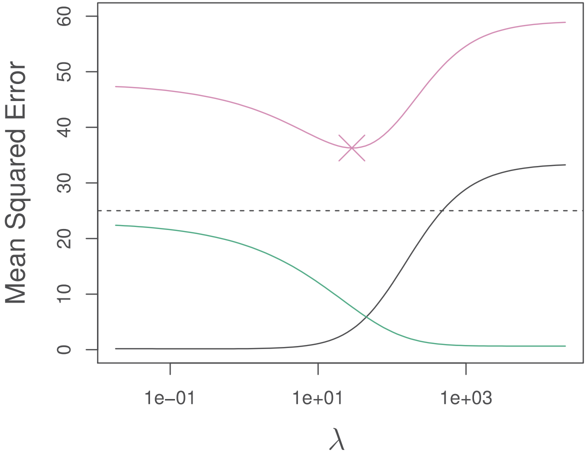
- Per $\lambda = 0$, coincide con il metodo dei minimi quadrati
- Per $\lambda \to \infty$, i coefficienti w_k tendono a 0
- Ammette soluzione in forma chiusa:
  $w^* = (X^\top X + \lambda m \cdot I_0)^{-1} X^\top y$

Regressione Ridge



Valori dei coefficienti di una regressione ridge in funzione di λ

Regressione Ridge



Bias^2 (nero), varianza (verde) e MSE di test (viola) per una regressione ridge in funzione di λ

Regressione LASSO

Regolarizzazione ℓ_1

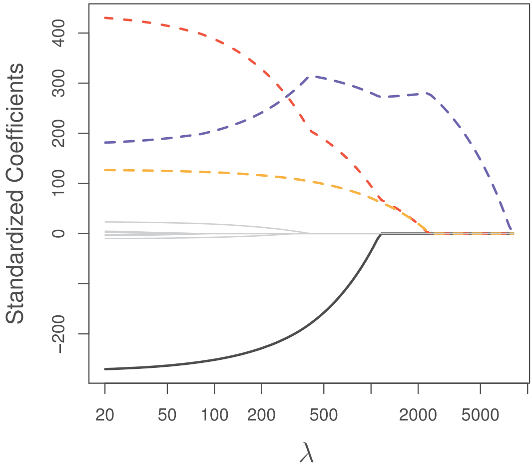
$$R(w) = \lambda(|w_1| + |w_2| + \ldots + |w_d|) = \lambda \|\omega\|_1 \qquad (\lambda \geq 0)$$

$\Rightarrow$ Regressione LASSO

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} L_S(h_w) + \lambda \|\omega\|_1 = \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \frac{1}{m} \|Xw - y\|^2 + \lambda \|\omega\|_1$$

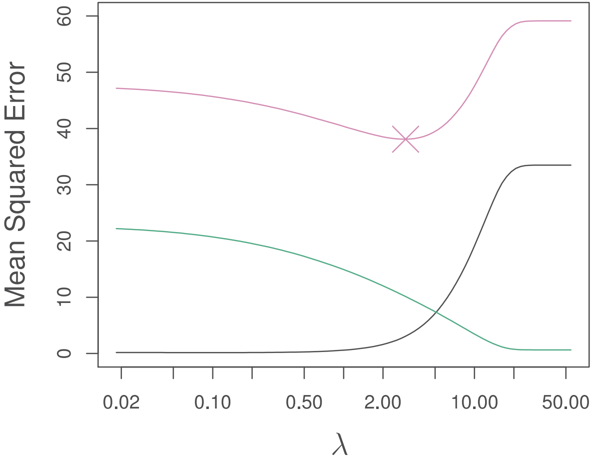
- Per $\lambda = 0$, coincide con il metodo dei minimi quadrati
- Per $\lambda \to \infty$, i coefficienti w_k tendono a 0
- Per λ crescente, alcuni coefficienti diventano esattamente pari a 0
  ($\Rightarrow$ incentiva modelli *sparsi*)

Regressione LASSO



Valori dei coefficienti di una regressione LASSO in funzione di λ

Regressione LASSO



Bias^2 (nero), varianza (verde) e MSE di test (viola) per una regressione LASSO in funzione di λ

Debugging dell'apprendimento

Esempio di scenario

- Filtro spam. Avete scelto un insieme di 100 parole da utilizzare come feature (invece di utilizzare 50000+ parole della lingua).
- La regressione logistica regolarizzata, implementata tramite discesa del gradiente, ottiene un errore di test del 20%, che per la vostra applicazione è inaccettabile
- Cosa fate ora?

Messa a punto dell'algoritmo di apprendimento

- Approccio possibile: provare a migliorare l'algoritmo in diversi modi
  - Ottenendo più esempi di training
  - Provando un insieme di feature più piccolo
  - Provando un insieme di feature più grande
  - Usando feature diverse: intestazione mail vs. corpo mail
  - Cambiando il numero di iterazioni di Gradient Descent
  - Usando un metodo di ottimizzazione del secondo ordine
  - Usando un diverso valore del coefficiente di regolarizzazione λ
  - Usando un metodo di apprendimento diverso dalla regressione logistica
- Questo approccio potrebbe funzionare, ma richiede molto tempo, e rischia di diventare una questione di fortuna

Diagnosi di bias e varianza

Approccio preferibile:

- Diagnosi del problema incontrato dall'apprendimento
- Correzione del problema

Nel nostro scenario, l'errore di test (20%) è troppo alto

Molto spesso, il problema potrebbe essere uno tra i seguenti due:

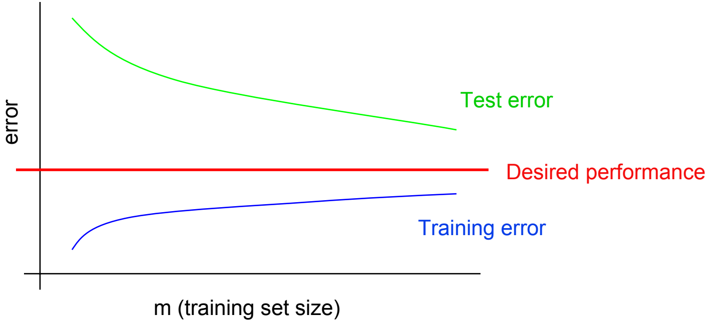
- Overfitting (varianza alta)
- Underfitting (bias alto)

Diagnosi:

- Overfitting: l'errore di training sarà sostanzialmente inferiore dell'errore di test
- Underfitting: l'errore di training sarà alto, quasi quanto quello di test

Bias vs. varianza e curve di apprendimento

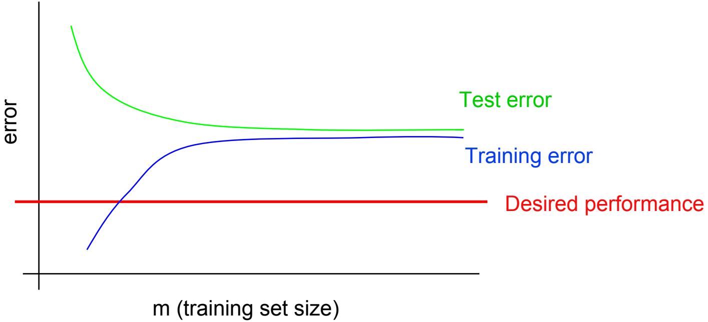
Curva di apprendimento tipica quando la varianza è alta:



- L'errore di test continua a decrescere con m crescente. Ciò suggerisce che un training set più grande possa essere utile
- Grande gap tra errore di test ed errore di training

Bias vs. varianza e curve di apprendimento

Curva di apprendimento tipica quando il bias è alto:



- Già l'errore di training è troppo alto!
- Piccolo gap tra errore di test ed errore di training

La diagnosi ci dice come intervenire

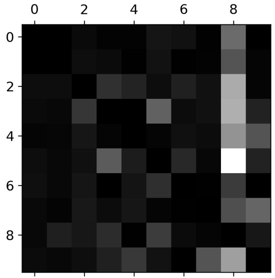
Nel nostro scenario, si può intervenire:

- Ottenendo più esempi di training — Diminuisce la varianza
- Provando un insieme di feature più piccolo — Diminuisce la varianza
- Provando un insieme di feature più grande — Diminuisce il bias
- Usando l'intestazione della mail — Diminuisce il bias
- Aumentando il numero di iterazioni di Gradient Descent
  Corregge l'algoritmo di ottimizzazione
- Usando un metodo del secondo ordine
  Corregge l'algoritmo di ottimizzazione
- Usando un diverso valore del coefficiente di regolarizzazione λ
  Aumentare λ diminuisce la varianza
  Diminuire λ diminuisce il bias

Analisi degli errori

Esempio: classificazione cifre MNIST

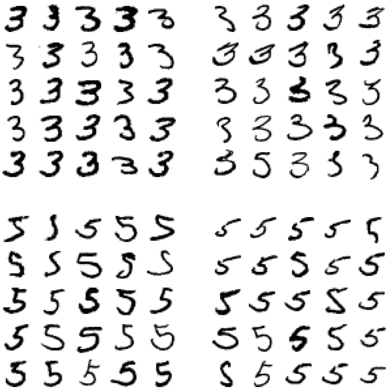
Analizziamo la matrice di confusione per capire quali classi vengono confuse con quali altre (**nota**: la diagonale è stata azzerata)



- Molte cifre (ad es., tanti 5) vengono facilmente confuse con degli 8
- I veri 8 vengono per lo più classificati correttamente
- Sembra utile aggiungere esempi che sembrano 8 ma non lo sono

Analisi degli errori

Analizziamo errori individuali per capire perché il classificatore fallisce



- Il classificatore sembra troppo sensibile a traslazione e rotazione
- Ciò suggerisce di centrare e “raddrizzare” le immagini

Conclusioni

- Il tempo investito nella diagnosi dell'algoritmo di apprendimento è tempo ben investito
- La diagnosi di bias e varianza è molto utile e può essere semplice
- L'analisi degli errori può fornire altre informazioni utili