Laborator 4

Lucian M. Sasu

1 Regresie logistică pentru două clase

1. (Recunoașterea a două cifre) Să se implementeze algoritmul de regresie logistică pentru a face clasificarea a două cifre. Setul de date este MNIST, descris la http://yann.lecun.com/exdb/mnist/ și disponibil în directorul ./date. Setul MNIST conține imagini gri ale cifrelor 0–9 — Figura 1.

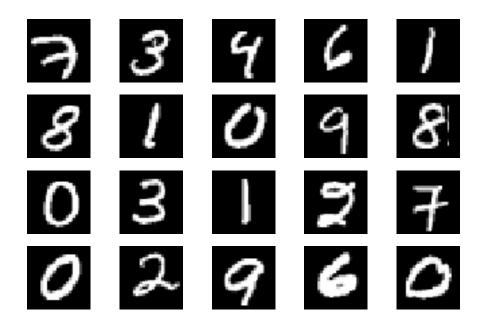


Figura 1: 20 de cifre din setul MNIST

Setul de antrenare este format din două fișiere in format CSV:

- (a) mnist_train_input.csv conţine reprezentarile matriceale pentru 55000 desene de cifre, datele de intrare pentru setul de antrenare; fiecare cifră e codificată ca o matrice de 28x28 de numere în virgulă mobilă, liniarizată (flattened);
- (b) mnist_train_labels.csv conţine 55000 de randuri, iar pe fiecare rând se găseşte codificarea one-hot a clasei din care face parte imaginea corespunzătoare (adică de pe același rând) din fișierul mnist_train_input.csv, reprezentând etichetele corespunzătoare pentru setul de intrare; prima matrice de 28x28 din fișierul de la punctul anterior este desenul pentru cifra 7, pe prima linie din fisierul mnist_train_labels.csv avem șirul de 10 numere 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0 (1 pe indicele 7, restul 0). Pentru detalii despre codificarea one-hot a se vedea secţiunea 3.1.

Setul de testare este structurat la fel, în fișiere al căror nume conține particula _test_ în loc de _train_, dar numărul de desene de cifre este de 10000.

Pașii de lucru sunt:

- (a) Scrierea de funcții auxiliare¹:
 - i. funcție care citeşte datele din fișier şi returnează: matricea X_train de 55000×784 din fisierul mnist_train_input.csv, vectorul y_train de 55000 valori intregi 0...9 (unica poziție pe care se află valoarea 1 pe rândul acela: 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0 → 7) şi similar X_test şi y_test din cele două fişiere cu date de testare; funcția returnează aceste 4 matrice;
 - ii. funcție de filtrare: pentru două cifre diferite specificate prin argumente, se vor returna din matricele X_*, y_* acele cazuri (linii) care corespund cifrelor indicate (de exemplu,dacă vreau să învăț doar cifrele 0 și 1, returnez doar liniile corespunzând desenelor pentru 0 și 1 din matricea X_* si doar etichete 0 și 1 din vectorul y_*). Formatați perechea de valori returnate în mod convenabil (matrice, liste de vectori etc.); cifrele vor fi alese de student;
 - iii. funcție care adaugă la o matrice dată o primă coloană plină cu 1 și returnează noua matrice;
 - iv. funcție pentru implementarea modelului de predicție h_{θ} :

$$h_{\theta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-\theta^t \cdot \mathbf{x})} \tag{1}$$

¹Pentru notă maximă: funcții vectorizate.

- v. funcție de calcul a erorii J, incluzând regularizare pentru elementele lui $\boldsymbol{\theta}$ mai puțin primul element al vectorului (a se vedea cursul);
- vi. funcție care primind parametrii unui model (în cazul nostru: vectorul θ) și setul de date de testare (perechea (X_test, y_test) filtrată cu funcția de la punctul (1(a)ii), va calcula acuratețea de clasificare a modelului. Acuratețea este procentul de cazuri în care datele sunt recunoscute corect: clasa estimată de către model pentru o intrare (vector de 768 numere în virgulă mobilă) coincide cu eticheta cunoscută asociată intrării;

vii. alte funcții necesare.

Precizare: ordinea aplicării funcțiilor este orientativă.

- (b) Calculul prin metoda gradient descent a vectorului optim $\boldsymbol{\theta}$ folosind doar setul de antrenare (acele linii din setul de date X_train şi y_train rezultate după filtrare; setul de testare este de asemenea cel filtrat pentru aceleași cifre); se va face regularizare; pentru hiperparametrul de regularizare λ se vor încerca diferite valori, idem pentru hiperparametrul rată de învățare α . Se va reprezenta grafic evoluția valorilor funcției de eroare J, urmărindu—se dacă aceste valori scad pe măsură ce se iterează.
- (c) Pentru setul de testare se va raporta: procentul de clasificare corectă și matricea de confuzie în cazul acesta de 2×2 .
- 2. (Regresie logistică multinomială pentru recunoașterea tuturor celor 10 cifre) Se va folosi întregul set de date de antrenare și algoritmul de regresie multinomială descris în curs; testarea se va face pe toate cele 10000 de cazuri din setul de testare.
- 3. (Opţional: Regresie logistică, estimarea calităţii hiperprametrilor prin k-fold cross validation peste setul de antrenare filtrat pe cele 2 cifre alese de student). De regulă, valorile pentru hiperparametrii α (rata de învăţare) şi λ (coeficientul pentru termenul de regularizare) se determină prin trial and error. Se cere implementare similară cu cea de la punctul (1b), dar estimarea performanţei modelului pentru o anumită valoare α şi λ să se facă prin k-fold cross validation, descris în secţiunea 3.2. Să se calculeze acurateţea de clasificare pentru 12 combinaţii de hiperparametri (α, λ) ∈ {0.1, 0.2, 0.3} × {0, 1, 10, 100}. Combinaţia de valori pentru care eroarea medie calculată pe cele k folduri este minimă se consideră a fi cea mai bună combinaţie de hiperparametri. Modelul antrenat cu aceste valori α şi λ e în final antrenat pe

setul de antrenare şi testat pe cel de testare (în ambele cazuri: considerând doar datele pentru cifrele alese de student).

Valoarea lui k este 5.

4. (Opțional) Să se aplice k-fold cross validation pentru regresia logistică multinomială, cazul celor 10 cifre. Să se încerce mai multe variante de valori pentru hiperparametrii α , λ . Strategia de lucru e aceeași ca la punctul anterior.

2 Precizări

- Din punctajul acordat, 1 punct este pentru scrierea codului vectorizat.
- Studenții se pot consulta pentru rezolvarea temei, dar rezolvările vor fi individuale.
- Predarea temei se va face la laboratorul din săptămâna 26-30 martie. Pentru o întârziere de cel mult o săptămână se vor scădea 2 puncte din nota cuvenită. Temele predate cu o întârziere mai mare de o săptămână nu vor mai fi luate în considerare.

3 Appendix

3.1 Codificarea "one-hot"

Pentru cazul în care se cere codificarea numerică a unei mulțimi de n clase, următoarea variantă este populară: fiecare clasă i, $0 \le i < n$, se codifică sub forma unui vector cu n elemente, având componenta pe indicele i setată la 1 iar restul 0.

Exemplu: dacă mulțimea de 5 clase este {mere, pere, portocale, nuci, struguri}, atunci pentru clasa "mere" vom avea codificarea vectorul $(1,0,0,0,0)^t$, pentru "pere" $(0,1,0,0,0)^t$ etc., pentru "struguri" $(0,0,0,0,1)^t$. Vectorii de codificare one-hot sunt "rari", în sensul https://en.wikipedia.org/wiki/Sparse_matrix.

Decodificarea unui astfel de vector înseamnă găsirea acelui indice i din vector care are valoarea 1; acest i este clasa codificată de vector.

3.2 Metoda de evaluare k-fold cross validation

Spre deosebire de metoda care testează un model pe un singur set de testare şi raportează performanța, metoda k-fold cross validation produce

k testări și prin urmare k valori ale acurateței modelului; pentru acestea în final se calculează valoarea medie, care reprezintă estimarea performanței modelului. În practică este metoda preferată de cuantificare a calității unui model și permite compararea relevantă cu alte modele.

Validarea funcționează astfel: se împarte matricea (setul de date) \mathbf{X} în k perechi de submulțimi disjuncte, de dimensiuni cât mai aporpiate; în paralel se face același lucru pentru setul \mathbf{y} . Rezultă partiționarea seturilor \mathbf{X} și \mathbf{y} în k perechi de submulțimi $(\mathbf{X}_i, \mathbf{y}_i)$, $1 \le i \le k$.

Pentru i de la 1 la k se procedează astfel: subseturile $(\mathbf{X}_i, \mathbf{y}_i)$ sunt păstrate strict petru testare; subseturile $(\mathbf{X}_1, \mathbf{y}_1), \ldots, (\mathbf{X}_{i-1}, \mathbf{y}_{i-1}), (\mathbf{X}_{i+1}, \mathbf{y}_{i+1}), \ldots, (\mathbf{X}_k, \mathbf{y}_k)$ sunt folosite doar pentru antrenare; se face antrenarea folosind toate datele din toate cele k-1 subseturi de antrenare şi se testează pe $(\mathbf{X}_i, \mathbf{y}_i)$. Rezultă o valoare de acuratețe a_i .

Observație: Pentru valori i diferite valorile optime $\boldsymbol{\theta}$ pot diferi; de asemnea, poate diferi numărul de iterații efectuate până la oprire. Explicația este dată de faptul că datele de antrenare diferă de la o valoare a lui i la alta.

După ce fiecare $(\mathbf{X}_i, \mathbf{y}_i)$ produce acuratețea a_i , cele k valori se mediază şi acesta este rezultatul final ce se raportează.

Detalii pentru k-fold cross validation se găsesc în:

- Regularization and model selection
- Tutorial 1
- Tutorial 2
- Tutorial video pentru Python