Învățare automată

— Licență, anul III, 2021-2022, examenul parțial I —

Nume student:

Grupa:

- 1. (Algoritmul ID3: 2 exemple simple de aplicare (antrenare + testare))
 - a. Considerăm arborele de decizie alăturat.

Numerele situate lângă etichetele +/- reprezintă cât de multe exemple de antrenament au fost asignate la nodul de decizie respectiv în cursul antrenării.

Folosind acest arbore de decizie, clasificați următoarele instanțe de test:

	\mathbf{s} \mathbf{m}	
	color shape	+ 15
	- + - /sq /circ	
	$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	
7	+	
รี	1 4 6	

size

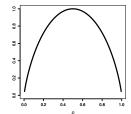
Size	Color	Shape	Smell	Classification
small	green	square	pine	
large	blue	square	pine	
medium	green	circle	rotten egg	
medium	red	square	lemon	

Observație: Pentru conveniență, pe arborele din imaginea de mai sus, valorile atributelor au fost scrise în mod prescurtat.

- b. Acum vom presupune că aplicați algoritmul ID3 pe un set de date de antrenament (neprecizat) și că folosiți criteriul câștigului de informație maxim (sau, un criteriu echivalent(!) cu acesta). Presupunem că
 - setul de date de antrenament este constituit din 128 de exemple, dintre care 64 sunt etichetate pozitiv, iar 64 sunt etichetate negativ;
 - instanțele de antrenament sunt caracterizate de trei atribute booleene: *Home-Owner*, *In-Debt* și *Rich*;
 - pentru 64 de exemple de antrenament, atributul *Home-Owner* este *true*, iar dintre aceste exemple 1/4 sunt negative şi restul sunt pozitive;
 - pentru 96 de exemple de antrenament, atributul In-Debt este true, iar dintre aceste exemple 1/2 sunt pozitive şi restul sunt negative;
 - pentru 32 de exemple de antrenament, atributul Rich este true, iar dintre aceste exemple 3/4 sunt pozitive şi restul sunt negative.
- i. Ce atribut trebuie pus în nodul rădăcină al arborelui ID3? (În prealabil, veţi desena compaşii de decizie corespunzători celor trei atribute de intrare care au fost indicate mai sus.)

Observație: Atunci când veți calcula entropii și / sau câștiguri de informație, le veți exprima în biți.

ii. Puteți determina atributul care trebuie pus în nodul rădăcină al arborelui ID3 fără să faceți calcule efectiv [pentru entropii], ci doar bazându-vă pe monotonia funcției entropie (H(p)) pentru distribuția aleatoare Bernoulli de parametru p (vedeți graficul alăturat)?

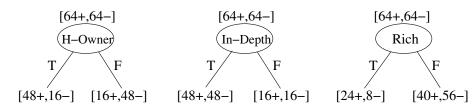


Răspuns:

a.

Size	Color	Shape	Smell	Classification
small	green	square	pine	+
large	blue	square	pine	+
medium	green	circle	rotten egg	_
medium	red	square	lemon	+

b. *i*.



Pentru uşurinţa calculelor, vom folosi criteriul entropiei condiționale medii minime (care este echivalent cu criteriul specificat în enunţ). Vom nota cu Y variabila de ieşire (clasa), iar cu H(p) entropia unei distribuții Bernoulli (oarecare) de parametru p.

$$H(Y|Home\text{-}Owner) = 2 \cdot \frac{64}{128} \cdot H(16/64) = H(1/4) = \dots = 0.8112$$
 biţi;

H(Y|In-Depth) = 1 bit (este imediat);

$$H(Y|Rich) = \frac{32}{128} \cdot H(8/32) + \frac{96}{128} \cdot H(40/96) = \frac{1}{4} \cdot H(1/4) + \frac{3}{4} \cdot H(5/12) = \ldots = 0.9377 \text{ biţi.}$$

Se observă că *Home-Owner* este atributul cel mai bun, deci va fi pus în nodul rădăcină.

ii. Răspunsul este pozitiv.

De fapt, în raţionamentul de mai sus nu mai era nevoie să facem calculele (acolo unde am pus ...). Justificarea este simplă: a determina cel mai bun atribut revine la a vedea care dintre atributele *Home-Owner* şi *Rich* este mai bun (fiindcă *In-Depth* are entropie condiţională medie maximă (1), deci câştig de informaţie minim (0)). Aşadar, trebuie să comparăm

$$H(1/4)$$
 şi $\frac{1}{4} \cdot H(1/4) + \frac{3}{4} \cdot H(5/12),$

ceea ce este echivalent cu a compara $\frac{3}{4} \cdot H(1/4)$ cu $\frac{3}{4} \cdot H(5/12)$, adică H(1/4) cu H(5/12).

Întrucât $\frac{1}{4}<\frac{5}{12}<\frac{1}{2}$, rezultă — datorită monotoniei lui H(p), entropia distribuției Bernoulli de parametru p — că

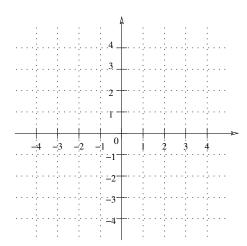
$$H(1/4) < H(5/12)$$
.

Prin urmare, H(Y|Home-Owner) < H(Y|Rich), deci în concluzie atributul Home-Owner trebuie pus în nodul rădăcină.

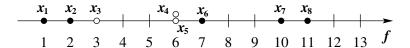
2.

A. Se dă un set de date de antrenament din planul euclidian (\mathbb{R}^2), format din instanțele negative (-1,0), (2,1) și (2,-2) și instanțele pozitive (0,0) și (1,0).

- a. Pe reperul de axe de coordonate ortogonale alăturat marcați aceste exemple de antrenament. Veți folosi *convenția* noastră de notare: simbolul desemnează instanțe pozitive (+), iar simbolul o instanțe negative (-). Desenați apoi granițele de decizie determinate de algoritmul 1-NN. Veți hașura zona / zonele de decizie corespunzătoare instanțelor pozitive.
- b. Cum va clasifica instanța de test (1,-1.01) de către algoritmul 1-NN? Dar de către algoritmul 3-NN? Justificați, în ambele cazuri.

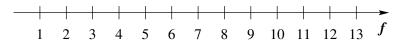


B. În desenul de mai jos este reprezentat un set de antrenament care conţine 8 instanţe, fiecare dintre ele având doar o trăsătură (engl., feature), notată cu f.



Remarcaţi faptul că sunt două instanţe pentru care valoarea trăsăturii f este aceeaşi, şi anume 6. Aceste două instanţe sunt reprezentate prin două simboluri \circ , situate unul deasupra celuilalt, dar de fapt ele ar fi trebuit să fie reprezentate ca două simboluri \circ suprapuse (unul peste celălalt), întrucât aceste instanţe au exact aceeaşi valoare pentru trăsătura f.

c. La acest punct al problemei veţi folosi algoritmul 1-NN. Vă cerem ca pe linia de mai jos să haşuraţi — şi, bineînţeles, să delimitaţi prin separatori decizionali — zonele în care algoritmul 1-NN va prezice semnul +, dat fiind setul de date de antrenament din figura de mai sus.



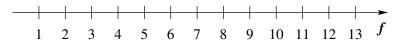
Cu ce etichetă vor fi clasificate instanțele de test f = 2.5 și f = 6.5? Justificați.

Convenții / reguli:

- 1. În cazul în care există două sau mai multe instanțe situate exact pe "marginea" [adică, pe conturul circular al] k-NN-vecinătății asociate instanței de clasificat, se va considera că toate aceste instanțe aparțin respectivei vecinătăți, iar fiecare dintre ele dispune de un vot întreg.
- 2. În caz de paritate de voturi, veți alege eticheta instanței de antrenament care este situată la distanță minimă către stânga față de instanța de test respectivă. (Distanță minimă este 0 atunci când instanța de test coincide cu o instanță de antrenament!)
- 3. Aceste reguli vor fi aplicate și la punctele următoare.

d. Dacă faceți cross-validare folosind metoda "leave-one-out" pe acest set de date, în conjuncție cu algoritmul 1-NN, cât va fi eroarea produsă? Veți arăta în mod clar—alcătuind un *tabel* care să conțină 1-NN-vecinătățile respective—cum anume ați ajuns la rezultatul pe care l-ați indicat.

e. Similar cu punctul c, însă aici veți folosi algoritmul 5-NN.¹



Indicație: Justificați în mod riguros rezultatul, referindu-vă la diverse intervale de valori (sau valori particulare) ale lui f:

Cazul 1: $f \in (-\infty, 4)$: ...

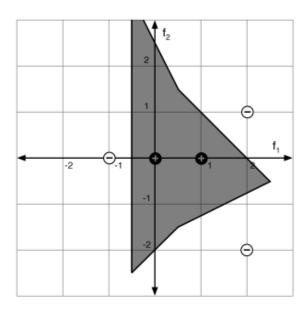
Cazul 2: f = 4: ...

. .

Cu ce etichetă vor fi clasificate instanțele de test f = 4, f = 6 și f = 7? Justificați.

Răspuns:

a.



b. (1,-1.01): Positive (+) since this is the class of the closest data point (1,0). (1,-1.01): Positive (+) since it is the majority class of the three closest data points (0,0), (1,0) and (2,-2).

c.



Justificare:

 $^{^1\}mathrm{Fără}$ să aplicați 5-NN pentru instanțele de test f=2.5 și f=6.5.

- Cazul 1.1: pentru orice $f \in (-\infty, 1.5) \cup (1.5, 2.5) \cup (6.5, 8.5) \cup (8.5, 10.5) \cup (10.5, +\infty)$, există un unic $x_i \in \{x_1, \ldots, x_8\}$ care este cel mai apropiat vecin al lui f, iar x_i este clasificat pozitiv, deci și f va fi clasificat pozitiv;
- Cazul 1.2: pentru $f \in \{1.5, 8.5, 10.5\}$, 1-NN-vecinătatea lui f este respectiv $\{x_1, x_2\}$, $\{x_6, x_7\}$, $\{x_7, x_8\}$, deci, conform regulii 1, f va fi clasificat pozitiv (fiindcă x_1, x_2, x_6, x_7 și x_8 au semnul +);
- Cazul 2.1: f = 2.5 este clasificat pozitiv, fiindcă 1-NN-vecinătatea sa este $\{x_1, x_2\}$ şi se aplică regula (2) pentru paritate de voturi $\{x_1\}$ are etichetă pozitivă);
- Cazul 2.2: f = 6.5 este clasificat negativ, fiindcă 1-NN-vecinătatea sa este $\{x_4, x_5, x_6\}$, iar x_4 și x_5 au etichete negative (se aplică regula 1);
- Cazul 3.1: pentru orice $f \in (2.5, 4.5)$, 1-NN-vecinătatea lui f este $\{x_3\}$, deci f este clasificat ca şi x_3 , adică negativ.
- Cazul 3.2: pentru orice $f \in (4.5, 6.5)$, 1-NN-vecinătatea lui f este $\{x_4, x_5\}$, deci f este clasificat negativ (ca şi x_4 şi x_5), conform regulii 1.

Concluzie: orice instanță având $f \in (-\infty, 2.5] \cup (6.5, +\infty)$ este clasificată pozitiv de către algoritmul 1-NN; altfel, este clasifictă negativ.

d. The point at 1 would be correct, nearest neighbor is at 2.

The point at 2 would be correct, nearest neighbor is at 1 (tie).

The point at 3 would be incorrect, nearest neighbor is 2.

Both points at 6 would be correct, nearest neighbor is the other point at 6.

The point at 7 would be incorrect, nearest neighbor is 6 (tie).

The point at 10 would be correct, nearest neighbor is 11.

The point at 11 would be correct, nearest neighbor is 10.

So, 6 correct, 2 incorrect \Rightarrow 75% would be predicted performance.

e.



Justificare:

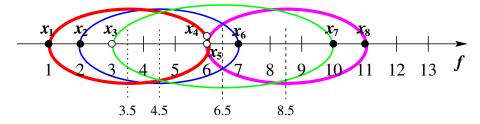
- Cazul 1: $\forall f \in (-\infty, 4)$ va fi clasificat cu -, fiindcă 5-NN-vecinătatea oricărui astfel de punct este $\{x_1, \dots, x_5\}$, în care semnul majoritar este -;
- Cazul 2: f = 4: 5-NN-vecinătatea sa este $\{x_1, \ldots, x_6\}$; se aplică regula pentru paritate de voturi și, deci, f = 4 primește semnul lui x_3 : -;
- Cazul 3: $\forall f \in (4,6)$ va fi clasificat cu –, fiindcă 5-NN-vecinătatea oricărui astfel de punct este $\{x_2, \dots, x_6\}$, în care semnul majoritar este –;
- Cazul 4: f = 6: 5-NN-vecinătatea sa este $\{x_2, ..., x_7\}$; se aplică regula pentru paritate de voturi şi, deci, f = 6 primeşte semnul lui x_4 (sau x_5): -;
- Cazul 5: $\forall f \in (6,7)$ va fi clasificat cu –, fiindcă 5-NN-vecinătatea oricărui astfel de punct este $\{x_3, \ldots, x_7\}$, în care semnul majoritar este –;
- Cazul 6: f = 7: 5-NN-vecinătatea sa este $\{x_3, \ldots, x_8\}$; se aplică regula pentru paritate de voturi și, deci, f = 7 primește semnul lui x_6 : +;
- Cazul 7: $\forall f \in (7, +\infty)$ va fi clasificat cu +, fiindcă 5-NN-vecinătatea oricărui astfel de punct este $\{x_4, \dots, x_8\}$, în care semnul majoritar este +.

Concluzie: orice instanță având $f \in [7, +\infty)$ este clasificată pozitiv de către algoritmul 5-NN; altfel, este clasifictă negativ.

Explicatie: Cum au fost alese / determinate aceste praguri, respectiv intervale?

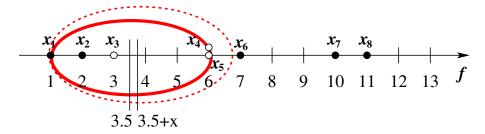
Se poate demonstra faptul că în cazul seturilor de date de antrenament $x_1, x_2, \ldots, x_n \subset \mathbb{R}$ (adică, atunci când se lucrează pe axa reală) k-NN-vecinătățile nu sunt discontinue, adică: dat fiind un punct de test oarecare $x_q \in \mathbb{R}$, dacă instanțele de antrenament x_i și x_j , cu $x_i \leq x_j$, se află în k-NN-vecinătatea lui x_q , atunci orice instanță de antrenament x_l care satisface proprietatea $x_i \leq x_l \leq x_j$ aparține și ea respectivei k-NN-vecinătăți a lui x_q .

În figura următoare punem în evidență cele patru (singurele!) 5-NN-vecinătăți având în componență câte 5 exemple de antrenament din setul $\{x_1, \ldots, x_8\}$ dat în enunțul problemei noastre. Cazurile 1, 3, 5 și 7 de mai sus corespund acestor patru 5-NN-vecinătăți.



Pragurile f=4, f=6 și f=7 (cazurile 2, 4 și 6 de mai sus) corespund acelor 5-NN-vecinătăți care au în componență câte 6 exemple de antrenament din setul $\{x_1,\ldots,x_8\}$ dat în enunțul problemei noastre. Cum au fost determinate aceste praguri?

Justificare intuitivă, pentru f = 4:



Justificare analitică:

Cazul 1: Mijlocul intervalului $[x_1, x_6]$ este 3.5. Este imediat că orice punct situat la stânga lui 3.5 are aceeași vecinătate ca și 3.5 (adică, $\{x_1, \ldots, x_5\}$). Vom identifica acum punctele la dreapta lui 3.5 care au aceeași vecinătate, $\{x_1, \ldots, x_5\}$:

Aceasta revine la a găsi x > 0 a.î. $1 + 2(3.5 + x - 1) < 7 = x_6$.

 $1 + 2(3.5 + x - 1) < 7 \Leftrightarrow 3.5 + x - 1 < 3 \Leftrightarrow x \in (0, 0.5).$

Aşadar, intervalul corespunzător acestui caz (adică, acestei 5-NN vecinătăți!) este $(-\infty, 4)$.

Cazul 3: Mijlocul intervalului $[x_2,x_6]$ este 4.5. Este imediat că orice punct situat în intervalul (4,3.5) are aceeași vecinătate ca și 4.5 (adică, $\{x_2,\ldots,x_6\}$). Vom identifica acum punctele la dreapta lui 4.5 care au aceeași vecinătate, $\{x_2,\ldots,x_6\}$: Aceasta revine la a găsi y>0 a.î. $2+2(4.5+y-2)<10=x_7$.

 $2 + 2(4.5 + y - 2) < 10 \Leftrightarrow 4.5 + y - 2 < 4 \Leftrightarrow y \in (0, 1.5)$.

Aşadar, intervalul corespunzător acestui caz (adică, acestei 5-NN vecinătăți!) este (4.6).

Cazul 5: Mijlocul intervalului $[x_3, x_7]$ este 6.5. Este imediat că orice punct situat în intervalul (6,6.5) are aceeași vecinătate ca și 6.5 (adică, $\{x_3,\ldots,x_7\}$). Vom identifica acum punctele la dreapta lui 6.5 care au aceeași vecinătate, $\{x_3,\ldots,x_7\}$:

Aceasta revine la a găsi z > 0 a.î. $3 + 2(6.5 + z - 3) < 11 = x_8$. $3 + 2(6.5 + y - 3) < 11 \Leftrightarrow 6.5 + z - 3 < 4 \Leftrightarrow z \in (0, 0.5)$.

Aşadar, intervalul corespunzător acestui caz (adică, acestei 5-NN vecinătăți!) este (6,7).

Cazul 5: Prin complementaritate (sau, în mod direct, printr-un raţionament realizat ca ,,în oglindă" faţă de cele de mai sus), rezultă că intervalul corespunzător 5-NN vecinătăţii $\{x_4,\ldots,x_8\}$ este $(7,+\infty)$.

(Un exemplu de clasificator de tip bayesian care combină avantajele algoritmilor Bayes Naiv și Bayes Optimal)

Fie A,B și C variabile aleatoare binare independente, fiecare dintre ele având posibilitatea să ia valoarea 0 cu probabilitate de 50%. Considerăm funcția

$$Y = ((\neg B) \land (\neg C)) \lor (A \land B).$$

a. Scrieți tabela de adevăr a funcției Y.

3.

b. i. Folosind tabela de adevăr a funcției Y — văzută acum ca un set de date de antrenament pentru un clasificator de tip bayesian — estimați valorile următoarelor probabilități condiționate:²

$P(A = 0 B = 0, Y = 0) = \dots$	$P(A = 0 C = 0, B = 0, Y = 0) = \dots$
	$P(A = 0 C = 1, B = 0, Y = 0) = \dots$
$P(A = 0 B = 0, Y = 1) = \dots$	$P(A = 0 C = 0, B = 0, Y = 1) = \dots$
	$P(A = 0 C = 1, B = 0, Y = 1) = \dots$
$P(A = 0 B = 1, Y = 0) = \dots$	$P(A = 0 C = 0, B = 1, Y = 0) = \dots$
	$P(A = 0 C = 1, B = 1, Y = 0) = \dots$
$P(A = 0 B = 1, Y = 1) = \dots$	$P(A = 0 C = 0, B = 1, Y = 1) = \dots$
	$P(A = 0 C = 1, B = 1, Y = 1) = \dots$

Atenție! Unele dintre aceste probabilități condiționate s-ar putea să nu fie definite. De exemplu, P(A=0|C=0,B=0,Y=0) este nedfinită, fiindcă P(C=0,B=0,Y=0), adică (veți vedea) nu există în tabelul de date nicio combinație de forma C=0,B=0,Y=0. În dreptul unor astfel de probabilități condiționate nedfinite veți pune semnul * (nedefinit).

- ii. Analizând rezultatele estimărilor obținute mai sus, se poate deduce o relație de tip independență condițională între variabilele $A,B,\ C$ și Y. Care este această relație?
- c. i. Pe baza rezultatului de la punctul b.ii, scrieți regula de decizie pe care o poate folosi un clasificator de tip bayesian diferit de Bayes Naiv și Bayes Optimal / Comun; să-i spunem New-Bayes pentru învățarea conceptului / funcției Y, astfel încât
- să producă eroare 0 pe setul de date [de antrenament] de la punctul a, dar
- să necesite un număr de parametri "liberi" (engl., free) care trebuie estimați mai mic decât cel al algoritmului Bayes Optimal.
- ii. Justificați în mod riguros regula de decizie pe care ați scris-o și că eroarea la antrenare produsă de la punctul a este într-adevăr 0.
- iii. Care sunt acești parametri "liberi"?
- iv. Comparați numărul acestor parametri "liberi" cu numărul minimal de parametri necesari de estimat de către clasificatorii Bayes Naiv și respectiv Bayes Optimal pe același set de date.

²Estimarea va fi făcută în mod clasic, adică în sensul verosimilității maxime (engl., Maximum Likelihood Estimation, MLE). Nu veți aplica nicio regulă de netezire a acestor probabilități, cum ar fi regula "add-one" a lui Laplace.

Răspuns:

a.

A	B	C	$A \wedge B$	$B \lor C$	$\neg (B \lor C)$	Y
0	0	0	0	0	1	1
0	0	1	0	1	0	0
0	1	0	0	1	0	0
0	1	1	0	1	0	0
1	0	0	0	0	1	1
1	0	1	0	1	0	0
1	1	0	1	1	0	1
1	1	1	1	1	0	1

b. Probabilitățile estimate sunt:

$$P(A = 0|B = 0, Y = 0) = 1/2$$

$$P(A = 0|C = 0, B = 0, Y = 0) = *(nedef.)$$

$$P(A = 0|B = 0, Y = 1) = 1/2$$

$$P(A = 0|B = 0, Y = 1) = 1/2$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 0, Y = 1) = 1/2$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 0, Y = 1) = *(nedef.)$$

$$P(A = 0|B = 1, Y = 0) = 1$$

$$P(A = 0|C = 0, B = 1, Y = 0) = 1$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 1, Y = 0) = 1$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 1, Y = 1) = 0$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 1, Y = 1) = 0$$

$$P(A = 0|C = 1, B = 1, Y = 1) = 0$$

Se observă că

$$P(A = a | B = b, Y = y) = P(A = a | C = c, B = b, Y = y)$$
 pentru orice $a, b, c, y \in \{0, 1\}$,

ori de câte ori probabilitățile condiționate respective sunt definite.³ Prin urmare, variabilele A și C sunt independente condițional, în raport cu variabilele B și Y (luate împreună).

c. [Justificare] Datorită independenței condționale demonstrate la punctul a, avem

$$P(A, B, C, Y) = P(A, B, C|Y) \cdot P(Y) = P(A, C|B, Y) \cdot P(B|Y) \cdot P(Y)$$
$$= P(A|B, Y) \cdot P(C|B, Y) \cdot P(B|Y) \cdot P(Y). \tag{1}$$

La scrierea acestor egalități, am folosit în ordine: regula de înmulțire / multiplicare a probabilităților, varianta condițională a regulei de multiplicare — sau, direct, pentru primele două egalități, regula de înlănțuire a probabilităților — și, în sfârșit, independența condițională dedusă la punctul b.

³Se poate verifica ușor că definiția mai generală a independenței condiționale — $P(A=a,C=c|B=b,Y=y)=P(A=a|B=b,Y=y)\cdot P(C=c|B=b,Y=y)$ pentru orice $a,b,c,y\in\{0,1\}$ — este satisfăcută în ambele cazuri de "nedefinire" indicate mai sus.

În consecință,

$$\begin{split} v_{New-Bayes}(A = a, B = b, C = c) &\stackrel{def.}{=} v_{JB}(A = a, B = b, C = c) \\ &\stackrel{def.}{=} & \arg\max_{y \in \{0,1\}} P(Y = y | A = a, B = b, C = c) \\ &= & \arg\max_{y \in \{0,1\}} \frac{P(A = a, B = b, C = c | Y = y) \cdot P(Y = y)}{P(A = a, B = b, C = c)} \\ &= & \arg\max_{y \in \{0,1\}} P(A = a, B = b, C = c | Y = y) \cdot P(Y = y) \\ &= & \arg\max_{y \in \{0,1\}} P(A = a, B = b, C = c, Y = y) \\ &\stackrel{(1)}{=} & \arg\max_{y \in \{0,1\}} P(A = a | B = b, Y = y) \cdot P(C = c | B = b, Y = y) \cdot P(B = b | Y = y) \cdot P(Y = y). \end{split}$$

De la curs știm că algoritmul Bayes Optimal produce eroare la antrenare 0 la învățarea oricărei funcții boolene. Prin urmare, și noul clasificator bayesian produce eroare la antrenare 0 la învățarea funcției Y.

Parametrii de estimat sunt:

$$\begin{array}{l} P(Y=0),\\ P(B=0|Y=0),\ P(B=0|Y=1),\\ P(A=0|B=0,Y=0),\ P(A=0|B=0,Y=1),\ P(A=0|B=1,Y=0),\ P(A=0|B=1,Y=1),\\ P(C=0|B=0,Y=0),\ P(C=0|B=0,Y=1),\ P(C=0|B=1,Y=0),\ P(C=0|B=1,Y=1). \end{array}$$

Sunt, deci, în total 11 parametri de estimat, ceea ce reprezintă mai mult decât numărul parametrilor care sunt necesari pentru Bayes Naiv $(7 = 2 \cdot 3 + 1)$, dar mai puțin decât numărul celor necesari pentru Bayes Optimal $(15 = 2^{3+1} - 1)$.