Zaawansowane Metody Eksploracji

Uczenie się na danych

Prof. dr hab. inż. Grzegorz Dudek
Wydział Matematyki i Informatyki
Uniwersytet Łódzki

WSTĘP

Wiedza pozyskana przez ucznia ma charakter odwzorowania informacji wejściowej za zbiór wartości wyjściowych.

Informacja wejściowa – opisy obiektów pewnej dziedziny

Dziedzina – zbiór obiektów X, których dotyczy wiedza zdobywana przez ucznia (przedmioty, osoby, wydarzenia, sytuacje, procesy, …)

Przykład – obiekt, element dziedziny $x \in X$

Atrybut (cecha, zmienna) – przykłady opisywane są za pomocą atrybutów x_i: $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$

Wartości wyjściowe – klasa lub wartość funkcji

Typy atrybutów:

- nominalne – o skończonym zbiorze nieuporządkowanych wartości dyskretnych,

  np. kolor, kształt, marka; relacje >, < są nieokreślone

- porządkowe – o skończonym zbiorze uporządkowanych wartości dyskretnych,

  np. rozmiar (S, M, L, XL), wzrost (niski, średni, wysoki); relacje >, < są określone

- ciągłe – o wartościach ze zbioru liczb rzeczywistych,

  np. temperatura, prędkość, masa

Przykład: punkty na płaszczyźnie.

Dziedzina – $X = \mathbb{R}^2$

Atrybuty – dwie współrzędne kartezjańskie: $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$

Przykład – punkt na płaszczyźnie: $\mathbf{x} = [1.23, 2.56]^T$

Klasa – punkty z pierwszej ćwiartki, punkty z drugiej ćwiartki, …

Przykład: n-elementowe łańcuchy binarne

Dziedzina – $X = \{0, 1\}^n$

Atrybuty – wartości binarne: $x_1, x_2, \ldots, x_n \in \{0, 1\}$

Przykład – łańcuch binarny: $\mathbf{x} = [01001010\ldots]^T$

Klasa – łańcuchy z jedną jedynką, łańcuchy z dwiema jedynkami, …

Przykład: figury geometryczne

Dziedzina – kolorowe figury geometryczne

Atrybuty – rozmiar, kolor, kształt

Przykład – $\mathbf{x}$ = (duży, niebieski, trójkąt)

Klasa – czworoboki, pięcioboki, trójkąty, …

Przykład: pogoda

Dziedzina – stany pogody

Atrybuty – aura (słoneczna, pochmurna, deszczowa), temperatura (zimna, umiark., ciepła), wilgotność (normalna, duża), wiatr (słaby, silny)

Przykład – $\mathbf{x}$ = (słoneczna, zimna, duża, słaby)

Klasa – pogoda ładna, pogoda brzydka

UCZENIE SIĘ POJĘĆ

Przykłady trenujące do uczenia się pojęć (przykłady etykietowane): opis obiektu + etykieta klasy

$$\langle \mathbf{x}, d \rangle$$

np. ⟨[1.23, 2.56], 1⟩; ⟨[1001000], 2⟩; ⟨(duży, niebieski, trójkąt), trójkąty⟩; ⟨(słoneczna, zimna, duża, silny), pogoda brzydka⟩

Zadanie ucznia (uczenie z nadzorem) – znalezienie hipotezy (wiedzy), która jest spójna (zgodna) z pojęciem docelowym (klasą) dla przykładów trenujących i która klasyfikuje również inne przykłady z jak najmniejszym błędem.

Hipoteza jest funkcją przypisującą przykładom ich klasy – $h : X \rightarrow C$, gdzie X jest dziedziną (zbiorem obiektów), a C jest zbiorem ich klas.

Dla zadania "punkty na płaszczyźnie" hipoteza może mieć postać:

Jeśli znak(x_1) = "+" i znak(x_2) = "+" to $\hat{d}$ = 1 (punkty z pierwszej ćwiartki)

Jeśli znak(x_1) = "–" i znak(x_2) = "+" to $\hat{d}$ = 2 (punkty z drugiej ćwiartki)

Jeśli znak(x_1) = "–" i znak(x_2) = "–" to $\hat{d}$ = 3 (punkty z trzeciej ćwiartki)

Jeśli znak(x_1) = "+" i znak(x_2) = "–" to $\hat{d}$ = 4 (punkty z pierwszej ćwiartki)

Dla zadania "n-elementowe łańcuchy binarne" hipoteza może mieć postać:

$\hat{d} = x_1 + x_2 + \ldots + x_n$

Hipoteza uzyskana w wyniku uczenia się pojęć może być stosowana do klasyfikacji innych przykładów z dziedziny. Uczeń na wejściu otrzymuje przykład **x**, a na wyjściu podaje jego klasę $\hat{d}$.

Prezentacja przykładu na wejściu nazywa się zapytaniem, a jego klasyfikacja przez ucznia – odpowiedzią na zapytanie.

Zbiór trenujący – zbiór przykładów etykietowanych $T = \{\langle \mathbf{x}_1, d_1 \rangle, \langle \mathbf{x}_2, d_2 \rangle, \ldots, \langle \mathbf{x}_N, d_N \rangle\}$

L.p.	**x**		Klasa
	x_1	x_2	d
1	2.65	1.26	1
2	–34.89	3.56	2
…	…	…	…
N	5.87	–7.94	4

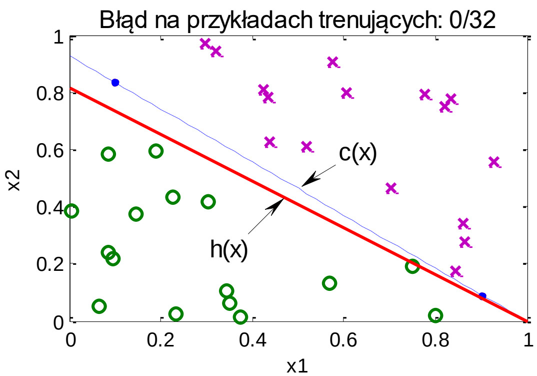
L.p.	**x**				Klasa
	x_1	x_2	x_3	x_4	d
1	słoneczna	zimna	duża	silny	brzydka
2	słoneczna	umiark.	normalna	słaby	ładna
…	…	…	…	…	…
N	deszczowa	zimna	duża	silny	brzydka

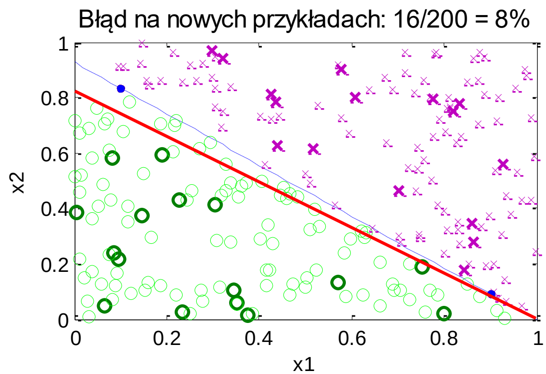
BŁĄD W UCZENIU SIĘ POJĘĆ

Błąd klasyfikacji – stosunek liczby niepoprawnie sklasyfikowanych przykładów do liczby wszystkich przykładów:

$$E(h) = \frac{|\{\mathbf{x} \in P \,|\, h(\mathbf{x}) \neq d)\}|}{|P|}$$

gdzie: |.| – moc zbioru, $P \in X$ – zbiór przykładów, $h(\mathbf{x})$ – klasa przypisana przez ucznia.





TWORZENIE POJĘĆ

Uczenie bez nadzoru – klasy przykładów są nieznane (przykłady nieetykietowane).

Uczeń grupuje samodzielnie zaobserwowane przykłady w grupy zgodnie z pewnymi kryteriami podobieństwa.

Hipoteza – funkcja odwzorowująca przykłady na zbiór grup – $h : X \rightarrow C_h$, gdzie C_h jest zbiorem grup utworzonym przez ucznia.

Hipoteza określa:

- jak są tworzone grupy
- jak do grup przypisane są przykłady

Odpowiedzią na zapytanie jest wskazanie przez ucznia grupy przykładu prezentowanego na wejściu

Zbiór trenujący – zbiór przykładów nieetykietowanych $T = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$

Uczenie się funkcji odwzorowującej przykłady na zbiór liczb rzeczywistych.

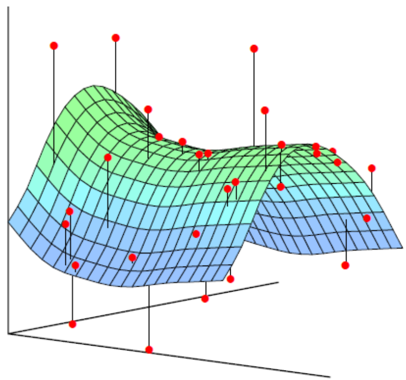
Przykłady trenujące – argument funkcji + wartość funkcji: $\langle \mathbf{x}, y \rangle$, gdzie $y = f(\mathrm{x}) + \varepsilon$, ε – błąd

Zadanie ucznia (uczenie z nadzorem) – znalezienie hipotezy dobrze przybliżającej nieznaną funkcję docelową $f : X \to \mathbb{R}$ dla przykładów trenujących i innych z dziedziny.

Hipoteza – funkcja przekształcająca przykłady w zbiór liczb rzeczywistych – $h : X \to \mathbb{R}$.

Zbiór trenujący – zbiór przykładów etykietowanych $T = \{\langle \mathbf{x}_1, y_1 \rangle, \langle \mathbf{x}_2, y_2 \rangle, \ldots, \langle \mathbf{x}_N, y_N \rangle\}$

L.p.	**x**		y
	x_1	x_2	
1	5.5	6.0	275.375
2	–4.5	–7.0	–261.625
…	…	…	…
N	0.5	8.0	257.125



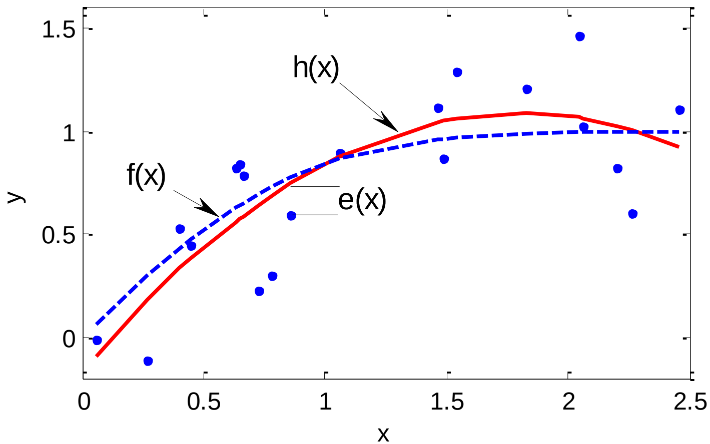
Błędy aproksymacji

Średni błąd względny: $$E(h)=\frac{1}{|P|}\sum_{\mathbf{x}\in P}\frac{|f(\mathbf{x})-h(\mathbf{x})|}{f(\mathbf{x})}=\mathrm{mean}\left(\frac{|e(\mathbf{x})|}{f(\mathbf{x})}\right)$$

Błąd średniokwadratowy (MSE): $$E(h)=\frac{1}{|P|}\sum_{\mathbf{x}\in P}(f(\mathbf{x})-h(\mathbf{x}))^2=\mathrm{mean}(e^2(\mathbf{x}))$$

gdzie: |.| – moc zbioru, $P \in X$ – zbiór przykładów, y – wartość pożądanej odpowiedzi, $h(\mathbf{x})$ – odpowiedź ucznia.

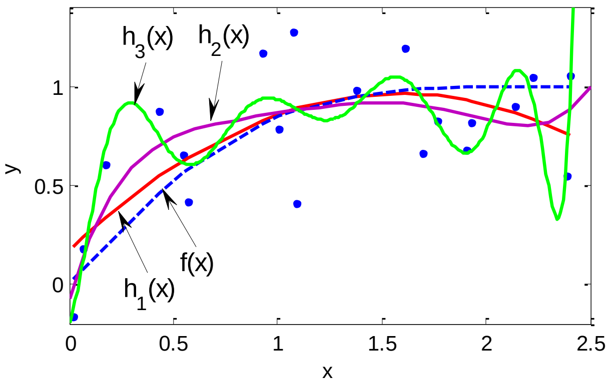
Ponieważ zwykle nie znamy prawdziwej wartości funkcji docelowej $f(\mathbf{x})$, w jej miejsce w powyższych wzorach podstawiamy y ($y = f(x) + \varepsilon$)

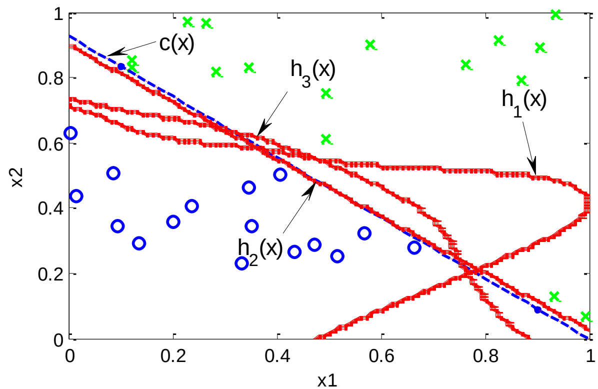


PROBLEM NADMIERNEGO DOPASOWANIA

Generalizacja (uogólnianie) – zdolność SUS do poprawnych odpowiedzi na przykłady spoza zbioru trenującego. Aby osiągnąć najlepszą generalizację złożoność hipotezy powinna odpowiadać złożoności pojęcia/funkcji docelowej.

Hipoteza jest nadmiernie dopasowana do zbioru trenującego (przeuczona), gdy istnieje inna hipoteza o większym błędzie na zbiorze trenującym, ale o mniejszym błędzie generalizacji (na nowych przykładach).





PROBLEM NADMIERNEGO DOPASOWANIA

Zagrożenie przeuczenia – SUS dopasowuje hipotezę do przykładów uczących, często zaszumionych. Charakterystyczne cechy pojęcia/funkcji docelowej pozostają niewykryte.

Przeuczeniu sprzyja:

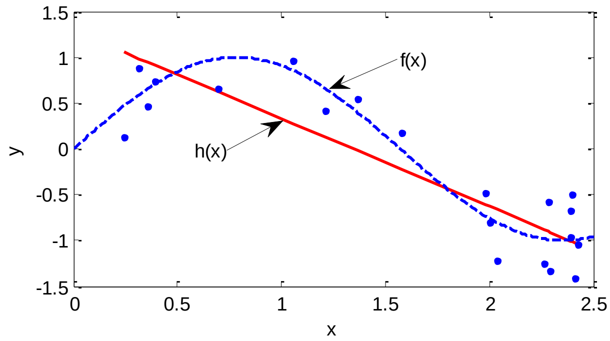
- nadmiernie złożony (elastyczny) model (bogate przestrzenie hipotez)
- deficyt danych

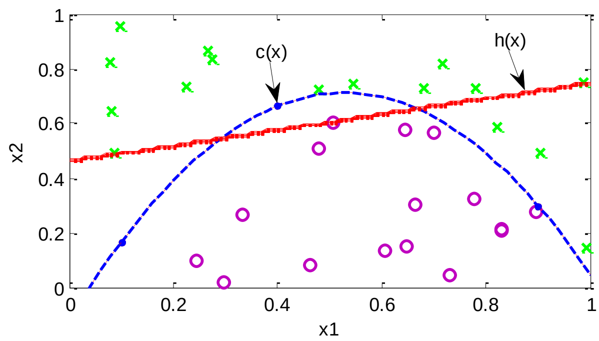
Zapobieganie nadmiernemu dopasowaniu:

- kontrola dopasowania hipotezy na przykładach walidacyjnych
- uwzględnienie złożoności hipotez w kryterium wyboru najlepszej hipotezy (regularyzacja)
- adaptacyjny dobór złożoności hipotezy (struktury modelu)
- komitety modeli
- dodanie składnika losowego do danych uczących
- wzbogacenie zbioru trenującego o nowe przykłady

PROBLEM NIEDOUCZENIA

Złożoność hipotezy jest mniejsza niż złożoność funkcji docelowej.





Zapobieganie niedouczeniu:

- rozbudowanie modelu (wzbogacenie przestrzeni hipotez)
- adaptacyjny dobór złożoności hipotezy (struktury modelu)

SELEKCJA NAJLEPSZEJ HIPOTEZY

Zbiór przykładów dzielimy na trzy rozłączne podzbiory:

- zbiór trenujący,
- zbiór walidacyjny i
- zbiór testowy.

Przykłady do tych zbiorów wybieramy losowo, np. 50% przykładów do zbioru trenującego, 25% – do zbioru walidacyjnego, 25% – do zbioru testowego.

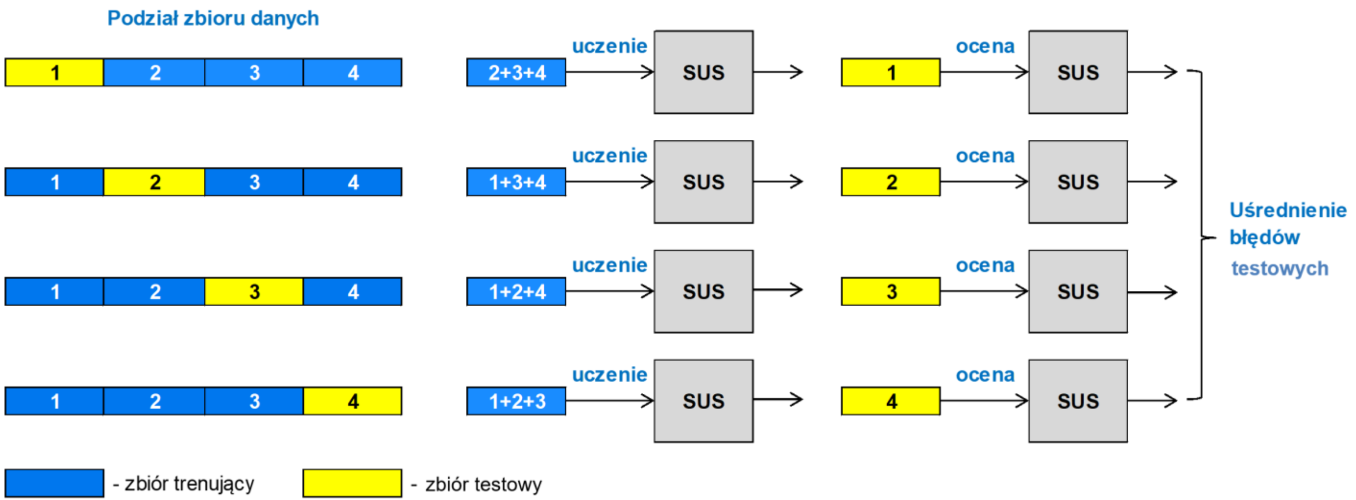
Użycie zbiorów:

- SUS uczy się na zbiorze trenującym.
- Błąd generalizacji hipotezy w trakcie uczenia szacujemy na zbiorze walidacyjnym, różnym od zbioru trenującego.
- Ostateczny błąd generalizacji SUS mierzymy na zbiorze testowym.

Hipoteza o najmniejszym błędzie testowym jest najlepsza.

ESTYMACJA BŁĘDU GENERALIZACJI

Kroswalidacja – procedura uczenia i oceny SUS, w której zbiór przykładów dzieli się losowo na *m* równolicznych, rozłącznych podzbiorów. Następnie kolejno każdy z tych podzbiorów bierze się jako zbiór testowy, a pozostałe razem jako zbiór trenujący, którym uczy się SUS. Błąd generalizacji szacuje się uśredniając błędy testowe obliczane po każdej z *m* sesji treningowych.



Postać modelu:

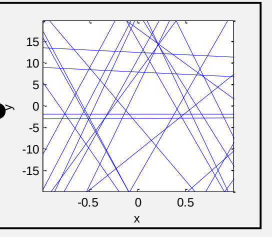
$$g(\mathbf{x}\,|\,\theta)$$

gdzie: **x** – wejścia, θ – parametry.

$g(.)$ reprezentuje klasę hipotez H. Konkretne wartości parametrów θ reprezentują konkretną hipotezę $h \in H$.

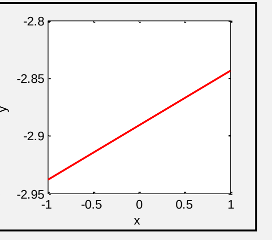
Przykład: model liniowy

Klasa hipotez: $g(\mathbf{x}\,|\,\theta) = ax + b$



$\theta = [a, b]$

Konkretna hipoteza: $g(\mathbf{x}\,|\,[0.0472, -2.8912]) = 0.0472\,x - 2.8912$



Postać modelu ustala projektant na podstawie przewidywanej postaci funkcji docelowej i własnych doświadczeń (obciążenie indukcyjne).

Kryterium oceny modelu:

- błąd generalizacji
- złożoność (liczba parametrów)

Procedura optymalizacji (uczenia) modelu:

Znaleźć wartości parametrów minimalizujące kryterium oceny

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} E(\theta \mid X)$$

Metody optymalizacji:

- Analityczne (w zadaniach regresji)
- Gradientowe
- Stochastyczne (algorytmy ewolucyjne i rojowe)
- ...