למידה חישובית 1 (096411)

חורף תשפ"א 2020/21

תרגיל בית 4

תאריך אחרון להגשה: 12/01/2021 בשעה 23:55

הוראות – יש לקרוא לפני תחילת העבודה על התרגיל

- **ההגשה בזוגות בלבד**. אישורים פרטניים להגשה שאיננה בזוגות חייבים לעבור אישור ע"י סגל הקורס. הגשה שאינה בזוגות ולא אושרה ע"י סגל הקורס **תקבל ציון 0 באופן אוטומטי**.
- עליכם להגיש קובץ pdf בודד עם השם **HW4_ID1_ID2.pdf** **כאשר ID1 ו-ID2 הם מספרי הסטודנט שלכם.**
  - הגשות (מאושרות) שאינן בזוגות – על שם הקובץ להיות בפורמט הבא הבא: **HW4_ID1.pdf** או **HW4_ID1_ID2_ID3.pdf**.
- רק אחד מחברי הצוות צריך להגיש את המטלה.
- עליכם לצרף את כל הקוד וכל הגרפים עבור **כל** השאלות במטלה. ניתן לצרף מחברת **סטטית** של jupyter / google colab (בפורמט pdf **בלבד**). הסברים מילוליים יכולים להיכתב בתוך תאי טקסט.
- עליכם לאחד את כל השאלות לכדי **קובץ pdf בודד.**
- קוד חייב להיות קריא, תמציתי ומתועד היטב. יש להקפיד על שימוש בשמות משמעותיים למשתנים.
- כל גרף חייב להכיל את האלמנטים הבאים (לפחות): מקרא (legend), כותרות לצירים ויחידות (ticks).
- **העתקות** – העתקות מחברים לקורס ו/או רפרנסים משנים קודמות יגררו ציון 0 על כל התרגיל וכנראה גם דיון משמעתי. זה בסדר להתייעץ עם חברים לקורס, אבל אנחנו מצפים שתכתבו את התשובות שלכם בעצמכם.
- יש להשתמש בפורום במודל לטובת שאלות על התרגיל. השאלות שלכם עוזרות לסטונדטים אחרים בקורס. באופן כללי, שאלות במייל על התרגיל לא ייענו (אלא אם כן יש סיבה מוצדקת לכך).

בהצלחה!

שאלה 1

בהרצאות למדנו על **Regularized Loss Minimization (RLM)** וראינו כיצד באמצעות שיטה זו ניתן לקבל לומדים יציבים למתן את תופעת ה-**overfitting**.

תהי $l(w,x,y)$ פונקציה קמורה ב-**w** (כאשר אנו מתייחסים ל x,y כקבועים). יהי $S=\{(x_i,y_i\}_i^m$ מדגם אימון ותהי (x',y') תצפית נוספת. בהינתן S, נגדיר את: $f_s(w)=L_S(w)+\lambda\parallel w\parallel^2$ כאשר: $L_S(w)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^m l(w,x_i,y_i)$. כמו כן נגדיר את $A(S)=argmin_w f_s(w)$. בנוסף, בהינתן $i\in\{1,\dots,m\}$ נגדיר את $S^{(i)}$ באופן הבא:

$$S^{(i)}=\{(x_1,y_1),\dots,(x_{i-1},y_{i-1}),(x',y'),(x_{i+1},y_{i+1}),\dots(x_m,y_m)\}$$

ונגדיר את $A(S^{(i)})=argmin_w f_{s^{(i)}}(w)$.

א. הסבירו במילותיכם מה הוא $S^{(i)}$ ומה הוא $A(S)$.

ב. הסבירו את נכונות השוויון הבא לכל u,v,i:

$$f_S(v)-f_s(u)=L_{s^{(i)}}(v)+\lambda\parallel v\parallel^2-\left(L_{s^{(i)}}(u)+\lambda\parallel u\parallel^2\right)$$
$$+\frac{l(v,x_i,y_i)-l(u,x_i,y_i)}{m}+\frac{l(u,x',y')-l(v,x',y')}{m}$$

ג. בשימוש הטענה הנ"ל, הסבירו מדוע אי השוויון הבא נכון:

$$f_S\left(A(S^{(i)})\right)-f_S(A(S))\le\frac{l(A(S^{(i)}),x_i,y_i)-l(A(S),x_i,y_i)}{m}+\frac{l(A(S),x',y')-l(A(S^{(i)}),x',y')}{m}$$

ד. הוכיחו כי:

$$\lambda\parallel A(S^{(i)})-A(S)\parallel^2\ \le\frac{l(A(S^{(i)}),x_i,y_i)-l(A(S),x_i,y_i)}{m}+\frac{l(A(S),x',y')-l(A(S^{(i)}),x',y')}{m}$$

ה. הוכיחו כי אם $l(\cdot)$ היא פונקציה $\rho-Lipschitz$ אזי:

$$\parallel A(S^{(i)})-A(S)\parallel\le\frac{2\rho}{\lambda m}$$

ו. הוכיחו כי אם $l(\cdot)$ היא פונקציה $\rho-Lipschitz$ אזי:

$$l(A(S^{(i)}),x_i,y_i)-l(A(S),x_i,y_i)\le\frac{2\rho^2}{\lambda m}$$

ז. כעת נגדיר $L_D(w)=\mathbb{E}_{(x,y)\sim D}[l(w,x,y)]$ ו-$L_S(w)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^m[l(w,x_i,y_i)]$. הסבירו במילותיכם מה משמעות כל אחת מההגדרות. קבעו האם בהינתן מדגם אימון S ולומד w ניתן לחשב את ערך הביטוי או לא. נמקו.

ח. כעת הניחו כי $i\sim U(m)$ וכי ניתן לדגום את $(x',y')\sim D$ באופן בלתי תלוי ב-S. הוכיחו כי:

$$\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[L_D(A(S))-L_S(A(S))]\le\frac{2\rho^2}{\lambda m}$$

שאלה 2

בשאלה זו נדון במשמעות של מטריקות שערוך כדוגמת ***recall*** ו- ***precision*** ונדגים שרטוט של עקומת ***ROC*** בבעיות סיווג בינאריות.

א. כתבו את הנוסחאות של כל אחת ממטריקות השערוך הבאות: ***FPR, recall, precision***. השתמשו בסימונים מתוך מטריצת הבלבול (***TP, TN, FP, FN***). הסבירו במילותיכם מה כל מטריקה מייצגת. לכל מטריקה ציינו אם היינו רוצים להגדיל או להקטין אותה.

ב. תנו דוגמה (במילים) למשימת סיווג בינארית בה ה *recall* חשוב יותר מה *precision*. הצדיקו את ההצעה שלכם.

ג. תנו דוגמה (במילים) למשימת סיווג בינארית בה ה *precision* חשוב יותר מה *recall*. הצדיקו את ההצעה שלכם.

ד. כעת הניחו שאימנתם מודל רגרסיה לוגיסטית על מדגם אימון בעל 2 פיצ'רים - x_1, x_2. לאחר האימון התקבלו המשקולות הבאות:

$$w_0 = 0.1, w_1 = -0.1, w_2 = 0.3$$

מדגם האימון נראה כך:

i	1	2	3	4	5
$\boldsymbol{x_{i1}}$	10	2	15	2	8
$\boldsymbol{x_{i2}}$	2	3	1	1	1
$\boldsymbol{y_i}$	0	1	0	0	1

ד. כתבו את הנוסחה עבור $P_w(y = 1|x)$ עם המשקולות הנ"ל וחשבו את $P_w(y_i = 1|x_i)$ לכל אחת מהתצפיות $i \in \{1, \dots, 5\}$.

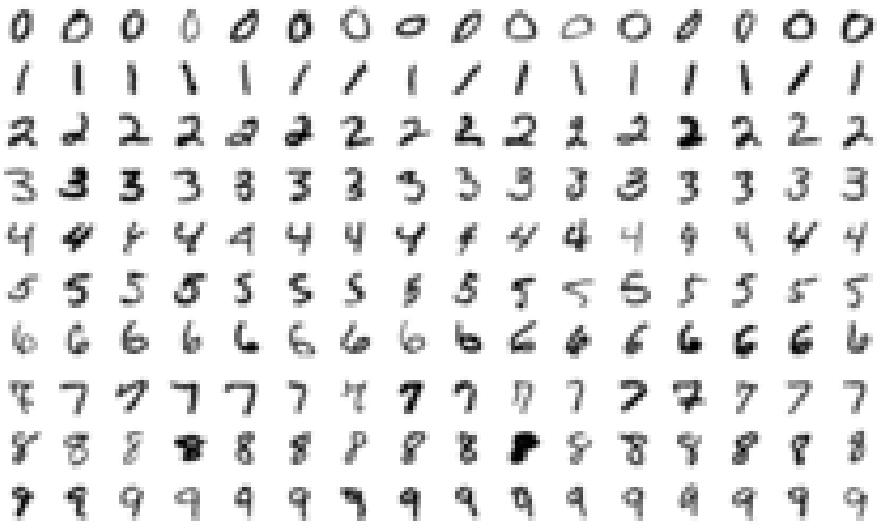
ה. שרטטו (**בדף ועט או באמצעי אלקטרוני שאיננו תכנותי**) את עקומת ה-*ROC* עבור המודל והתצפיות הנ"ל. יש לשרטט בנוסף את העקומה עבור מודל אקראי. שימו לב כי יש לחשב את ערכי ה ***FPR*** וה-***TPR*** עבור שרטוט זה. פרטו את חישוביכם.

ו. חשבו את ערך המטריקה *AUC-ROC*. פרטו את החישוב שלכם. האם נדמה שהמודל טוב יותר ממודל אקראי? נמקו.

שאלה 3

בשאלה זו ניישם שימוש ב cross validation על סט הנתונים MNIST. סט הנתונים MNIST מכיל ב-70,000 תמונות שחור לבן של ספרות (0-9) מצוירות בכתב יד אנושי. כל תמונה מלווה בתיוג של הספרה שמופיעה בה.

דוגמה מתוך סט הנתונים (ללא תיוגים):



כל תמונה מיוצגת ע"י מטריצה דו מימדית מגודל 28x28 עם ערכים בין 0 ל-255 (כאשר 0 מייצג פיקסל שחור לחלוטין ו-255 מייצג פיקסל לבן לחלוטין). בשאלה זו נעבוד עם ייצוג **שטוח** של המטריצות הדו מימדיות, כלומר כל תמונה תיוצג ע"י וקטור חד מימדי מגודל 28*28=784. נשתמש בקומבינציות שונות של ***kernels*** והיפר-פרמטרים שונים עבור אלגוריתם ***SVM*** ע"מ לקבוע איזה מסווג צפוי להיות הטוב ביותר.

א. השתמשו בקטע הקוד הבא בכדי לטעון 8000 תמונות ותוויות מתוך סט הנתונים ***MNIST***:

```
import numpy as np
np.random.seed(42)

from sklearn.datasets import fetch_openml

def fetch_mnist():
  # Download MNIST dataset
  X, y = fetch_openml('mnist_784', version=1, return_X_y=True)
  # Randomly sample 8000 images
  np.random.seed(2)
  indices = np.random.choice(len(X), 8000, replace=False)

  X, y = X[indices], y[indices]
  return X, y

X, y = fetch_mnist()
print(X.shape, y.shape)
```

יש לוודא שקטע הקוד מדפיס את הפלט הבא: `(8000,)` `(8000, 784)`. ייתכן והטעינה תיקח מספר שניות.

ב. הציגו את 10 התצפיות (תמונות) הראשונות מהמדגם ***X*** באמצעות הפונקציה ***plt.imshow*** עם הארגומנט `cmap="binary"`. שימו לב כי יש לשנות את הצורה (***reshape***) של כל תצפית ב-***X*** בחזרה למימד 28*28 על מנת להציג אותה באמצעות הפונקציה ***imshow***. לכל תמונה, הציגו בסמוך אליה את הלייבל המתאים שלה מ ***y***.

ג. ממשו פונקציה בשם **SVM _results(X_train, y_train, X_test, y_test)** כאשר:

- $X_{train} \in \mathbb{R}^{m_{train} \times 784}$ – מטריצת הנתונים עבור סט האימון (מטיפוס numpy nd-array)
- $y_{train} \in \mathbb{R}^{m_{train}}$ – וקטור הלייבלים עבור סט האימון (מטיפוס numpy nd-array)
- $X_{test} \in \mathbb{R}^{m_{test} \times 784}$ – מטריצת הנתונים עבור סט המבחן (מטיפוס numpy nd-array)
- $y_{test} \in \mathbb{R}^{m_{test}}$ – וקטור הלייבלים עבור סט המבחן (מטיפוס numpy nd-array)

על הפונקציה להשתמש בפונ' **cross_validation_error(X, y, model, folds)** שמימשתם בתרגיל בית 3 עם folds=5 בכדי לחשב את שגיאות האימון והולידציה הממוצעת של מסווגי SVM עם היפר-הפרמטרים הבאים:

- קרנל לינארי עם ערך C ברירת מחדל
- קרנל פולינומי עבור ערכי $d \in \{2,4,6,8,10\}$
- קרנל RBF עבור ערכי $\gamma \in \{0.001, 0.01, 0.1, 1.0, 10\}$

סה"כ **11** מודלים שונים. בנוסף, לכל מודל מהנ"ל, הפונקציה צריכה להתאים את אותו המודל עבור כל מדגם **האימון** ולחשב את שגיאת **המבחן**. הפונקציה צריכה להחזיר מילון (dictionary) באשר המפתחות (keys) הם שמות המודל (לדוגמא: *'SVM_poly_4'* והערכים (values) הינם tuple מהצורה הבאה:

(average_train_error, average_validation_error, test_error)

באשר 2 האלמנטים הראשונים מחושבים ע"י 5-fold CV והאלמנט האחרון מחושב ע"י מודל בודד שמתאמן על כל מדגם האימון.

שימו לב כי בדומה לתרגיל בית 3, במימוש של הפונקציה **cross_validation_error** **אסור** לכם להשתמש בפונקציות עזר מהספריה sklearn. בפרט אסור לכם להשתמש בפונקציה cross_val_score מתוך sklearn.

עם זאת, בפונקציה **SVM _results** מותר (וכדאי) להשתמש בפונקציות ומחלקות מ sklearn.

ד. חלקו את סט הנתונים לסט אימון וסט מבחן באמצעות הפקודה הבאה:

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2, random_state=42)
```

הריצו את הפונקציה מסעיף ב' על הנתונים שטענתם בסעיף א'. ייתכן והריצה תיקח זמן (~שעה).

ציירו גרף עמודות (bar plot) המציג את התוצאות של כל ניסוי. כלומר, ציר ה-x יתאר את מודלי הSVM השונים שאימנם וציר ה-y יתאר את שגיאת האימון הממוצעת, שגיאת הולידציה הממוצעת ושגיאת המבחן (סה"כ 11 **שלשות** של עמודות). יש להקפיד על צבע שונה לכל סוג של עמודה (אימון / ולידציה / מבחן).

מיהו המודל הטוב ביותר לפי שיטת CV? מיהו המודל הטוב ביותר על מדגם המבחן? האם מדובר באותו המודל?