Úvod do machine learning v R

—

17VSADR – Skriptování a analýza dat v jazyce R

Lubomír Štěpánek

Katedra biomedicínské informatiky
Fakulta biomedicínského inženýrství
České vysoké učení technické v Praze

10. prosince 2018

Rychlý úvod

- machine learning (*strojové učení*) je velká množina algoritmů a technik, které umožňují počítačovému systému se samostatně učit (měnit jeho vnitřní stav, aniž by právě k tomu byl explicitně naprogramován)
- algoritmy
  - s učitelem
  - bez učitele
  - kombinace obou předchozích a další
- základní typy úloh
  - regresní úloha
  - klasifikační úloha
  - shlukování

Některé algoritmy v rámci klasifikační úlohy

Bayesovská naïvní klasifikace

- relativně jednoduchý algoritmus
- MAP princip (Maximum-A-Posteriori-Probability) - prvek je zařazen do třídy, která má na konci nejvyšší pravděpodobnost
- buď $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m, c_i)$ jedno z pozorování v testovací množině popsané m atributy a třídou c_i pro jedno pevné $i \in \{1, 2, \ldots, k\}$
- pak pravděpodobnost, že bude x správně zařazeno do své třídy c_i, je

$$p(c_i \mid x) = \frac{p(x \mid c_i)p(c_i)}{p(x)}$$

- protože $p(x) = \frac{1}{|\text{trénovací množina}|} = konst.$ a pro daný dataset i $p(c_i) = \frac{|\{y\text{: } y \text{ je třídy } c_i\}|}{|\text{trénovací množina}|} = konst.$, je

$$p(c_i \mid x) \propto p(x \mid c_i)$$

Bayesovská naïvní klasifikace

- za předpokladu nezávislosti atributů je

$$p(x \mid c_i) \propto \prod_{j=1}^{n} p(x_j \mid c_i),$$

kde $n = |\text{testovací množina}|$, u nespojitých atributů odhadneme

$$p(x_j \mid c_i) = \frac{|\{y\text{: } y \in \text{trén. množ. } \wedge\ j\text{-tý atribut } y \text{ je } x_j \wedge \text{třída } y \text{ je } c_i\}|}{|\{z\text{: } z \in \text{trénovací množina} \wedge \text{třída } z \text{ je } c_i\}|},$$

u spojitých použijeme fitting normálním rozložením a $\phi(x_j \mid c_i)$

- x je třídy c_i tak, že

$$i = \underset{i \in \{1,2,\ldots k\}}{\arg\max} \{p(x \mid c_i)\}$$

Bayesovská naïvní klasifikace

- grafická interpretace typická pro Bayesův naïvní klasifikátor vlastně není
- výstupem pro hodnocení přesnosti predikce modelu je konfuzní matice

		přiřazená hodnota			
		1	2	$\dots$	k
skutečná hodnota	1	n_{11}	n_{12}	$\cdots$	n_{1k}
	2	n_{21}	n_{22}	$\cdots$	n_{2k}
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
	k	n_{k1}	n_{k2}	$\cdots$	n_{kk}

- přesnost (*accuracy*) vyčíslíme jako podíl stopy a součtu konfuzní matice

$$accuracy = \frac{\sum_{i=1}^{k} n_{ii}}{\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{k} n_{ij}}$$

Bayesovská naïvní klasifikace v R

- knihovna `e1071`
- funkce `naiveBayes()` s argumenty
  - `formula` - závislá proměnná a na kterých prediktorech závisí
  - `data` - dataframe trénovací množiny
- funkce `predict()` s argumenty
  - `object` - objekty typu model naïvní Bayesovské klasifikace
  - `newdata` - dataframe testovací množiny
  - `type` - když `"class"`, jsou vráceny predikované třídy, když `"raw"`; jsou vrácena maxima aposteriorních pravděpodobností
- funkce `table()` pro konfuzní matici

Bayesovská naïvní klasifikace v R

```
## inicializuji balíček "e1071"
suppressWarnings(library("e1071"))

## loaduji data "HouseVotes84"
data(HouseVotes84, package = "mlbench")
head(HouseVotes84[, 1:16], 4)
```

```
##        Class   V1 V2 V3   V4   V5 V6 V7 V8 V9 V10  V11 V12 V13 V14 V15
## 1 republican    n  y  n    y    y  y  n  n  n   y <NA>   y   y   y   n
## 2 republican    n  y  n    y    y  y  n  n  n   n    n   y   y   y   n
## 3   democrat <NA>  y  y <NA>    y  y  n  n  n   n    y   n   y   y   n
## 4   democrat    n  y  y    n <NA>  y  n  n  n   n    y   n   y   n   n
```

```
## náhodně rozděluji data "HouseVotes84" do trénovací
## a testovací množiny
set.seed(2016)

train_set_indices <- sample(1:dim(HouseVotes84)[1],
                            floor(0.6 * dim(HouseVotes84)[1]),
                            replace = FALSE)

train_set <- HouseVotes84[train_set_indices, ]
test_set <- HouseVotes84[-train_set_indices, ]
```

Bayesovská naïvní klasifikace v R

```
## vytvářím model
my_bayes <- naiveBayes(Class ~ ., data = train_set)

## a dívám se na první z predikovaných hodnot
head(predict(my_bayes, test_set, type = "class"))
```

```
## [1] republican democrat   democrat   republican republican republican
## Levels: democrat republican
```

```
head(predict(my_bayes, test_set, type = "raw"), 2)
```

```
##          democrat   republican
## [1,] 2.506697e-08 0.9999999749
## [2,] 9.997932e-01 0.0002068392
```

```
## vytvářím a dívám se na konfuzní matici
(confusion_matrix <- table(test_set$Class, predict(my_bayes, test_set)))
```

```
##
##              democrat republican
##   democrat         89         13
##   republican        5         67
```

Bayesovská naïvní klasifikace v R

```
## počítám přesnost
sum(diag(confusion_matrix)) / sum(confusion_matrix)
```

```
## [1] 0.8965517
```

Rozhodovací stromy

- princip: trénovací množina je postupně rozdělována na stále menší podmnožiny tak, aby v každé podmnožině převládaly prvky jedné třídy
- tedy princip „rozděl a panuj“ („divide and conquer“), metoda známa jako *top-down induction of decision tree* (TDIDT)
- v každé iteraci vyberou některý z atributů a určí její hodnotu tak, že trénovací množina je pak hodnotou této proměnné „nejlépe“ rozdělena ve smyslu některé diskriminační metriky
- vzniká tak graf typu strom

Rozhodovací stromy

- metriky, které jsou pro atributy maximalizovány
  - Giniho index

$$\textit{Giniho index}_i = 1 - \sum_{j=1}^{k} p_{ij}^2$$

  - informační zisk

$$\textit{informační zisk}_i = -\sum_{j=1}^{k} p_{ij} \log_2 p_{ij}$$

  - deviance

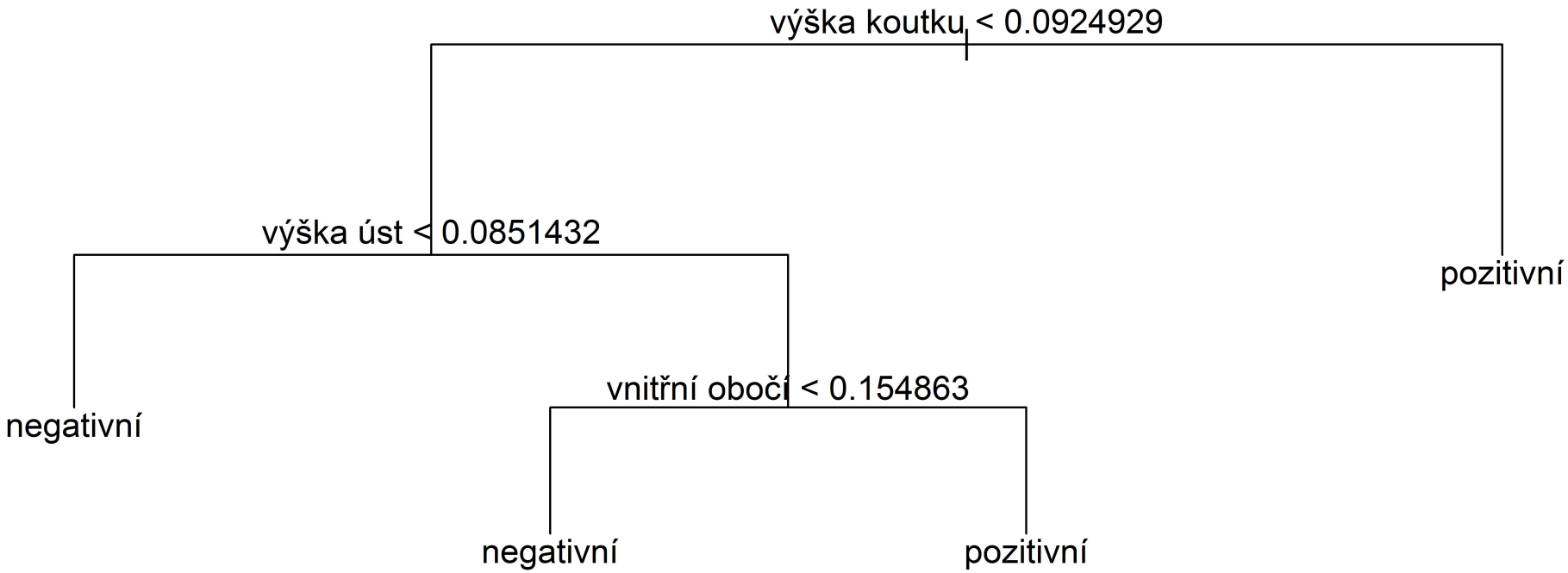
$$\textit{deviance}_i = -2 \sum_{j=1}^{k} n_{ij} \ln p_{ij}$$

- kde p_{ij} je pravděpodobnost existence j–té třídy v i–tém uzlu, n_{ij} je počet pozorování j–té třídy v podmnožině i–tého uzlu, k je počet tříd

Rozhodovací stromy

- *pruning* - prořezání výsledného stromu (tj. neuvažování koncových větví stromu od určitého stupně větvení)
  - pomocí k-násobné křížové validace
  - nebo porovnáním nevysvětlené variability vs. počtu uzlů stromu (v diagramu *elbow fenomén*)
  - apod.

Rozhodovací stromy



Rozhodovací stromy v R

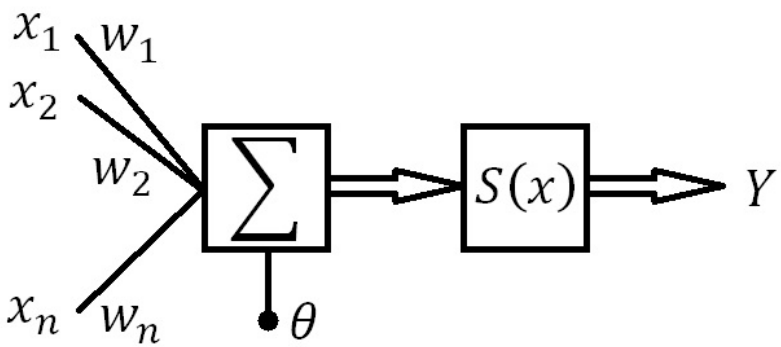
- knihovna `tree`
- funkce `tree()` s argumenty
  - `formula` - závislá proměnná a na kterých prediktorech závisí
  - `data` - dataframe trénovací množiny
- funkce `predict()` s argumenty
  - `object` - objekty typu model naïvní Bayesovské klasifikace
  - `newdata` - dataframe testovací množiny
  - `type` - když `"class"`, jsou vráceny predikované třídy, když `"raw"`; jsou vrácena maxima aposteriorních pravděpodobností
- funkce `table()` pro konfuzní matici

Neuronové sítě

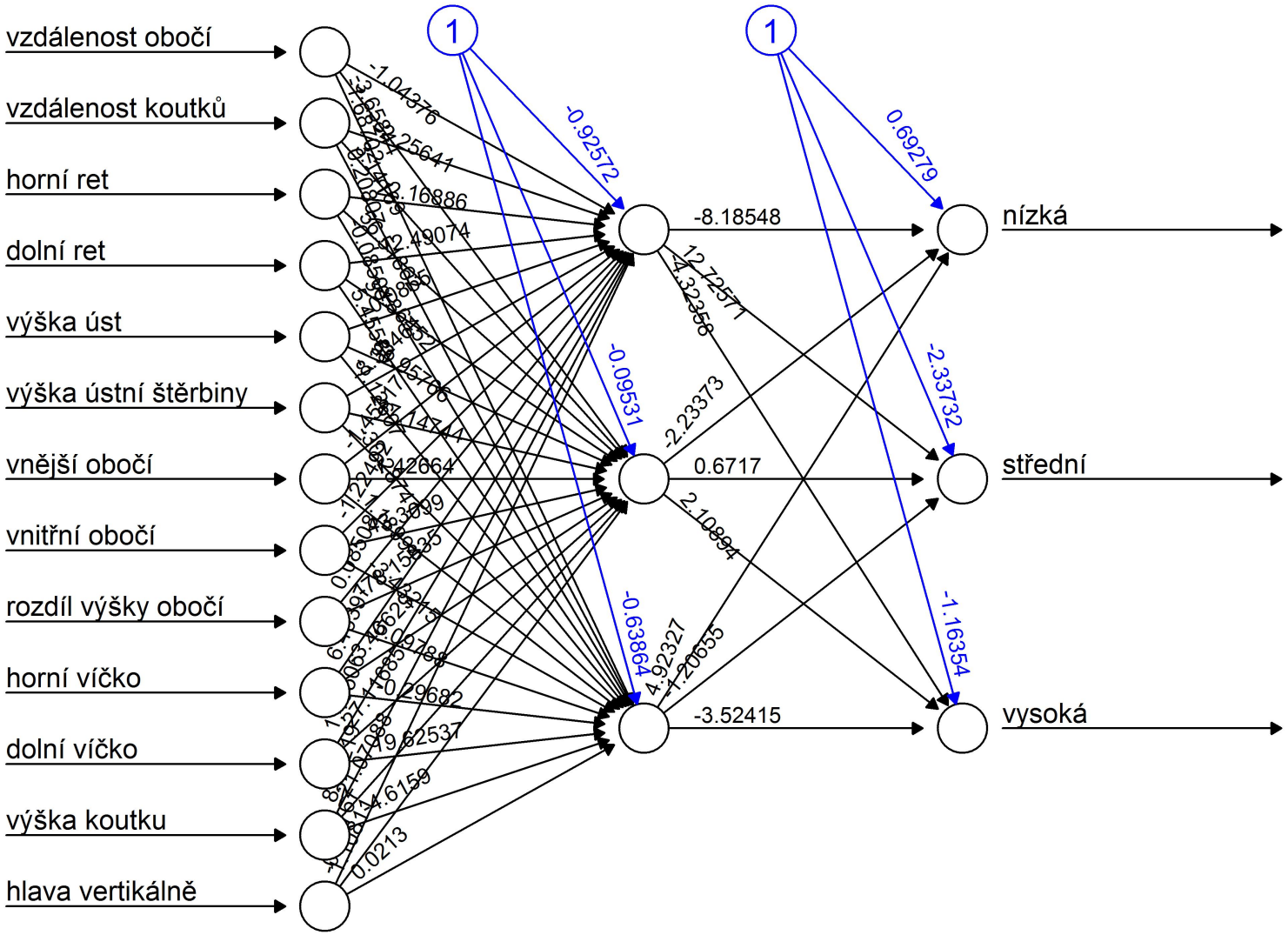
- v padesátých letech navržen první model McCullochem a Pittsem

$$Y = S(\sum_{i=1}^{n}(w_i x_i) + \theta),$$

kde x_i jsou vstupy neuronu, w_i jsou synaptické váhy pro $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$, θ je práh, $S(x)$ je přenosová, též aktivační funkce neuronu a Y je výstup neuronu



Neuronové sítě



Neuronové sítě v R

- knihovna `neuralnet`
- funkce `neuralnet()` s argumenty
  - `formula` - závislá proměnná a na kterých prediktorech závisí
  - `hidden` - počet skrytých vrstev
  - `linear.output` - zda se jedná o spojitou predikovanou proměnnou
  - `data` - dataframe trénovací množiny
  - `threshold` - prah pro prahovou funkci
- funkce `predict()` s argumenty
  - `object` - objekty typu model naïvní Bayesovské klasifikace
  - `newdata` - dataframe testovací množiny
  - `type` - když `"class"`, jsou vráceny predikované třídy, když `"raw"`; jsou vrácena maxima aposteriorních pravděpodobností
- funkce `table()` pro konfuzní matici

Hands-on! Your turn!

- samplová data, skripty a tato prezentace na adrese

  https://github.com/LStepanek/Uvod-do-machine-learning-v-R/

Děkuji za pozornost!

lubomir.stepanek@fbmi.cvut.cz