

Föreläsning 1 - Introduktion till Data Mining och Maskininlärning

Josef Wilzen

2021-08-23

Outline

1 Introduktion

- Kursupplägg
- Introduktion till Data Mining och Maskininlärning

2 Maskininlärningsprocessen

3 Översikt av metoder

4 Modellval och generalisering

Outline

1 Introduktion

- Kursupplägg
- Introduktion till Data Mining och Maskininläring

2 Maskininlärningsprocessen

3 Översikt av metoder

4 Modellval och generalisering

Kursupplägg

- Lärare och examinator: Josef Wilzén
- Upplägg
 - ▶ Föreläsningar
 - ▶ Datorövningar/labbar
 - ▶ Projektarbete = 2.5 hp (U,G)
 - ▶ Tenta = 5 hp (U,G,VG)

Kursupplägg

- Föreläsningar
 - ▶ Ny information och metoder presenteras
- Datorövningar
 - ▶ Parvis lösning av övningar som behandlar tidigare material
- Projektarbete:
 - ▶ Större uppgift där ni ska analysera data mer självständigt
- Seminarium
 - ▶ Projektarbetet presenteras och opponeras
- Tentamen
 - ▶ Påminner om datorövningarna, kan ha teoretiska frågor

Kursutvärdering 2020

- Antal respondenter:
- Antal svar: (Svarsfrekvens: %)
- Vilket helhetsbetyg ger du kursen?
- Förändringar:
 - ▶ Sektionen om klustering utökad
 - ▶ Ny kursbok

Förkunskaper

Vad behövs sen tidigare?

- Linjär algebra
- Matematisk analys
- Programmering
- Regression och Variansanalys
- Statistik teori

Outline

1 Introduktion

- Kursupplägg
- Introduktion till Data Mining och Maskininlärning

2 Maskininlärningsprocessen

3 Översikt av metoder

4 Modellval och generalisering

Statistik

Från Wikipedia: “Statistik är en gren inom tillämpad matematik som sysslar med insamling, utvärdering, analys och presentation av data eller information.”

- Vad ni har sysslat med i två år...
- Traditionellt så har statistiker sysslat med
 - ▶ Relativt små och “enkla” dataset
 - ▶ Inferens: hypotestest och konfidenstervall
 - ▶ Prediktioner
 - ▶ Strävar efter att använda så korrekta antaganden som möjligt
 - ▶ Modeller som är lätta att beräkna

Statistik modellering

- Startar med ett problem som relaterar till data
- Konstruktion av abstrakta modeller som beskriver sambandet/relationen mellan ett antal variabler
- Utgår från att det finns osäkerhet eller slumpmoment i problemet och att den ska vara med i modellen
- Beskrivs matematiskt: sannolikhetsfördelningar och ekvationer

Statistik modellering (forts.)

- Metoder för att skatta modellens parameterar härleds och implementeras
- Sen används modellen för:
 - ▶ inferens = kvantifiera osäkerhet i modellen och dess parameterar
 - ▶ prediktion = utvärdera modellen i nytt sammanhang/ny data/framtiden etc
- Del i större vetenskapligt arbete

Exempel: linjär regression

Repons: y och förklarande variabler X

- Vi antar att det finns ett linjärt samband mellan y och X
- En deterministiskt modell:

$$y = X\beta$$

- En slumpmodell

$$y = X\beta + \varepsilon \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

- Skattning: $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y$
- Inferens: vi kan konstruera olika test för modellen, tex t-test, eller konfidensintervall för β
- Prediktion: Vi kan beräkna anpassade värden \hat{y} för nya värden på X_{test}

Maskininlärning

Maskininlärning (Machine learning):

- System/modell/algorithm som kan lära sig från data utan att explicita instruktioner/regler behöver ges
- Systemet lär sig av “erfarenhet” från data
- Används för att fatta datadrivna beslut och prediktioner
- Kan beskrivas som matematiska modeller eller algoritmer
- Ofta fokus på skalbarhet och beräkningseffektivitet
 - ▶ Stora datormängder, snabba beräkningar
- Ofta del i ett större system/programvara
- Ursprung i datorvetenskapen, del av området artificiell intelligens (AI)

Data Mining

Data Mining (datautvinning):

- Metoder för att hitta mönster, samband stora datamängder
- Skärningspunkten mellan:
 - ▶ datorvetenskap, databashantering och statistik
- Ofta fokus på skalbarhet och beräkningseffektivitet
- Fokus är ofta på explorativ dataanalys (vi vet inte var vi letar efter...)

Maskininlärning vs Data Mining

Stort överlapp mellan fälten!!!

- Maskininlärning: mer fokus på prediktioner
- Data mining: mer explorativ dataanalys och hitta nya samband

Statistical learning \approx Maskininlärning

Inom “learning” maskininlärning betyder ofta “estimation” i statistik.

Diskussionsfråga

Diskutera i grupper om 3:

- Ge ett exempel på två stora eller komplexa datamängder där man kan finna intressant information.
- Beskriv mängden och ange vilken information som kan finnas däri

Exempel på stora datamaterial

- Transaktionsdatabaser
- Elektroniska hälsoregister
- Register av telefonsamtal
- Sociala nätverk
- Webbsidologgar
- Korpus (stor samling språkliga data)
- Väder och klimatdata
- Astrofysisk data

Maskininlärning

- Metoderna kan vara antingen deterministiska eller probabilistiska
 - ▶ Del beskrivs med hjälp av algoritmer (=ingen explicit “modell”)
- Många klassiska statistiska metoder används inom maskininlärning, ex:
 - ▶ Linjär regression
 - ▶ Logistik regression
 - ▶ Principal komponent analys (kommer i Multivariata metoder)
- Maskininlärning \approx (nya) statistiska metoder som passar för komplexa/stora dataset
 - ▶ Mer fokus på att lära sig en “funktion” än linjära modeller
 - ▶ Mer fokus på prediktion

Dataset

Tabellformat

case	variable 1	variable 1	variable 1	variable 1
1									
2									
3									
⋮									

- Rader:
 - ▶ object, record, observation, transaction
- Kolumner:
 - ▶ Variable, attribute, feature, covariate
- Finns många andra format: tidseriser, text, kartor, grafer, videor

Olika dataskalor

- 1 Nominell: "Röd", "Grön", "Blå"
 - 1 Binär: 0 eller 1, TRUE eller FALSE
- 2 Ordinal: "låg", "mellan", "hög"
- 3 Intervall/Kvot: $[0, 1]$, \mathbb{R} , \mathbb{R}^+

Analysprocessen

Övergripande:

- Problemformulering
- Samla in data
- Datahatering och utforskning: Rådata → Användbar data
 - ▶ NA, felaktigheter, rensa, outliers, skalning
 - ▶ Metadata, plottar, beskrivande statistik
- Modellering: skatta modeller och gör prediktioner
- Evaluering: jämför med problemformuleringen!

Datahatering

- Saknade värden
 - ▶ Eliminera objekt eller attribut (problem många saknade värde, attribut kan vara viktiga)
 - ▶ Skatta saknade värde
 - ▶ Ignorera saknade värde
- Förbearbeta data
 - ▶ Aggregering
 - ▶ Urval
 - ▶ Reducera dimensionalitet
 - ▶ Diskretisering: göra en numerisk variabel till Nominell/Ordinal
 - ▶ Variabelomvandling (feature engineriing)

Översikt av metoder

- Supervised learning (övervakad inlärning):
 - ▶ Klassificering och regression
 - ▶ Varje obs består av en responsevariabel (y) och förklarande variabler (X).
 - ▶ Värdet på responsevariabel: etiketter/ufall
- Unsupervised learning (oövervakad inlärning)
 - ▶ Ett antal variabler (X), men ingen responsevariabel

Översikt av metoder

- Semisupervised learning
 - ▶ Värdet på responsvariabeln finns bara tillgängligt på en delmängd av data
 - ▶ Data: $\{X_a, y_a\}, \{X_b\}$
 - ▶ Använda all data för att förstå relationen $X \rightarrow y$
- Reinforcement learning:
 - ▶ Handlar om att lära sig att agera optimalt i en miljö: robotar, självkörande bilar
 - ▶ Data \rightarrow Lära sig beteende

Exempel på olika inlärning

- Övervakad inlärning:

- ▶ Prediktera morgondagens elkonsumtion. Utgå från väderdata, kalenderregister samt tidigare konsumtion.
- ▶ Identifiera vilka siffror som finns i en bild.
- ▶ Skapa beskrivande texter för bilder automatiskt

- Oövervakad inlärning:

- ▶ Identifiera köpmönster vilket kan användas för reklamkampanjer.
- ▶ Hitta liknade grupper av läkemedelsmolekyler
- ▶ Hitta bedragare bland bankkunder

Kursens områden – översikt

- Klassificering:
 - ▶ y : Binär, nominell, ordinal
 - ▶ Bygg modell för ändligt antal klasser (utfall)
 - ▶ Prediktera klass för ny observation
- Regression:
 - ▶ $y: \mathbb{R}, \mathbb{R}^+, a \leq y \leq b$
 - ▶ Bygg modell för kontinuerligt utfall
 - ▶ Prediktera utfall för ny observation
- Modeller: beslutsträd, neurala nätverk, k-närmaste grannar

Kursens områden – översikt

- Klusteranalys:

- ▶ Dela upp observationer i grupper (kluster)
- ▶ Placera ny observation i "rätt" kluster
- ▶ Undersöka klustrens egenskaper

- Associationsanalys:

- ▶ Hitta samband som sker ofta i transaktionsdata, ex. {blöjor} \rightarrow {öl}

Hur definieras en lämplig modell?

- **Modellen ska fånga den relevanta strukturen i problemet och kunna svara på frågeställningen**
 - ▶ En modells lämplighet beror alltid på sin kontext!
- Givet ovan: modellen ska vara så enkel som möjlig
 - ▶ Ockhams rakkniv
 - ▶ Vad vinner jag på att ha en mer komplicerad modell?
- Modellen ska att gå att beräkna i en rimlig tid

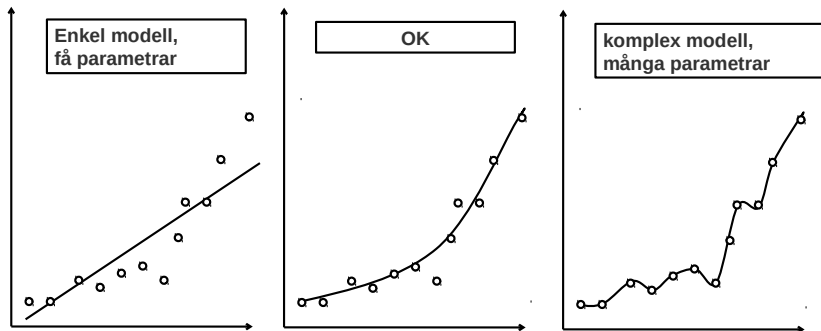
Hur definieras en lämplig modell?

$$y = f(x|w) + \varepsilon \quad E[\varepsilon] = 0 \quad V[\varepsilon] = \sigma^2$$

- f är en okänd funktion
- w är ev parameterar till f
- ε är en slumpmässig felterm
- Ex:
 - ▶ $f(x|w) = w_1 \cdot \sin(2\pi \cdot x \cdot w_2)$
 - ▶ $f(x|w) = w_1 \cdot \exp(-x \cdot w_2)$
 - ▶ $f(x|w) = x_1 w_1 + x_2 w_2 + x_3 w_3$

Hur definieras en lämplig modell?

- Underanpassning (underfitting): modellen fångar inte relevanta strukturer i problemet
- Överanpassning (overfitting): Modellen fångar upp bruset i data



Modellval

- Vi vill att modellen ska fungera bra på ny data
- Definera en felfunktion/kostnadsfunktion (error function/cost function):
 - ▶ Givet en datamängd så anger felfunktion hur bra modellen anpassar den aktuella datamängden
- Vanliga exempel:
 - ▶ Squared error loss: Tänk normalfördelning, ex: linjär regression

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(y_i - \hat{f}(x_i) \right)^2$$

- ▶ Cross entropy loss: Vanligt för klassificering med neurala nätverk
- ▶ Misclassification loss

Modellval

- Dela upp dataset (om ej för liten) i slumpmässiga delar:
 - ▶ Träning (train)
 - ▶ Validering (validation)
 - ▶ Test
- Olika proportioner kan väljas: $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}), (0.6, 0.2, 0.2), (0.7, 0.15, 0.15)$
- OBS! Träning bör inte ha mindre proportion än de andra.

Hur hittas den bästa modellen?

- Ta fram några kandidatmodeller. De kan ha olika komplexitet.

M1(?,?)

M2(?,?,?)

M3(?,?,?,?,?)

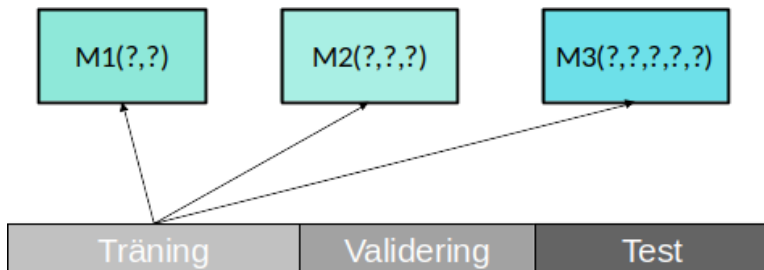
Träning

Validering

Test

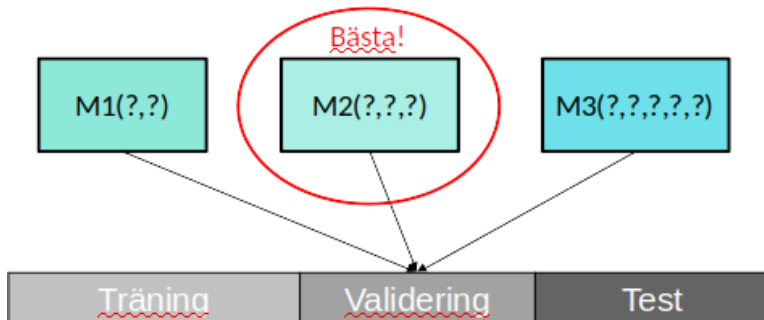
Träningsmängden

- Används för att skatta parametrarna i modellerna

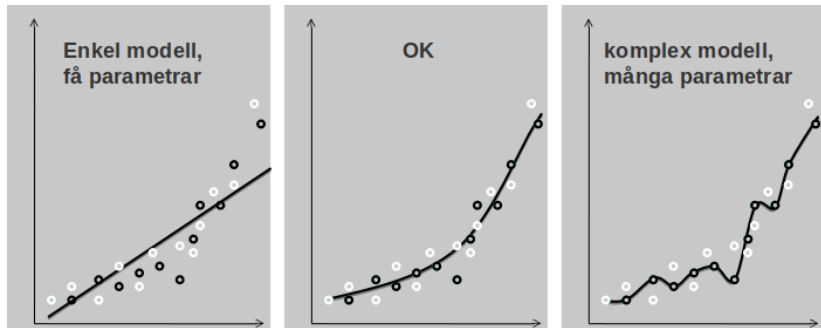


Valideringsmängden

- Används för att välja den bästa skattade modellen utifrån lämplig följfunktion.
- Vi kan iterera mellan att skatta nya modeller på träningsdata och utvärdera dem på valideringsdata.



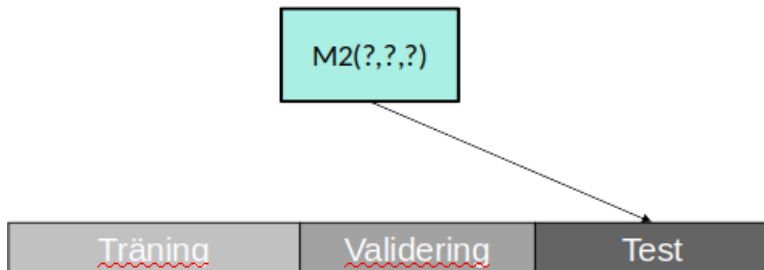
Valideringsmängden



Träningsdata=svart, valideringsdata=vit

Testmängden

- Används för att få en väntevärdesriktig skattning av felfunktionen på ny data.
- Vi bör **inte** ändra något på modellen när vi ska använda den på testdata. Varför?



K-fold cross-validation

Utgå från ett antal kandidatmodeller.

Dela upp data i K block och för varje modell:

- 1 Ta bort ett block och anpassa modellen till återstående data
- 2 Använd den anpassade modellen för att skatta felfunktionen för de borttagna observationerna (valideringsdata)
- 3 Upprepa 1. och 2. för alla block och skatta felfunktionen för alla valideringsdata. Beräkna genomsnitt för felfunktionen över alla olika block.

Välj modellen med lägst genomsnittlig felfunktion.

Observera: Om vi har K block så måste vi skatta varje modell K gånger.

K-fold cross-validation

X_{11}	X_{21}	X_{p1}	y_1
.	.	.	.
X_{1K}	X_{2K}	X_{pK}	y_K
.	.	.	.
$X_{1,jK+1}$	$X_{2,jK+1}$	$X_{p,jK+1}$	y_{jK+1}
.	.	.	.
$X_{1,(j+1)K}$	$X_{2,(j+1)K}$	$X_{p,(j+1)K}$	$y_{(j+1)K}$
.	.	.	.
$X_{1,(m-1)K+1}$	$X_{2,(m-1)K+1}$	$X_{p,(m-1)K+1}$	$y_{(m-1)K+1}$
.	.	.	.
$X_{1,mK}$	$X_{2,mK}$	$X_{p,mK}$	$y_{p,mK}$

Leave-one-out cross-validation

Utgå från ett antal kandidatmodeller.

För varje modell:

- 1 Ta bort en observation och anpassa modellen till återstående observationer
- 2 Använd den anpassade modellen för att skatta felfunktionen för den borttagna observationen (valideringsdata)
- 3 Upprepa 1. och 2. för alla observationer och skatta felfunktionen för alla valideringsdata. Beräkna genomsnitt för felfunktionen över alla olika block.

Välj modellen med lägst genomsnittlig felfunktion.

Observera: Om vi har n obs så måste vi skatta varje modell n gånger.

Leave-one-out cross-validation

$$\begin{pmatrix} X_{11} & X_{21} & & X_{p1} & y_1 \\ X_{12} & X_{22} & & X_{p2} & y_2 \\ X_{1j} & X_{2j} & & X_{pj} & y_j \\ & & & & \\ X_{1n} & X_{2n} & & X_{pn} & y_n \end{pmatrix}$$

Bias, varians, brus

$$y = f(x) + \varepsilon \quad E[\varepsilon] = 0 \quad V[\varepsilon] = \sigma^2$$

$$\hat{y} = \hat{f}(x_{test})$$

Förväntad test MSE:

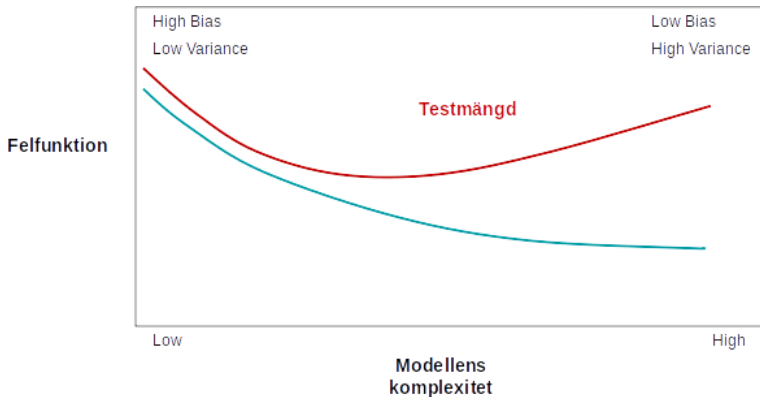
$$E \left[y_{test} - \hat{f}(x_{test}) \right]^2 = V[\varepsilon] + V \left[\hat{f}(x_{test}) \right] + Bias \left[\hat{f}(x_{test}) \right]^2$$

- Brusvariens $V[\varepsilon]$: irreducibel brus
- Modellens varians $V \left[\hat{f}(x_{test}) \right]$: Hur mycket kommer \hat{f} att ändras när vi byter dataset
- Modellens skewhet $Bias \left[\hat{f}(x_{test}) \right]$: Systematisk skewhet eller modelleringsfel i modellen

Bias, variance, bias

Bias-variance-trade-off

- Vi vill ha
 - ▶ Lågt bias
 - ▶ Låg varians



Avslut

- Frågor? Kommentarer?
- Mail:
 - ▶ Teams
 - ▶ Distanskurs
- Kurshemsidan
- Labben