Concepte generale. Clasificatorul Bayes Naiv. Măsurarea performanței.

Prof. Dr. Radu Ionescu
raducu.ionescu@gmail.com

Facultatea de Matematică și Informatică
Universitatea din București

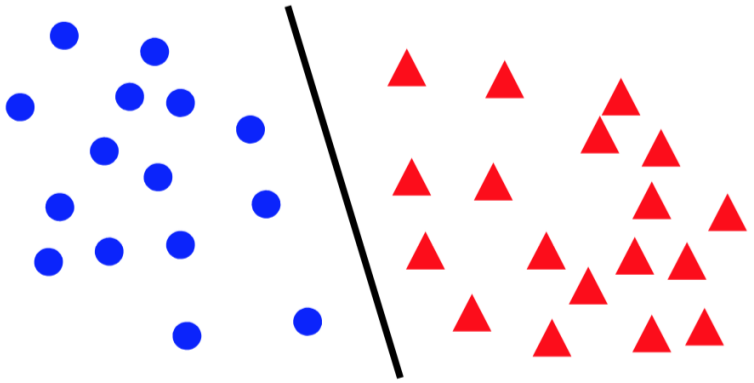
Paradigme ale învățării

- Învățare supervizată (supervised learning)
- Învățare nesupervizată (unsupervised learning)
- Învățare semi-supervizată (semi-supervised learning)
- Învățare ranforsată (reinforcement learning)

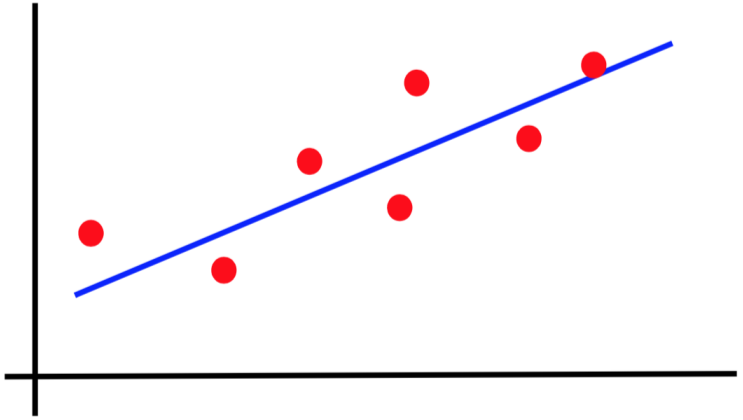
- Paradigme non-standard:
- Învățarea activă (active learning)
- Învățare prin transfer (transfer learning)

Formele canonice ale problemelor de învățare supervizată

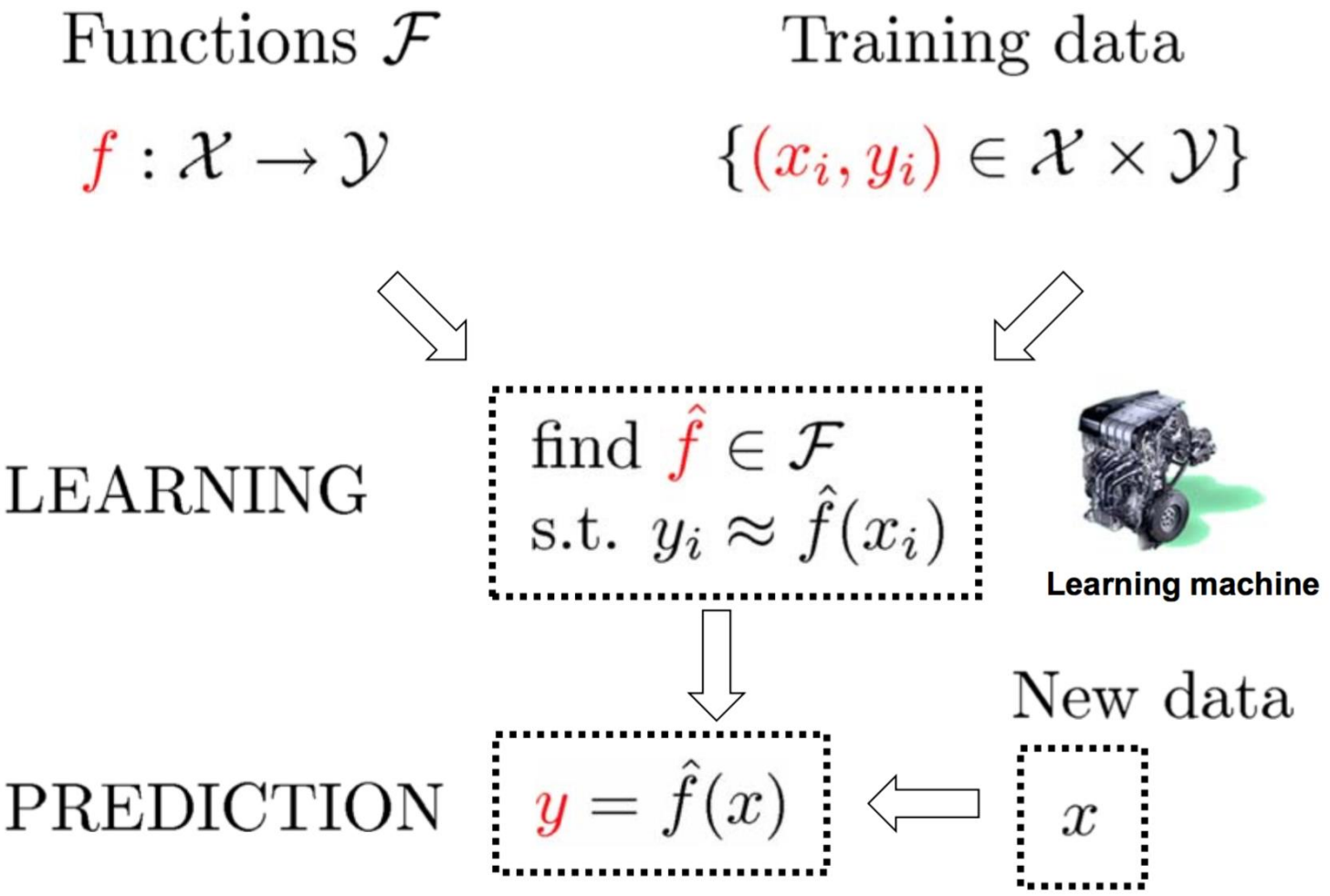
- Clasificare



- Regresie



Paradigma de învățare supervizată



Pașii necesari pentru învățare supervizată

- **Definirea** problemei de învățare supervizată
- **Colectarea datelor**

Pornim cu datele de antrenare, pentru care știm etichetele corecte (de la un profesor sau oracol)

- **Reprezentarea datelor**

Alegem cum să reprezentăm datele

- **Modelarea**

Alegerea spațiului de ipoteze: $H = \{g: X \to Y\}$

- **Învățarea / Estimarea parametrilor**

Găsirea celei mai bune ipoteze din spațiul ales

- **Selectarea modelului**

Încercăm mai multe modele și îl păstrăm pe cel mai bun

- Dacă rezultatele sunt mulțumitoare atunci ne oprim

Altfel rafinăm unul sau mai mulți pași anteriori

Clasificare între Banana și Furbish

- **Date de antrenare**

- Banana language:
  - baboi, bananonina, bello, hana, stupa

- Furbish:
  - doo, dah, toh, yoo, dah-boo, ee-tay

- Date de test: gelato

- Care este limba?
- De ce?
- Învățarea este grea fără a stabili un spațiu de ipoteze H!

Antrenare versus testare

- Ce ne dorim?
  - Performanță bună (pierdere scăzută) pe datele de antrenare?
  - Nu, performanță bună pe datele de test (nevăzute)

- Date de antrenare:
  - $\{(x_1,y_1), (x_2,y_2), \ldots, (x_N,y_N)\}$
  - Sunt folosite pentru a învăța funcția de mapare f

- Date de testare:
  - $\{x_1, x_2, \ldots, x_M\}$
  - Folosite pentru a vedea cât de bine am învățat

Funcția de eroare / de pierdere

- Cum măsurăm performanța?

- Regresie:

➢ Media pătratelor erorilor
➢ Media erorilor în valoare absolută

- Clasificare:

➢ Numărul de clasificări greșite (misclassification error)

➢ Pentru clasificare binară:
True Positive, False Positive, True Negative, False Negative

➢ Pentru clasificare în mai multe clase:
Matricea de confuzie

Erori

- Eroarea de generalizare (generalization error):

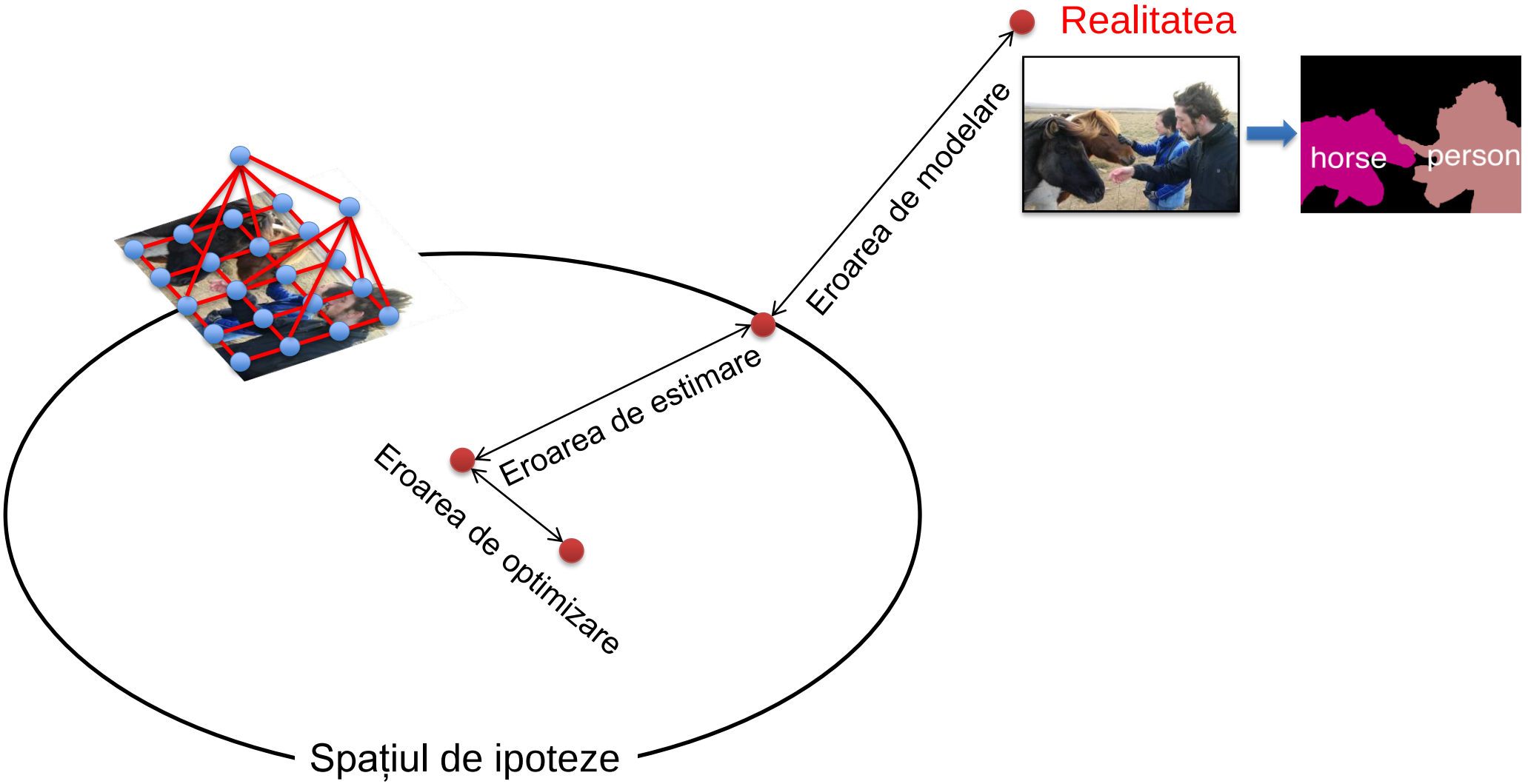
$$\mathcal{E}(h) = \int_{X \times Y} V(h(x), y)\rho(x, y)dxdy$$

- Probabilitatea comună $\rho(x, y)$ este deobicei necunoscută
- Atunci calculăm eroare empirică (empirical error):

$$E(h) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} V(h(x_i), y_i)$$

- Estimăm eroarea empirică pe datele de antrenare sau pe cele de test?
- Nu este corect să raportăm eroarea pe datele de antrenare!

Descompunerea erorii

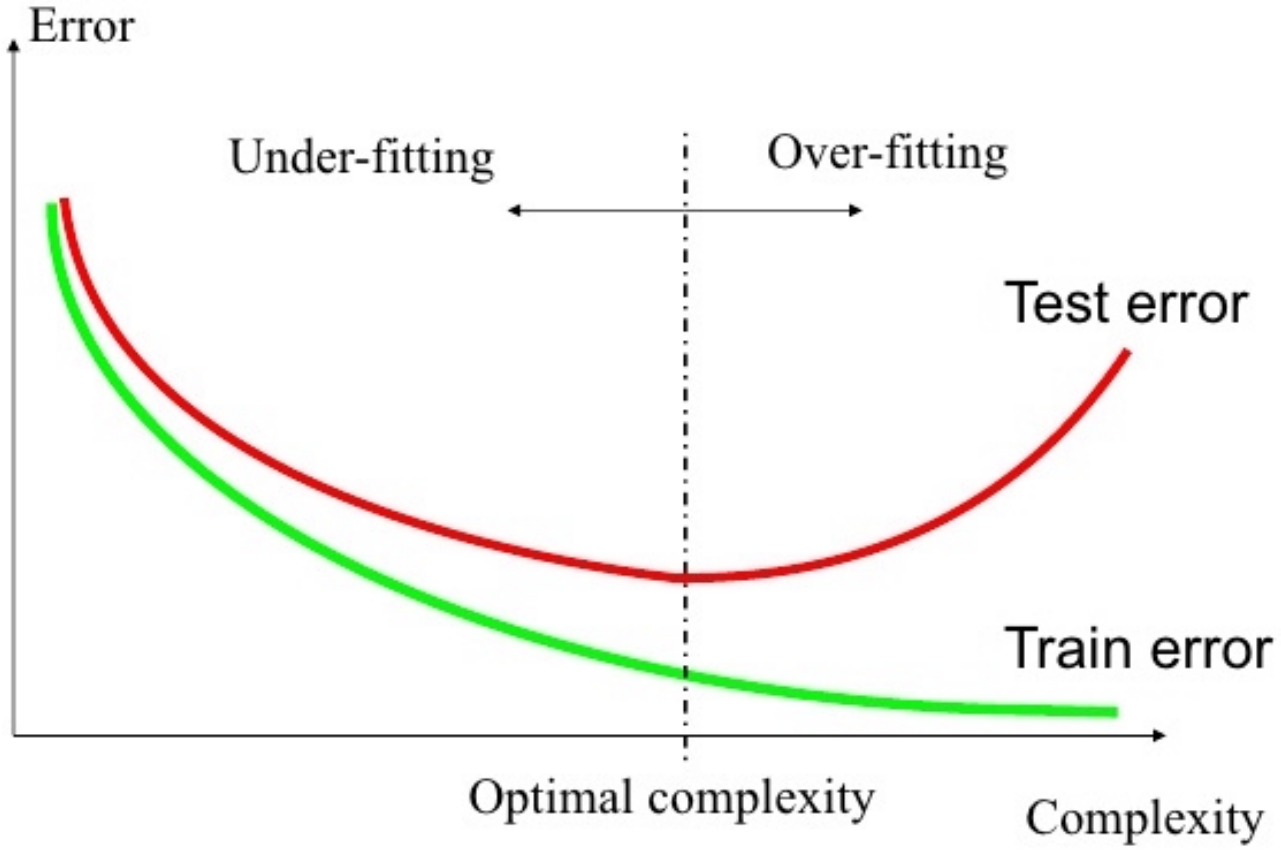


Descompunerea erorii

- Eroare de modelare
  - Am încercat să modelăm realitatea cu un spațiu de ipoteze
- Eroarea de estimare
  - Am încercat să antrenăm un model cu o mulțime finite de date
- Eroarea de optimizare
  - Nu am reușit să optimizăm funcția până în punctul optim

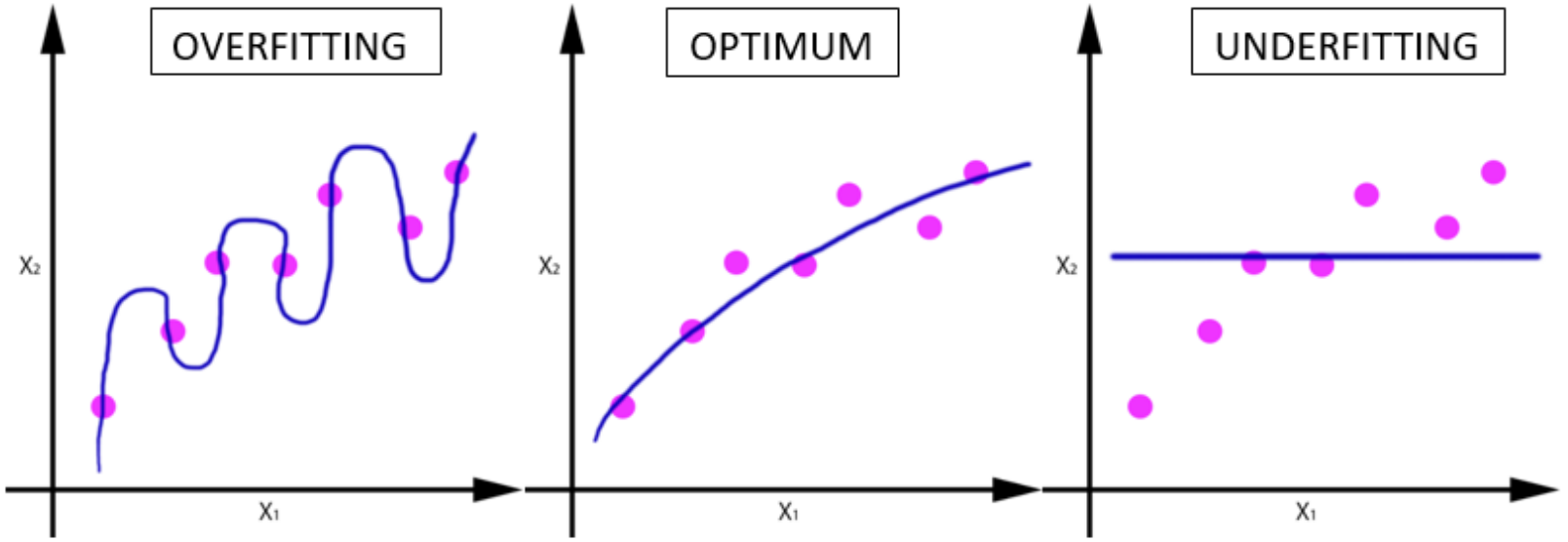
Underfitting versus overfitting

- Problema cea mai importantă a învățării?
- Îmbunătățirea capacității de generalizare



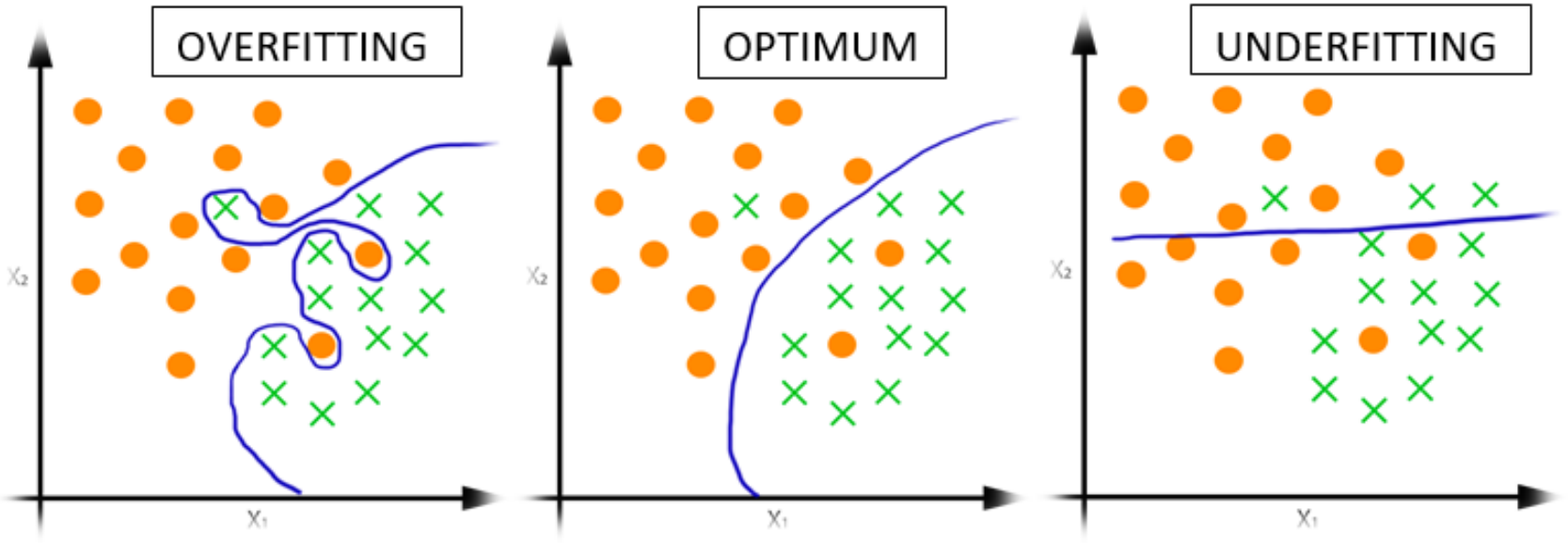
Underfitting versus overfitting

- Exemplu 1: problemă de regresie



Underfitting versus overfitting

- Exemplu 2: problemă de clasificare



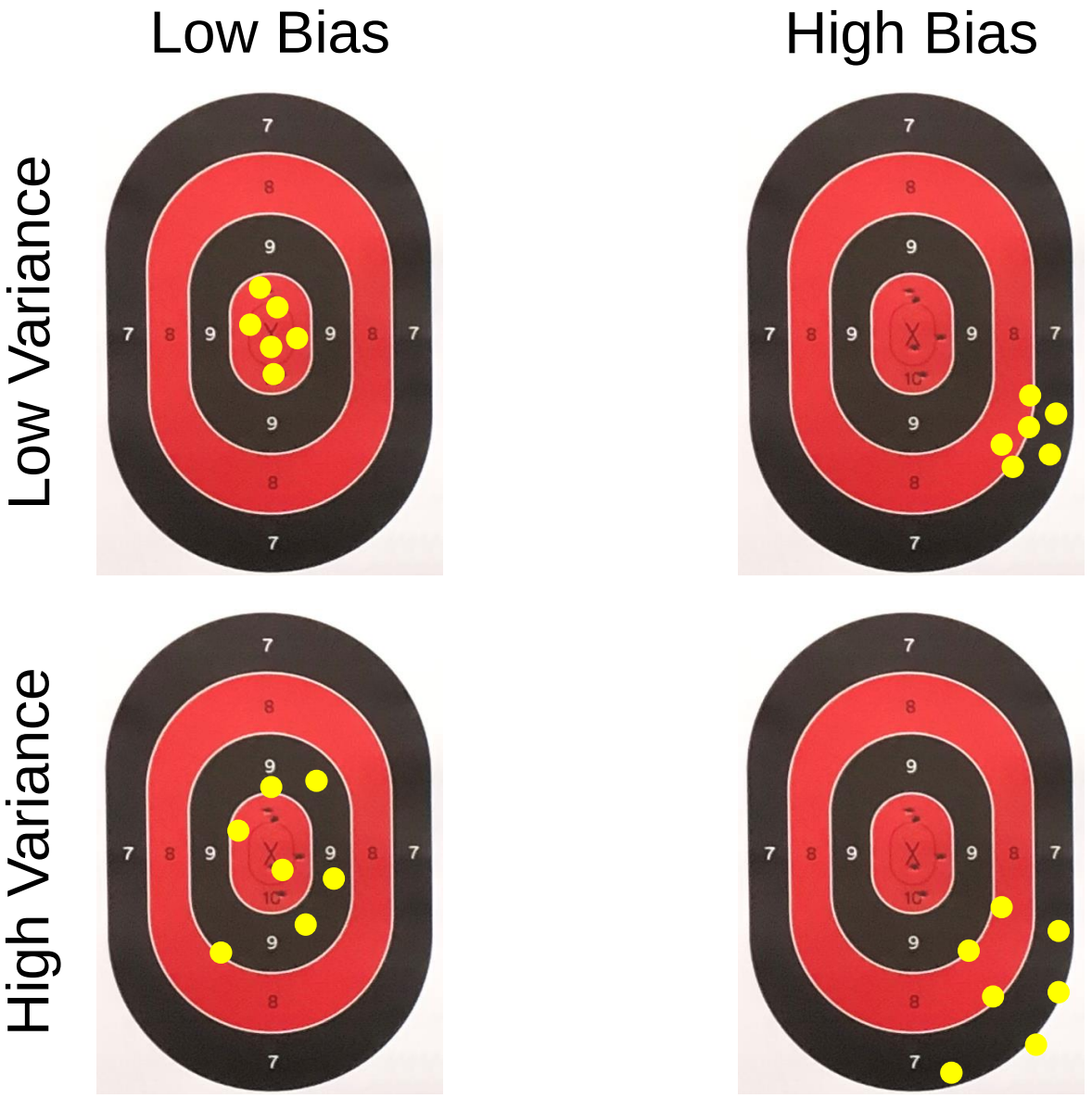
Bias-Variance Trade-off

- Bias
  - Eroare sistematică care provine din inabilitatea modelului de a învăța adevărata relație dintre trăsături și etichete (underfitting)
  - Poate fi corectată prin creșterea complexității modelului

- Variance
  - Eroare aleatoare care provine din senzitiviatea ridicată la mici fluctuații din date, cauzată de faptul că modelul a învățat și zgomotul din datele de antrenare (overfitting)
  - Poate fi corectată prin adăugarea de exemple de antrenare sau prin scăderea complexității modelului

Bias-Variance Trade-off

Bias-Variance Trade-off



Abordarea procedurală

- Etapa de antrenare:
  - Date neprelucrate → x
    (extragerea trăsăturilor / caracteristicilor = feature extraction)
  - Date de antrenare {(x,y)} → f
    (învățare)

- Etapa de testare:
  - Date neprelucrate → x
    (extragerea trăsăturilor)
  - Date de testare x → f(x)
    (aplicarea funcției, calcularea erorii)

Abordarea statistică

- Folosim probabilități:
  - x și y sunt variabile aleatoare
  - $D = (x_1,y_1), (x_2,y_2), \ldots, (x_N,y_N) \sim P(X,Y)$

- Presupunem că datele sunt i.i.d. (independent și identic distribuite):
  - Datele de antrenare și testare sunt generate i.i.d. din P(X,Y)
  - Învățăm pe setul de antrenare
  - Sperăm ca modelul să generalizeze pe datele de test

Concepte

- Capacitatea modelului
  - Cât de larg este spațiul de ipoteze H?
  - Este sau nu restrâns spațiul de funcții?

- Supra-învățare (overfitting)
  - f funcționează bine pe datele de antrenare
  - Dar foarte slab pe datele de testare

- Capacitatea de generalizare
  - Abilitatea de a obține eroare mică pe datele noi de test

Garanții

- Simplificând 20 de ani de cercetare din Teoria Învățării…

- Dacă:
  - Avem suficiente date de antrenare D
  - Și spațiul de ipoteze H nu este foarte complex
- atunci probabil că modelul va avea capacitate de generalizare

Probabilități (recapitulare)

- A este un eveniment nedeterminist:

A = “Novak Djokovic va câștiga Roland Garros”

- Ce înseamnă P(A)?
- Abordarea statistică:

$$\lim_{N \to \infty} \frac{\#(A = true)}{N}$$

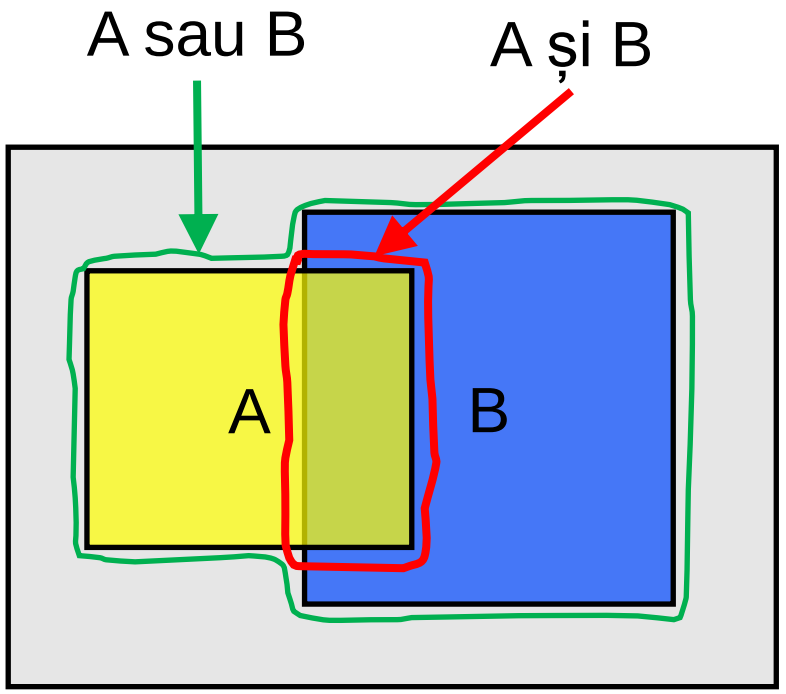
➢ Frecvența la limită a unui eveniment repetabil și nedeterminist

- Abordarea Bayesiană:

➢ P(A) este ceea ce “credem” despre A

Axiomele Probabilității (recapitulare)

- $0 \leq P(A) \leq 1$
- $P(\emptyset) = 0$
- $P(\forall) = 1$
- $P(A\ sau\ B) = P(A) + P(B) - P(A\ și\ B)$



Probabilități condiționate (recapitulare)

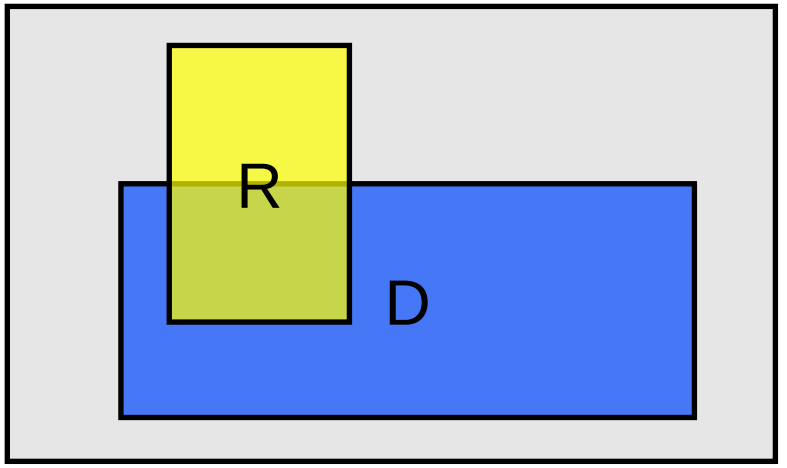
$$P(Y = y \mid X = x)$$

- Ce să credem despre $Y = y$, dacă știm că $X = x$?
- P(Novak Djokovic va câștiga Roland Garros)?
- Dacă știm următoarele:
  - În 2021, Novak Djokovic a câștigat Roland Garros
  - Novak Djokovic a pierdut patru finale de Roland Garros
  - Novak Djokovic se află pe poziția 1 în clasamentul ATP

Probabilități condiționate (recapitulare)

- P(A | B) = În cazurile în care B este adevărat, proporția în care A este adevărat

- Exemplu:
  - D: “Am dureri de cap”
  - R: “Sunt răcit”



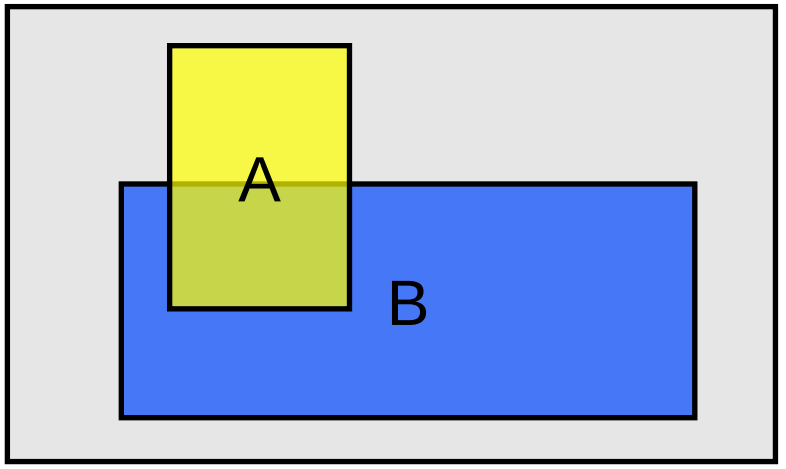
- $P(D) = \frac{1}{10}$
- $P(R) = \frac{1}{40}$
- $P(D \mid R) = \frac{1}{2}$

- Durerile de cap sunt rare și răceala este și mai rară, dar dacă ești răcit atunci sunt 50% șanse să ai dureri de cap

Regula Bayes

$$P(B \mid A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)} = \frac{P(A \mid B)\, P(B)}{P(A)}$$

- Thomas Bayes "An Essay towards solving a Problem in the Doctrine of Chances" Royal Society, 1763.
- Simplu de înțeles dacă vă gândiți la arii



Regula Bayes

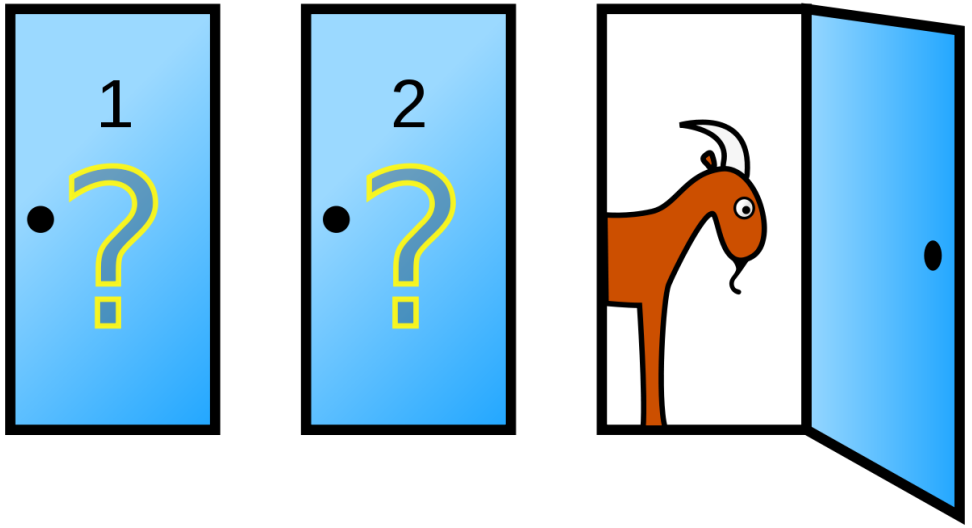
Concepte:

- Probabilitate
  - Cât de bine explică datele o anumită ipoteză?

- Informații apriori
  - Ce credem înainte de a vedea datele?

- Informații aposteriori
  - Ce credem după ce vedem datele?

Problema Monty Hall



- Sunt 3 uși numerotate cu 1, 2, 3.
- Un premiu mare (o mașină) este ascunsă în spatele unei uși. Celelalte două uși au câte o capră.
- Trebuie să alegem o ușă.
- Să presupunem că alegem poarta 1. Gazda deschide poarta 3, arătând capra din spate. Ce alegem mai departe?

(a) Rămânem cu alegerea inițială (poarta 1);
(b) Schimbăm și alegem poarta 2;
(c) Este vreo diferență?

Problema Monty Hall

- $H = i$ denotă ipoteza “premiul este după ușa i”. Apriori toate cele 3 uși sunt egal probabile să ascundă premiul:

$$P(H = 1) = P(H = 2) = P(H = 3) = \frac{1}{3}$$

- Alegem poarta 1.
- Dacă premiul este în spatele ușii 1, gazda este indiferentă și va alege ușile 2 sau 3 cu probabilitate egală:

$$P(U = 2 \mid H = 1) = \frac{1}{2},\ P(U = 3 \mid H = 1) = \frac{1}{2}$$

- Dacă premiul este în spatele ușii 2 (respectiv 3), gazda alege ușa 3 (respectiv 2):

$$P(U = 2 \mid H = 2) = 0,\ P(U = 3 \mid H = 2) = 1$$

$$P(U = 2 \mid H = 3) = 1,\ P(U = 3 \mid H = 3) = 0$$

- Gazda deschide poarta 3 (U=3), descoperind capra. Observația este U=3. Premiul este în spatele ușii 1 sau 2?

Problema Monty Hall

$$P(H = 1) = P(H = 2) = P(H = 3) = \frac{1}{3}$$

$$P(U = 2 \mid H = 1) = \frac{1}{2},\ P(U = 3 \mid H = 1) = \frac{1}{2}$$

$$P(U = 2 \mid H = 2) = 0,\ P(U = 3 \mid H = 2) = 1$$

$$P(U = 2 \mid H = 3) = 1,\ P(U = 3 \mid H = 3) = 0$$

- Aplicăm regula Bayes:

$$P(H = 1 \mid U = 3) = \frac{P(U = 3 \mid H = 1)\, P(H = 1)}{P(U = 3)} = \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3}}{\frac{1}{2}} = \frac{1}{3}$$

$$P(H = 2 \mid U = 3) = \frac{P(U = 3 \mid H = 2)\, P(H = 2)}{P(U = 3)} = \frac{1 \cdot \frac{1}{3}}{\frac{1}{2}} = \frac{2}{3}$$

Clasificatorul optimal

- **Învățăm**: $h: \boldsymbol{X} \rightarrow Y$
  - **X** – trăsături
  - Y – etichete

- Presupunând cunoscută P(Y|**X**), cum clasificăm datele?
  - Aplicăm clasificatorul Bayes:

$$y^* = h^*(x) = \underset{y}{\operatorname{argmax}}\, P(Y = y \mid X = x)$$

- **De ce?**

Clasificatorul optimal

- **Teoremă:** Clasificatorul Bayes h_{Bayes} este optim!
  - Adică:

$$error_{true}(h_{Bayes}) \leq error_{true}(h), \forall h$$

- **Eroarea Bayes** este cea mai mica eroare posibilă:

$$error_{Bayes} = 1 - \sum_{y \neq y^*} \int_{x \in H_i} P(y \mid x) P(x) dx$$

Clasificatorul optimal

- Cât de greu este să învățăm clasificatorul optimal?
  - Dar pentru date categorice?
- Cum reprezentăm datele? Câți parametrii trebuie estimați?
  - Probabilitatea apriori a claselor P(Y):

Presupunem că Y este compus din k clase

  - Probabilitatea P(**X** | Y):

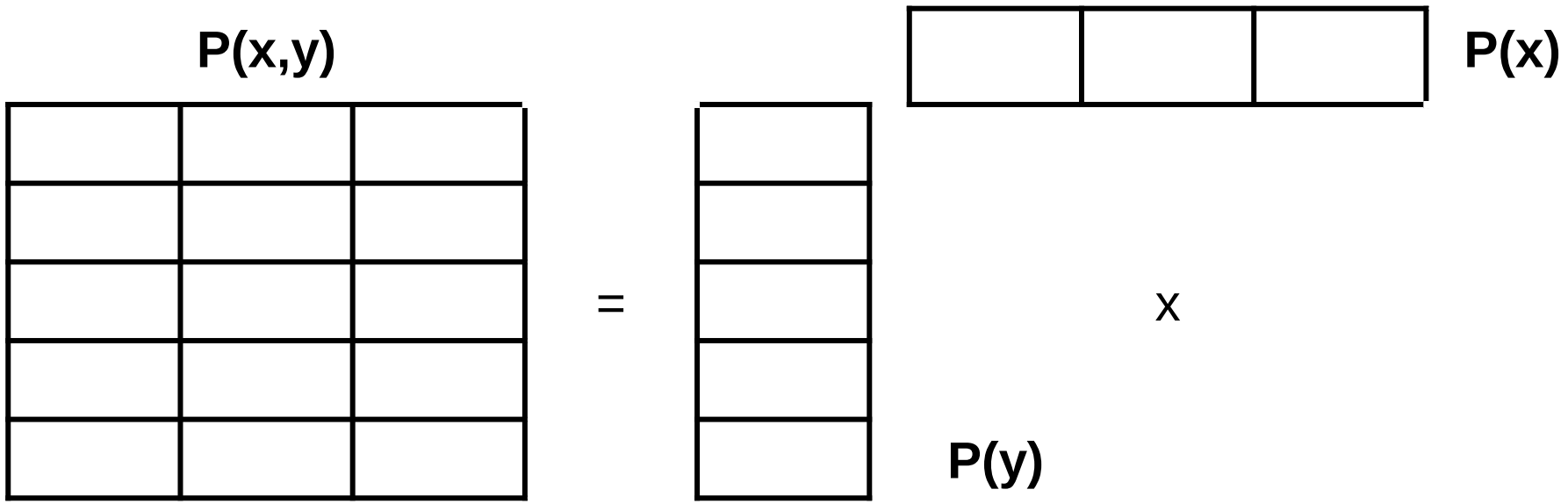
Presupunem că **X** este compus din n trăsături binare

Model complex → Avem varianță mare cu date limitate!

Soluție: considerăm că trăsăturile sunt independente

- Două variabile sunt independente dacă și numai dacă:

$$P(x, y) = P(x)\, P(y)$$



- Două variabile sunt independente condiționat dacă, fiind dată o a treia variabilă, avem:

$$P(x, y \mid z) = P(x \mid z)\, P(y \mid z)$$

Clasificatorul Naïve Bayes

- Presupunerea Naïve Bayes:

➢ Trăsăturile sunt independente:

$$P(X_1, X_2 \mid Y) = P(X_1 \mid Y)P(X_2 \mid Y)$$

➢ Mai general:

$$P(X_1 \ldots X_n \mid Y) = \prod_i P(X_i \mid Y)$$

- Câți parametrii trebuie estimați acum?

➢ Presupunem că **X** este compus din n trăsături binare

➢ Redus de la 2^n la $2 \cdot n$

Clasificatorul Naïve Bayes

- Fiind date:
  - Probabilitatea apriori a claselor P(Y)
  - *n* trăsături independente **X** condiționate de Y
  - Pentru fiecare X_i, probabilitatea $P(X_i \mid Y)$

- Regula de decizie Naïve Bayes este:

$$h_{NB}(x) = \underset{y}{\operatorname{argmax}}\, P(y)\, P(x_1, \ldots, x_n \mid y)$$

$$h_{NB}(x) = \underset{y}{\operatorname{argmax}}\, P(y) \prod_i P(x_i \mid y)$$

- În practică folosim sumă de log!
- Dacă presupunerea este adevărată, NB este clasificatorul optimal!

Estimarea parametrilor NB

- Se aplică metoda aproximării verosimilității maxime (Maximum Likelihood Estimation)
  - Fiind dat setul de antrenare, calculăm numărul de exemple pentru care A=a și B=b:

count(A=a, B=b)

- Estimarea parametrilor:
  - Probabilitatea apriori a fiecărei clase: $P(Y = y) =$ ...
  - Probabilitatea condiționată de clase: $P(X_i = x_i \mid Y = y) =$ ...

Încălcarea presupunerii NB

- Deobicei, trăsăturile nu sunt independente condiționat:

$$P(X_1 \ldots X_n \mid Y) \neq \prod_i P(X_i \mid Y)$$

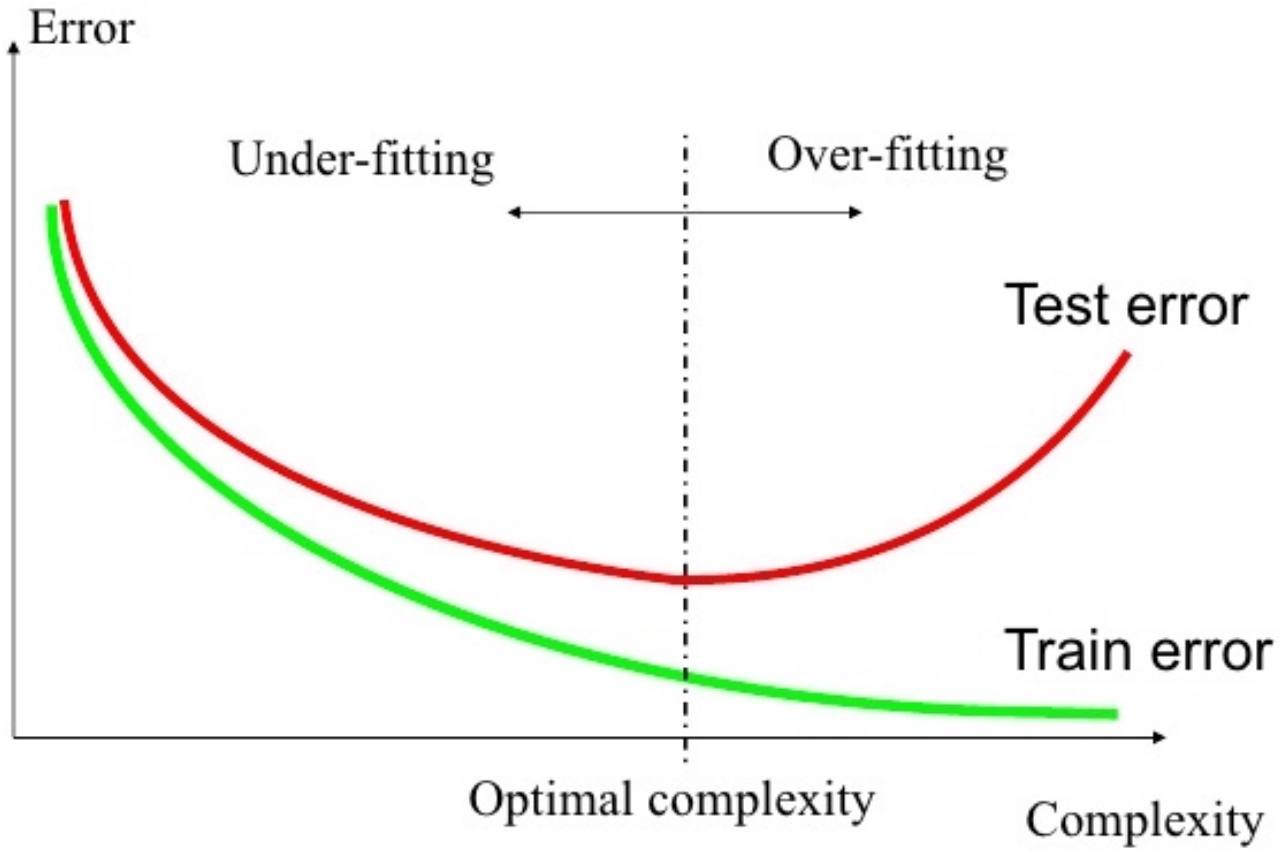
- Probabilitățile P(Y|**X**) sunt deseori 0 sau 1

- Totuși, clasificatorul NB este foarte popular

➢ Deorece se descurcă bine, chiar dacă presupunerea este încălcată

Underfitting versus overfitting

- Îmbunătățirea capacității de generalizare



Împărțirea datelor în date de antrenare, validare și test

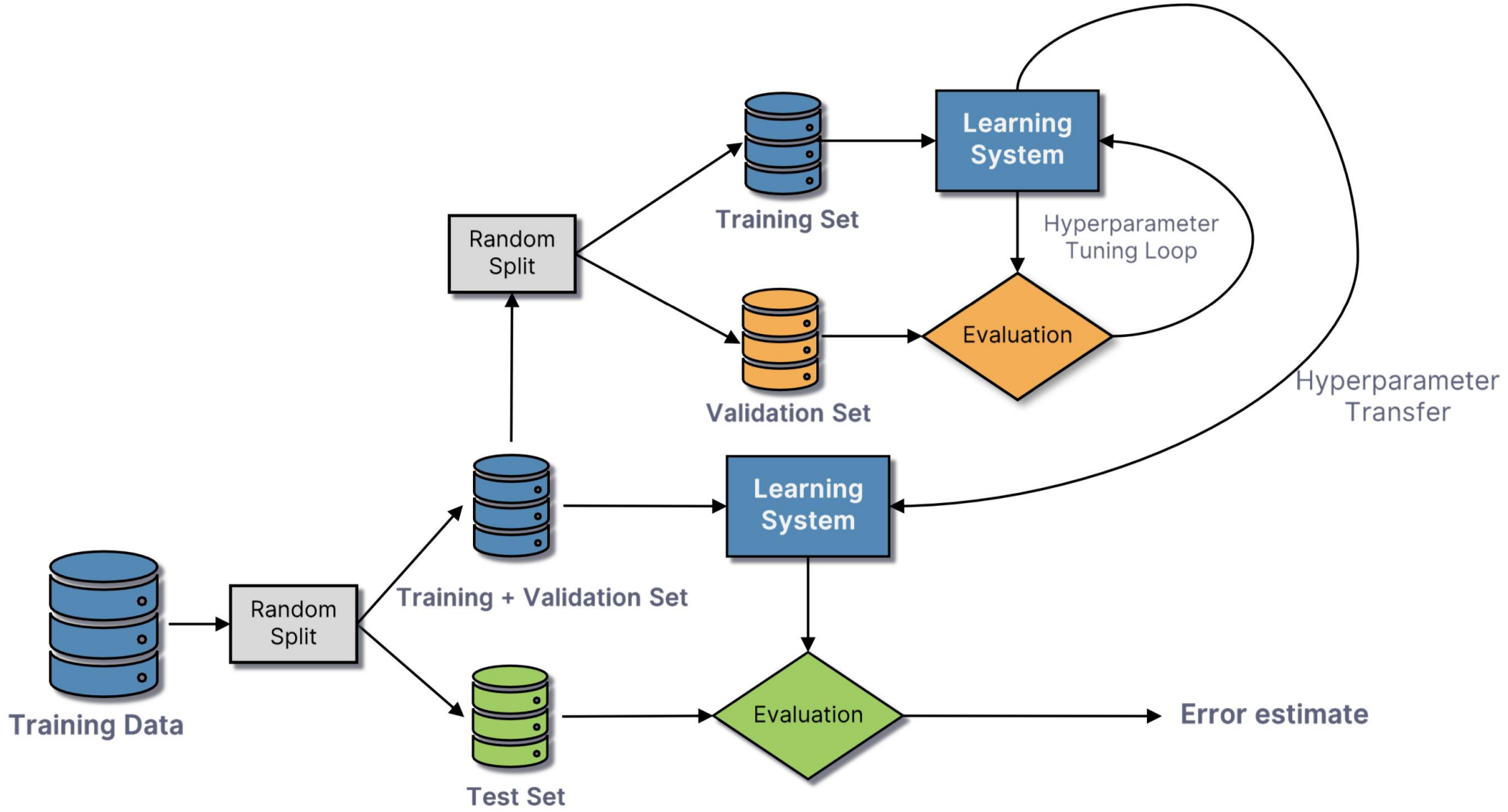
- Pentru a construi un model cât mai performant, trebuie să îl testăm pe date “necunoscute”
- O posibilă abordare (atunci când avem la dispoziție multe date):
  - 50% exemple pentru antrenare
  - 25% exemple pentru validare
  - 25% exemple pentru testare

(procentele pot să varieze)

De ce nu este suficient să împărțim datele în train și test?

- Utilizarea repetată a unei împărțiri atunci când încercăm diverși hiperparametrii poate să “uzeze” setul de test:
  - ➢ Ajungem la overfitting în spațiul hiperparametrilor!
- Obținem o estimare mai bună a erorii dacă tunăm hiperparametrii pe un set diferit, anume setul de validare

Training, validation, test

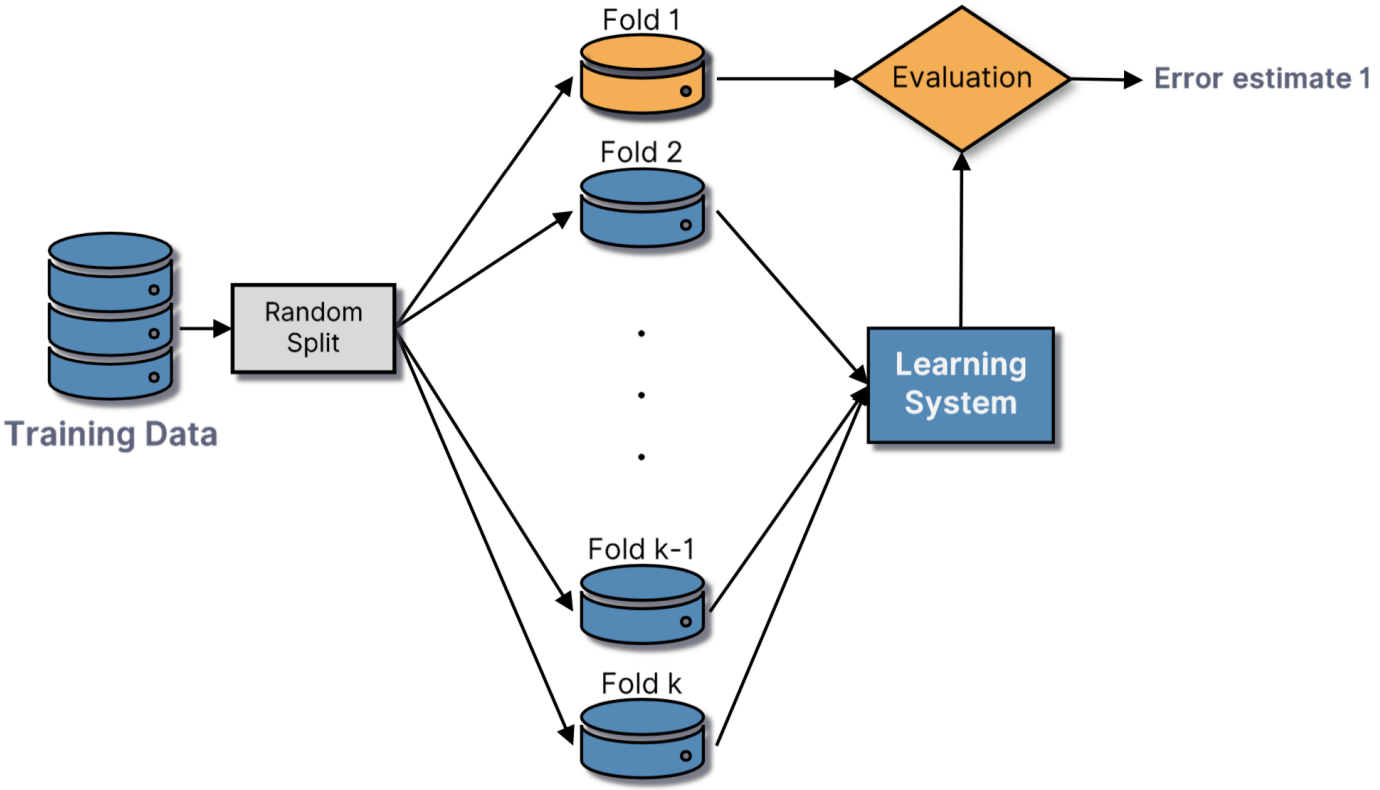


Cross-validation

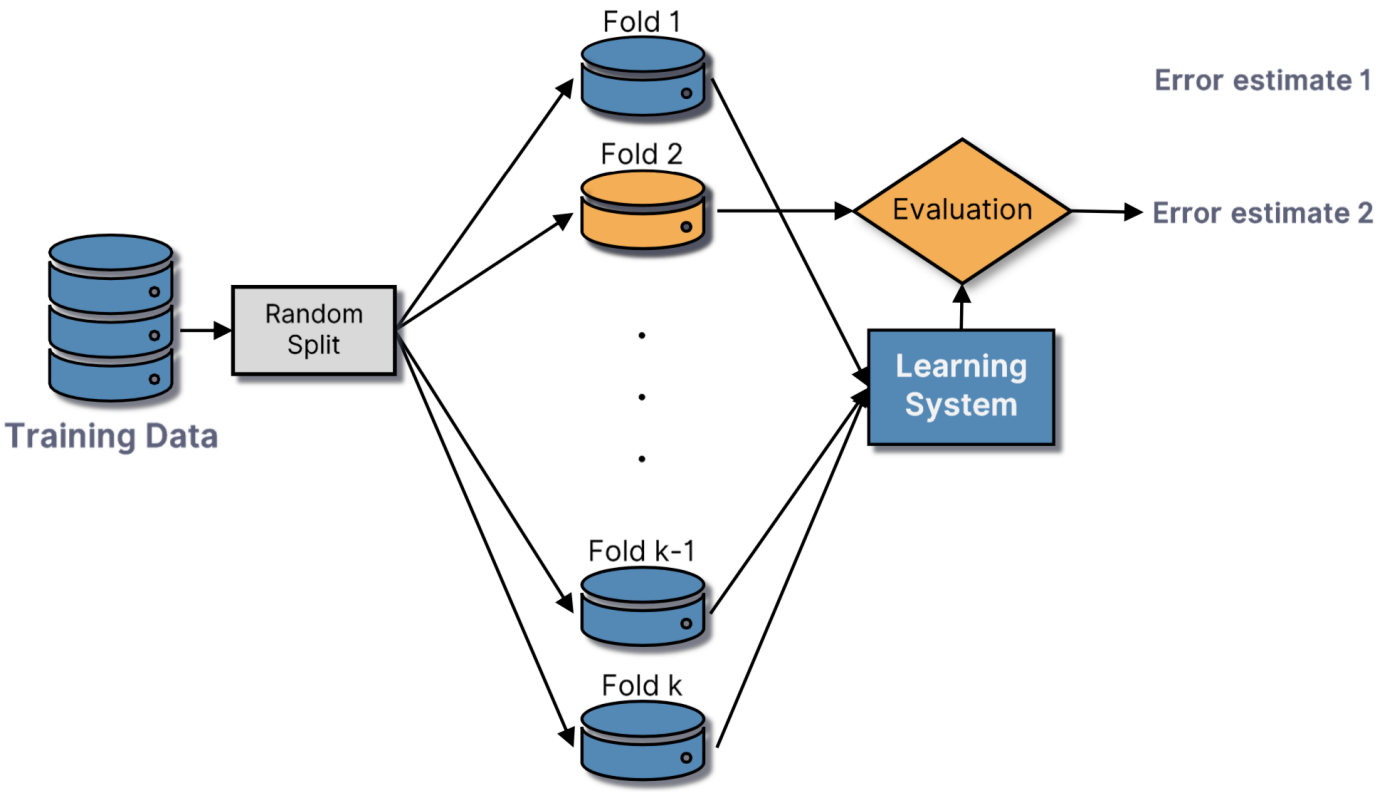
- O altă abordare (funcționează bine cu data puține):
  - Împărțim datelor în k părțile egale (fold-uri)
  - Antrenăm pe k-1 fold-uri și testăm pe fold-ul dat deoparte
  - Repetăm de k ori
  - Calculăm media rezultatelor

- Atunci când numărul de fold-uri este egal cu numărul de exemple:
  - Leave-one-out cross-validation

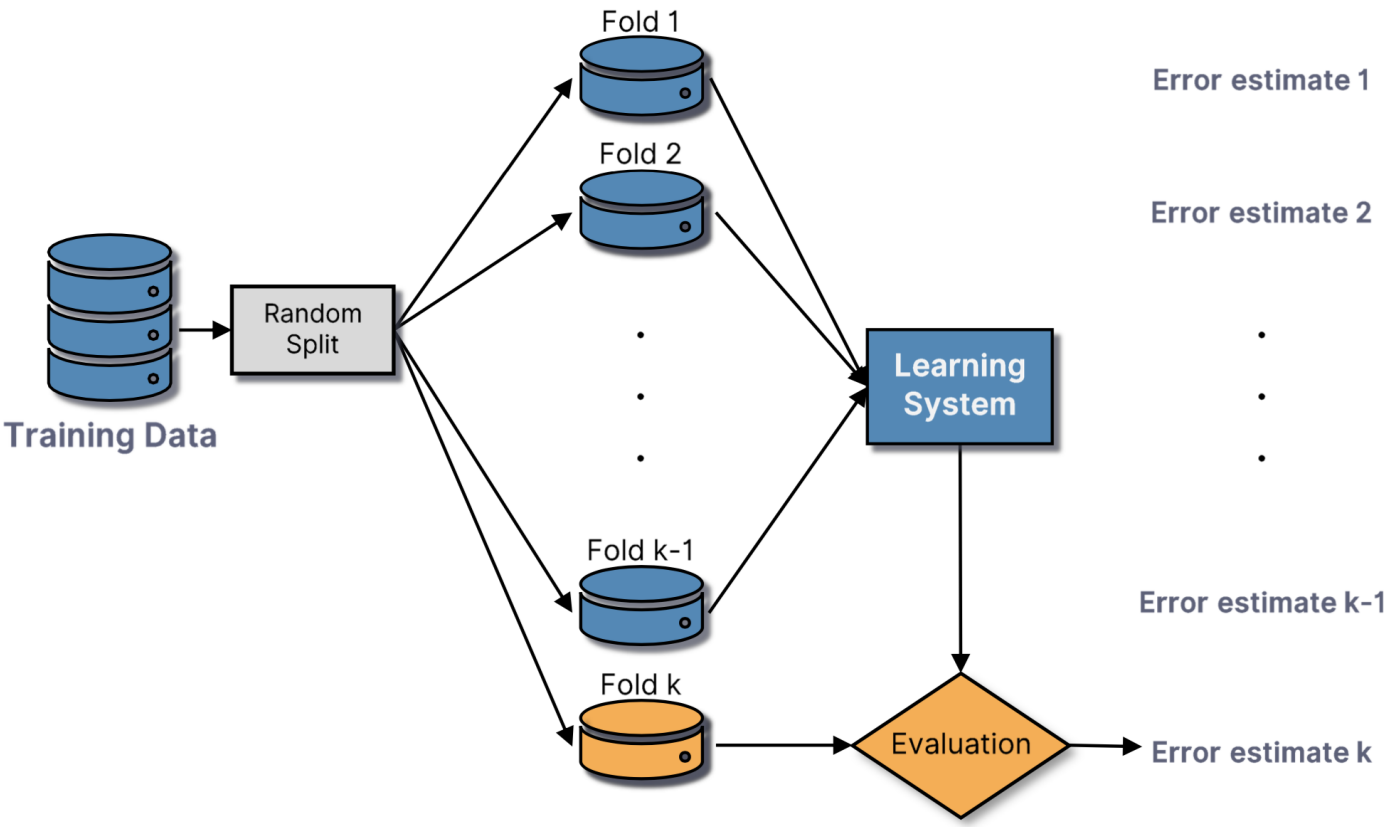
Cross-validation



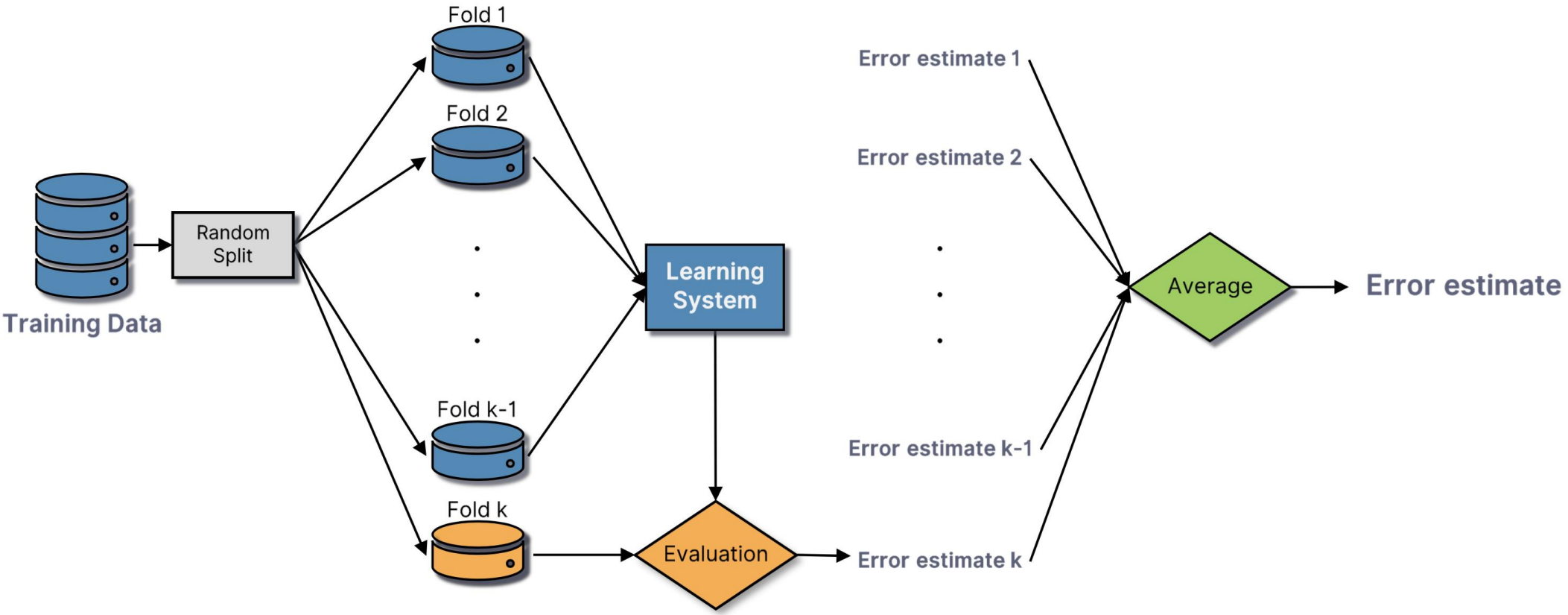
Cross-validation



Cross-validation



Cross-validation



Îmbunătățirea capacității de generalizare

Early stopping

- Oprirea învățării atunci când observăm că eroarea pe validare începe să crească

Regularizare

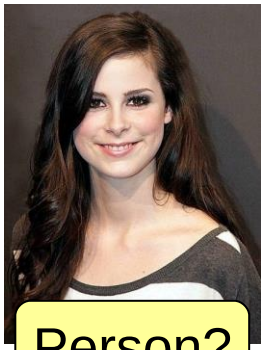
- Adăugarea unui termen care să penalizeze complexitatea funcției de învățare, impunând restricții de netezire sau limite asupra normei vectorului de ponderi

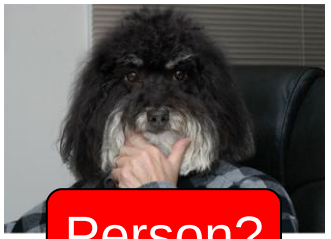
$$\min_f \sum_{i=1}^{n} V(f(\hat{x}_i), \hat{y}_i) + \lambda R(f)$$

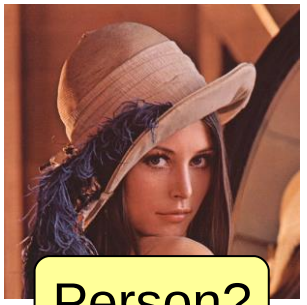
Evaluare performanței

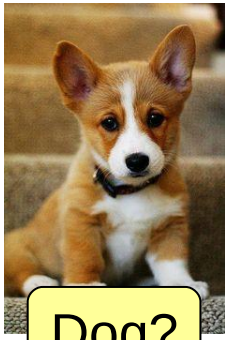
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Măsurăm acuratețea / eroarea pe datele de test:





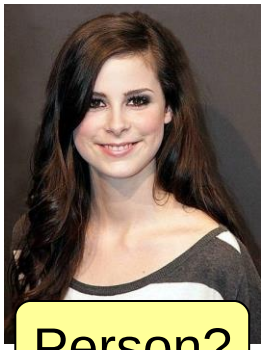


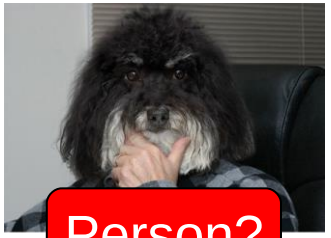


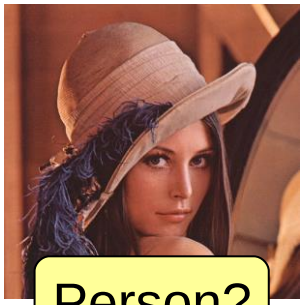
- Acuratețea: 4 corecte din 6 = 66.67%
- Eroarea: 2 greșite din 6 = 33.33%

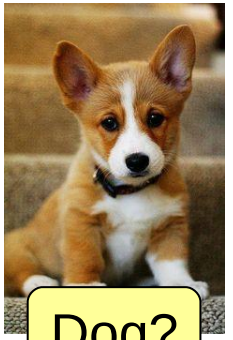
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Construim matricea de confuzie







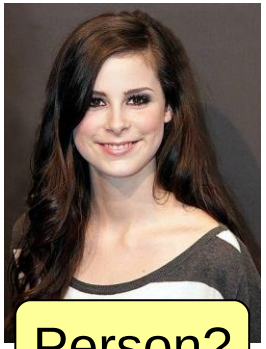


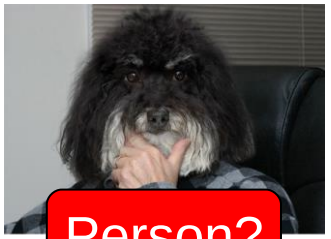
- Acuratețea: suma elementelor de pe diagonală principală supra numărul de componente diferite de zero (4/6)
- Eroarea: suma elementelor rămase în afara diagonalei supra numărul de componente diferite de zero (2/6)

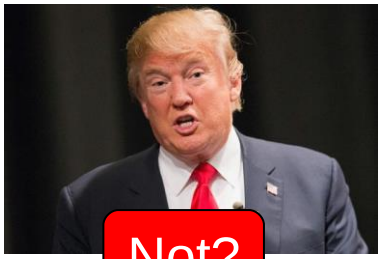
Predicted Actual	Car	Dog	Person
Car	1	1	0
Dog	0	1	1
Person	0	0	2

Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Matricea de confuzie în cazul binar



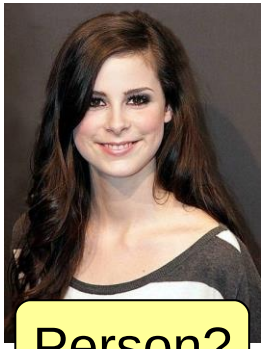


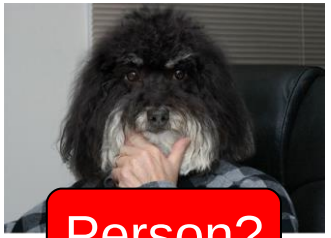


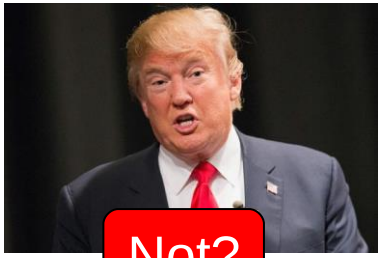
	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	True Positive	False Negative
Actual NO	False Positive	True Negative

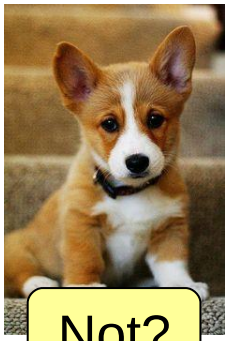
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Matricea de confuzie în cazul binar





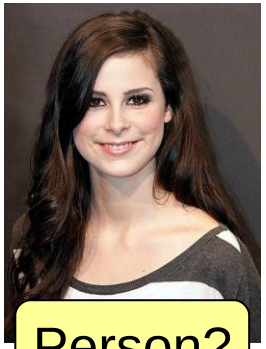


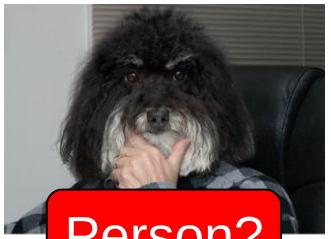


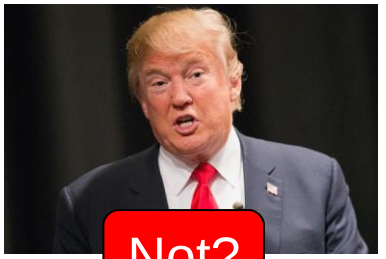
	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	False Negative
Actual NO	False Positive	True Negative

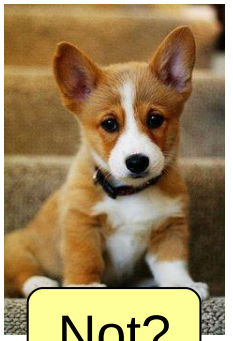
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Matricea de confuzie în cazul binar





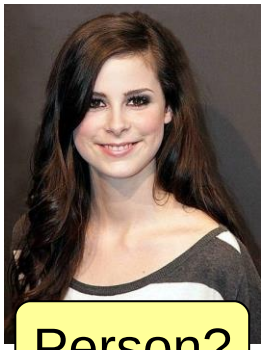


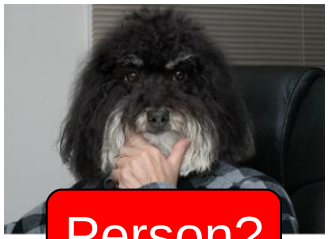


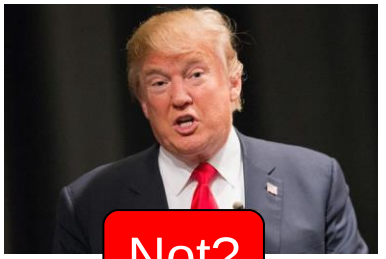
	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	1
Actual NO	False Positive	True Negative

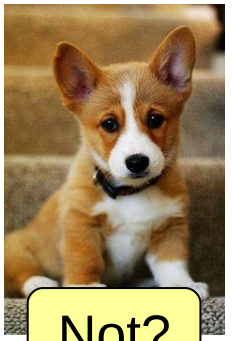
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Matricea de confuzie în cazul binar





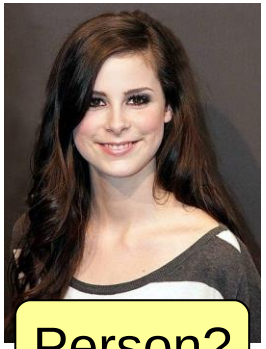


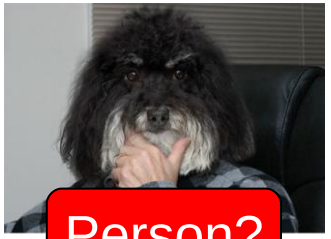


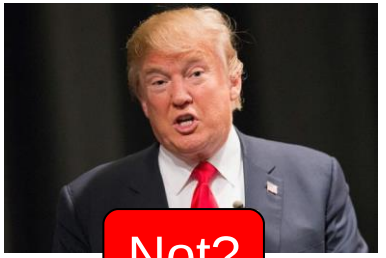
	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	1
Actual NO	1	True Negative

Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Matricea de confuzie în cazul binar



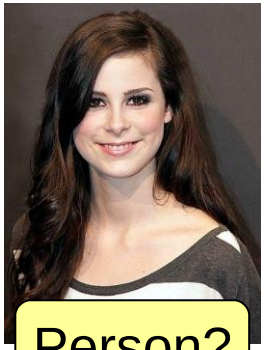


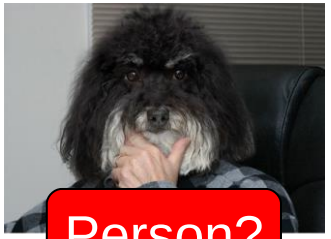


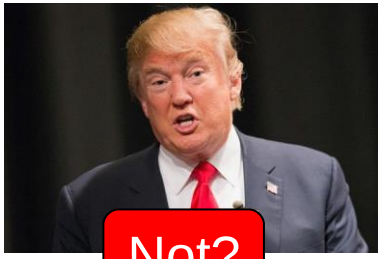
	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	1
Actual NO	1	2

Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Calculul măsurilor Precision și Recall







- Precision = TP / (TP + FP)

  = 66.67%

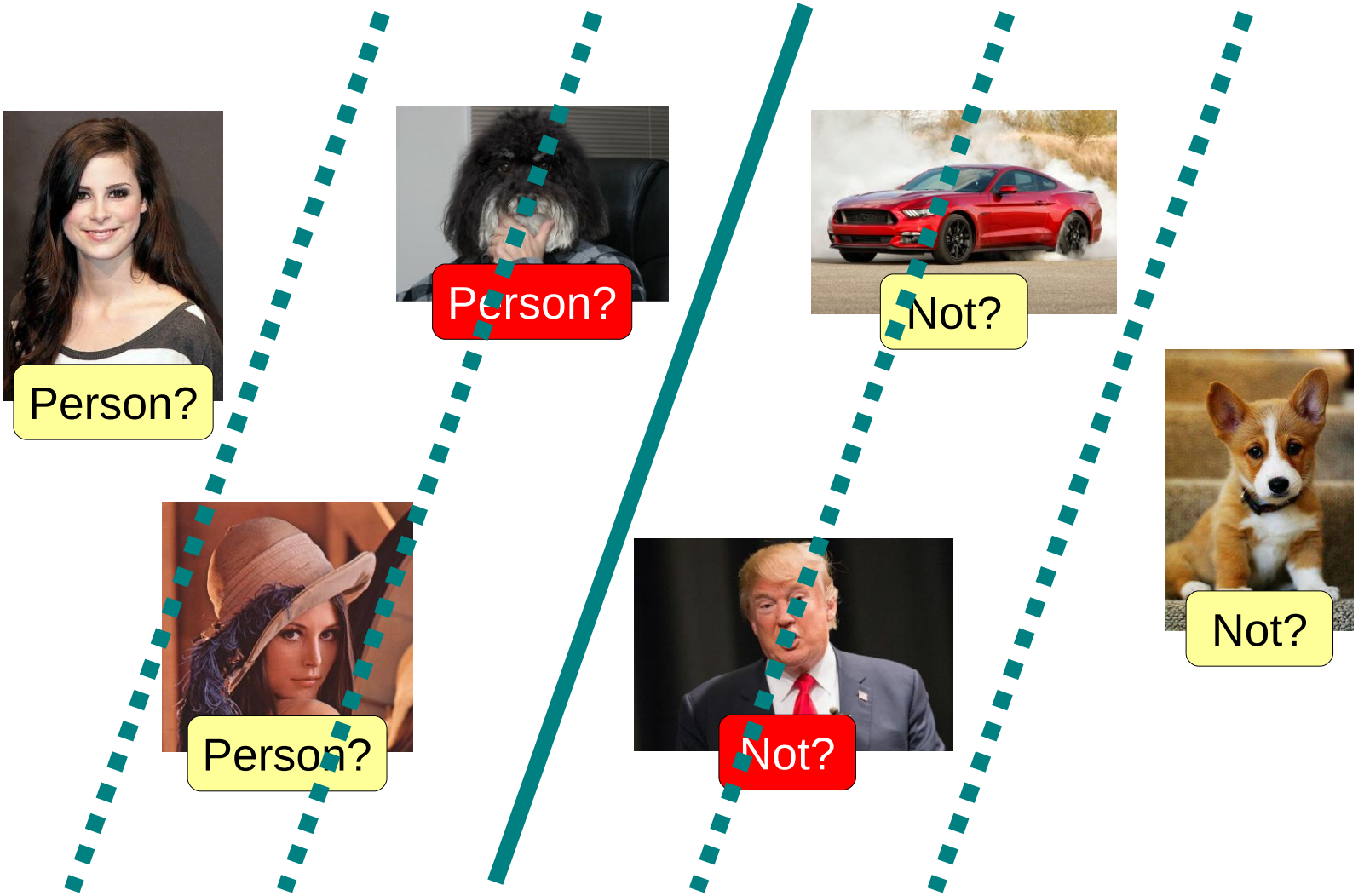
- Recall = TP / (TP + FN)

  = 66.67%

	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	1
Actual NO	1	2

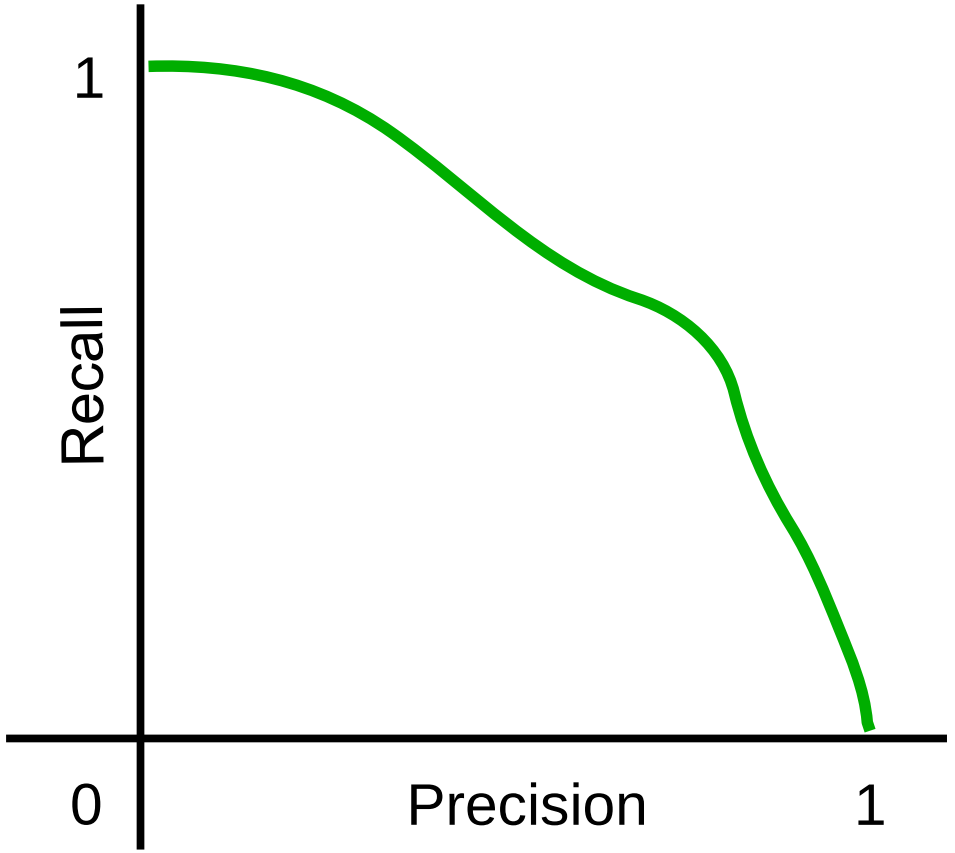
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Curba Precision-Recall



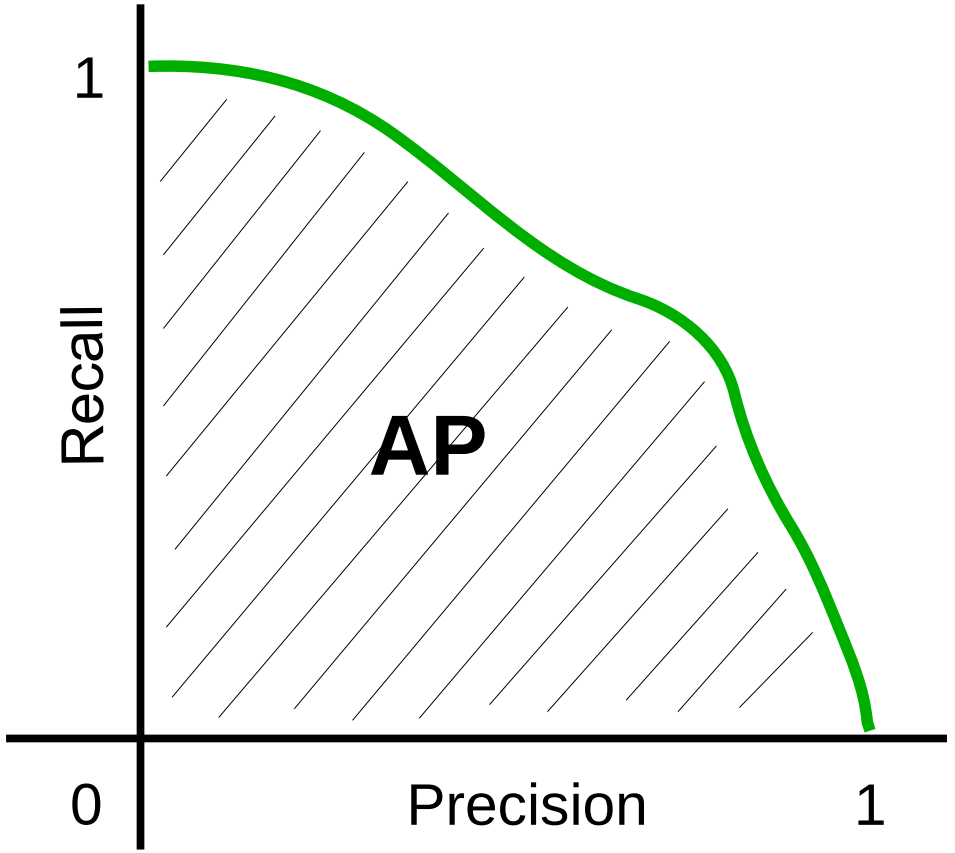
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Curba Precision-Recall



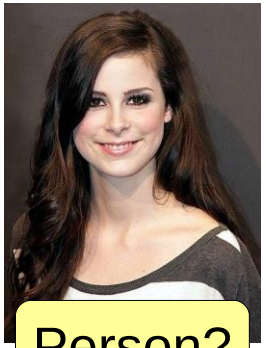
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

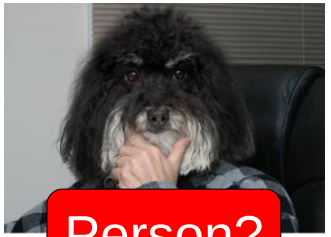
- Average Precision

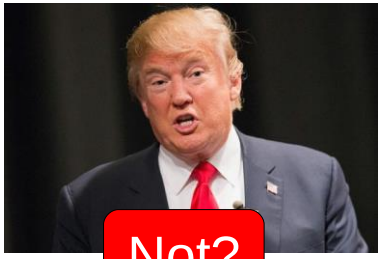


Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Calculul măsurilor TPR și FPR







- TPR = TP / (TP + FP)

  = 66.67%

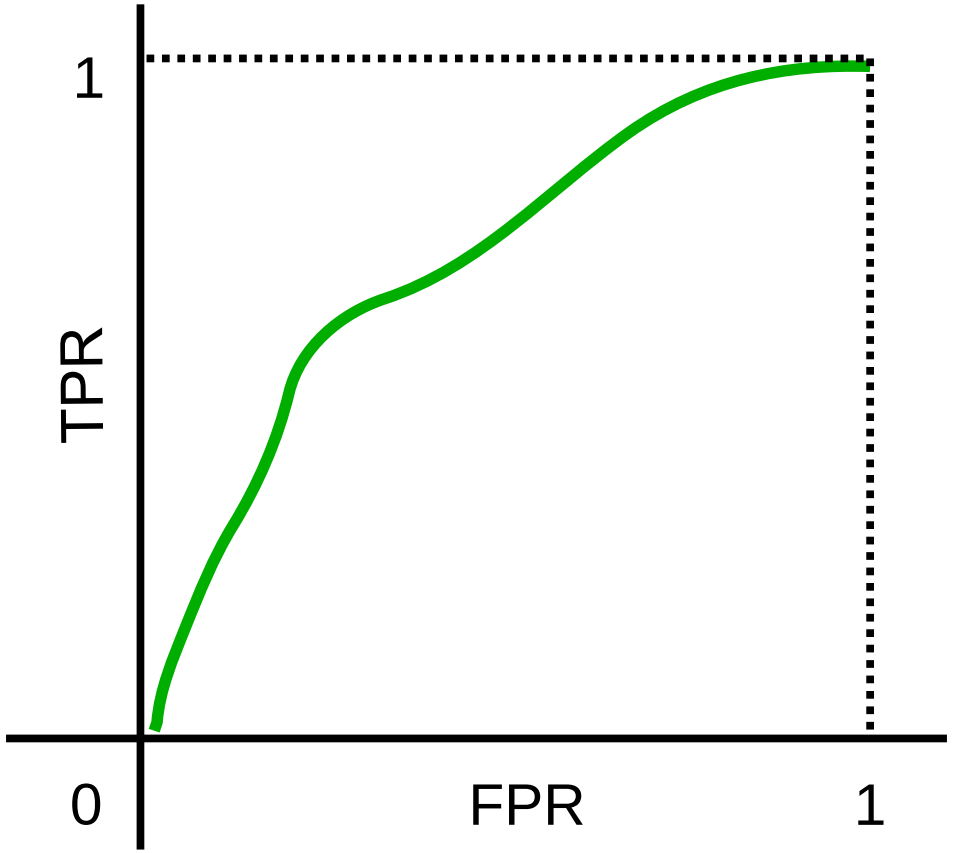
- FPR = FP / (FP + TN)

  = 33.33%

	Predicted YES	Predicted NO
Actual YES	2	1
Actual NO	1	2

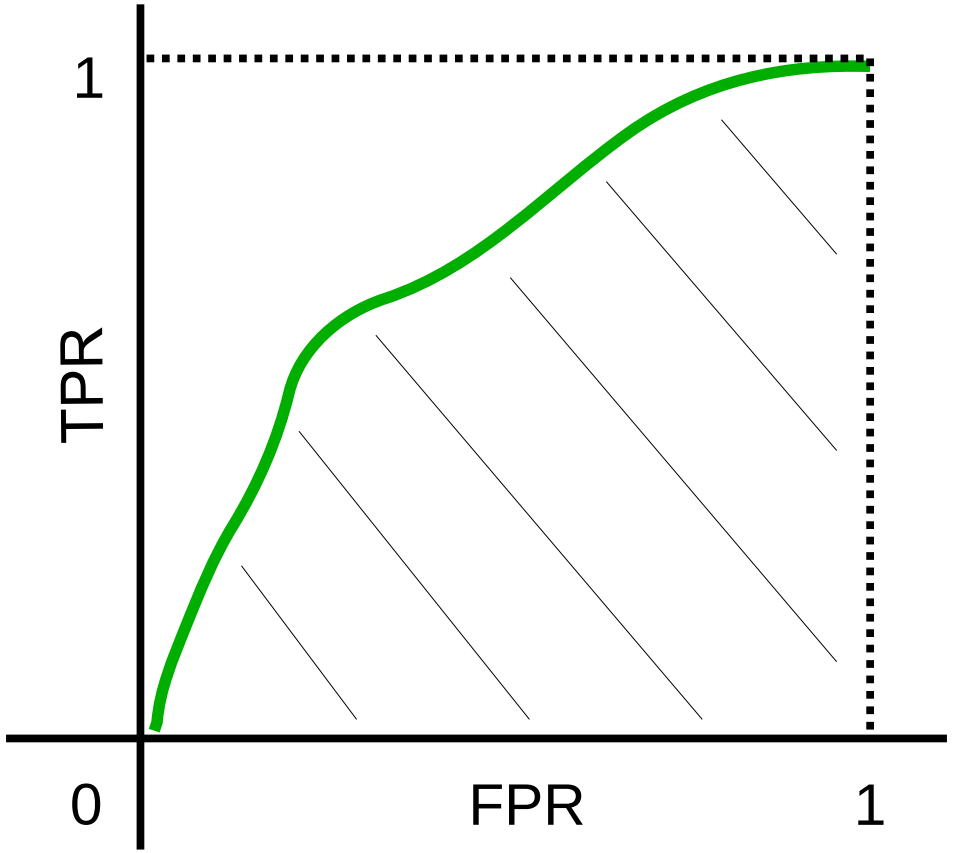
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Curba ROC (Receiver Operating Characteristic)



Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Măsura AUC: Aria de sub curba ROC



Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

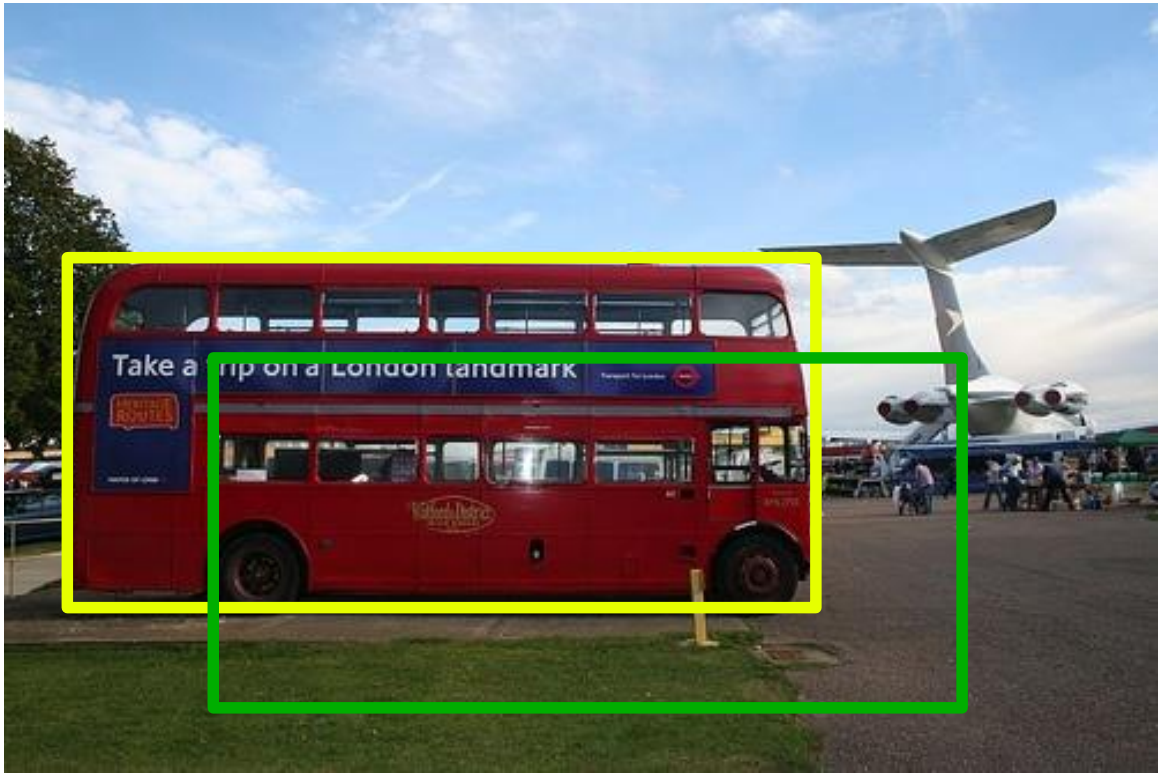
- Măsura F_β

$$F_\beta = (1 + \beta^2) \cdot \frac{\mathrm{precision} \cdot \mathrm{recall}}{(\beta^2 \cdot \mathrm{precision}) + \mathrm{recall}}$$

- Măsura F_1 este poate cea mai folosită măsură de tipul F_β

Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Intersecție supra Reuniune (indexul Jaccard)



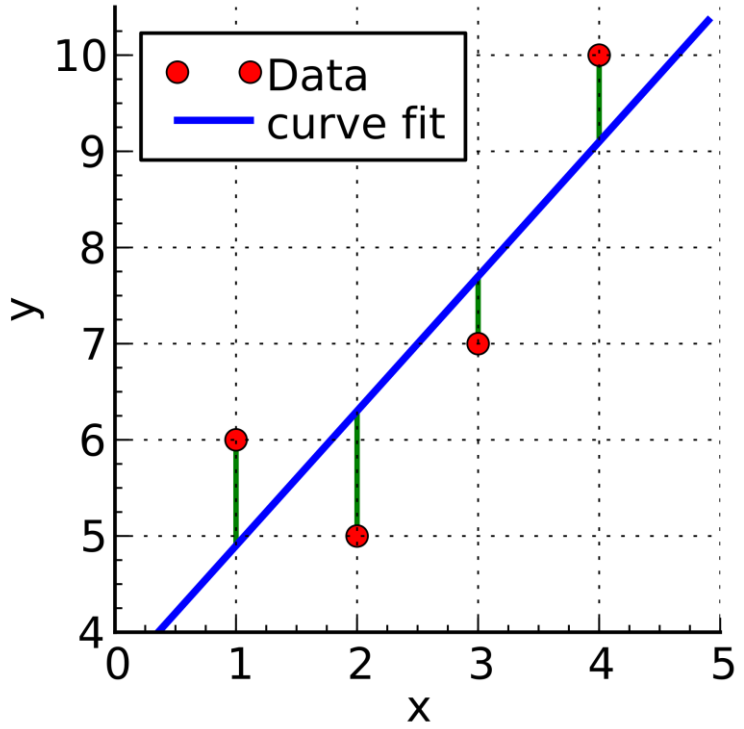
Cum evaluăm un sistem de învățare automată?

- Intersecție supra Reuniune (indexul Jaccard)
- Detecție corectă dacă J(A,B) > 0.5

Cum evaluăm un sistem de regresie?

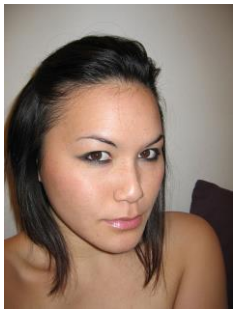
- Media pătratelor erorilor (MSE)

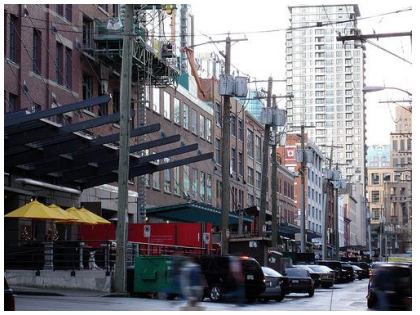
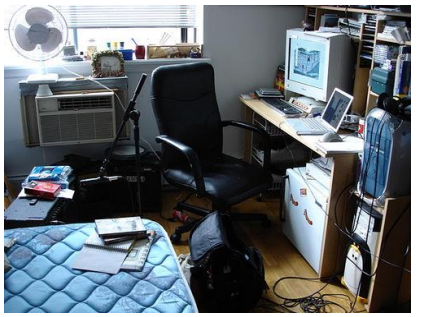
$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{f}(x_i))^2$$



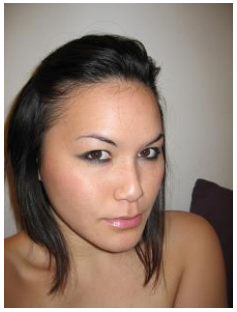
Cum evaluăm un sistem de regresie?

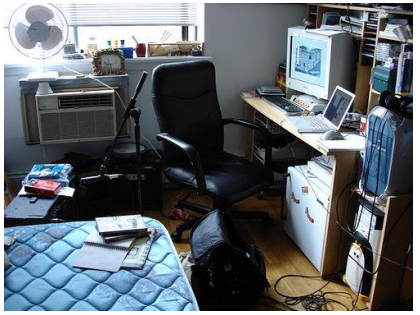
- Ordinea dificultății conform oamenilor

- Ordinea dificultății prezisă de sistem




Cum evaluăm un sistem de regresie?

- Corelația Kendall Tau:

$$\tau_a = \frac{P - Q}{\frac{n(n-1)}{2}}$$

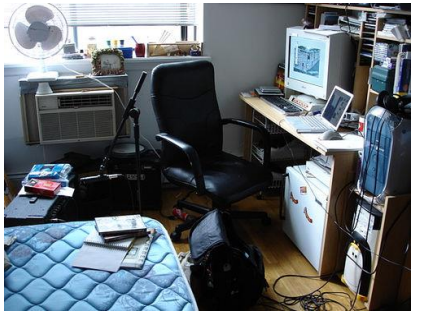
- Măsură ordinală bazată pe perechi concordante (P) și discordante (Q)

$$P = |\{(i,j) : 1 \leq i < j \leq n, (x_i - x_j)(y_i - y_j) > 0\}|$$

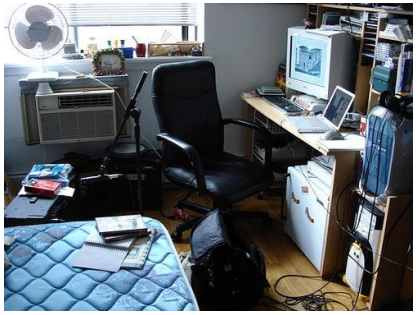
$$Q = |\{(i,j) : 1 \leq i < j \leq n, (x_i - x_j)(y_i - y_j) < 0\}|$$

Cum evaluăm un sistem de regresie?

- Ordinea dificultății conform oamenilor

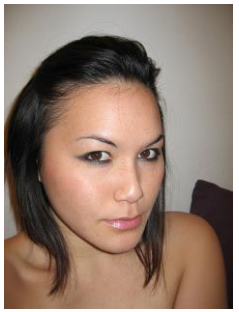


- Concordantă cu ordinea prezisă de sistem

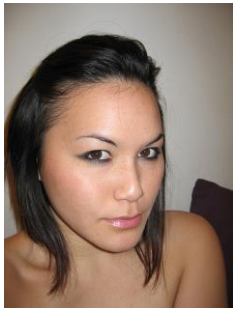


Cum evaluăm un sistem de regresie?

- Ordinea dificultății conform oamenilor

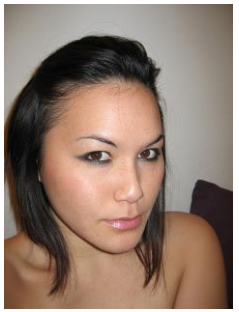



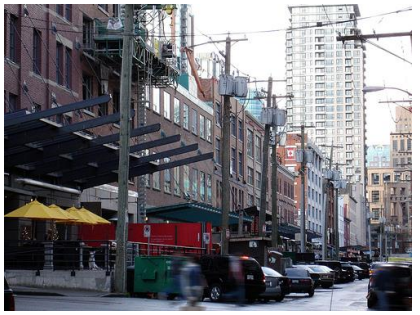
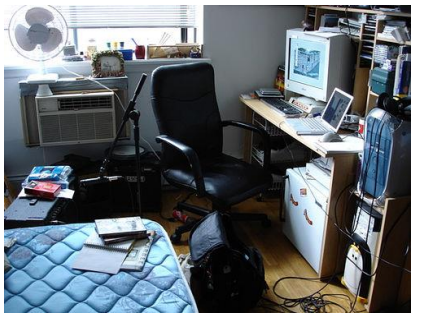
- Discordantă cu ordinea prezisă de sistem



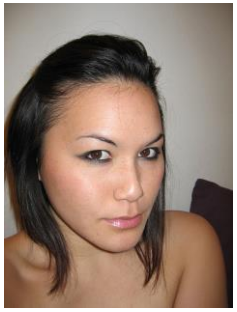

Cum evaluăm un sistem de regresie?

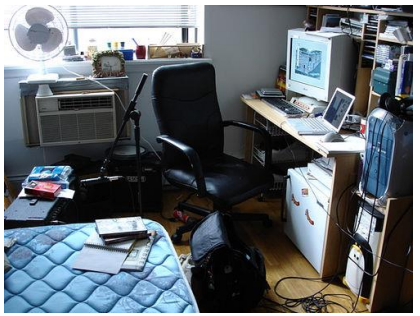
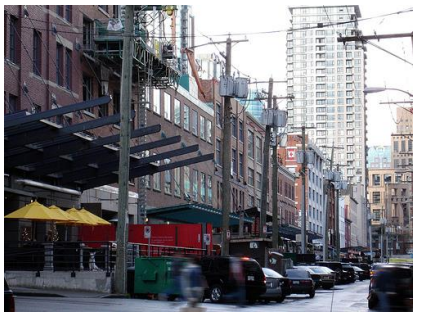
- Cât este corelația Kendall Tau?

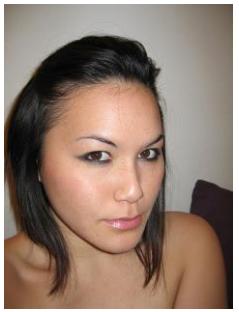
- P = ?, Q = ?

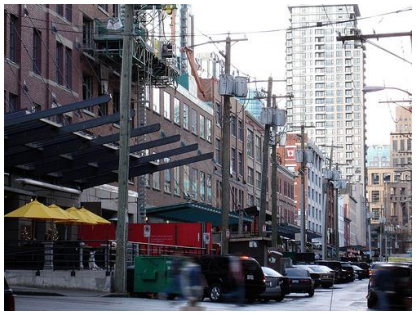
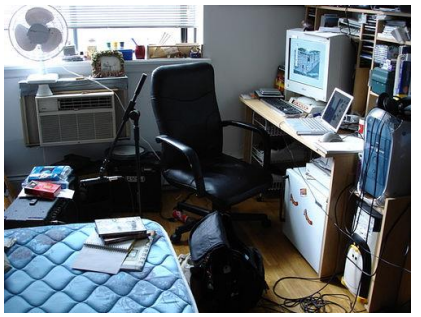


Cum evaluăm un sistem de regresie?

- Cât este corelația Kendall Tau?

- P = 7, Q = 3, Kendall Tau = (7-3) / 10 = 0.4