SkaiWD – Laboratorium 2

Barycentryczny układ współrzędnych

Iwo Błądek

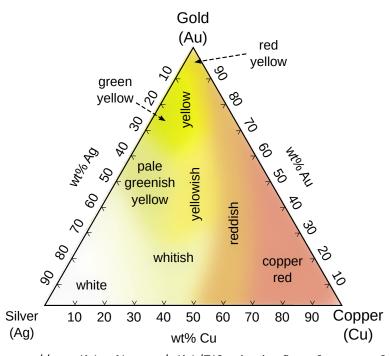
21 marca 2019

1 Barycentryczny układ współrzędnych

Podstawowa wiedza została przekazana na wykładzie. W tej sekcji znajdują się proste ćwiczenia na przypomnienie.

Zadanie 1.1: Narysuj trójkąt równoboczny ABC i zaznacz w nim, traktując wierzchołki jako wymiary barycentrycznego układu współrzędnych, następujące punkty (kombinacje wypukłe wierzchołków): a = (1,0,0), b = (0,1,0), c = (0,0,1), d = (1/2,1/2,0), e = (0,1/2,1/2), f = (1/3,1/3,1/3).

Zadanie 1.2: Odpowiedz na pytania dotyczące poniższego barycentrycznego wykresu (ang. ternary plot).



 ${\rm \acute{Z}r\acute{o}d\acute{e}o: https://en.wikipedia.org/wiki/File:Ag-Au-Cu-colours-english.svg}$

- 1. Jaki potencjalnie kolor może mieć stop z 60% zawartością złota? A 60% srebra?
- 2. Jakim proporcjom stopów odpowiada wysokość trójkąta poprowadzona od wierzchołka dla złota do podstawy?
- 3. Podaj formułę logiczną opisującą możliwe stosunki metali prowadzące do czerwonawego zabarwienia stopu (reddish, copper red).
- 4. Podaj formułę logiczną opisującą możliwe stosunki metali prowadzące do żółtawego zabarwienia stopu (yellow, yellowish, pale greenish yellow).

2 Ocena miar jakości klasyfikacji

Układ barycentryczny można wykorzystać do wizualizacji miar jakości klasyfikacji 2-klasowej i badania ich właściwości. Jednym z kierunków takiej analizy może być przypadek niezrównoważonej liczności klas, na którym się na tych zajęciach skupimy.

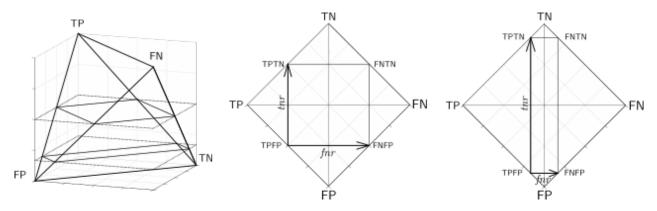
Poniżej po lewej stronie dla przypomnienia została przedstawiona macierz pomyłek. W środkowej tabelce zawarte są alternatywne oznaczenia. Po prawej stronie znajduje się macierz z przykładowymi wartościami dla równej liczności klas (50P, 50N).

	P_{pred}	N_{pred}
P	TP	FN
\overline{N}	FP	TN

	P_{pred}	N_{pred}
P	a	\mathbf{c}
\overline{N}	b	d

	P_{pred}	N_{pred}
P	40	10
N	20	30

Poniższa ilustracja pokazuje interpretację rzutów (cross-sections) dla pewnego stosunku elementów należących do pozytywnej i negatywnej klasy. Będzie to przydatne w dalszej części zadań.

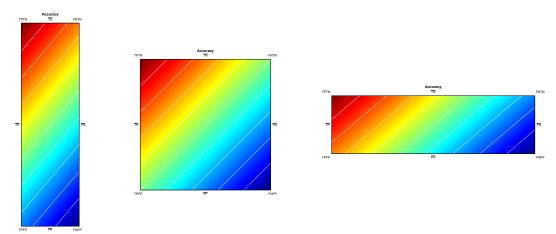


Zadanie 2.1: Wejdź na stronę https://dabrze.shinyapps.io/Tetrahedron/. Alternatywnie, możesz uruchomić środowisko lokalnie pobierając je z repozytorium (https://github.com/dabrze/tetrahedron) i instalując wymagane paczki języka R (np. korzystając ze skryptu install_libraries.R). Poeksperymentuj trochę ze środowiskiem by poznać możliwości konfiguracji widocznych na ekranie elementów. Możesz również zapoznać się z pomocą w zakładce Help.

Zadanie 2.2: Przejdź do zakładki Tetrahedron. Jako miarę ustaw trafność klasyfikacji (Accuracy). Każdy punkt czworościanu odpowiada pewnej klasie macierzy pomyłek. Taką klasę można jednoznacznie zapisać wypełniając macierz iloczynami pewnych stałych i parametru n oznaczającego liczbę klasyfikowanych przypadków, np. $\begin{pmatrix} 0.5n & 0 \\ 0.2n & 0.3n \end{pmatrix}$ (jak przyjmiemy taką interpretację n, to stałe muszą sumować się do 1). Innymi słowy, istotne są wzajemne proporcje między elementami wpadającymi w poszczególne pola, a nie absolutne wartości. Odpowiedz na poniższe pytania. Zapisuj klasy macierzy w abstrahującej od konkretnych wartości formie.

- 1. Jakie macierze pomyłek reprezentowane są w wierzchołkach czworościanu? Czy tego typu sytuacje często występują w problemach klasyfikacji?
- 2. Co się będzie zmieniać, jeżeli będziemy się stopniowo poruszać po krawędzi TNTP? A FNFP? Jakie klasy macierzy pomyłek odpowiadają takiej sytuacji?
- 3. Jakim macierzom pomyłek odpowiada punkt środkowy czworościanu?
- 4. Załóżmy, że mamy sytuację równej ilości przypadków należących do klasy decyzyjnej pozytywnej i negatywnej. Takiej sytuacji odpowiada pewien przekrój przez czworościan, na którym będą mogły się znajdować macierze pomyłek. Wskaż ten przekrój. Jaka to będzie figura geometryczna?
- 5. Załóżmy, że 75% przykładów należy do klasy N, a 25% do klasy P. Który przekrój przez figurę będzie odpowiadał takiej sytuacji? Jaka to będzie figura geometryczna?

Zadanie 2.3: Przejdź do zakładki *Cross-sections* i ustaw jako miarę *Accuracy*. W tym panelu można obserwować i analizować przekroje z ostatnich punktów poprzedniego zadania. Suwak *Minority ratio* pozwala na określenie stosunku między liczbą elementów w klasie pozytywnej do liczby wszystkich elementów (czyli 0.1 odpowiada sytuacji, gdy 10% przypadków należy do klasy pozytywnej, a 90% do negatywnej). Domyślnie ustawiona jest równa liczność elementów między klasami. Kolor odpowiada wartości miary w danym punkcie. Poniżej przedstawione są przekroje odpowiednio dla *Minority ratio* równego 0.25, 0.5 i 0.75.



- 1. Jakim macierzom pomyłek odpowiadają poszczególne wierzchołki? Podpowiedź: FNTN odpowiada sytuacji, w której wszystkie elementy są klasyfikowane jako należące do klasy N.
- 2. Zwróć uwagę na krawędzie przekroju. Oznaczenia na krawędziach, np. \overline{TN} , mówią o niezmienniku na danej krawędzi. Dla \overline{TN} oznacza to, że wszystkie przypadki negatywne są poprawnie klasyfikowane na odcinku TPTN-FNTN. Przeanalizuj pod tym względem pozostałe krawędzie.

- 3. Jak pewnie wiesz, trafność klasyfikacji uznawana jest za słabą miarę w przypadku niezbalansowanych klas. Przekonaj się o tym, analizując wartości tej miary w zależności od stopnia niezbalansowania. Na czym polega główny problem związany z tą miarą?
- 4. Jedną z modyfikacji trafności klasyfikacji jest Balanced accuracy, liczona jako $\frac{1}{2}(\frac{TP}{P} + \frac{TN}{N})$. Przeanalizuj tę miarę i spróbuj ocenić, czy rozwiązała główne problemy tradycyjnej trafności klasyfikacji.

Zadanie 2.4: Zmień miarę na *F1 score* (możesz sprawdzić jej definicję w zakładce *Measure definitions*). Co się zmieniło i jaki to będzie miało wpływ na ocenę jakości klasyfikacji w zależności od stopnia niezbalansowania?

Zadanie 2.5: Zmień miarę na *G-mean* (możesz sprawdzić jej definicję w zakładce *Measure definitions*). Co się zmieniło i jaki to będzie miało wpływ na ocenę jakości klasyfikacji w zależności od stopnia niezbalansowania?

Zadanie 2.6: Oblicz ręcznie wartości poszczególnych miar trafności klasyfikacji i wypełnij poniższą tabelkę. Sprawdź na odpowiednich przekrojach, czy wartości się zgadzają (poza pierwszym wierszem tabelki, *Minority ratio* powinno być ustawione na 0.2). Następnie odpowiedz na pytania pod tabelką.

	Accuracy	Balanced accuracy	G-mean	F1 score
$\left(\begin{smallmatrix} 40 & 40 \\ 10 & 10 \end{smallmatrix}\right)$	0.5	0.5	0.5	0.615
$\left(\begin{smallmatrix}10&10\\40&40\end{smallmatrix}\right)$	0.5			
$\left(\begin{smallmatrix}15 & 5\\40 & 40\end{smallmatrix}\right)$	0.55			
$\left(\begin{smallmatrix} 5 & 15 \\ 40 & 40 \end{smallmatrix}\right)$	0.45			
$\left(\begin{smallmatrix}10&10\\20&60\end{smallmatrix}\right)$	0.7			
$\left(\begin{smallmatrix} 10 & 10 \\ 60 & 20 \end{smallmatrix}\right)$	0.3			

- 1. Które miary są niezmiennicze ze względu na odwrócenie etykiet klas decyzyjnych?
- 2. Które miary są liniowe? Jak można zdefiniować liniowość miary jakości klasyfikacji?
- 3. Jaką własność G-mean i Balanced accuracy można wskazać na podstawie tabelki? Czy pozostałe miary również mają tę własność?
- 4. Zarówno Balanced accuracy jak i G-mean to średnie określone na TP rate i TN rate. Jakiego rodzaje to średnie?
- 5. (*) Dla chętnych: sprawdź, jaki wykres miałaby średnia harmoniczna TP rate i TN rate korzystając z pola *Custom function* na wizualizacji (jako zmienne można użyć tp, fn, tn, fp; operatory matematyczne standardowo).

3 Wybieranie odpowiedniej miary

Jak można zauważyć w tabelce, każda z miar przypisuje inne oceny do tych samych macierzy pomyłek. Wybór miary jakości jest w istocie wyborem relacji porządku między różnymi macierzami

pomyłek. Ponadto wybór ten jest subiektywny, ponieważ zależy zasadniczo od preferencji użytkownika chcącego rozwiązać jakiś problem uczenia maszynowego. Na dostępne w literaturze miary należy patrzeć jak na propozycje o pewnych charakterystykach i matematycznych właściwościach.

Zadanie 3.1: Zastanów się, w jakiej sytuacji nieliniowa miara jakości (np. F1 score, G-mean) może być bardziej użyteczna niż liniowa miara Balanced accuracy?

Zadanie *3.2: (Dla chętnych) Przeczytaj esej krytykujący F1 score: https://adamyedidia.files.wordpress.com/2014/11/f_score.pdf.