

# Klasyfikatory/Regresory

Jarosław Jasiewicz  
**Eksploracja danych i Uczenie maszynowe**

Geoinformacja program magisterski  
Specjalność Geoinformatyka

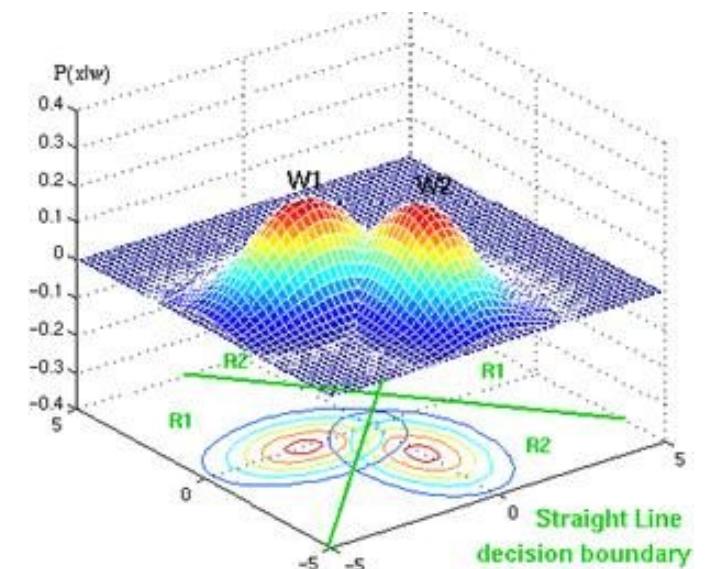
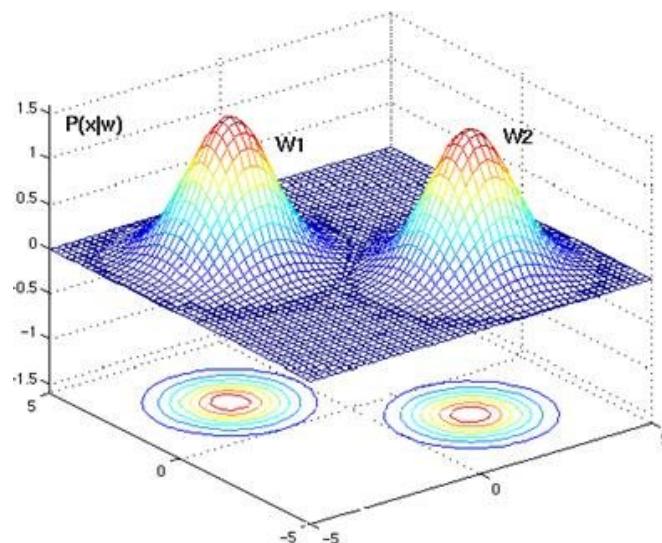
# Wybrane metody regresji/klasyfikacji

- Naiwny klasyfikator Bayesa
- Metody najbliższego sąsiada
- Metody dyskryminacyjne
- Metoda częściowych najmniejszych kwadratów
- Drzewa decyzyjne
- Metody adaptacyjne
- Sieci neuronowe
- Wektory wsparcia
- Metody wzmacniane

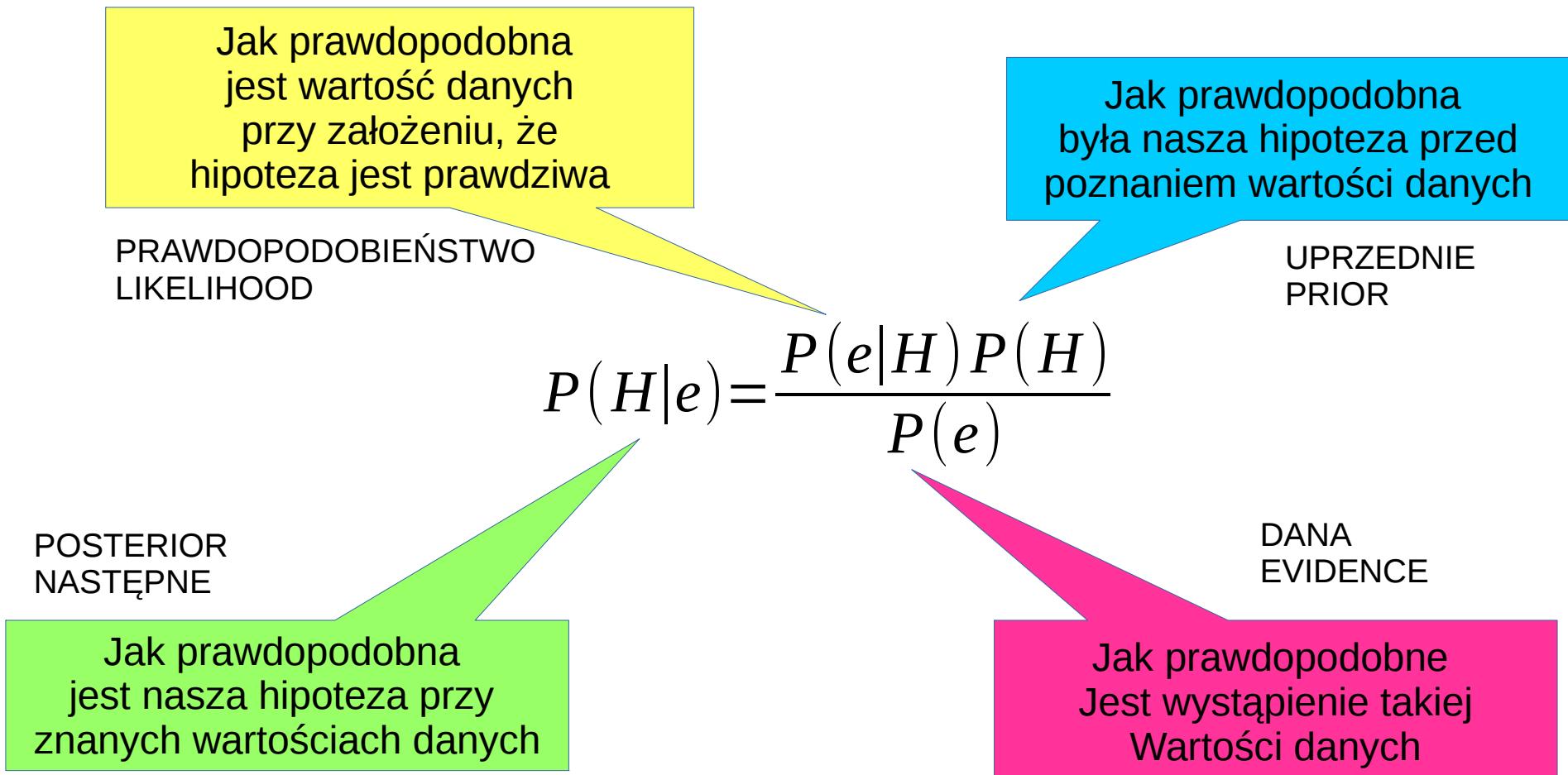
# Naiwne klasyfikatory Bayesa

Grupa prostych klasyfikatorów probabilistycznych wykorzystująca (naiwne) założenie o **silnej niezależności** pomiędzy zmiennymi uczącymi. Nie jest stosowany w regresji

- Zalety:
  - szybkość i skalowalność, prostota
  - Łatwość treningu na małym zbiorze danych
- Wady
  - Założenie o niezależności predyktorów (zmiennych wyjaśniających)
  - Nie potrafi uwzględnić zależności między cechami



# Co jest czym w prawie Bayesa



# Przykład

Pacjent ma gorączkę, czy ma grypę?

- POSTERIOR: Jakie jest prawdopodobieństwo że pacjent z gorączką ma grypę ???
- LIKELIHOOD: jakie jest prawdopodobieństwo gorączki u chorego na grypę **96%**
- PRIOR: jakie jest prawdopodobieństwo złapania grypy? **1.2%**
- EVIDENCE: jakie jest prawdopodobieństwo wystąpienia gorączki **3.4%**

Odpowiedź:  $(0.96 \cdot 0.012) / 0.034 = 33.9\%$

**Dlaczego:**

Pomimo, że gorączka w czasie grypy jest prawie pewna, to jednak występuje ona 3x częściej w innych przypadkach nie związanych z grypą

# Przykład z teledetekcji

## Klasyfikacja obrazu teledetekcyjnego

- POSTERIOR: Jaka jest skuteczność klasyfikatora do wykrywania budynków ???
- LIKELIHOOD: jaką jest ogólna skuteczność klasyfikatora **71%**
- PRIOR: jaką jest częstość budynków? **12.7%**
- EVIDENCE: jakie jest odbicie spektralnego typowego dla budynku **12.9%**

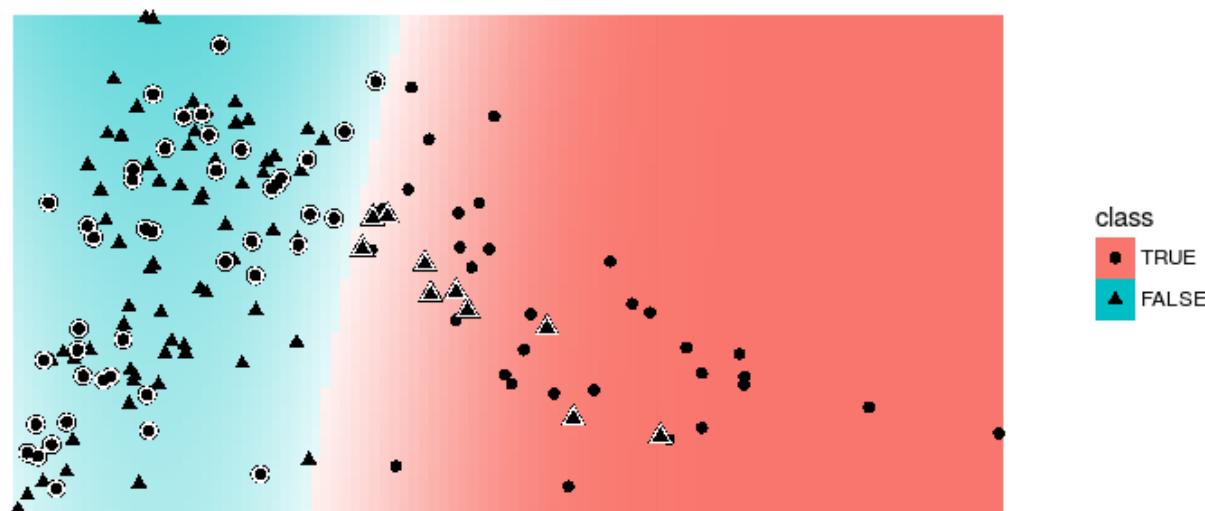
Odpowiedź:  $(0.71 * 0.127) / 0.129 = 69.8\%$

## Dlaczego:

Cecha na podstawie której klasyfikator rozpoznaje budynki występuje z podobnym pokryciem do budynków

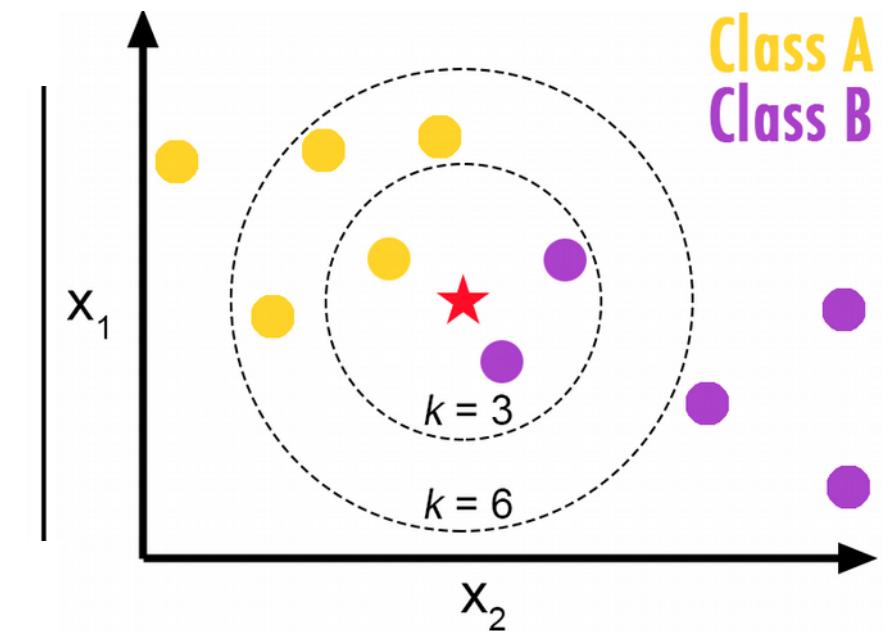
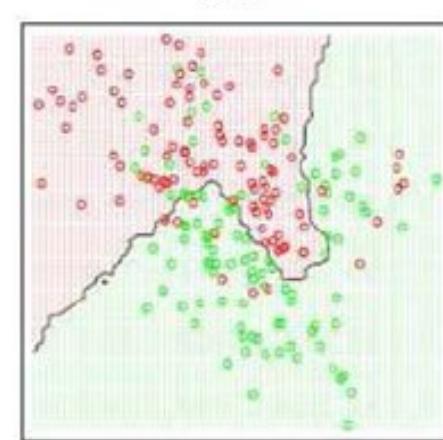
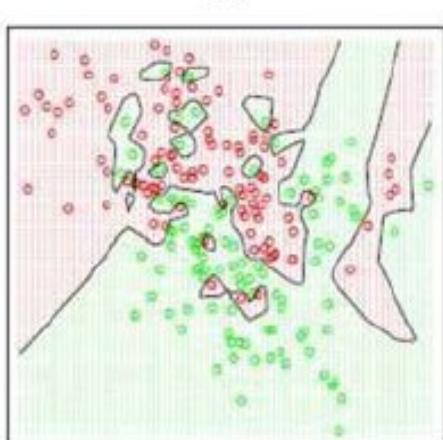
# Przestrzeń decyzyjna Naive Bayes

nbayes:  
Train: mmce=0.353; CV: mmce.test.mean=0.36



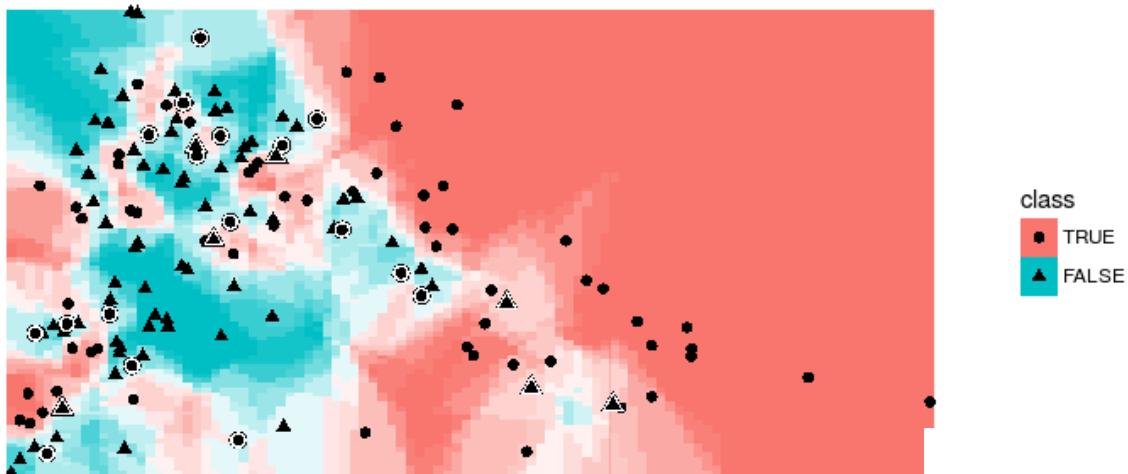
# Algorytm najbliższego sąsiada

- Nieparametryczny algorytm podejmujący decyzję na podstawie właściwości otoczenia w n-wymiarowej przestrzeni, na podstawie k najbliższych sąsiadów. W przypadku klasyfikacji jest to wybór na podstawie większości, w przypadku regresji – wartość średnia
- Klasyfikator łatwy do przeuczenia jeżeli k małe (np. 1), przy wzrastającym k rośnie generalizacja ale też czas obliczeń

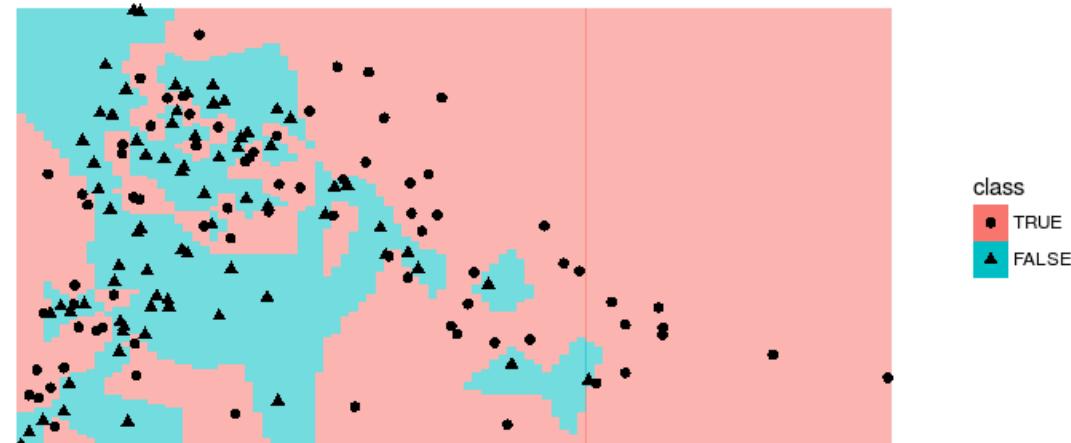


# Przestrzeń decyzyjna kNN

kknn: k=5; scale=FALSE  
Train: mmce=0.16; CV: mmce.test.mean=0.46



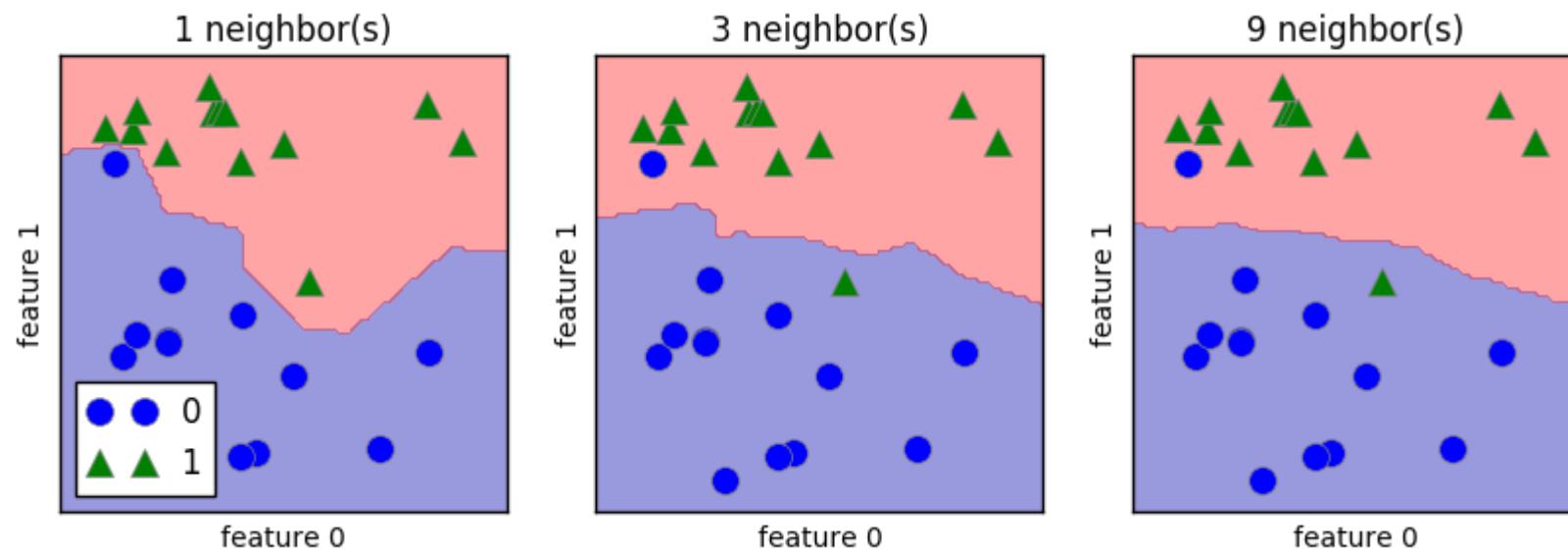
kknn: k=1; scale=FALSE  
Train: mmce= 0; CV: mmce.test.mean=0.46



Wersja przeuczona  $k=1$

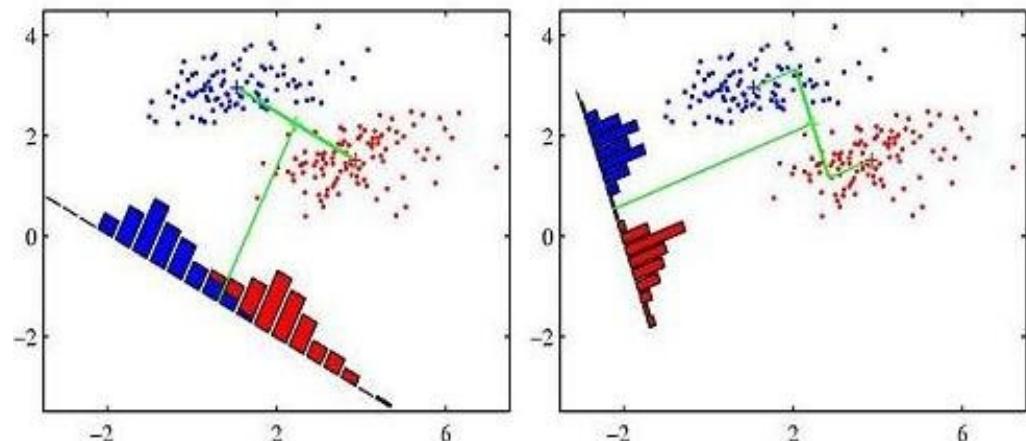
# Przeuczenie kNN

overfitting



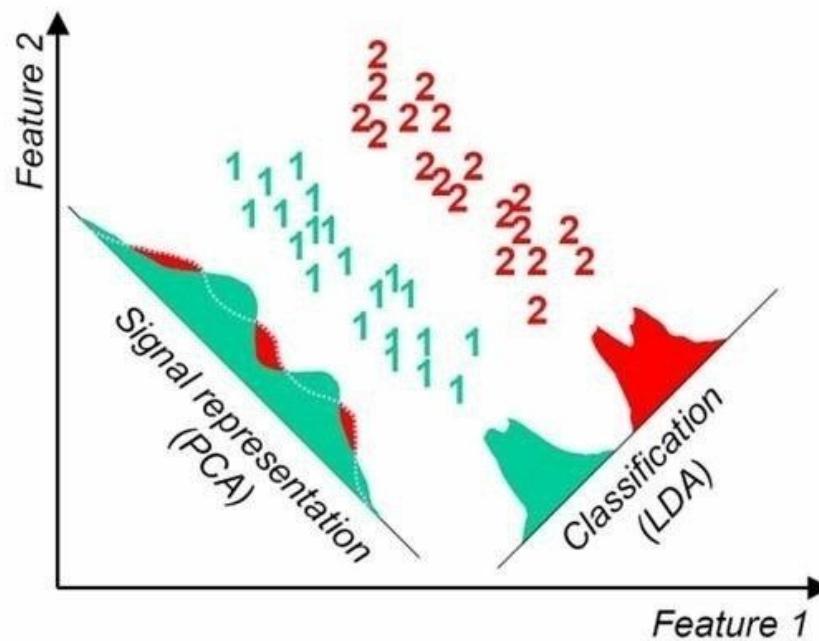
# Analiza dyskryminacyjna

- (Linear) **Discriminant Analysis**
- Algorytm, który poszukuje liniowej kombinacji cech, dla której dseparowanie powyższych klas jest największe.
- Stosowana w **klasyfikacji** (nie nadaje się do **regresji**), lub też jako metoda redukcji wymiarowości
- Oprócz dyskryminacji liniowej stosuje się też odmiany potęgowe i kernelowe



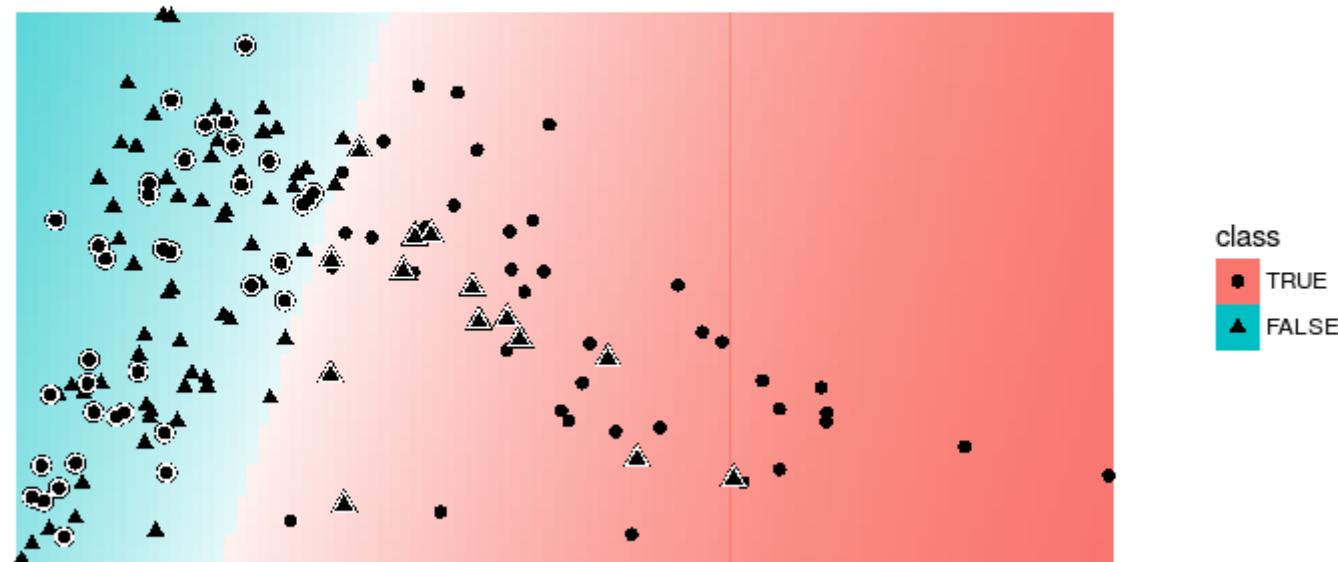
# LDA i PCA

- LDA ma wiele związków z PCA, jako metoda poszukiwania liniowej kombinacji zmiennych, tak aby najlepiej wyjaśnić zmienność w obrębie struktury danych
- Analiza dyskryminacyjna wymaga zmiennej zależnej



# Przestrzeń decyzyjna LDA

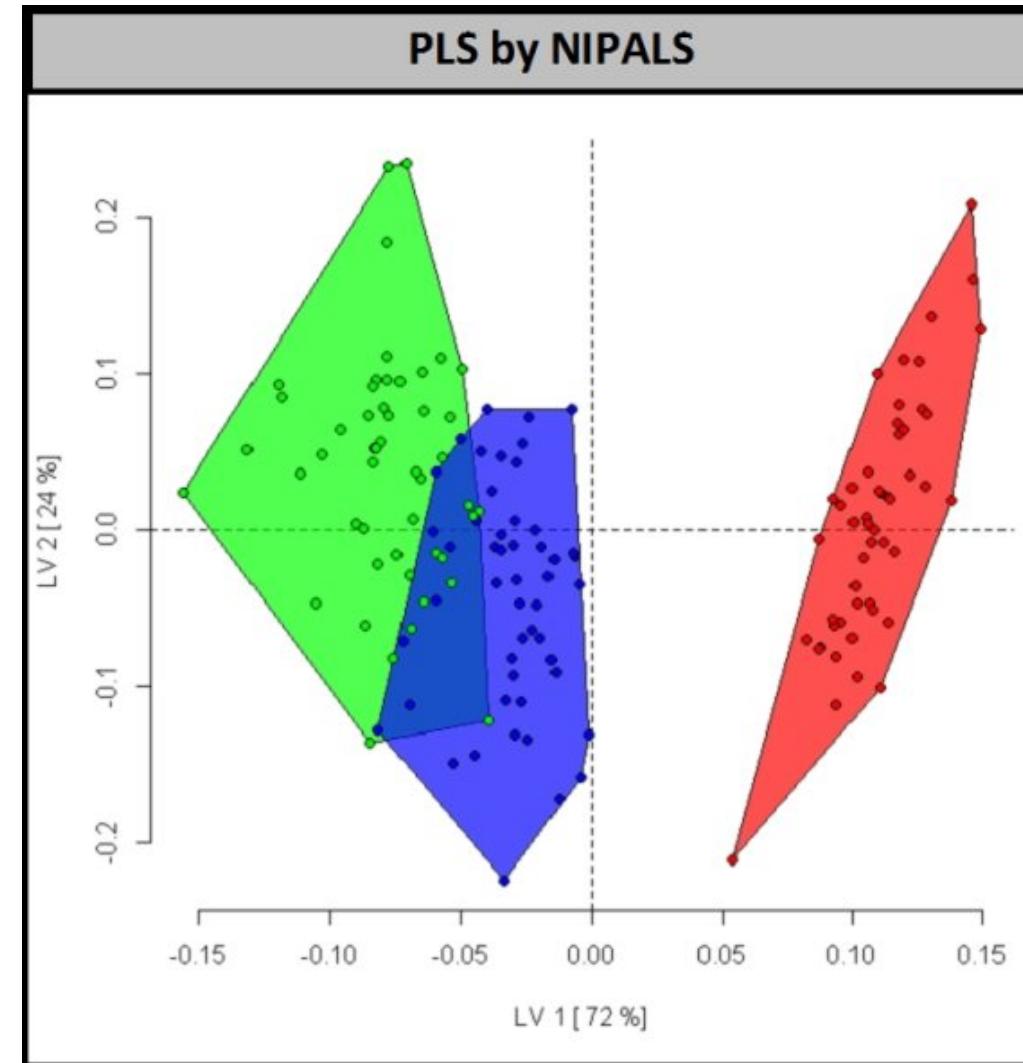
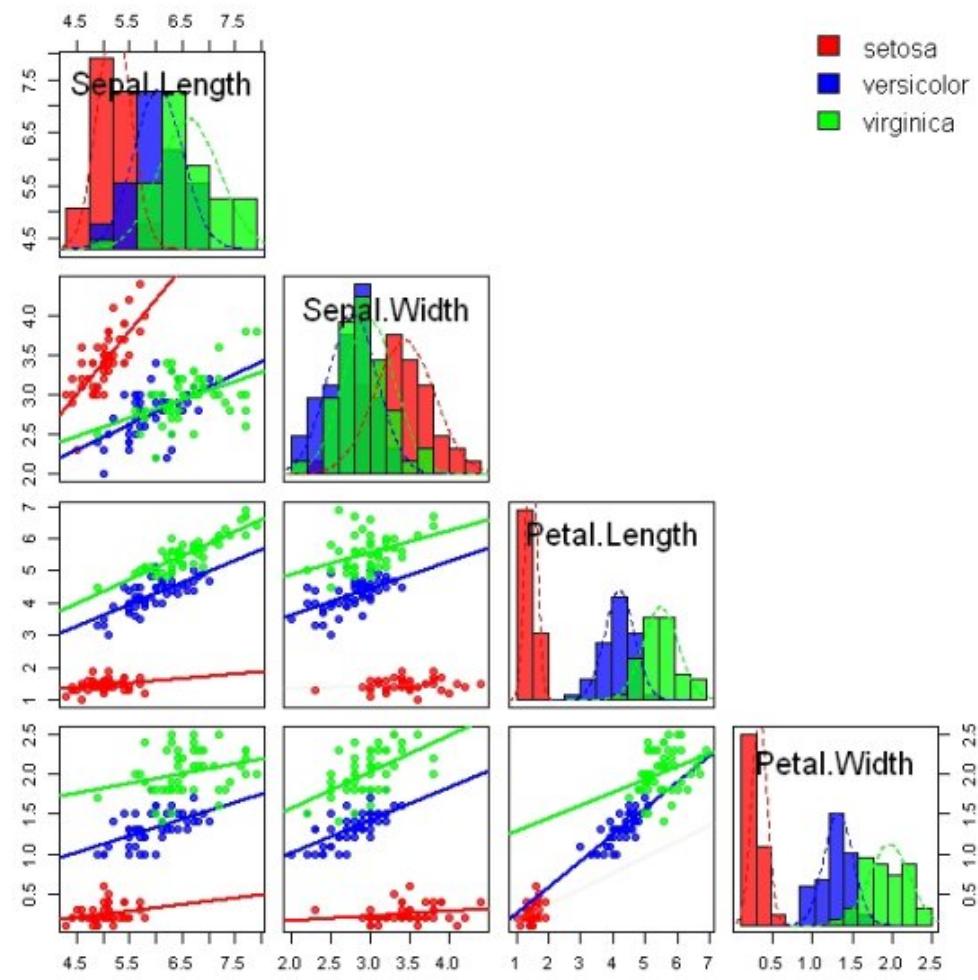
lda: nu=5  
Train: mmce=0.333; CV: mmce.test.mean=0.353



# Metoda częściowych najmniejszych kwadratów

- **Partial least squares** – metoda powiązana z PCA i LDA.  
W przeciwnieństwie do LDA nie szuka hiperpłaszczyzny maksymalizującej wariancję w zmiennych niezależnych dla poszczególnych klas poszukuje zależności liniowej poprzez projekcję zmiennych zależnych i niezależnych do innej przestrzeni (jak PCA)
- Partial least squares -DA odmiana metody dla danych kategoryzacyjnych
- Metoda ma zastosowanie, gdy mamy więcej zmiennych niż obserwacji (typowe dla danych ekologicznych)

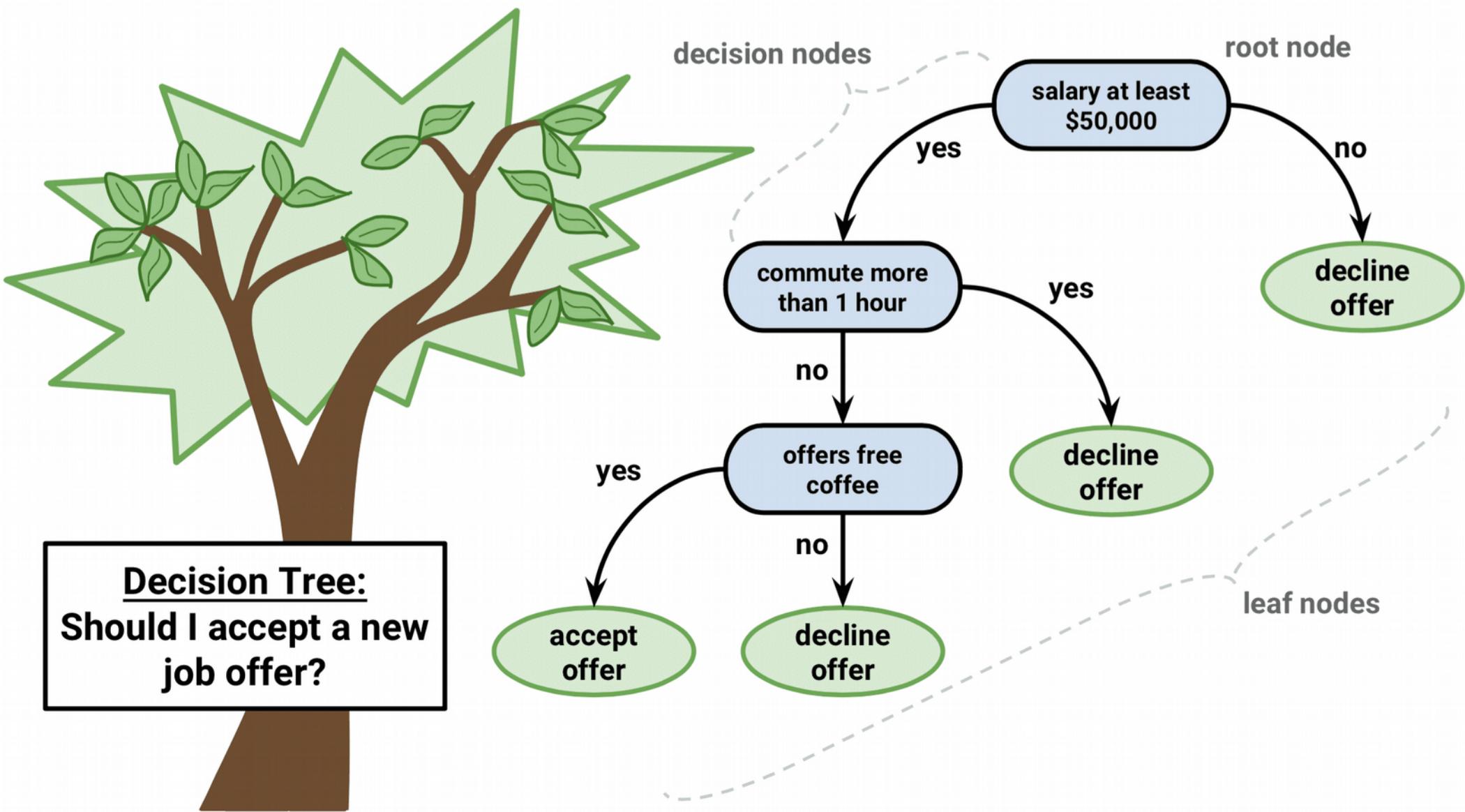
# Jak działa PLS



# Drzewa klasyfikacyjno-regresyjne

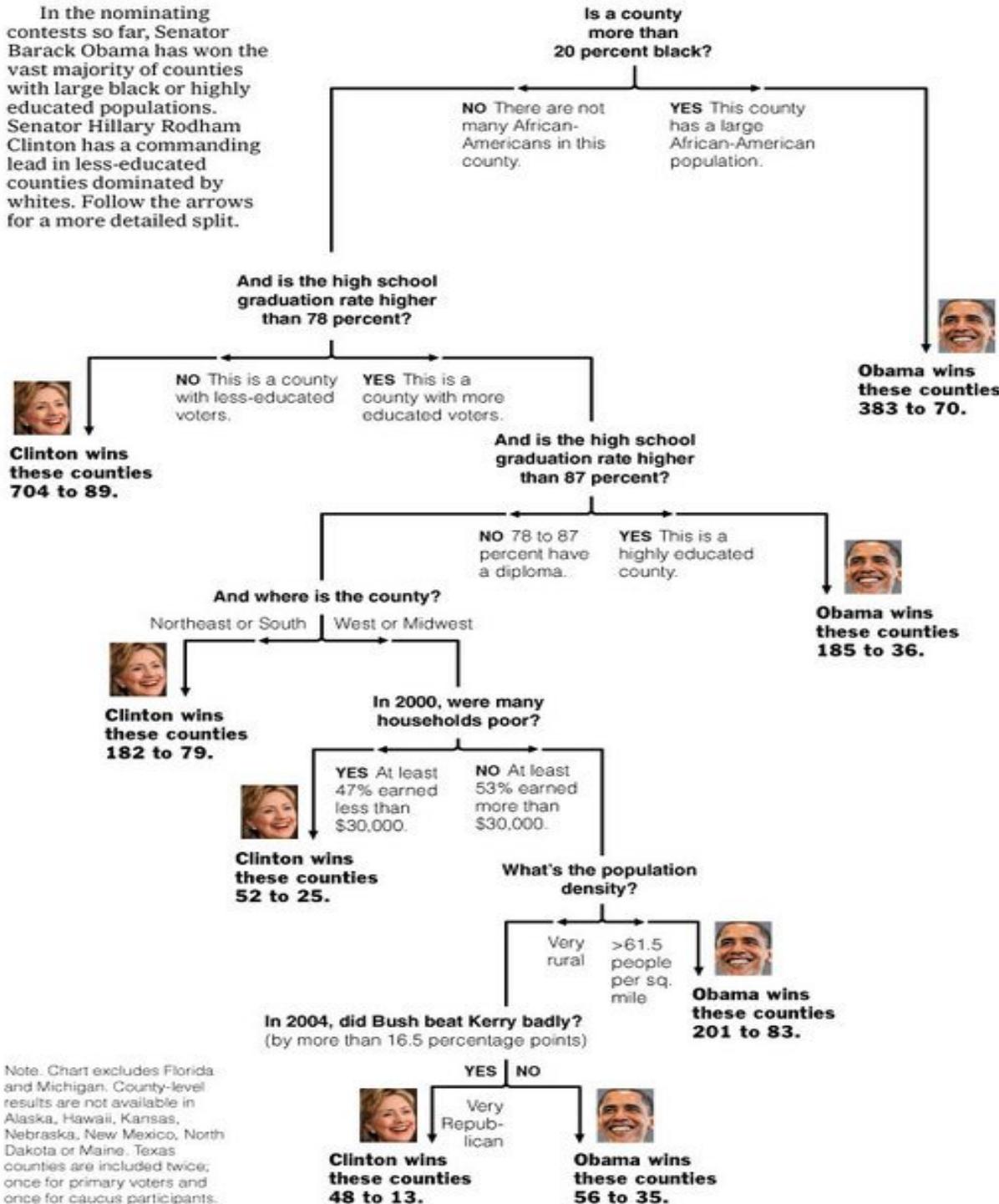
- **Classification and regression trees**
- Popularna metoda uczenia, polega na przewidzeniu klasy (**drzewo klasyfikacyjne**) lub wartości (**drzewo regresyjne**) zmiennej zależnej na podstawie znajdowania reguł w zmiennych wyjaśniających
- Prosta metoda polegająca na kolejnych podziałach, gdzie każdy podział maksymalizuje różnice pomiędzy klasami docelowymi
- Proces podziałów kończy się, kiedy liść zawiera albo czystą klasę, albo dalsze podziały nie są możliwe. W celu uniknięcia przeuczenia (generalizacji modelu) stosuje się przycinanie (pruning)
- Mocne strony:
  - Szybka metoda
  - Przejrzyste kryteria decyzyjne
- Słabe strony
  - Zachłanny algorytm
  - Łatwość przeuczenia
- Odmiany: C45, C50, Qubist

# Drzewa decyzyjne



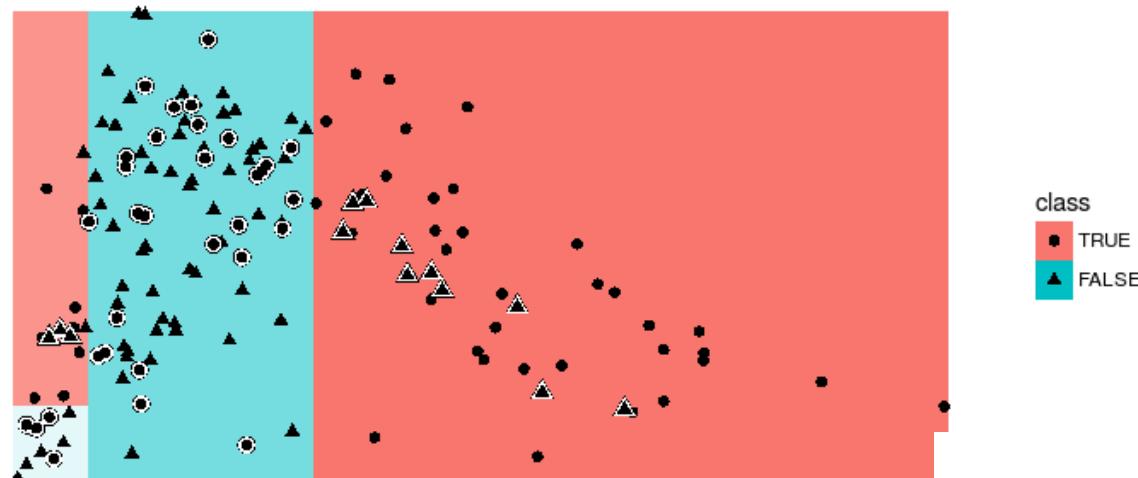
# Decision Tree: The Obama-Clinton Divide

In the nominating contests so far, Senator Barack Obama has won the vast majority of counties with large black or highly educated populations. Senator Hillary Rodham Clinton has a commanding lead in less-educated counties dominated by whites. Follow the arrows for a more detailed split.

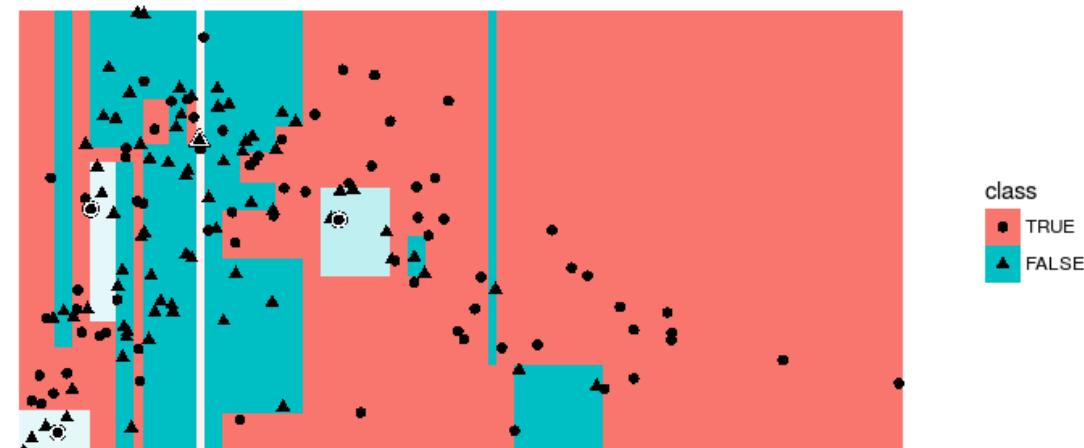


# Przestrzeń decyzyjna CART

rpart: xval=0  
Train: mmce= 0.3; CV: mmce.test.mean=0.433



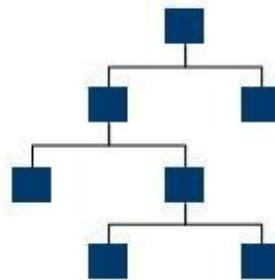
rpart: xval=20; minsplit=3; minbucket=1; cp=0.001  
Train: mmce=0.0267; CV: mmce.test.mean=0.567



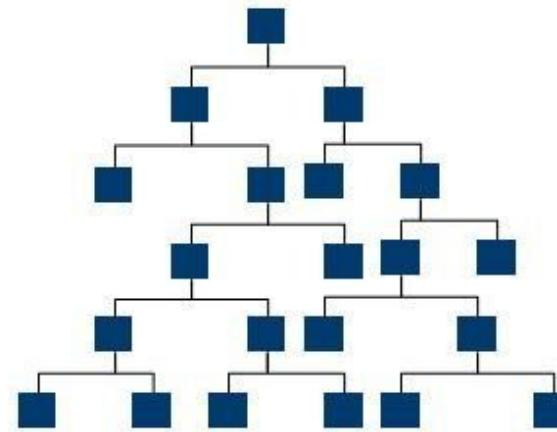
Wersja przeuczona – nadmiar podziałów

# Przeuczenie drzew decyzyjnych

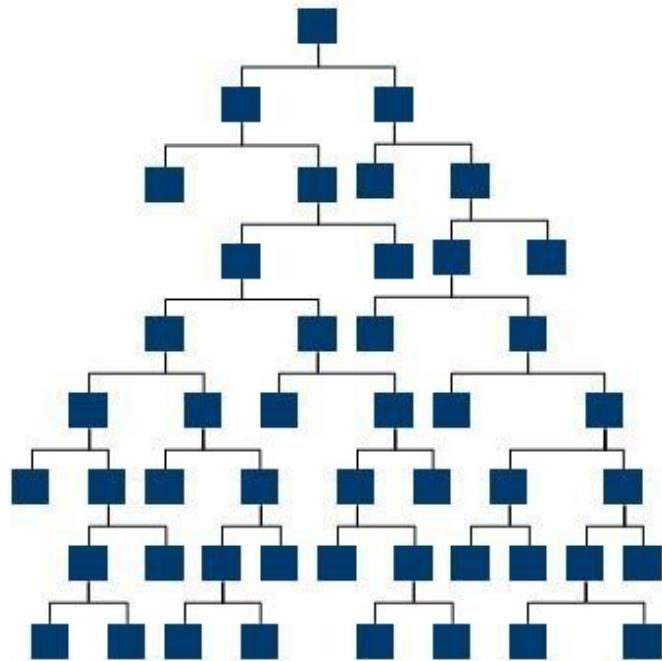
Underfit tree



Optimal tree



Overfit tree



Accuracy on training = 50%

Accuracy on test = 50%

Accuracy on training = 70%

Accuracy on test = 70%

Accuracy on training = 90%

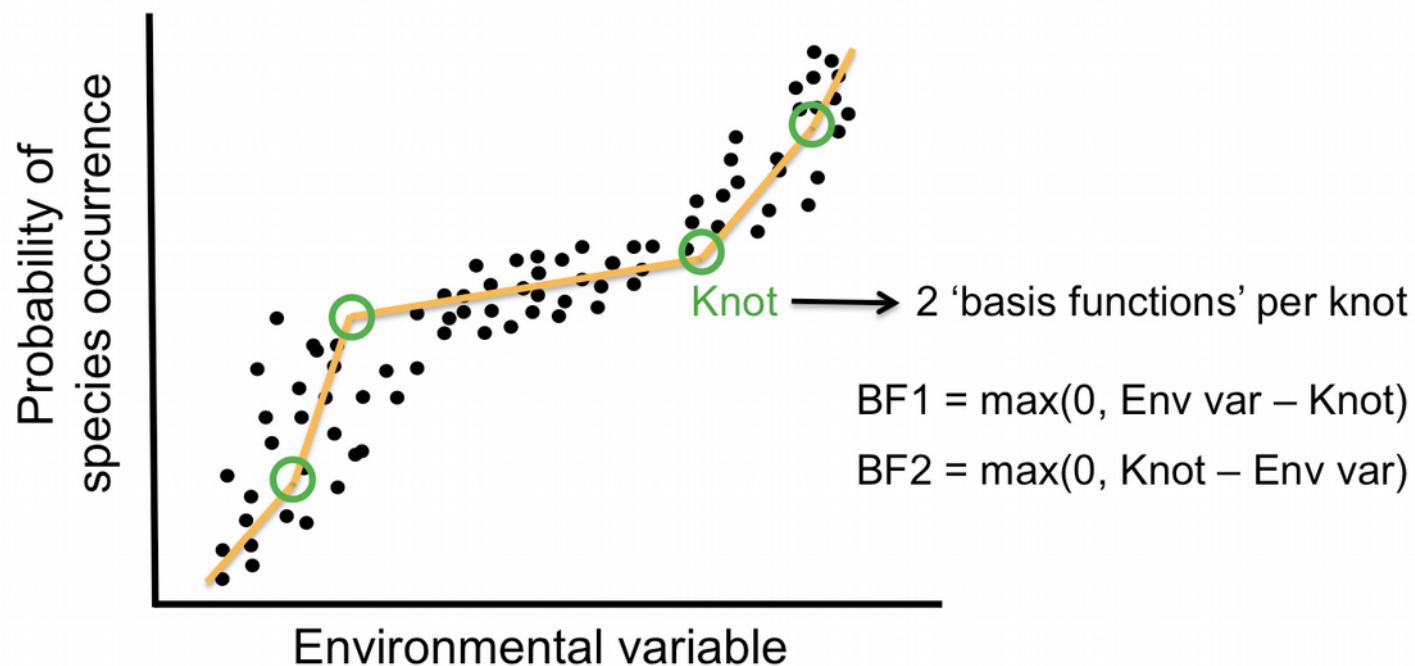
Accuracy on test = 65%

# Regresja nieliniowa i metody adaptacyjne

- Technika nieparametrycznej regresji, automatycznie modelująca nieliniowe zależności pomiędzy zmiennymi
- Zaletą metody jest możliwość stosowania zarówno predyktorów dyskretnych jak i ciągłych
- Prosty do zrozumienia i interpretacji, interpretowany
- Nie wymaga transformacji danych wejściowych
- Samodzielnie dobiera zmienne wyjaśniające na podstawie ich wag
- Popularne metody **MARS/Earth, Spline, GAM** (General Additive model)

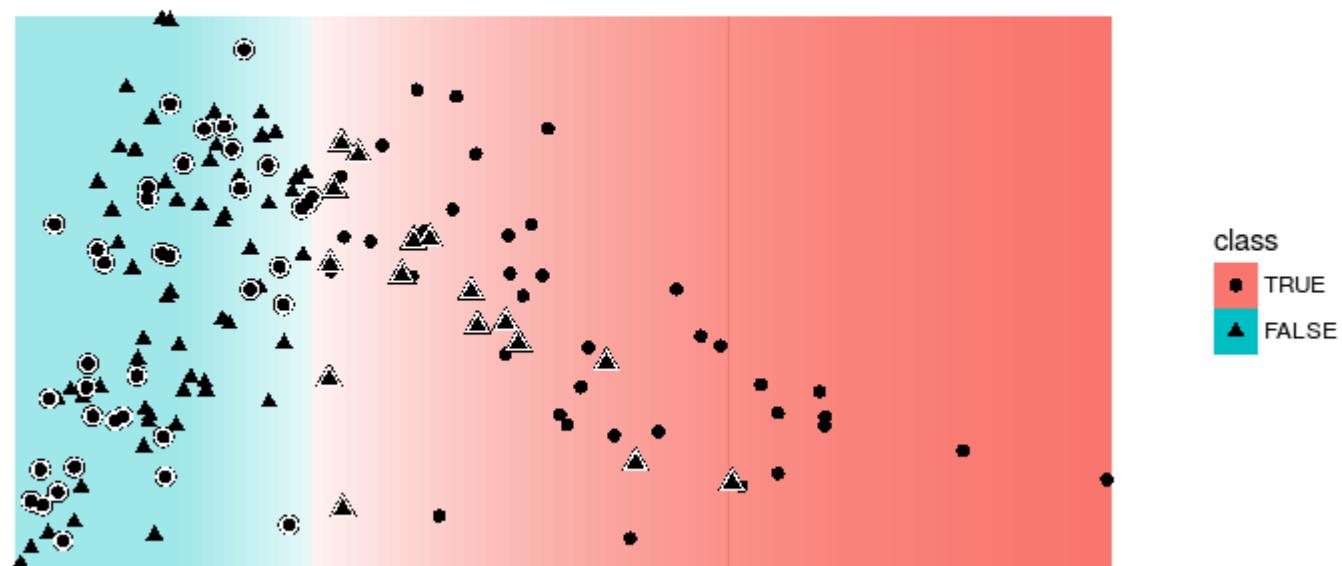
# MARS

- Algorytm dokonuje podziału na danych na podgrupy rozdzielone węzłami, czyli obiektami wyznaczającymi przedziały podgrup
- Zastosowaniu prostych modeli spline dla każdego przedziału
- Analizie zmiennych i wyborze oraz przypisaniu wag tym, które przenoszą najwięcej informacji



# Przestrzeń decyzyjna - MARS

fda: degree=3  
Train: mmce=0.353; CV: mmce.test.mean=0.38



# Modele penalizowane

- Normowane modele regresji liniowej, nie nadają się do klasyfikacji
- Modele penalizowane zapobiegają przeuczeniu
- Przyczyną przeuczenia jest złożoność modelu wyrażająca się wysokimi wartościami niektórych współczynników – **tych które nie są w stanie w sposób prosty wyjaśnić modelu**
- Funkcja kosztu – błąd dopasowania

$$L = \sum (\hat{Y}_i - Y_i)^2$$

- Ogólna postać modelu regresji (dla jednej zmiennej):

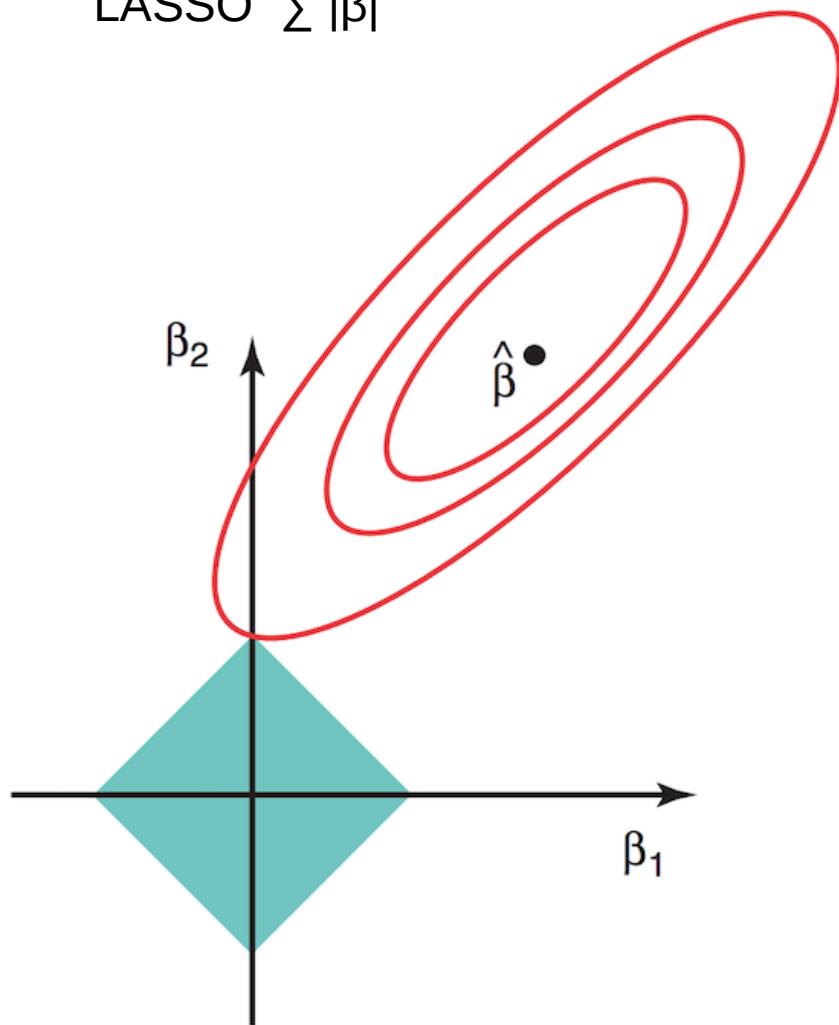
$$\hat{Y} = \beta_0 + \beta_1 X_1$$

- Funkcja kosztu z karą – parametrem normującym: - suma parametrów modelu

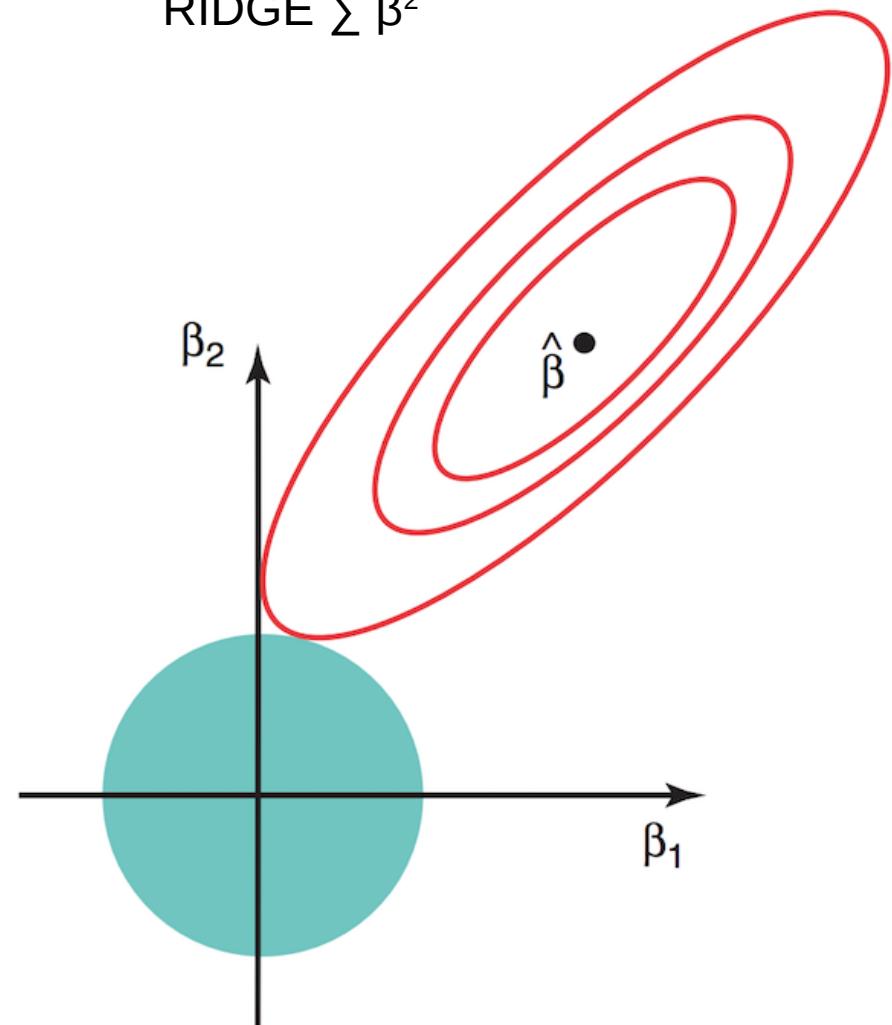
$$L = \sum (\hat{Y}_i - Y_i)^2 + \lambda \sum \beta$$

# Lasso vs. Ridge

LASSO  $\sum |\beta|$



RIDGE  $\sum \beta^2$

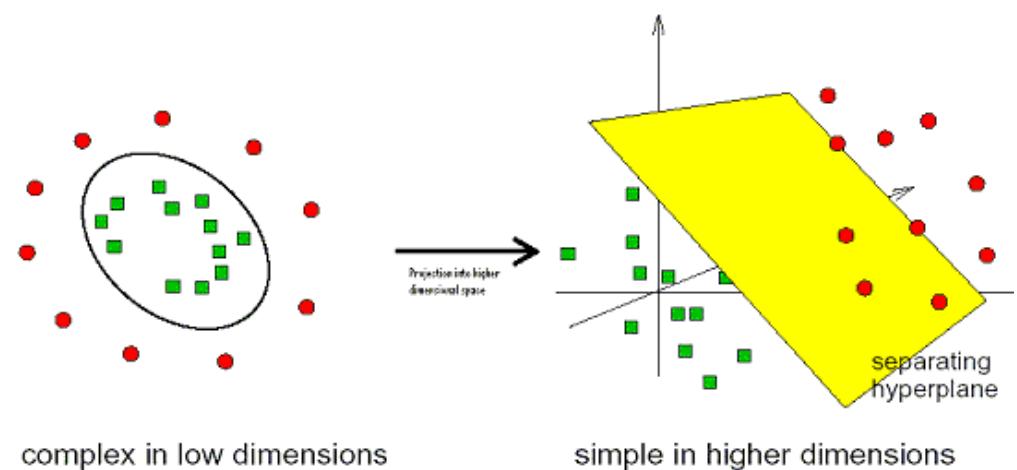
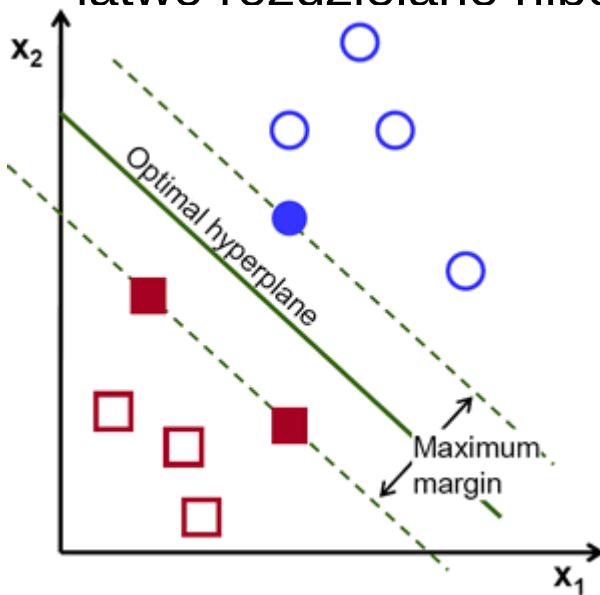


# Popularne modele

- Regresja **Ridge** (Norma L2) – nie usuwa nieistotnych cech, jedynie zmniejsza wartości największych (mało istotnych) współczynników regresji
- Regresja **Lasso** (Norma L1) – ustawia współczynniki wysokie współczynniki cech na 0 w ten sposób usuwa nieistotne cechy (shrinkage – kurczenie modelu)
- Regresja **Elastic Net** (połączenie obu norm)
- Norma to inaczej natężenie wektora cech (zbioru zmiennych)

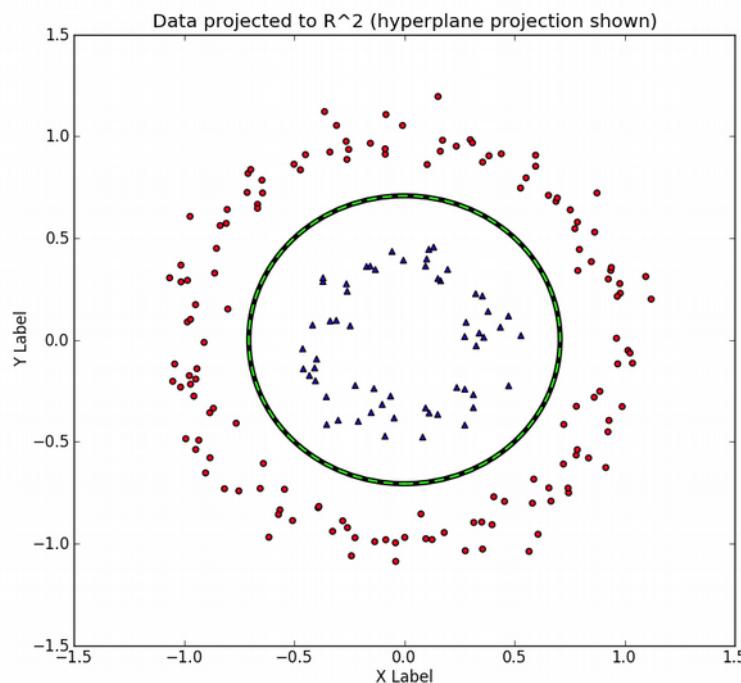
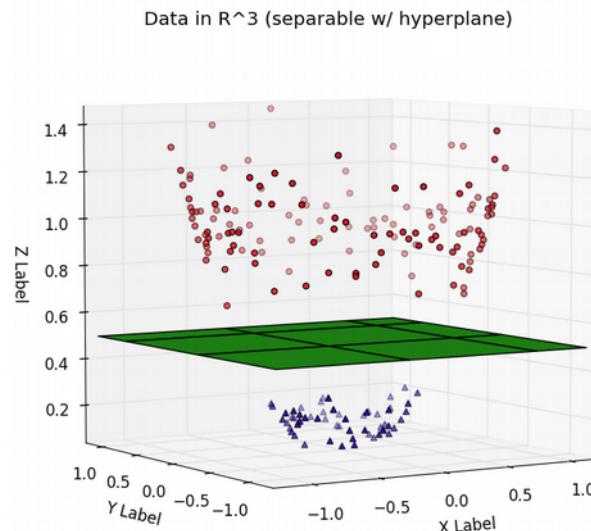
# • Maszyny wektorów wsparcia

- **Support vector machines**
- Klasyfikatory liniowe, podstawą działania jest maksymalizacja marginesu pomiędzy dwoma klasami – odległości pomiędzy dwoma wektorami podpierającymi płaszczyznę rozdzielającą
- Jeżeli klasy nie są możliwe do rozdzielenia liniowo stosuje się funkcje jądrowe poprzez przeniesienie problemu z mniejszej do większej liczby wymiarów
- Obiekty trudne do liniowego rozdzielenia w mniejszej liczbie wymiarów są łatwo rozdzielane hiperplaszczyzną w większej



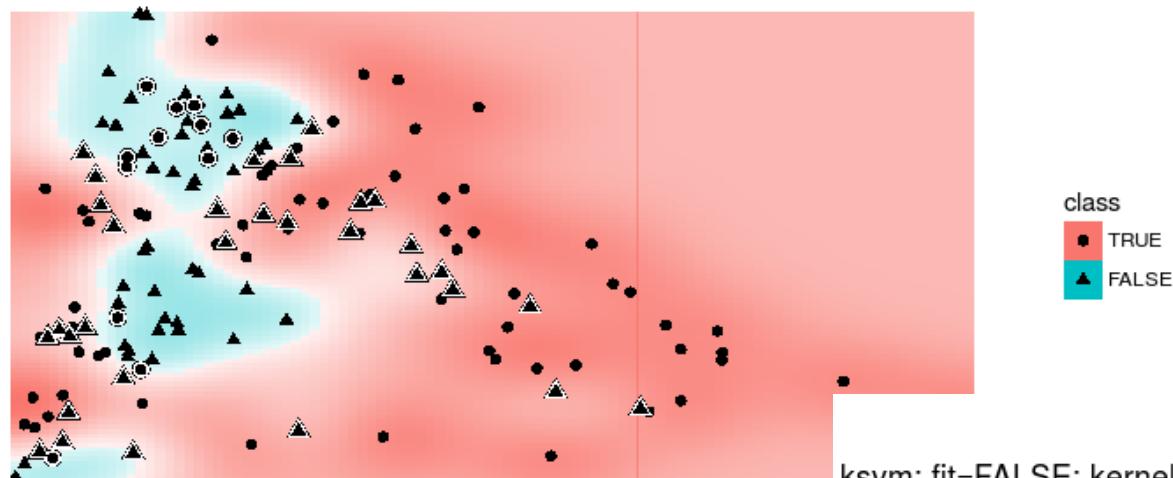
# Funkcje kernelowe (jądrowe)

- Funkcje jądrowe (wielomianowa, gaussowska, sigmoidalna i inne) działają na zasadzie dodania dodatkowego wymiaru
- np: dla  $x$  i  $y$  dodajemy nowy wymiar  $z$ , zależny od  $x$  i  $y$

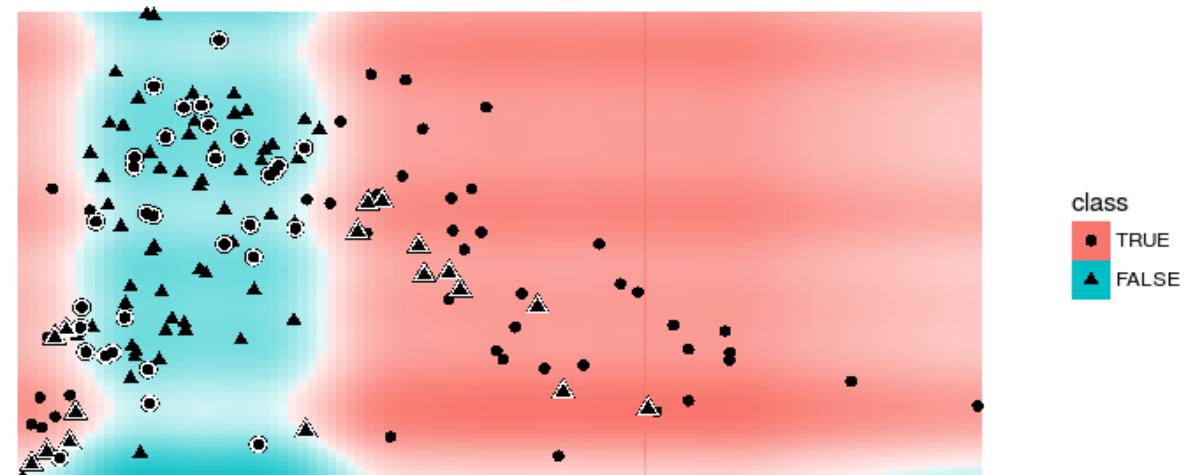


# Przestrzeń decyzyjna – SVM

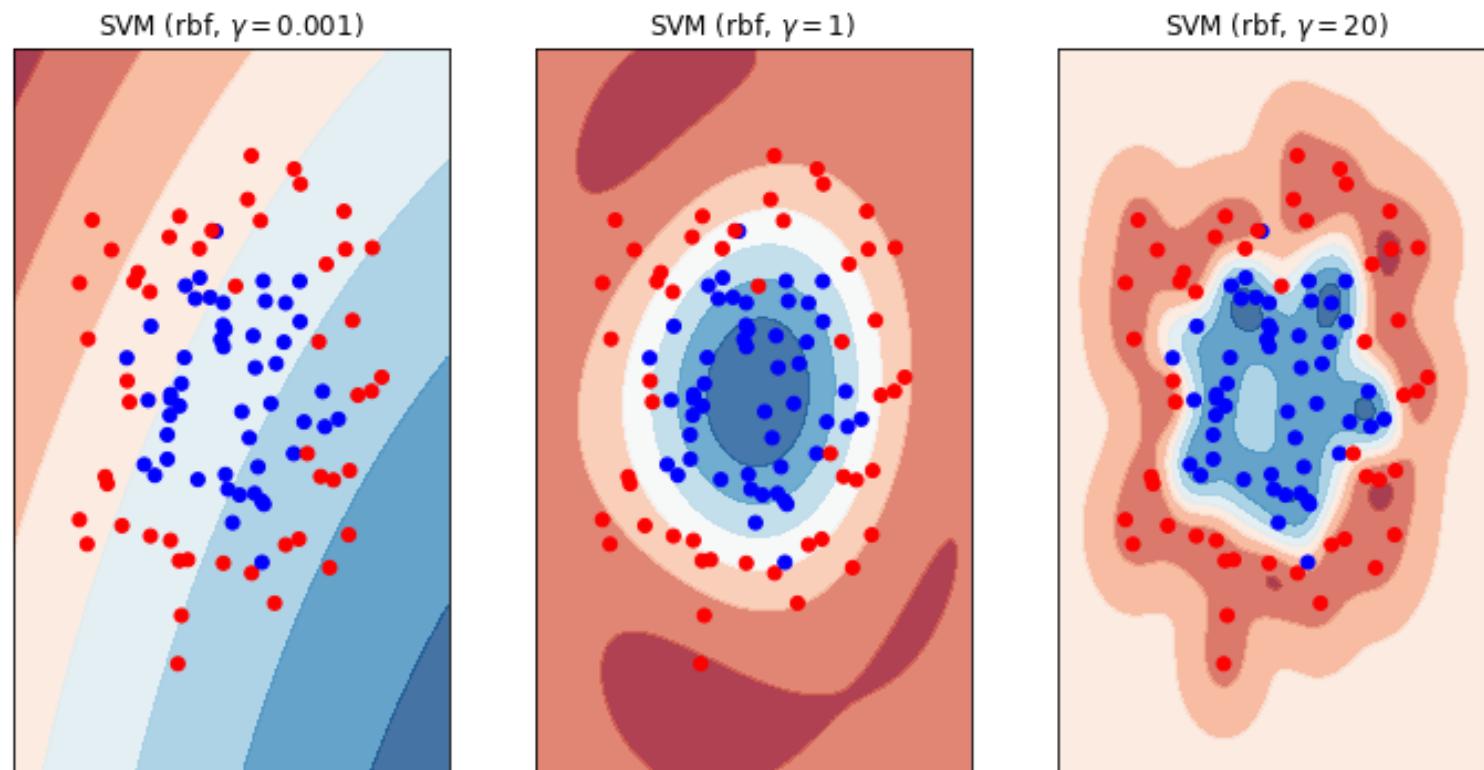
ksvm: fit=FALSE; kernel=rbfdot; sigma=5  
Train: mmce=0.287; CV: mmce.test.mean=0.44



ksvm: fit=FALSE; kernel=anovadot; sigma=5  
Train: mmce=0.32; CV: mmce.test.mean= 0.4

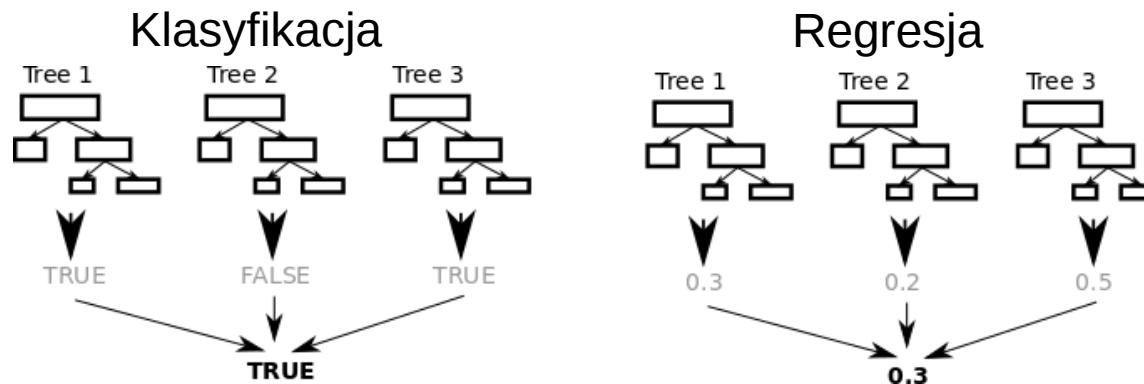


# Przeuczenie SVM



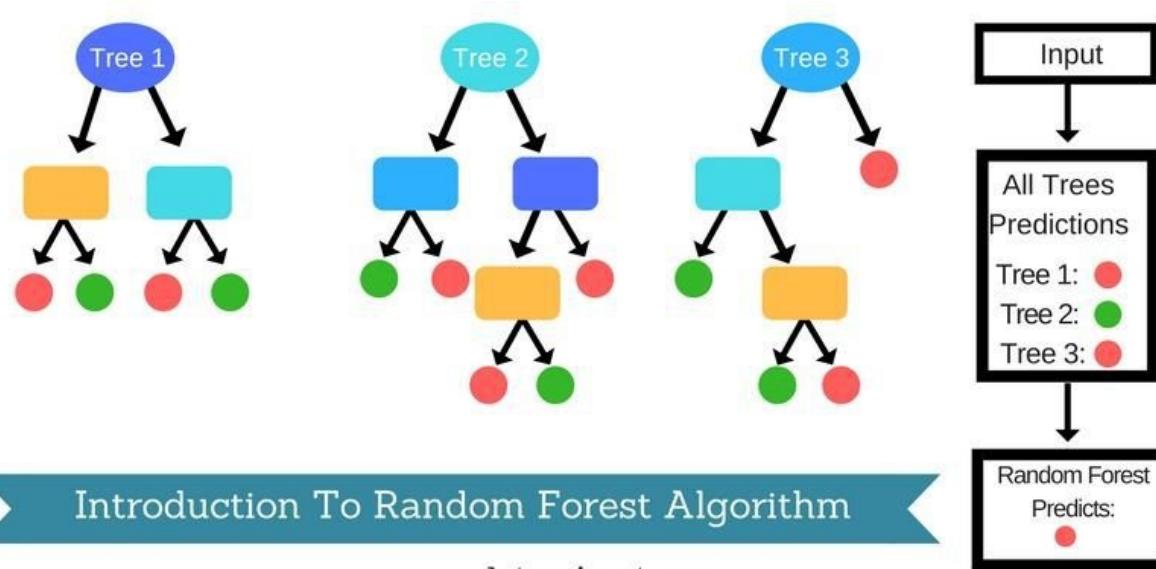
# Metody agregujące

- Meta algorytmy, których celem jest jednoczesna redukcja błędu systematycznego i losowego (**bias i variance**). Zakłada że wiele „słabych” klasyfikatorów/regresorów może zostać połączona w jeden silny
- **Bagging** – algorytm agregujący rodzinę klasyfikatorów (np. CART), gdzie wynik klasyfikacji opiera się na głosowaniu większościowym
- **Boosting** – metoda konstruowania kolejnych wersji klasyfikatorów na podstawie losowych ciągów uczących i przypisywaniu wag obiektom z ciągów uczących. Wagi te określają prawdopodobieństwo wylosowania w kolejnej iteracji. Waga wzrasta jeżeli obiekt został błędnie zakwalifikowany. Obiekty błędnie klasyfikowane są częściej losowane co jest pożądane, ponieważ z reguły znajdują się w pobliżu granicy decyzyjnej.



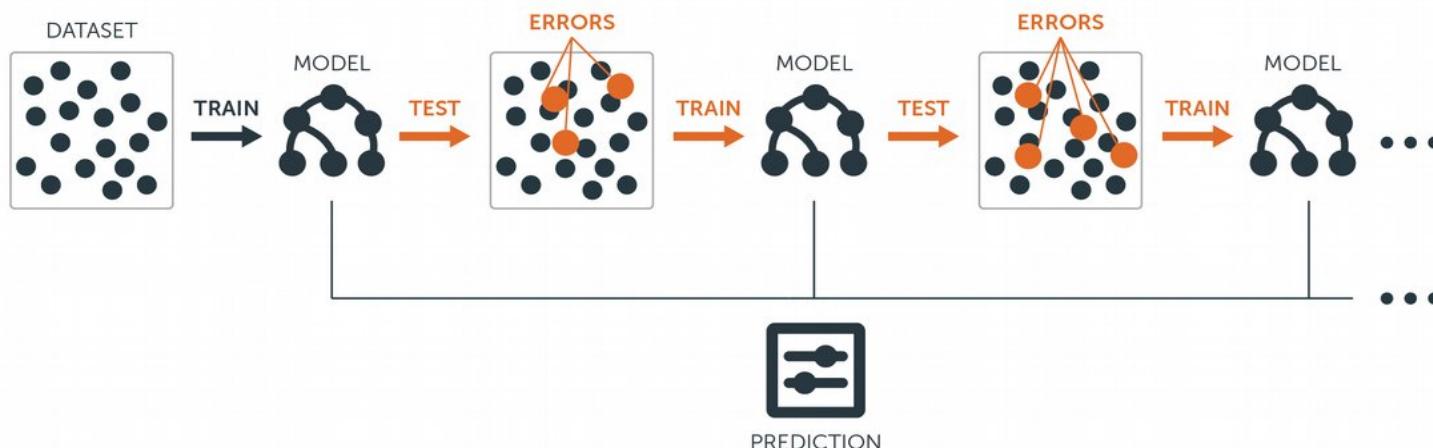
# Random Forest - bagging

- Agregujące uogólnienie drzew decyzyjnych, końcowa decyzja jest podejmowana na podstawie głosowania lub uśredniania (regresja).
- Tworzone są małe drzewa
- Losowaniu podlegają zmienne uczące jak i przypadki. Losuje się ograniczoną liczbę cech, dzięki czemu mogą być stosowane zbiory o bardzo dużej liczbie zmiennych wyjaśniających



# Boosted trees - boosting

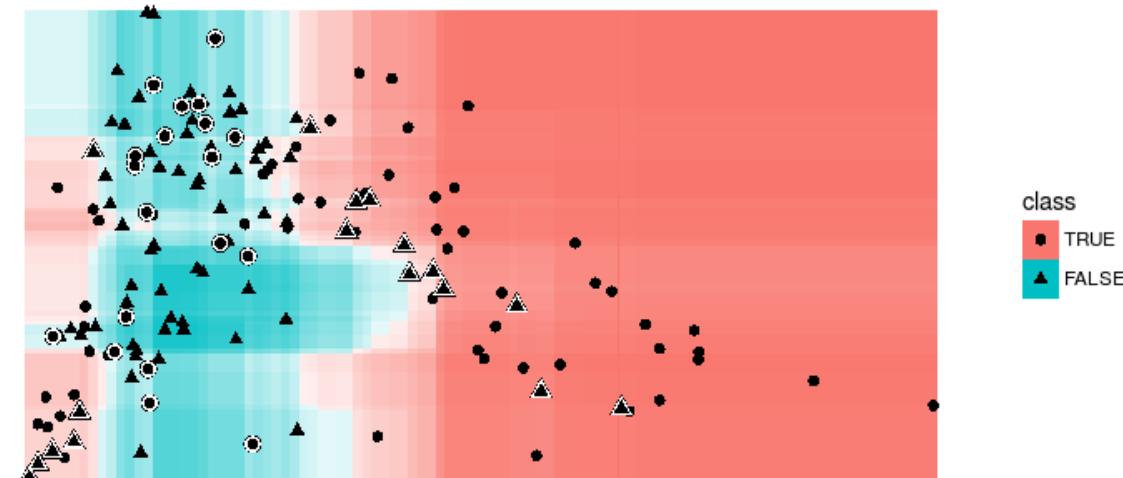
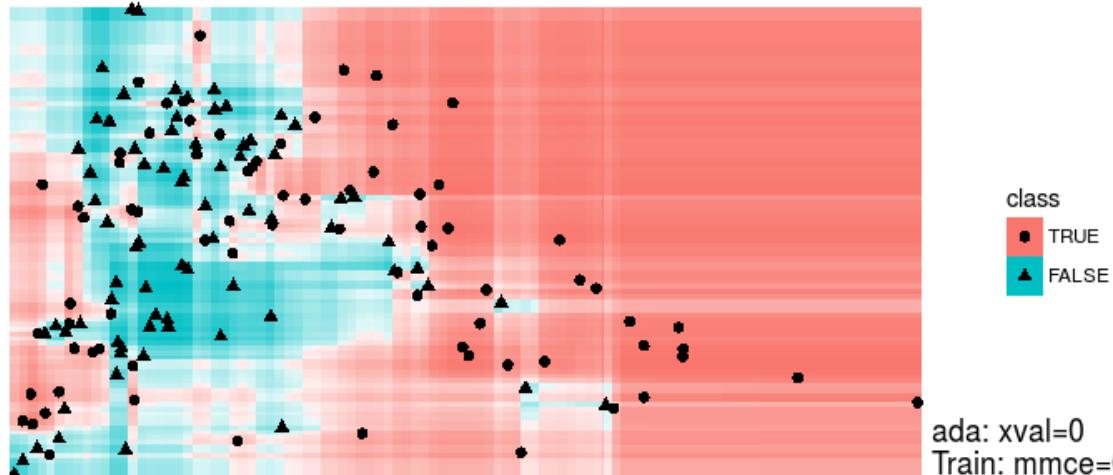
- Model tworzy wstępne drzewo na podstawie wartości inicjalnych podziałów dla których klasyfikuje obiekty/ wyznacza wartość
- Błędnie zaklasyfikowane obiekty zostają użyte do wyznaczenia korekty, która poprawi klasyfikację
- Korekta pozwala wyznaczyć gradient zmian, który doprowadzi do wyznaczenia nowych, lepszych parametrów podziału drzewa
- Proces jest powtarzany aż do osiągnięcia zamierzonego celu, ilości założonych iteracji lub nie można wyznaczyć korekty



# Przestrzeń decyzyjna - metody wzmacniane

rf:

Train: mmce= 0; CV: mmce.test.mean=0.487

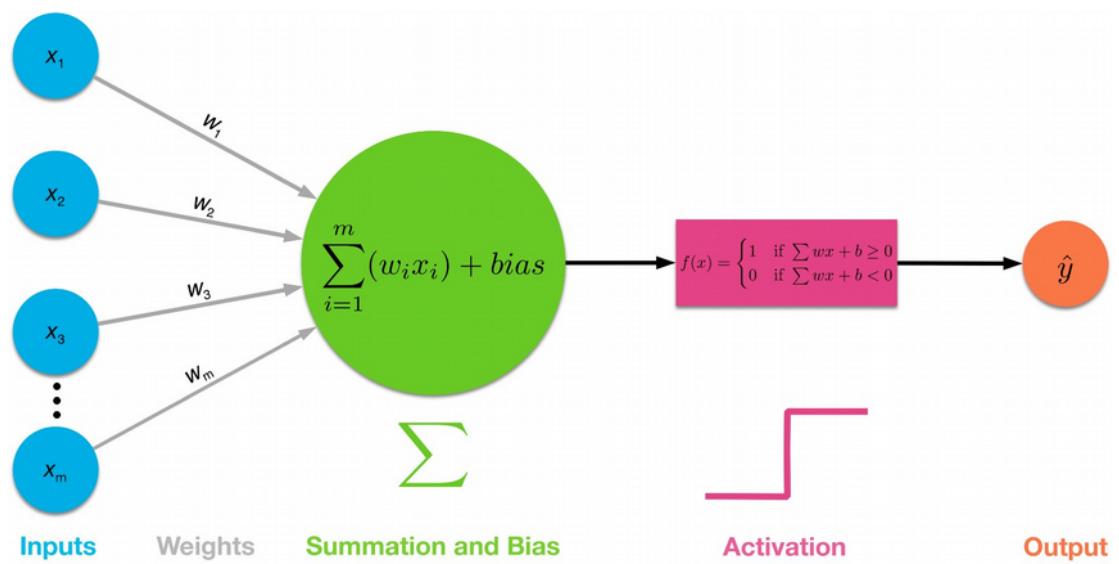
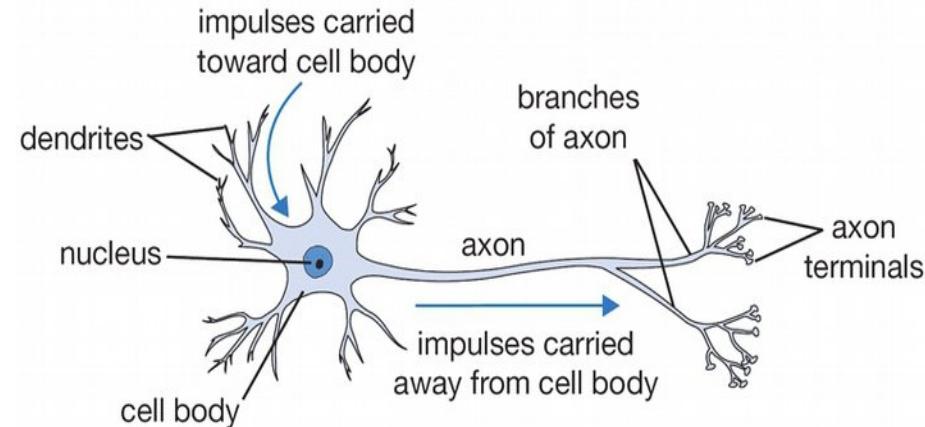


# Sieci neuronowe

- Narzędzia przetwarzające sygnał (zmienne wyjaśniające) poprzez rząd elementów zwany sztucznymi neuronami. Każdy neuron wykonuje podstawową operację ważonego sumowania
- Sieci jednokierunkowe – bez sprzężeń zwrotnych
- Sieci rekurencyjne połączenia między neuronami mają charakter cykliczny
- Głębokie sieci – wielowarstwowe sieci
- Samoorganizujące się mapy to też sieci neuronowe

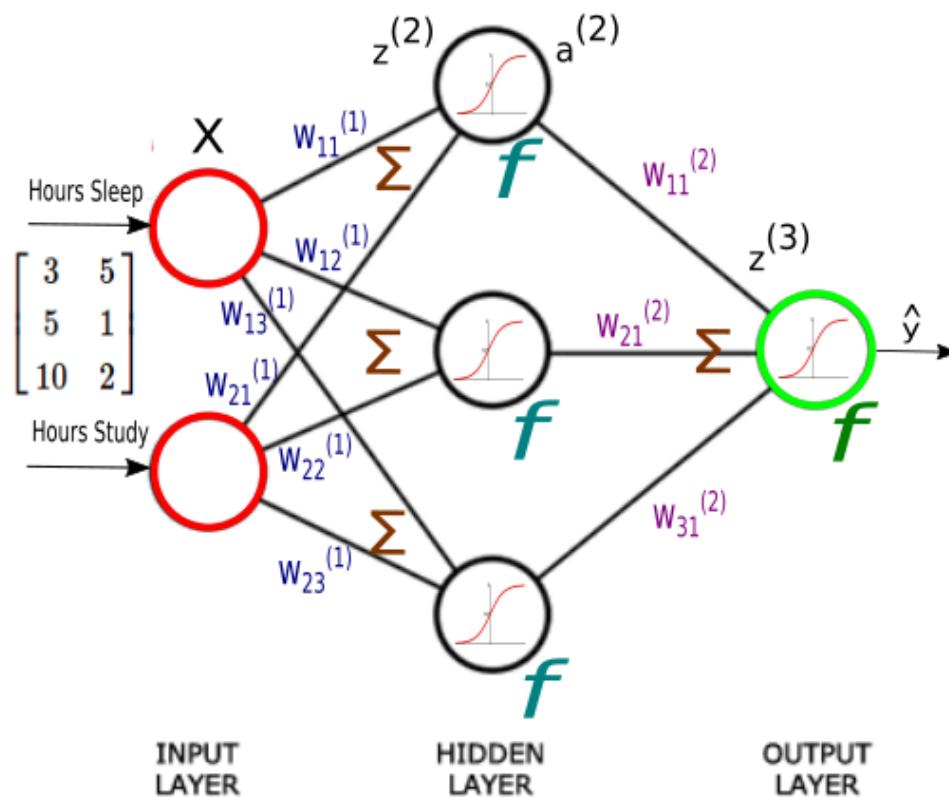
# Neuron

- Uczenie się sieci polega na iteracyjnym dobieraniu wag na wejściu do sztucznego neuronu, tak aby suma wartości wejściowych pomnożonych przez wagi dawała optymalną decyzję
- Sieci neuronowe mogą też być strukturami fizycznymi (sprzętowymi)

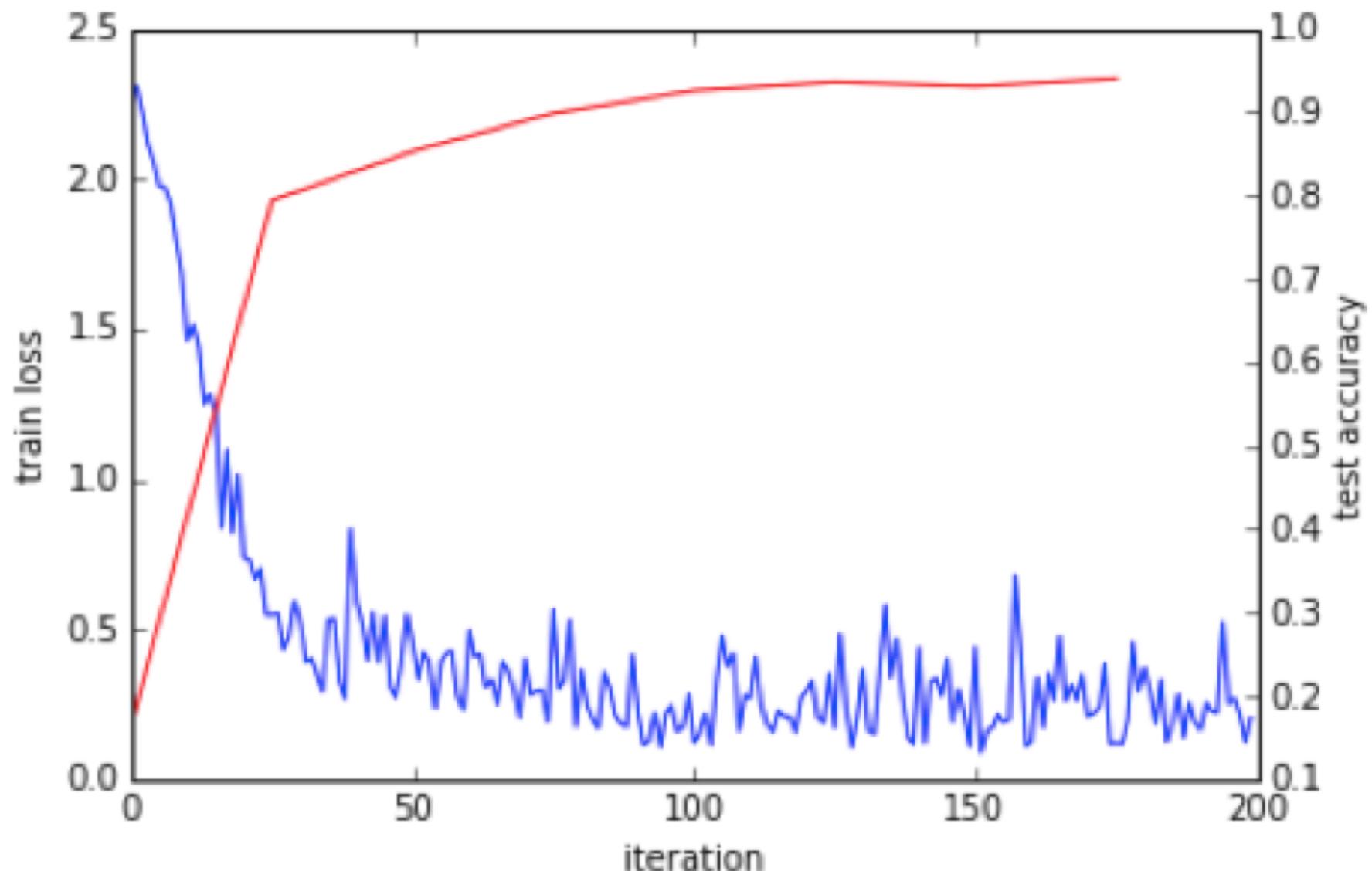


# Jak działa sieć neuronowa?

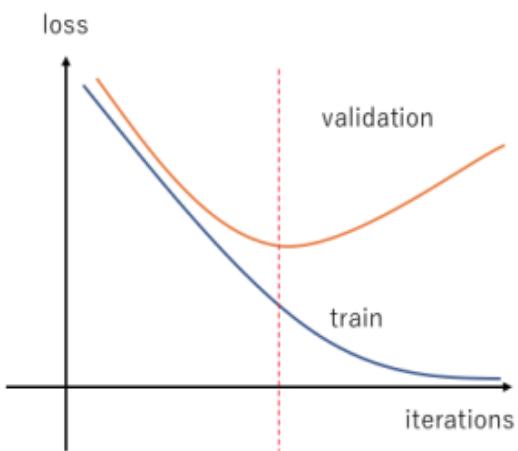
- Działanie sieci opiera się na decyzjach podejmowanych przez poszczególne neurony a następnie uwspólnieniu decyzji



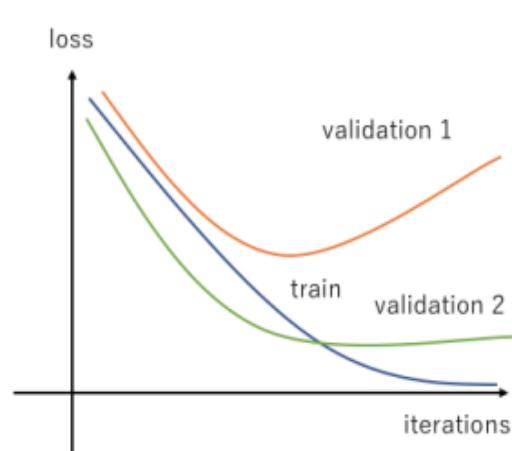
# Optymalizacja sieci neuronowych



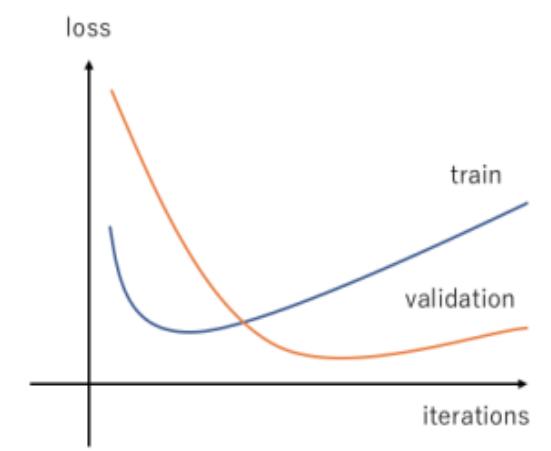
# Przeuczenie sieci



Sytuacja klasyczna



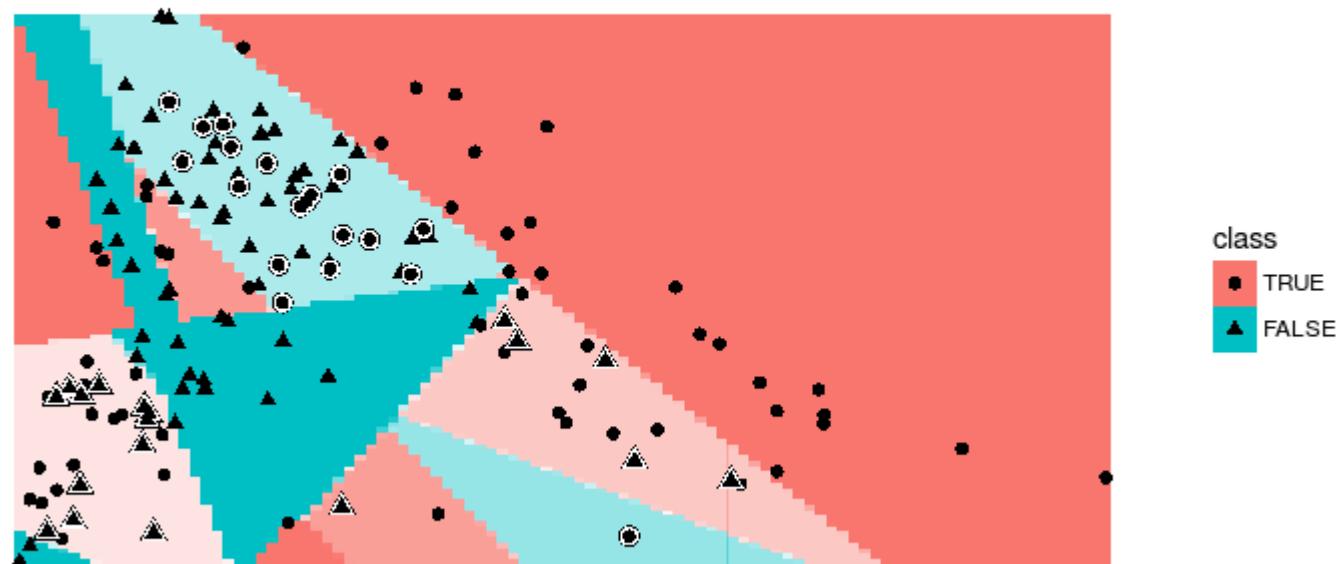
Niepewność co do zbiorów



Błędna optymalizacja

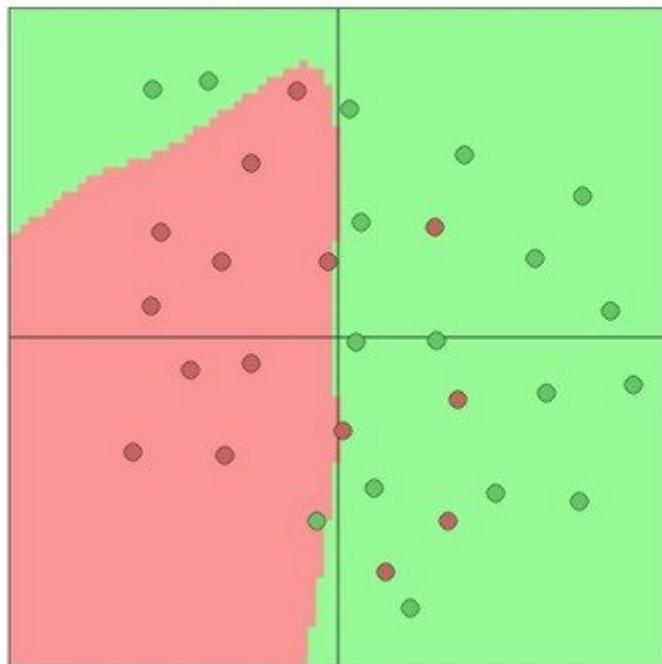
# Sieci neuronowe – przestrzeń decyzyjna

nnet: size=10; decay=0; maxit=400  
Train: mmce=0.247; CV: mmce.test.mean= 0.4

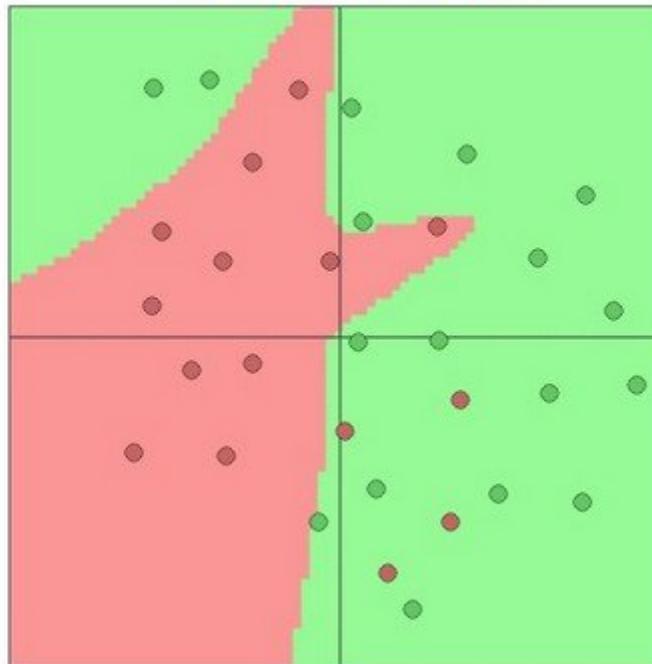


# Przeuczenie sieci neuronowych

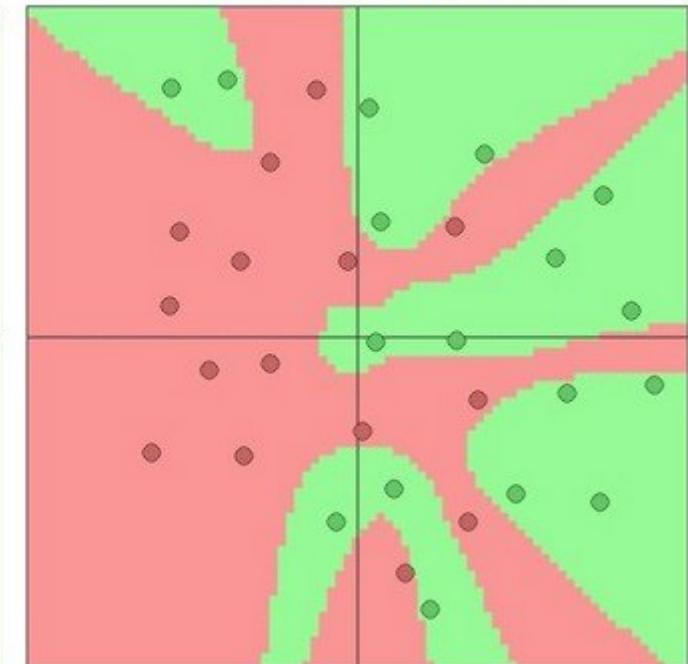
3 hidden neurons



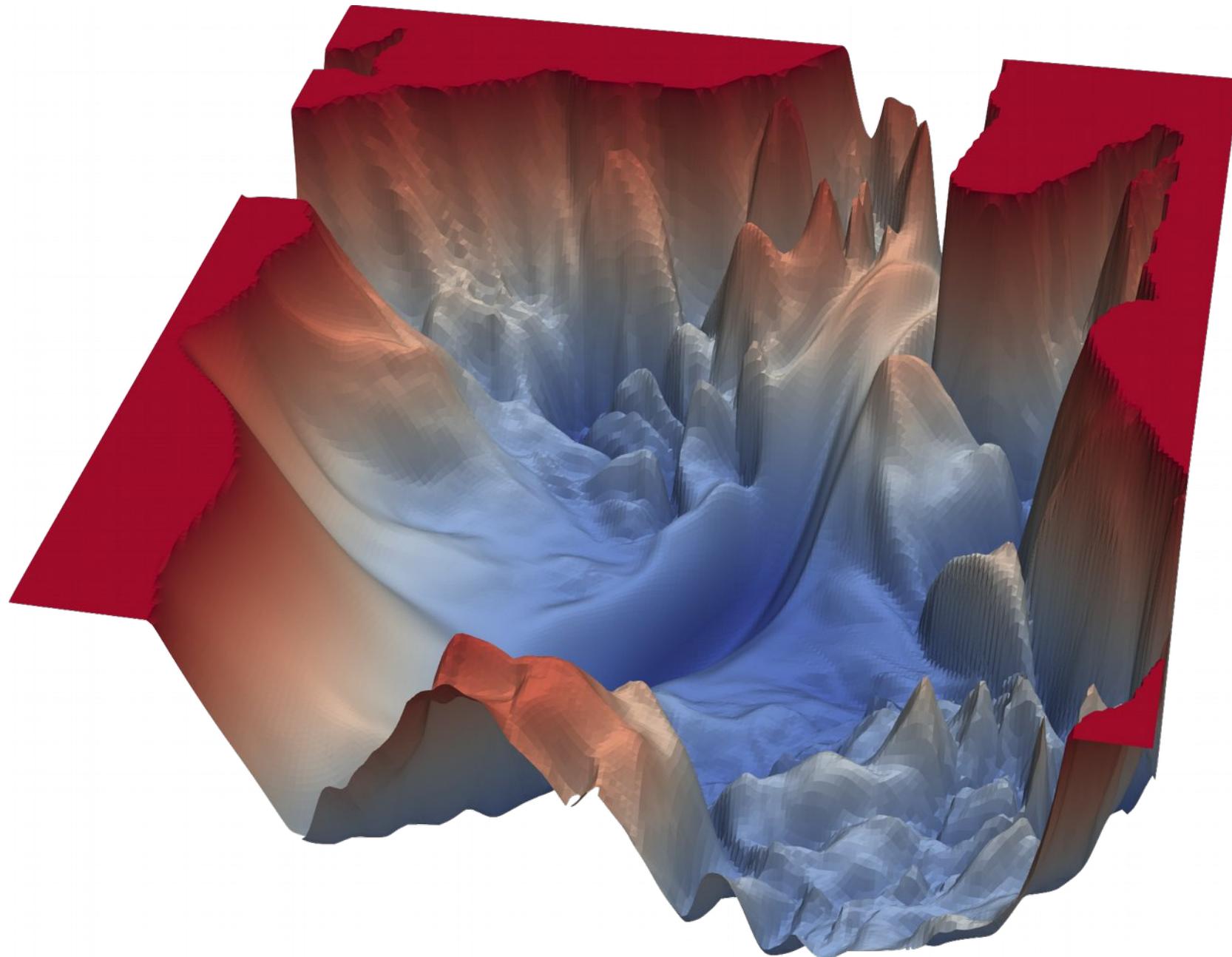
6 hidden neurons



20 hidden neurons

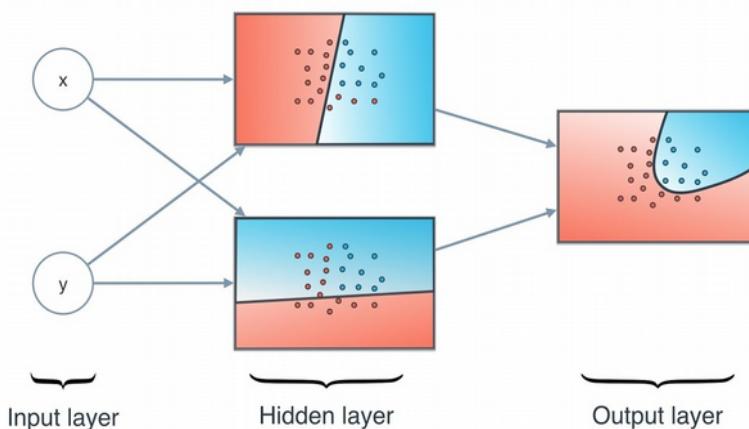


# Krajobraz funkcji kosztu

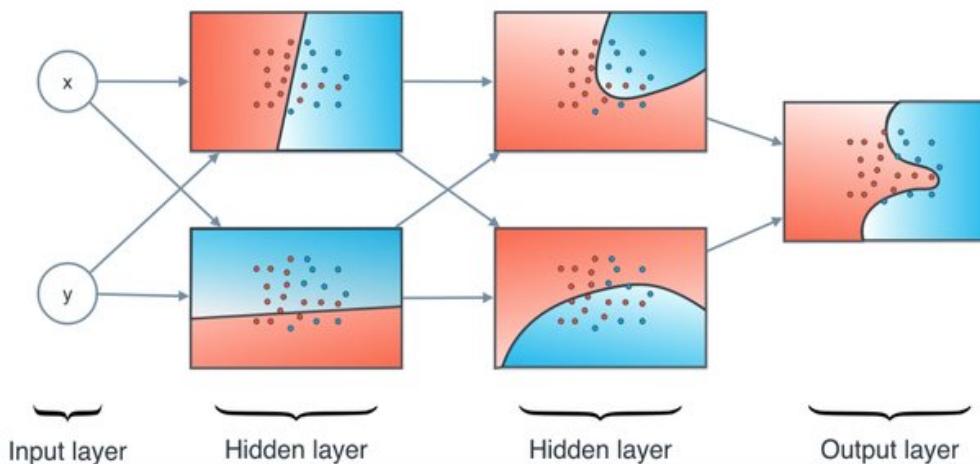


# Standardowa Sieć a Deep Learning

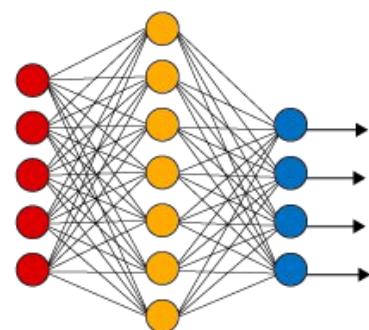
Neural Network



Liczne słabe klasyfikatory  
Deep Neural Network



Simple Neural Network

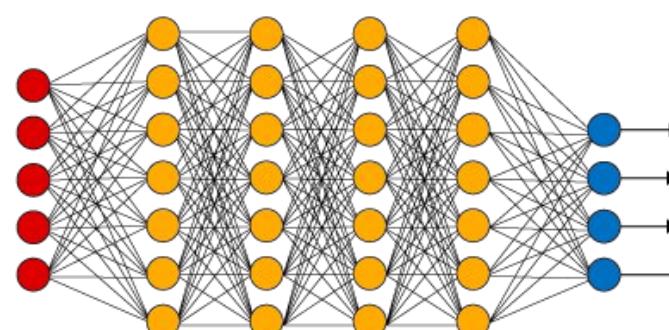


● Input Layer

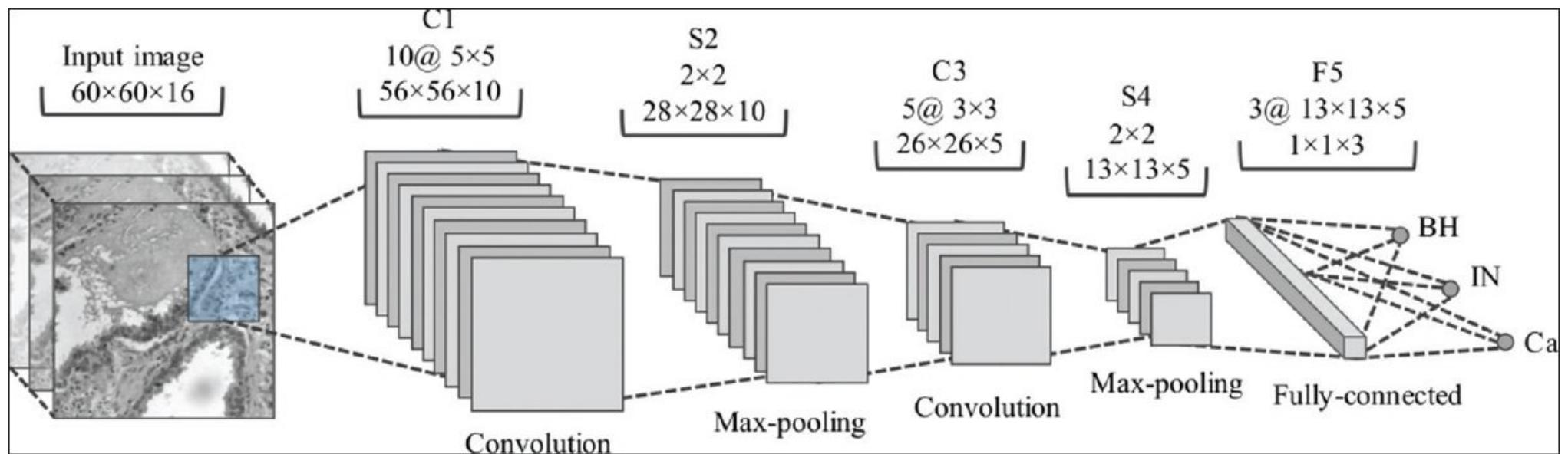
● Hidden Layer

● Output Layer

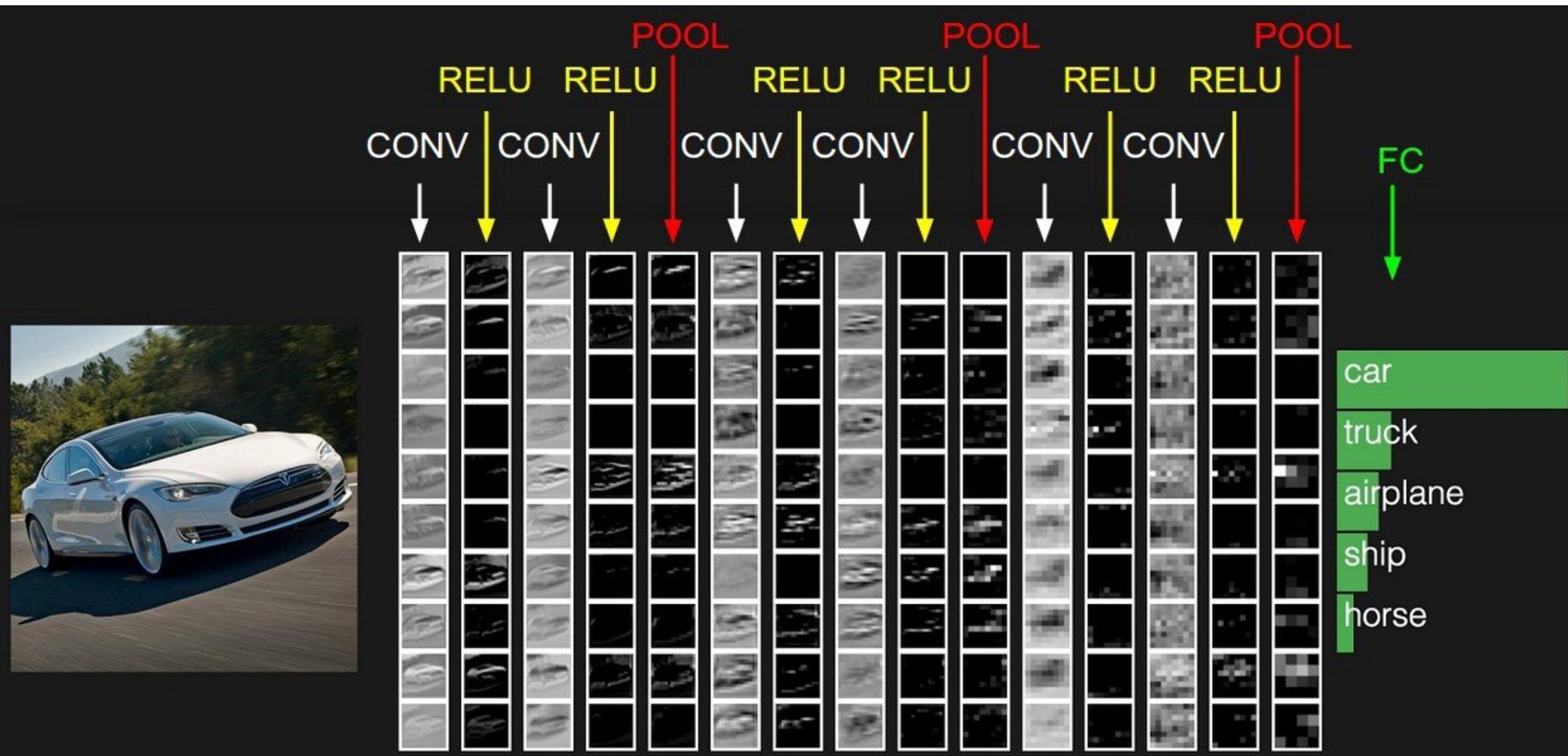
Deep Learning Neural Network



# Sieci konwolucyjne



# Ekstrakcja cech w sieciach konwolucyjnych



PHASE MODELING ERN GROUP WHETHER HIERARCHICAL DISEASE MAY SINGLE  
PATIENTS BIAS SIGNALS STUDY HIERARCHICAL DISEASE MAY SINGLE  
HIGHER LARGER SYMPTOM WHEREAS INTERACTIONS SYSTEMS RESULTS USED DECISIONS ERROR HUMANS  
INDIVIDUAL TESTED CHOICE STRUCTURE MECHANISTIC SYSTEMS SELECTION PREDICTION RELATED HUMAN  
LEARN STIMULI DIFFERENT SHOW DATA CONFLICT NEURAL SUPPORT FINDINGS INCREASED SUGGEST  
ACTION STRIATUM TASK PROCESSES PUNISHMENT RESPONSE OUTCOMES CONSISTENT THETA VIA  
NOVEL PREDICTED RESPONSES BRAIN EVIDENCE SZ REVERSAL ABILITY RELATIVE UNDERLYING TRAINING  
MEMORY STRIATAL PREFRONTAL ONE PERFORMANCE GANGLIA POSITIVE MOTOR ROLE  
TASKS FUNCTION DEFICITS CORTEX COGNITIVE LEVEL DIFFERENCES AVOIDANCE CHOICES  
USING VALUE TEST SCHIZOPHRENIA PARKINSON'S NEUROCOMPUTATIONAL MECHANISMS THOUGHT PREDICTIONS FUNCTIONS TWO SYSTEM EFFECTS  
REPRESENTATIONS DECISION NEGATIVE REWARD DOPAMINE BEHAVIORAL STN ACTIONS ERRORS D2  
INFORMATION FEEDBACK PATIENTS CONTROL BG DA COMPUTATIONAL  
TIME CIRCUITS PROVIDE UNDERSTANDING BETTER GO STIMULUS PARTICIPANTS BASAL REINFORCEMENT  
STUDIES WORKING FRONTAL DOPAMINERGIC HOWEVER  
MAKING SUBJECTS RESULTS NETWORK NEUROSCIENCE LEVELS INDIVIDUALS FRAMEWORK CONDITIONS  
BASIS NOGO CONTROLS IMPAIRED GENETIC ACTIVITY PFC  
**MODEL LEARNING**