Week1: Introduction to ML

ผศ.ดร.สิวะโชติ ศรีสุทธิยากร

Contents

1.	What's algorithms?	2
2.	What's ML?	3
3.	AI vs ML vs DL	3
4.	Types of ML	5
	4.1 Supervised Learning	5
	4.2 Unsupervised Learning	7
	4.3 Reinforcement Learning	7
5.	ตัวอย่างการประยุกต์ใช้ ML ทางการศึกษา (การบ้าน)	8
6.	Introduction to Supervised Learning 1 (regression models)	9
	6.1 กิจกรรม 1 : Rule-based algorithm	9
	6.2 กิจกรรม 2 : ติดตั้ง $ m R$	9
	6.3 กิจกรรม 3 : ML-based using Linear regression model	9
	Root Mean Squared Error (RMSE)	11
	Coeffcient of Determination (R squared)	11
	R squared plot	12
	6.4 Bias and Variance in ML models	12
	6.5 Underfitting, Overfitting และ Good fit models	13
	6.6 Training, validation, and Test Dataset	13
	6.7 Data Partitioning	15
	6.7.1 ชุดข้อมูล mpg	16
	6.7.2 การแบ่งข้อมูลด้วยการสุ่มอย่างง่าย	17
	6.7.3 การแบ่งข้อมูลด้วยการสุ่มแบบชั้นภูมิ	18
	6.8 Modeling Process	18

6.9 Tidymodels Framework	18
6.10 Fitting and Evaluating ML models via tidy models framework $\ \ldots \ \ldots \ \ldots \ \ldots \ \ldots$	21
6.10.1 Fitting models using parsnip package	21
6.10.2 Prediction	25
6.10.3 Evaluating models using yardstick package	26
6.11 กิจกรรม 4 : พัฒนา regression model ด้วย tidymodel framework	28

1. What's algorithms?

อัลกอริทึมคือกระบวนการในการดำเนินงานที่มีขั้นตอนอย่างชัดเจน โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อทำงาน/แก้ปัญหาที่กำหนดให้สำเร็จ การใช้อัลกอริทึมในการทำงานนั้นไม่ได้จำกัดเฉพาะงานทางด้านคอมพิวเตอร์ หรือสถิติและวิทยาการข้อมุลเท่านั้น แต่ในชีวิต ประจำวันเราก็มีการใช้อัลกอริทึมเพื่อดำเนินงานต่าง ๆ อยู่เป็นประจำ เช่น

- การเดินทางจากบ้านไปยังร้านขายของสะดวกซื้อ งานดังกล่าวสามารถเขียนแยกแยะออกมาเป็นขั้นตอนการเดินทางโดย อาจเริ่มตั้งแต่การออกประตูบ้าน เลี้ยวขวา เดินตรงไป เมื่อพบสามแยกให้เลี้ยวขวาอีกครั้งจะพบร้านสะดวกซื้อ
- การทอดไข่เจียวที่อาจเริ่มจากการตั้งไฟ ใส่น้ำมัน ตอกไข่ ตีไข่ ใส่เครื่องปรุง ทอดไข่ และนำไข่เจียวที่ได้เสริฟ

ปัจจุบันโลกได้ก้าวเข้าสู่ยุคที่ให้เครื่องจักร เช่น เครื่องคอมพิวเตอร์ทำงานบางอย่างแทนมนุษย์ได้ ซึ่งเบื้องหลังการดำเนินการของ เครื่องจักรต่าง ๆ จำเป็นต้องมีอัลกอริทึมที่ใช้สำหรับควบคุมการทำงาน การพัฒนาอัลกอริทึมดังกล่าวอาจทำได้สองวิธีการ วิธี การแรกเรียกว่า rule-based algorithm ที่ผู้พัฒนาเป็นผู้กำหนดขั้นตอนวิธีการทำงานและประมวลผลทั้งหมด ส่วนวิธีการที่สอง เรียกว่า machine learning-based ที่เป็นวิธีการสมัยใหม่และถูกนำมาใช้เป็นวิธีการหลักในปัจจุบัน การพัฒนาอัลกอริทึมด้วยวิธี การนี้จะนำข้อมูลที่เกี่ยวข้องมาเป็นต้นแบบเพื่อสอนให้คอมพิวเตอร์ได้เรียนรู้ผ่านอัลกอริทึมการเรียนรู้ต่าง ๆ เรียกว่า learning ซึ่งเมื่อ learning ได้การเรียนรู้จากข้อมูลที่มากเพียงพอจะได้ผลลัพธ์เป็นอัลกอริทึมหรือโมเดลที่สามารถใช้ดำเนินการตัดสินใจได้ ด้วยตนเอง อัลกอริทึมประเภทนี้จะมีความยืดหยุ่นและมีประสิทธิภาพมากกว่าอัลกอริทึมแบบ rule-based

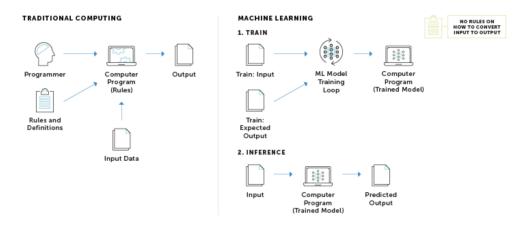


Figure 1: rule-based vs ML-based (https://www.epam.com/insights/blogs/making-ai-more-human-black-box-models-lead-to-better-decision-making)

เพื่อให้เห็นภาพชัดเจนมากขึ้นลองพิจารณาปัญหาการอ่านตัวเลขจากลายมือด้านล่าง ปัญหานี้อ้างอิงจาก (Geron, 2019)



Figure 2: Handwritting Digit Recognition

จากรูปจะเห็นว่าการเขียนกฎเกณฑ์แบบ rule-based เพื่อจำแนกตัวเลขในรูปข้างต้นทำได้ยากมากและเป็นไปแทบไม่ได้เลยที่จะ มีอัลกอริทึมแบบ rule-based ที่มีประสิทธิภาพในการจำแนกตัวเลขดังกล่าว ในขณะที่อัลกอริทึมแบบ ML-based สามารถนำ ภาพของลายมือดังกล่าวไปให้อัลกอริทึมการเรียนรู้ของเครื่องได้เรียนรู้ และสร้างโมเดลจำแนก (classifier) เพื่อจำแนกตัวเลข จากลายมือดังกล่าวได้อย่างมีประสิทธิภาพ ดังตัวอย่างต่อไปนี้

- https://www.kaggle.com/code/pranjalrathore/digit-recognizer-minst
- https://www.kaggle.com/code/alphaghostusmc/mnist-cnnv2
- https://www.kaggle.com/code/kobakhit/digital-recognizer-in-r
- https://www.kaggle.com/code/ivoruaro/mnist-xgboost-r

2. What's ML?

การเรียนรู้ของเครื่อง (ML) เป็นศาสตร์ย่อยแขนงหนึ่งภายใต้ศาสตร์ทางด้านสถิติและวิทยาการข้อมูล ซึ่งเกี่ยวข้องกับการใช้อัล กอริทึม (algorithms) ในการเรียนรู้/ค้นหาความรู้จากข้อมูล แล้วนำความรู้ที่ได้มาใช้งานตั้งแต่การบรรยายสภาพของข้อมูล (descriptive) การวินิจฉัย (diagnostic) เพื่อหาสาเหตุหรือปัจจัยที่ก่อให้เกิดผลลัพธ์ที่สนใจ การทำนาย (predictive) เพื่อสร้างโมเดลที่เรียนรู้ความสัมพันธ์ในข้อมูลเพื่อทำนายผลลัพธ์ของตัวแปรที่สนใจ ผลลัพธ์ที่ได้จากการทำนายนี้ สามารถนำมาโมเดลเพื่อช่วยวางแผน/ตัดสินใจ (prescriptive) ดำเนินการเพื่อนำไปส่ผลลัพธ์ที่คาดหวัง

3. AI vs ML vs DL

ปัจจุบันมีการใช้คำว่า AI, ML และ DL แทนกันไปมาจนบางครั้งเหมือนว่าจะเป็นคำเดียวกัน ในความเป็นจริงทั้งสามคำดังกล่าว ม่ได้เป็นสิ่งเดียวกันเลยทีเดียว แต่มีทั้งส่วนที่เหมือนและแตกต่างกัน รายละเอียดมีดังนี้

- AI ย่อมาจาก Artificial Intelligent เป็นเทคนิคหรือวิธีการที่นักวิทยาการข้อมูลใช้เพื่อพัฒนาโปรแกรม คอมพิวเตอร์ รวมถึงหุ่นยนต์หรือจักรกลที่สามารถเลียนแบบการทำงานต่าง ๆ ของมนุษย์ได้ AI จะมีความสามารถ ในการทำงานใกล้เคียงหรือดีกว่ามนุษย์ ทั้งความสามารถในการจดจำ จำแนก และตัดสินใจดำเนินงานเองโดยอาศัยข้อมูล ที่เป็นไปได้ทั้งข้อมูลตัวเลข ข้อความ รูปภาพ และเสียง ตัวอย่างของ AI เช่น รถยนต์หรือยานพาหนะไร้คนขับ, AlphaGo DeepMind, Chatgpt เป็นต้น
- Machine Learning (ML) เป็นกลุ่มของเทคนิคหรือศาสตร์ย่อยแขนงนึงภายใต้ AI ที่เกี่ยวข้องกับการใช้ประยุกต์ ใช้ทฤษฎีทางสถิติและคณิตศาสตร์เพื่อเรียนรู้หรือสกัดสารสนเทศจากข้อมูล สารสนเทศดังกล่าวสามารถนำมาใช้ได้หลาย ลักษณะ ทั้งการบรรยาย อธิบาย ทำนาย และตัดสินใจ ML ถือเป็นส่วนประกอบที่สำคัญที่สนับสนุนการทำงานของ AI
- Deep Learning (DL) เป็นแขนงย่อย (subdivision) ของ ML ที่เกี่ยวข้องกับการใช้เทคนิคที่เรียกว่าเครือข่าย ประสาทเทียม (artificial neural network: ANN) ที่มีความลึกของเครือข่ายหลายชั้นเพื่อเรียนรู้หรือสกัดสารสนเทศ จากข้อมูลและใช้ในวัตถุประสงค์หลักคือเพื่อทำนาย/จำแนกค่าสังเกตของตัวแปรตาม นอกจากนี้ลักษณะเฉพาะตัวที่โดด เด่นของ DL คือเครือข่ายประสาทเทียมที่ใช้ในการเรียนรู้นั้นถูกพัฒนาขึ้นเลียนแบบการทำงานของเซลล์เครือข่ายสมอง ของมนุษย์ การเรียนรู้ของเครื่องที่ใช้ DL จึงสามารถเรียนรู้ข้อมูลที่มีความซับซ้อนเช่น ข้อความ ภาพ และเสียงได้มี ประสิทธิภาพมากกว่าการใช้เทคนิค ML แบบปกติ

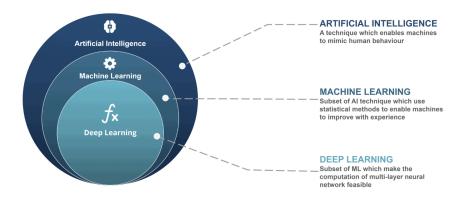


Figure 3: AI, ML และ DL (https://k21academy.com/datascience/deep-learning/dl-vs-ml/)

จากความหมายในข้างต้นจะเห็นว่า DL ถือเป็น machine learning ตัวหนึ่งที่ใช้ในวัตถุประสงค์เพื่อทำนายหรือจำแนกค่าสังเกต ของตัวแปรตาม เมื่อเปรียบเทียบความแตกต่างระหว่าง machine learning algorithm ในกลุ่มที่ใช้สำหรับทำนาย กับ DL มี ความแตกต่างหนึ่งที่เห็นได้อย่างชัดเจนคือในส่วนของกระบวนการเรียนรู้ของโมเดล ดังรูปด้านล่าง

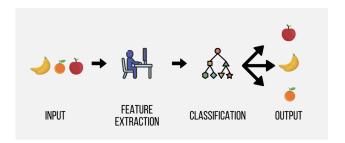


Figure 4: ML (https://www.advancinganalytics.co.uk/blog/2021/12/15/understanding-the-difference-between-ai-ml-and-dl-using-an-incredibly-simple-example)

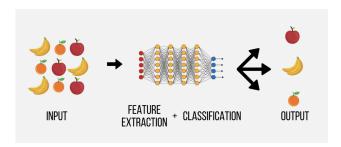


Figure 5: DL (https://www.advancinganalytics.co.uk/blog/2021/12/15/understanding-the-difference-between-ai-ml-and-dl-using-an-incredibly-simple-example)

4. Types of ML

เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่องอาจจำแนกได้เป็น 3 ประเภท ตามวัตถุประสงค์หรือความสามารถของอัลกอริทึมการเรียนรู้ ได้แก่

- การเรียนรู้ที่มีการชื้นำ (supervised learning)
- การเรียนรู้แบบไม่มีการชี้นำ (unsupervised learning)
- การเรียนรู้แบบที่มีการเสริมแรง (reinforcement learning)

4.1 Supervised Learning

ผู้วิเคราะห์จะใช้ supervised learning เมื่อมีวัตถุประสงค์ที่ต้องการสร้างโมเดลทำนาย/จำแนกค่าสังเกตของตัวแปรตามด้วย ข้อมูลค่าสังเกตของตัวแปรอิสระ โดย supervised learning เป็นกลุ่มของอัลกอริทึมที่จะเรียนรู้รูปแบบความสัมพันธ์ระหว่าง ตัวแปรอิสระกับตัวแปรตาม และใช้รูปแบบความสัมพันธ์ที่เรียนรู้จากข้อมูลในอดีตนี้ในการทำนายข้อมูลที่ไม่ทราบค่าที่จะเกิดขึ้น ในอนาคต เช่น

- การทำนายสถานะการเป็นหนี้ของลูกค้า (ลูกหนี้ชั้นดี ลูกหนี้ปกติ ลูกหนี้เสีย) โดยอิงกับข้อมูลส่วนตัว ข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับ เครดิตทางการเงิน และข้อมูลพฤติกรรมการดำเนินชีวิต
- ผู้พัฒนาคอสเรียนออนไลน์ใช้ supervised learning เพื่อทำนายผลการเรียนของนักเรียน หรือแนวโน้มการ drop out ของนักเรียนในคอสเรียน โดยอิงจากพฤติกรรมการเรียนที่แสดงในระบบการเรียนรู้ออนไลน์

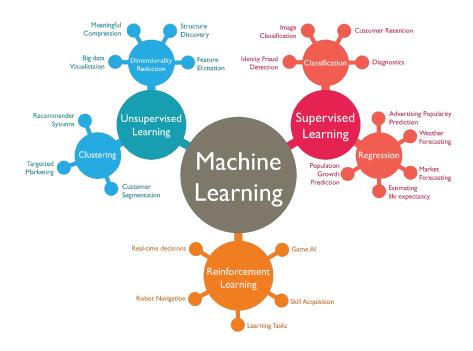


Figure 6: ประเภทของ ML

• การพัฒนาระบบวินิจฉัยความยึดมั่นผูกพันของนักเรียนด้วยการรู้จำใบหน้าโดยใช้การเรียนรู้เชิงลึก

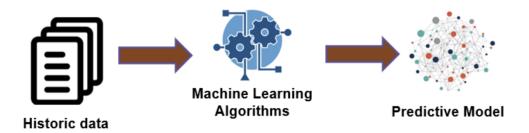


Figure 7: ลักษณะของ ML ประเภท supervised learning (https://3.bp.blogspot.com/-occLtedKtRw/W8RVv5QyIII/AAAAAAAABBg/fdvwBPGxdfQ1izWa_l95-SW4kgYSMgAsgCLcBGAs/s1600)

การที่จะใช้ supervised learning ได้นั้นผู้วิเคราะห์ยังจำเป็นต้องมีชุดข้อมูลต้นแบบที่ภายในชุดข้อมูลประกอบด้วยข้อมูลของ ตัวแปรตามหรือผลลัพธ์ที่ต้องการทำนาย และตัวแปรอิสระหรือข้อมูลที่จะใช้เป็นตัวทำนายผลลัพธ์ที่ต้องการดังกล่าว ในเชิง เทคนิคจะเรียกชุดข้อมูลต้นแบบดังกล่าวว่า **ชุดข้อมูลฝึกหัด** (training dataset) นอกจากนี้ supervised learning ยัง จำแนกเป็นประเภทย่อยได้อีก 2 ประเภทตามลักษณะของตัวแปรตาม ได้แก่ regression และ classification

- Regression เป็นโมเดลสำหรับทำนายตัวแปรตามเชิงปริมาณ
- Classification เป็นโมเดลสำหรับทำนายตัวแปรตามแบบจัดประเภท

4.2 Unsupervised Learning

ภาษาไทยอาจใช้คำว่าการเรียนรู้แบบไม่มีการชี้นำ การเรียนรู้ประเภทนี้มีความแตกต่างจาก supervised learning กล่าวคือชุด ข้อมูลฝึกหัดไม่จำเป็นต้องมีค่าสังเกตของตัวแปรตาม และวัตถุประสงค์ของการใช้ unsupervised learning คือการสร้างหรือ สกัดสารสนเทศออกมาจากข้อมูล ซึ่งอาจจำแนกได้เป็น การจัดกลุ่ม (clustering) และการหาความสัมพันธ์ (association)

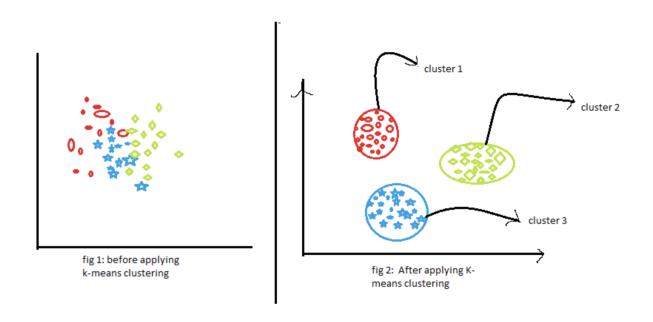


Figure 8: ลักษณะของการ clustering

4.3 Reinforcement Learning

เป็นอัลกอริทึมการเรียนรู้ (เรียกว่า agent) ที่เรียนรู้ด้วยการใช้ feedback ที่มีการให้รางวัล (reward) เมื่ออัลกอริทึมสามารถ ทำงานได้สำเร็จ และมีการทำโทษ (punishments) เมื่อล้มเหลว ผู้พัฒนาอัลกอริทึมประเภทนี้จะให้ agent ทำการเรียนรู้งานที่ การให้ feedback ดังกล่าวแบบทวนซ้ำจนกระทั้งอัลกอริทึมสามารถทำงานที่กำหนดได้อย่างมีประสิทธิภาพตามที่ต้องการ

- https://www.youtube.com/watch?v=ldXxDNjS5jw
- https://www.youtube.com/watch?v=n2gE7n11h1Y
- https://www.youtube.com/watch?v=2tamH76Tjvw

5. ตัวอย่างการประยุกต์ใช้ ML ทางการศึกษา (การบ้าน)

ขอให้นิสิตสืบค้นงานวิจัยทางการศึกษาที่มีการใช้ machine learning จากนั้นสรุปสาระสำคัญจากงานวิจัยดังกล่าวส่งเป็นการ บ้านชิ้นที่ 1 **กำหนดส่ง 25 มกราคม 2566** โดยรายงานสรุปที่จะส่งขอให้มีความยาวไม่เกิน 2 หน้า A4 โดยมีรายละเอียด ครอบคลุมหัวข้อดังนี้

- ชื่องานวิจัย
- ความเป็นมา หรือ motivation ของงานวิจัย
- วัตถุประสงค์ของการวิจัย
- กลุ่มเป้าหมาย
- ตัวแปรและข้อมูลที่ใช้ในการวิจัย
- อัลกริทึมการเรียนรู้ของเครื่องที่ใช้ในการวิจัย
- ผลการวิจัยที่สำคัญ
- จุดเด่นและข้อสังเกตของการวิจัย

Table 1: ข้อมูลคะแนนสอบและพฤติกรรมการเรียนของนักเรียน

behav	score
0	1
1	2
2	2
3	3
4	4
5	4

6. Introduction to Supervised Learning 1 (regression models)

หัวข้อนี้ประกอบด้วยกิจกรรมและเนื้อหาที่สำคัญเกี่ยวกับการพัฒนา supervised learning รายละเอียดมีดังนี้

6.1 กิจกรรม 1 : Rule-based algorithm

ข้อมูลในตาราง 1 ประกอบด้วยคะแนนสอบ (score) กับคะแนนพฤติกรรมการเรียนของนักเรียน (behav) ลองดำเนินการดังนี้

- 1. พิจารณาความสัมพันธ์เบื้องต้นระหว่าง score กับ behav
- 2. ลองสร้างโมเดลทำนายคะแนนสอบ (หาสมการเส้นตรง)โดย (1) ลองใช้วิธีการลากเส้นด้วยมือ (2) ลองคำนวณหาสมการ เส้นตรงด้วยวิธีการทางคณิตศาสตร์
- 3. สมการเส้นตรงที่ได้จากวิธีการทั้งสองเป็นอย่างไร และมีประสิทธิภาพในการทำนายเป็นอย่างไร

6.2 กิจกรรม 2 : ติดตั้ง ${ m R}$

กิจกรรมนี้มีวัตถุประสงค์คือให้ผู้เรียนได้ทำความรู้จักกับเครื่องมือของนักวิทยาการข้อมูลที่สามารถใช้ประมวลผลการเรียนรู้ของ เครื่อง ขอให้ผู้เรียนติดตั้ง R และ Rstudio โดยดาวน์โหลด R ที่นี่ และดาวน์โหลด Rstudio ที่นี่

6.3 กิจกรรม 3 : ML-based using Linear regression model

จากตัวอย่างข้อมูลในกิจกรรม 1 เราจะสร้างโมเดลทำนายใหม่ด้วยอัลกอริทึมการเรียนรู้ของเครื่อง ทั้งนี้จะให้ใช้อัลกอริทึมที่ทุกคน รู้จักกันดีตั้งแต่ในรายวิชาสถิติพื้นฐาน คือ linear regression model

โมเดลการวิเคราะห์การถดถอยเชิงเส้น (linear regression) เป็นโมเดลเชิงสถิติ (statistical model) ที่ใช้สำหรับทำนาย แนวโน้มค่าสังเกตของตัวแปรตามที่ไม่ทราบค่าโดยอิงกับค่าสังเกตของตัวแปรอิสระที่ทราบค่า การเรียนรู้ของ linear regression จะพยายามสร้างสมการเส้นตรงที่ดีที่สุด (best linear equation) ที่สามารถใช้เป็นตัวแทนความสัมพันธ์ตามธรรมชาติระหว่าง ตัวแปรตามกับตัวแปรอิสระที่พบในชุดข้อมูล ในเชิงเทคนิคการหาสมการเส้นตรงดังกล่าวจะเป็นการแก้สมการหรือเฟ้นหาค่าของ พารามิเตอร์ภายในสมการเส้นตรง ได้แก่ พารามิเตอร์จุดตัดแกน y และพารามิเตอร์ความชั้น ที่ทำให้สมการเส้นตรงมีความคลาด เคลื่อนในการทำนายต่ำที่สุด

จากข้อมูลในกิจกรรม 1 สามารถใช้อัลกอริทึม linear regression เพื่อหาโมเดลทำนายที่เหมาะสมด้วยโปรแกรม R ได้ดังนี้

```
# import data
x < -c(0,1,2,3,4,5)
y < -c(1,2,2,3,4,4)
dat<-data.frame(behav = x, score = y)</pre>
# estimate linear regression model
fit_linear<-lm(y~x, data=dat)</pre>
summary(fit_linear)
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x, data = dat)
##
## Residuals:
##
          1
                   2
                            3
                                              5
## -0.09524 0.27619 -0.35238 0.01905 0.39048
          6
## -0.23810
##
## Coefficients:
               Estimate Std. Error t value
## (Intercept) 1.09524
                           0.23425
                                     4.675
## x
              0.62857
                           0.07737
                                    8.124
              Pr(>|t|)
##
## (Intercept) 0.00948 **
## x
                0.00125 **
## ---
## Signif. codes:
## 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
\#\# Residual standard error: 0.3237 on 4 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.9429, Adjusted R-squared: 0.9286
## F-statistic: 66 on 1 and 4 DF, p-value: 0.001249
```

การใช้งานโมเดล fit_linear จะเน้นไปในการทำนายมากกว่าการอธิบายความสัมพันธ์แบบที่ทำให้ data analysis ดังนั้นก่อน ที่จะนำโมเดลทำนายไปใช้ผู้วิเคราะห์จำเป็นต้องตรวจสอบให้มั่นใจว่าโมเดลที่พัฒนาขึ้นมีประสิทธิภาพในการทำนาย ทั้งนี้มีเกณฑ์ การพิจารณาที่เรียกว่า evaluation metric ได้หลายเกณฑ์ที่สามารถใช้ประเมินประสิทธิภาพดังกล่าวได้ในที่นี้จะกล่าวเกณฑ์ที่ มักใช้สำหรับประเมิน regression model ได้แก่ RMSE (root mean squared error) และค่า R-squared

Root Mean Squared Error (RMSE)

ในทางทฤษฎีค่า RMSE มีความหมายเป็นค่าคลาดเคลื่อนในการทำนายโดยเฉลี่ยของโมเดล สามารถคำนวณได้จากสูตร

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$$

Coeffcient of Determination (R squared)

ส่วน R squared มีความหมายเป็นสัดส่วนของความผันแปรที่ร่วมกันระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามกับค่าทำนายของตัวแปรตาม ที่ได้จากโมเดลทำนาย การคำนวณค่า R squared สามารถทำได้ง่าย ๆ ด้วยการหาค่ากำลังสองของสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของตัวแปรตามดังกล่าว

$$R^2 = Corr(y, \hat{y})^2$$

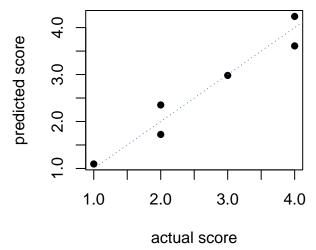
จะเห็นว่า evalulation metric ทั้งสองล้วนเป็นการเปรียบเทียบความแตกต่างหรือความสอดคล้องระหว่างค่าจริงของตัวแปร ตามกับค่าทำนายที่ได้จากโมเดลทำนาย การคำนวณค่าของ metric ดังกล่าวสามารถเขียนคำสั่งใน R ได้ดังนี้

```
# calculate prediction values
pred<-predict(fit_linear)</pre>
pred # predicted value
          1
                    2
                             3
                                                5
##
## 1.095238 1.723810 2.352381 2.980952 3.609524
          6
##
## 4.238095
# calculate rmse value
sqrt(mean((y-pred)^2)) #rmse
## [1] 0.264275
# calculate r squared value
cor(pred, y)^2 #rsq
```

[1] 0.9428571

R squared plot

```
# create R squared plot
plot(y, pred, pch=16, xlab = "actual score", ylab="predicted score")
abline(a=0, b=1, lty=3, col="steelblue")
```



6.4 Bias and Variance in ML models

- พิจารณารูป 9 แสดงการ fit โมเดลทำนาย 3 แบบกับชุดข้อมูลฝึกหัดชุดหนึ่ง จะเห็นว่าแต่ละโมเดลมีความสามารถในการ เรียนรู้ความสัมพันธ์ที่เกิดขึ้นในชุดข้อมูลแตกต่างกัน
- ความแตกต่างระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามในชุดข้อมูลฝึกหัดกับค่าทำนายที่ได้จากโมเดล เรียกว่า ความลำเอียง
 (bias)
- จากรูป 9 ผู้อ่านคิดว่าโมเดลใดที่มีประสิทธิภาพในการทำนายสูงที่สุดเพราะเหตุใด ?
- พิจารณารูป 10 ผู้วิเคราะห์ได้นำโมเดลทำนายทั้ง 3 แบบ ที่พัฒนาจากชุดข้อมูลฝึกหัดมาใช้ทำนายข้อมูลใหม่ที่โมเดลทั้ง 3 ไม่เคยได้เรียนรู้มาก่อน ผลการทำนายที่ได้เป็นอย่างไร ?
- ความแตกต่างระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามในชุดข้อมูลใหม่ (หรือชุดข้อมูลที่ไม่ได้ใช้ในขั้นการพัฒนาโมเดล) กับค่า ทำนายของโมเดล เรียกว่า ความแปรปรวน (variance)

จากตัวอย่างข้างต้นทำให้ได้ข้อสรุปว่า การวัดประสิทธิภาพของโมเดลทำนายอย่างน้อยผู้วิเคราะห์จะต้องพิจารณาความคลาด เคลื่อนของโมเดล 2 ด้าน ได้แก่ ความลำเอียง (biased) และความแปรปรวน (variance) โดยที่ (1) ความลำเอียงเป็นตัวชื้ วัดที่บอกผู้วิเคราะห์ว่าสามารถสอนให้โมเดลเรียนรู้ความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรหรือสารสนเทศภายในชุดข้อมูลฝึกหัดได้ดีมาก น้อยแค่ไหน ความลำเอียงสามารถประมาณได้จากความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามกับค่าทำนายภายใต้ชุดข้อมูล ฝึกหัด และ (2) ความแปรปรวน (variance) ใช้เป็นตัวชี้วัดความเป็นนัยทั่วไป หรือผู้วิเคราะห์สามารถนำโมเดลทำนายที่พัฒนา ขึ้นไปใช้กับข้อมูลที่โมเดลไม่รู้จักในประชากรได้ดีมากน้อยแค่ไหน

ในเชิงอุดมคติ ผู้วิเคราะห์ต้องการให้ทั้งความลำเอียง และความแปรปรวนมีค่าต่ำที่สุดเท่าที่จะสามารถต่ำได้ แต่ในความเป็น จริงความคลาดเคลื่อนทั้งสองไม่ควบคุมให้ต่ำที่สุดพร้อมกันได้ (เพราะอะไร?) รูป 11 ด้านล่างแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง

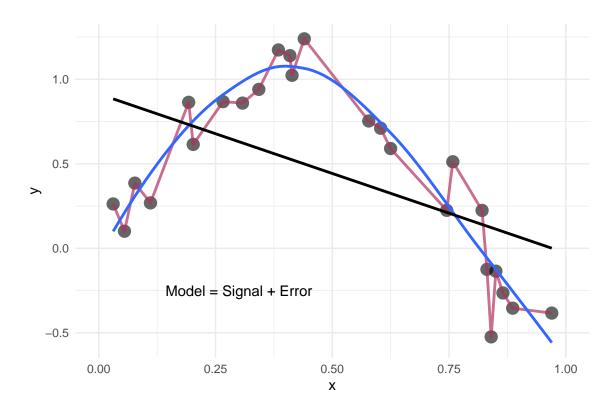


Figure 9: regression model on training dataset

ความลำเอียง และความแปรปรวน ซึ่งจะเห็นว่ามีการแปรผกผันซึ่งกันและกัน โมเดลที่มีความลำเอียงสูงมีแนวโน้มที่จะมีความ แปรปรวนต่ำ และในทางกลับกันโมเดลที่มีความลำเอียงต่ำจะมีแนวโน้มที่มีความแปรปรวนสูง **ดังนั้นวัตถุประสงค์ของการ** พัฒนาโมเดลจึงเป็นการหาจุดที่ดีที่สุดที่ทำให้ความคลาดเคลื่อนทั้งสองอยู่ในจุดที่ต่ำที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้

6.5 Underfitting, Overfitting และ Good fit models

หากจำแนกโมเดลทำนายที่ถูกพัฒนาขึ้นตามประสิทธิภาพการทำนายของโมเดล อาจจำแนกได้เป็น 3 ประเภท ดังในรูป 12 ได้แก่

- underfitting models คือโมเดลที่มีความลำเอียงสูง
- overfitting models คือโมเดลที่มีความแปรปรวนสูง
- good fit models คือโมเดลที่สามารถสมดุลความลำเอียงและความแปรปรวนให้มีค่าต่ำที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้

6.6 Training, validation, and Test Dataset

จาก concept ข้างต้นจะเห็นว่าในกระบวนการพัฒนาโมเดลผู้วิเคราะห์จะให้ความสำคัญกับประสิทธิภาพในการทำนายของ โมเดลเฉพาะด้านความลำเอียงไม่ได้ ยังต้องคำนึงถึงด้านความแปรปรวนด้วย การพัฒนาโมเดลการเรียนรู้ของเครื่องจึงจะมีแค่ชุด ข้อมูลฝึกหัดไม่ได้ ยังต้องมีชุดข้อมูลอีกชุดหนึ่งเพื่อเอาไว้ตรวจสอบความแปรปรวนของโมเดลด้วย ในเชิงเทคนิคเรียกชุดข้อมูลนี้ ว่า **ชุดข้อมูลทดสอบ (test dataset)**

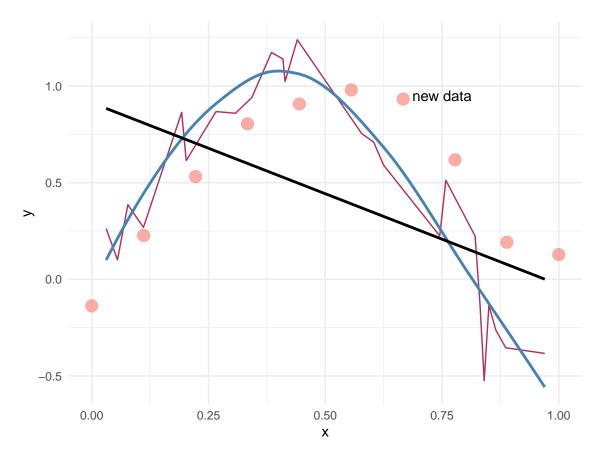


Figure 10: regression model on new dataset

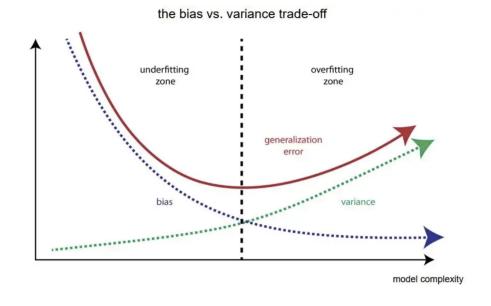


Figure 11: bias and variance trace-off

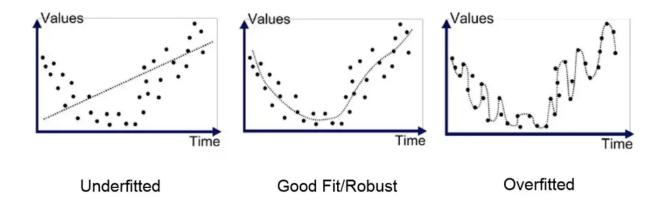


Figure 12: underfitting, good fit, and overfitting model

ภายในอัลกอริทึม supervised learning จะมีส่วนประกอบหลัก ๆ ได้แก่ อัลกอริทึม พารามิเตอร์ และ ไฮเปอร์พารามิเตอร์

- อัลกอริทึม เป็นส่วนของวิธีการเรียนรู้ของสำหรับแต่ละการเรียนรู้ของเครื่องที่ใช้ในการเรียนรู้หรือสกัดสารสนเทศจาก ข้อมูลในชุดข้อมูลฝึกหัด
- พารามิเตอร์ (parameters) ส่วนที่ทำให้การเรียนรู้ของเครื่อง fit กับข้อมูล กล่าวง่าย ๆ คือค่าของพารามิเตอร์ที่ เปลี่ยนแปลงไป จะทำให้รูปแบบการเรียนรู้มีการเปลี่ยนไป ค่าพารามิเตอร์นี้สามารถประมาณได้จากข้อมูลด้วยวิธีการทาง สถิติ/คณิตศาสตร์ ตัวอย่างของพารามิเตอร์เช่น ใน linear regression model มีพารามิเตอร์คือ สัมประสิทธิ์จุดตัดแกน และสัมประสิทธิ์ความชั้น เป็นต้น อย่างไรก็ตามบางอัลกอริทีมไม่ได้มีพารามิเตอร์ของโมเดล เช่น K-NN เป็นต้น
- ไฮเปอร์พารามิเตอร์ (Hyperparameters) เป็นพารามิเตอร์ประเภทหนึ่งในอัลกอริทึมการเรียนรู้ของเครื่อง พารามิเตอร์ประเภทนี้ไม่สามารถประมาณค่าจากข้อมูลโดยตรงด้วยวิธีการทางสถิติ แต่จะใช้การกำหนด/ปรับแต่งค่า โดยตัวผู้วิเคราะห์เอง ในเชิงเทคนิคเรียกการปรับแต่งค่าดังกล่าวว่า hyperparameter tuning การปรับแต่งค่า ของ hyperparameter ดังกล่าวจะใช้วิธีการทดลองกำหนดค่า hyperparameter จำนวนหนึ่งให้กับอัลกอริทึม จากนั้น เลือกใช้ค่า hyperparameter ที่ทำให้ค่าประสิทธิภาพของโมเดลทำนายสูงที่สุด ทั้งนี้การพิจารณาประสิทธิภาพดังกล่าว จะพิจารณาบนชุดข้อมูลอีกชุดหนึ่งที่เรียกว่า validation dataset

จากที่กล่าวข้างต้นจะเห็นว่าในกระบวนการพัฒนาโมเดลการเรียนรู้ของเครื่อง ต้องการชุดข้อมูลทั้งหมดจำนวน 3 ชุด ได้แก่ training, validation และ test dataset โดยที่ training และ validation dataset เป็นชุดข้อมูลที่ใช้ในระยะพัฒนาการ เรียนรู้ของโมเดลให้มีประสิทธิภาพลูงสุด ส่วน test dataset เป็นชุดข้อมูลที่ใช้ตรวจสอบประสิทธิภาพด้านความเป็นนัยทั่วไปแต่ จะไม่ได้มีส่วนเกี่ยวข้องกับระยะการพัฒนาการเรียนรู้ของโมเดล

6.7 Data Partitioning

ในทางปฏิบัติผู้วิเคราะห์มักมีข้อมูลต้นฉบับเพียงชุดเดียวเท่านั้นแต่ละใช้การแบ่งส่วนข้อมูลโดยใช้วิธีการสุ่มตัวอย่าง (random sampling) เพื่อสร้าง training, validation และ test dataset รูปด้านล่างแสดงลักษณะการแบ่งส่วนข้อมูลดังกล่าว

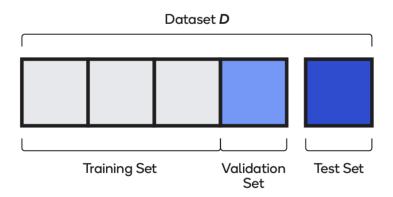


Figure 13: training, validation และ testing dataset

โดยปกติการแบ่งส่วนข้อมูลดังกล่าวไม่ได้มีกฎเกณฑ์ตายตัวว่าควรแบ่งส่วนใดอย่างละเท่าไหร่ โดยปกติผู้วิเคราะห์มักกำหนด สัดส่วนระหว่าง training + validation dataset กับ test dataset เป็น 80 : 20, 75 : 25, 70 : 30, 60: 40 หรือ 50: 50 ขึ้นอยู่กับว่าชุดข้อมูลต้นฉบับที่มีนั้นมีขนาดใหญ่มากเพียงใด นอกจากนี้การแบ่งส่วนข้อมูลด้วยวิธีการสุ่มตัวอย่างอาจจำแนกเป็น 2 วิธีการ วิธีการแรกคือการสุ่มตัวอย่างแบบง่าย (simple random sampling: SRS) และวิธีการที่สองคือการสุ่มตัวอย่างแบบ ชั้นภูมิ (stratified random sampling)

6.7.1 ชุดข้อมูล mpg

ชุดข้อมูลที่ใช้เป็นตัวอย่างในหัวข้อนี้จะใช้ dataset mpg ที่เป็นชุดข้อมูลตัวอย่างซึ่งถูกติดตั้งมาพร้อมกับการติดตั้งโปรแกรม R อยู่ แล้ว ผู้วิเคราะห์สามารถเรียกดูข้อมูลภายในชุดข้อมูลดังกล่าวได้โดยใช้คำสั่งพื้นฐานต่าง ๆ เช่น head(), str(), glimpse() หรือ summary() เป็นต้น

```
library(dplyr)
head(mpg)
```

```
## # A tibble: 6 x 11
     manufa~1 model displ year
                                    cyl trans drv
##
     <chr>>
              <chr> <dbl> <int> <int> <chr> <chr>
##
## 1 audi
              a4
                       1.8
                            1999
                                      4 auto~ f
## 2 audi
              a4
                       1.8
                            1999
                                      4 manu~ f
                       2
## 3 audi
              a4
                            2008
                                      4 manu~ f
## 4 audi
                       2
                            2008
                                      4 auto~ f
              a4
                       2.8
                            1999
## 5 audi
              a4
                                      6 auto~ f
## 6 audi
              a4
                       2.8
                            1999
                                      6 manu~ f
     ... with 4 more variables: cty <int>,
       hwy <int>, fl <chr>, class <chr>, and
       abbreviated variable name 1: manufacturer
## #
```

glimpse(mpg)

```
## Rows: 234
## Columns: 11
## $ manufacturer <chr> "audi", "audi", "audi", ~
                  <chr> "a4", "a4", "a4", "a4",~
## $ model
## $ displ
                  <dbl> 1.8, 1.8, 2.0, 2.0, 2.8~
                  <int> 1999, 1999, 2008, 2008,~
## $ year
## $ cyl
                  <int> 4, 4, 4, 6, 6, 6, 4,~
                  <chr> "auto(15)", "manual(m5)~
## $ trans
                  <chr> "f", "f", "f", "f", "f"~
## $ drv
## $ cty
                  <int> 18, 21, 20, 21, 16, 18,~
                  <int> 29, 29, 31, 30, 26, 26,~
## $ hwy
                  <chr> "p", "p", "p", "p", "p"~
## $ fl
                  <chr> "compact", "compact", "~
## $ class
```

6.7.2 การแบ่งข้อมูลด้วยการสุ่มอย่างง่าย

การแบ่งด้วย simple random sampling เป็นการแบ่งโดยสุ่มข้อมูลตามจำนวนที่กำหนดออกมาเป็นชุดข้อมูล training dataset หรือ test dataset โดยการสุ่มดังกล่าวมีข้อสมมุติว่าหน่วยข้อมูลทุกหน่อยในชุดข้อมูลต้นฉบับมีโอกาสที่จะถูกสุ่มขึ้นมา เท่ากันทั้งหมด การแบ่งข้อมูลด้วยวิธีการนี้ใน R สามารถทำได้หลายวิธี แต่ในบทความนี้จะใช้วิธีที่อยู่ภายใต้ framework ของ tidymodels การแบ่งข้อมูลด้วยวิธีการดังกล่าวมีสองขั้นตอน

- ขั้นแรกคือการสร้างกรอบของการแบ่งข้อมูลออกเป็น training และ test data สามารถทำได้ด้วยฟังก์ชัน initial_split() ของ package rsample อาร์กิวเมนท์สำคัญที่จะต้องระบุในฟังก์ชันได้แก่ data และ prop
- ขั้นที่สองคือการแบ่งข้อมูลตามกรอบในขั้นตอนแรก โดยจะใช้ฟังก์ชัน training() เพื่อแบ่งชุด training dataset ออก มา และใช้ฟังก์ชัน testing() เพื่อแบ่งชุดข้อมูล test dataset ออกมา

```
# generate sampling frame
mpg_split1 <- initial_split(data = mpg, prop = 0.75)
mpg_split1

## <Training/Testing/Total>
## <175/59/234>
# create training and test dataset
train_srs <- mpg_split1 %>% training()
test_srs <- mpg_split1 %>% testing()
```

6.7.3 การแบ่งข้อมูลด้วยการสุ่มแบบชั้นภูมิ

การแบ่งชุดข้อมูลด้วยการสุ่มแบบชั้นภูมิสามารถทำได้ด้วยฟังก์ชัน initial_split() เช่นเดียวกัน แต่จะต้องมีการระบุอาร์กิว เมนท์ของฟังก์ชันเพิ่มเติมได้แก่ strata เพื่อระบุตัวแปรตามหรือตัวแปรเกณฑ์ที่จะใช้แบ่งชั้นภูมิก่อนการสุ่มตัวอย่าง และ breaks ใช้กำหนดจำนวนอันตรภาคชั้นของตัวแปรตามหรือตัวแปรเกณฑ์ที่จะใช้แบ่งชั้นภูมิหากตัวแปรดังกล่าวเป็นตัวแปรเชิง ปริมาณ ค่าเริ่มต้นของอาร์กิวเมนท์นี้กำหนดให้ breaks = 4ตัวอย่างต่อไปนี้แสดงการแบ่งชุดข้อมูล training และ test ด้วย การสุ่มแบบชั้นภูมิ

รูปด้านล่างแสดงการเปรียบเทียบการแจกแจงของตัวแปรตามระหว่างชุดข้อมูลต้นฉบับ (full dataset), training และ test dataset ที่แบ่งด้วยวิธีการสุ่มตัวอย่างแบบง่าย และแบบชั้นภูมิ

6.8 Modeling Process

จาก concept ที่กล่าวในหัวข้อ 6.4 - 6.6 จึงมีการออกแบบกระบวนการพัฒนา ML model ไว้ดังรูป 15

6.9 Tidymodels Framework

ปัจจุบันมีเครื่องมือที่ช่วยให้ผู้วิเคราะห์สามารถพัฒนา machine model ได้หลายตัว บทเรียนนี้จะกล่าวถึงการใช้โปรแกรม R เพื่อ พัฒนา ML model ดังกล่าว ทั้งนี้ต้องทำความเข้าใจก่อนว่า การทำงานบน R แม้จะเป็นปัญหาเดียวกัน ชุดข้อมูลเดียวกัน แต่ ผู้วิเคราะห์ต่างคนกันก็มีทางที่จะดำเนินการด้วยวิธีการที่แตกต่างกันได้ (ใน Python หรือโปรแกรมอื่น ๆ ก็เช่นเดียวกัน) วิธีการ หนึ่งใน R ที่สามารถ modeling ได้ง่ายและมีประสิทธิภาพคือการใช้ tidymodels framework รายละเอียดดังรูป 16

- package-rsample ใช้ในงาน resampling ข้อมูล เช่นการสร้าง training/validation/test dataset การสร้าง cross-validation dataset หรือการสร้าง bootstrape dataset ซึ่งได้กล่าวการใช้งานเบื้องต้นไปแล้วใน 6.7 Data Partitioning
- package-recipes ใช้แปลง/แก้ปัญหาที่เกิดขึ้นในข้อมูลของตัวแปรที่ใช้ในการพัฒนาโมเดล ขั้นตอนนี้เรียกว่า feature engineering
- package-parsnip ใช้ fit machine learning กับข้อมูล
- package-Tune และ package-dials มีฟังก์ชันที่อำนวยความสะดวกในการ fine tune hyperparameter ของ โมเดลเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการทำนายของโมเดลให้สูงที่สุด
- package-yardstick มีฟังก์ชันของ metric ที่ใช้ประเมินประสิทธิภาพของโมเดลทำนาย

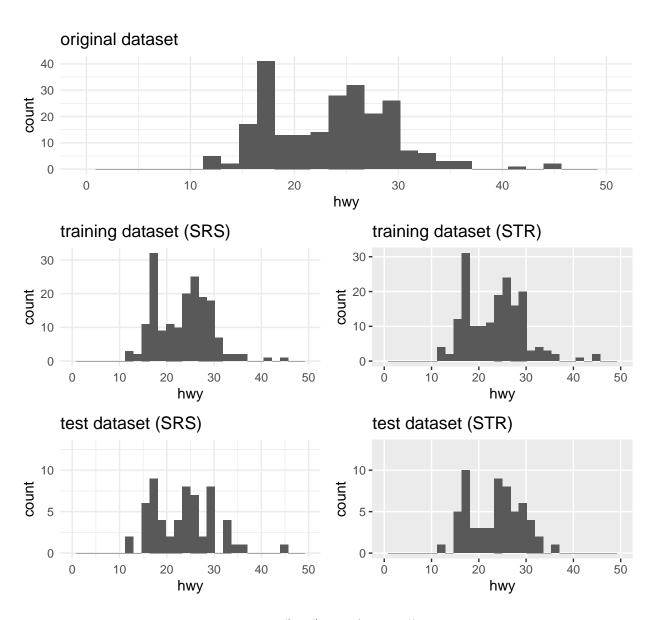


Figure 14: เปรียบเทียบระหว่าง SRS กับ STR

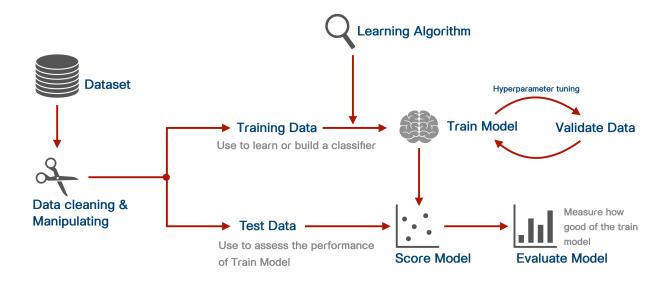


Figure 15: Modeling Process

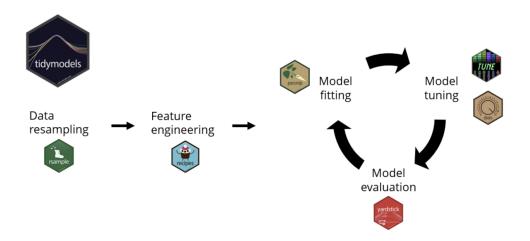


Figure 16: tidymodel framework

tidymodels ถูกพัฒนาขึ้นโดยได้รับการออกแบบให้สามารถทำซ้ำกระบวนการพัฒนาโมเดลได้ง่าย โดยใช้ไวยกรณ์ของภาษาใน ลักษณะเดียวกัน และถูกออกแบบโดยเน้นใช้กับ supervised learning เป็นหลัก ผู้ใช้งานไม่จำเป็นต้องติดตั้งทุก package ใน ข้างต้นด้วยตนเอง แต่ติดตั้งเพียง package-tidymodels ก็สามารถใช้งานทุก package ภายใต้ framework ดังกล่าวได้แล้ว โดย การพิมพ์คำสั่งต่อไปนี้

```
install.packages("tidymodels") # ดาวน์โหลดและติดตั้ง tidymodels
library(tidymodels) # เรียกใช้ tidymodels
```

6.10 Fitting and Evaluating ML models via tidymodels framework

จากชุดข้อมูล mpg ที่ได้ดำเนินการแบ่งส่วนข้อมูลเป็นชุดข้อมูลฝึกหัด และชุดข้อมูลทดสอบแล้ว ซึ่งอยู่ในส่วน Data resampling ของรูป 15 แล้ว นอกจากนี้ชุดข้อมูลดังกล่าวถูกจัดเตรียมมาเรียบร้อยจึงยังไม่ต้องดำเนินการในส่วน feature engineering เนื้อหาในหัวข้อนี้จึงจะนำชุดข้อมูลทั้งสองมาพัฒนาและตรวจสอบประสิทธิภาพของโมเดลตาม tidymodels framework โดยใช้ package parsnip และ yardstick ตามลำดับ

6.10.1 Fitting models using parsnip package

การ fit machine learning model กับข้อมูลด้วย R ในยุคเริ่มแรกค่อนข้างมีความยากลำบากพอสมควร เพราะ R ไม่ได้มี package ที่เป็น framework รวมสำหรับการ fit ML model ดังกล่าว การที่จะ fit ML model ในงานหนึ่ง ๆ ผู้วิเคราะห์อาจ จะต้องยุ่งเกี่ยวกับ package จำนวนมาก เช่น

- package rpart สำหรับ fit decision tree
- package glmnet สำหรับ fit regularized regression model
- package knn สำหรับ fit K-NN model

โดย package ที่แตกต่างกันมักมีแนวคิดและไวยกรณ์การเขียนคำสั่งที่แตกต่างกัน ทำให้เป็นอุปสรรคต่อการทำงานโดยเฉพาะ การทำซ้ำในอนาคต จากปัญหานี้ tidymodels จึงมีการพัฒนา package parsnip ขึ้นเพื่อเป็น interface สำหรับใช้ package ใน R ที่เกี่ยวข้องกับการ fit supervised learning ทั้งนี้ parsnip ได้ถูกออกแบบมาให้การสั่งงานทั้งหมดอยู่ภายใต้ไวยกรณ์แบบ เดียวกัน ปัจจุบันการ fit ML models ใน R จึงดำเนินการได้ง่ายขึ้นอย่างมาก

ขั้นตอนการ fit ML models ด้วย parsnip มี 2 ขั้นตอน ได้แก่ การระบุโมเดล และการประมวลผล รายละเอียดมีดังนี้

การระบุโมเดล (model specification) การระบุโมเดลใน parsnip มีส่วนประกอบ 3 ส่วนที่จำเป็นได้แก่

- model type หรืออัลกอริทึมการเรียนรู้ของเครื่องที่ผู้วิเคราะห์จะใช้ในการทำงาน
- engine หรือ package ของ R ที่จะใช้สำหรับประมวลผล model type ที่เลือก
- mode สำหรับกำหนดว่าปัญหาที่ทำงานด้วยอยู่นี้เป็น regression หรือ classification

รายละเอียดว่าผู้วิเคราะห์สามารถกำหนด model type, engine และ mode แบบใดได้บ้างและต้องกำหนดอย่างไร สามารถ ศึกษาได้จาก https://www.tidymodels.org/find/parsnip/ รูปด้านล่างแสดงค้นหาสำหรับอัลกอริทีม linear regression จากผลการค้นหาในรูปด้านล่างจะเห็นว่าการ fit linear regression ด้วย parsnip สามารถทำได้ด้วย model type คือ linear_reg() เมื่อพิจารณาในคอลัมน์ engine จะเห็นว่าการ fit linear regression มี engine จำนวนมากที่สามารถใช้เพื่อ ประมาณค่าพารามิเตอร์ของโมเดลได้ engine ดังกล่าวจริง ๆ แล้วคือ package ต่าง ๆ ของ R ที่ใช้ประมวลผล mode type ที่ เลือกไว้ได้ ผู้อ่านจะเห็นว่า model type แบบ linear_reg มี engine ที่สามารถใช้ประมวลผลได้จำนวนมาก ซึ่งมีความเหมือน และความแตกต่างกัน เนื้อหาส่วนนี้มีความละเอียดและลึกมาก จึงขอไม่กล่าวถึงในที่นี้

EXPLORE MODELS

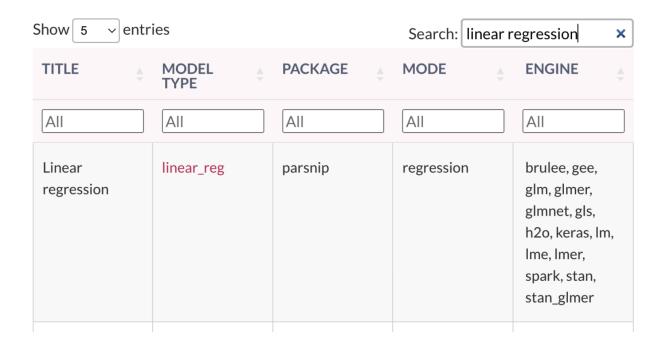


Figure 17: parsnip manual

ในคู่มือข้างต้นยังมีเครื่องมือให้ค้นหาการกำหนดอาร์กิวเมนท์ของฟังก์ชัน model type ในข้างต้น จากรูปด้านล่างจะเห็นราย ละเอียดในการกำหนดอาร์กิวเมนท์ของฟังก์ชัน linear_reg() เมื่อกำหนด engine ในลักษณะต่าง ๆ

ความหมายของการกำหนดอาร์กิวเมนท์แต่ละค่าสามารถศึกษาได้จากคู่มือของฟังก์ชัน linear_reg() ซึ่งสามารถกด hyperlink จากคู่มือข้างต้นเข้าไปศึกษาได้เลย (คู่มือ linear_reg())

เอกสารเพิ่มเติมเกี่ยวกับ package parsnip

- https://cran.r-project.org/web/packages/parsnip/parsnip.pdf
- https://cran.r-project.org/web/packages/parsnip/vignettes/parsnip.html



Figure 18: argument ในฟังก์ชัน model type

สมมุติว่าผู้วิเคราะห์ต้องการพัฒนาโมเดลการเรียนรู้ของเครื่องด้วยอัลกอริทึม linear regression โดยมีตัวแปรตามคือ hwy และ ตัวแปรอิสระเพียง 1 ตัวได้แก่ cty ตัวอย่างคำสั่งต่อไปนี้แสดงการกำหนดโมเดลการเรียนรู้ด้วย parsnip ดังกล่าว

```
lm_model <- linear_reg() %>%  # model type
set_engine("lm") %>%  # model engine
set_mode("regression") # model mode
```

การประมวลผล เมื่อกำหนดโมเดลการเรียนรู้แล้วขั้นตอนถัดไปคือการนำ model specification ดังกล่าว ไปดำเนินการ ประมวลผล โดยส่งผ่านไปยังฟังก์ชัน fit() ซึ่งมีอาร์กิวเมนท์สำคัญ 2 ตัวได้แก่ model formula และ training dataset ที่จะ ใช้สำหรับฝึกหัดโมเดล

การเขียน model formula จะเขียนอยู่ในรูปของ y ~ x1+x2+x3+... โดยที่ y คือตัวแปรตาม ส่วน x1, x2, x3 ,... คือ ตัวแปรอิสระภายในชุดข้อมูลฝึกหัด และสัญลักษณ์ ~ หมายความว่า "regress on" ในกรณีที่ต้องการใช้ตัวแปรที่เหลือในชุด ข้อมูลทั้งหมดเป็นตัวแปรทำนาย สามารถเขียน model formula สั้น ๆ ได้ดังนี้ 'y ~ : ตัวอย่างต่อไปนี้แสดงการส่งผ่าน model specification lm_model ในข้างต้นไปประมวลผล

```
## parsnip model object
##
##
## Call:
## stats::lm(formula = hwy ~ cty, data = data)
##
## Coefficients:
## (Intercept) cty
## 1.139 1.326
```

การเรียกดูค่าประมาณพารามิเตอร์ของ ML model อย่างไรก็ตาม tidymodels มีฟังก์ชัน tidy() ซึ่งช่วยสร้างตารางสรุป ผลลัพธ์จากการประมาณค่าพารามิเตอร์หรือการเรียนรู้ของโมเดลทำนายที่ใช้ให้อยู่ในรูปแบบเดียวกัน ดังนี้

```
tidy(fit_lm)
```

```
## 1 (Intercept) 1.14 0.537 2.12 3.51e- 2
## 2 cty 1.33 0.0309 42.9 7.32e-94
## # ... with abbreviated variable names
## # 1: estimate, 2: std.error, 3: statistic
```

ภายใต้ framework ของ tidymodels จะใช้ฟังก์ชันใน package parsnip เพื่อ fitting model ทำนายดังกล่าว package ดัง กล่าว จุดเด่นของ parsnip คือถูกออกแบบมาเพื่อเป็น interface สำหรับ fit supervised learning model ที่มีรูปแบบการใช้ คำสั่งเป็นไวยกรณ์แบบเดียวกันทั้งหมด

6.10.2 Prediction

ผู้วิเคราะห์สามารถนำโมเดลที่ผ่านการ train เรียบร้อยแล้วไปใช้หาค่าทำนาย โดยส่งผ่านโมเดลที่ train แล้ว (ในที่นี้คือ fit_lm) ไปยังฟังก์ชัน predict() ที่มีอาร์กิวเมนท์สำคัญคือ new_data ตัวอย่างด้านล่างแสดงนำ fit_lm ไปทำนายตัวแปร hwy ใน ชุดข้อมูลทดสอบ

```
##
      .pred
      <dbl>
##
   1 29.0
   2 25.0
   3 21.0
     22.4
   5 19.7
##
      26.3
   7 25.0
     23.7
   9 23.7
## 10 23.7
## # ... with 50 more rows
```

ผลลัพธ์ที่ได้จากการทำนายจะเป็นตารางแบบ tibble ที่แต่ละ row คือค่าทำนายของหน่วยข้อมูลใน row เดียวกันกับใน test_str

เมื่อได้ค่าทำนายในชุดข้อมูลทดสอบมาแล้ว ขั้นตอนถัดไปคือการประเมินประสิทธิภาพของโมเดลทำนาย โดยทั่วไปผู้วิเคราะห์มัก จะรวมค่าทำนายที่ได้ (ในที่นี้คือ hwy_pred) ไปไว้อยู่ภายในชุดข้อมูลทดสอบ การดำเนินการนี้สามารถทำได้หลายวิธีการขึ้นอยู่ กับว่าถนัดจะดำเนินการแบบนี้ ในตัวอย่างนี้จะใช้ฟังก์ชัน bind_cols()

```
# A tibble: 60 x 3
##
               cty .pred
##
       <int> <int> <dbl>
    1
          29
                     29.0
##
                     25.0
##
          26
                 18
    3
                 15 21.0
          25
##
##
    4
          26
                 16
                     22.4
                     19.7
##
    5
          19
                 14
          27
                 19
                     26.3
    7
                     25.0
          26
                 18
          26
                     23.7
                 17
                     23.7
##
          24
                 17
                     23.7
## 10
          24
                 17
## # ... with 50 more rows
```

6.10.3 Evaluating models using yardstick package

ประสิทธิภาพในการทำนายของโมเดลสามารถประเมินได้หลายลักษณะ ในเชิงเทคนิคจะเรียกเกณฑ์ที่ใช้สำหรับประเมิน ประสิทธิภาพของโมเดลการเรียนรู้ของเครื่องว่า evaluation metric

Metric ดังกล่าวอาจจำแนกเป็น 2 ประเภท ตามประเภทของ supervised learning ได้แก่ metric สำหรับประเมินประสิทธิภาพ ของ regression model และ classification model ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึง metric สำหรับ regression model ก่อน

สำหรับ metric ที่นิยมใช้ประเมินประสิทธิภาพของ regression model ได้แก่ RMSE (root mean squared error) และ R squared (coefficient of determination) การคำนวณค่าประสิทธิภาพดังกล่าวสามารถทำได้โดยใช้ฟังก์ชันจาก package yardstick ได้แก่ rmse() และ rsq() ตามลำดับ ตัวอย่างต่อไปนี้แสดงการเขียนคำสั่งเพื่อคำนวณ metric ทั้งสอง

ในทางทฤษฎีค่า RMSE มีความหมายเป็นค่าคลาดเคลื่อนในการทำนายโดยเฉลี่ยของโมเดล สามารถคำนวณได้จากสูตร

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$$

ส่วน R squared มีความหมายเป็นสัดส่วนของความผันแปรที่ร่วมกันระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามกับค่าทำนายของตัวแปรตาม ที่ได้จากโมเดลทำนาย การคำนวณค่า R squared สามารถทำได้ง่าย ๆ ด้วยการหาค่ากำลังสองของสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ ระหว่างค่าจริงกับค่าทำนายของตัวแปรตามดังกล่าว

```
R^2 = Corr(y, \hat{y})^2
```

```
test results %>%
  rmse(truth = hwy, estimate = .pred)
## # A tibble: 1 x 3
     .metric .estimator .estimate
##
             <chr>
##
     <chr>>
                             <dbl>
## 1 rmse
             standard
                              1.64
test_results %>%
  rsq(truth = hwy, estimate = .pred)
## # A tibble: 1 x 3
     .metric .estimator .estimate
     <chr>>
             <chr>>
                             <dbl>
## 1 rsq
             standard
                             0.913
```

นอกจาก metric ที่เป็นค่าสถิติแล้วยังมี metric ที่เป็น visualization ด้วย เช่นในกรณีของ regression model สามารถใช้ R squared plots เพื่อประเมินความสอดคล้องกันระหว่างค่าจริงของตัวแปรตามกับค่าทำนายได้ การสร้าง R squared plot ใน R สามารถทำได้หลายวิธี ทั้งการใช้ package graphic ซึ่งเป็น package พื้นฐานสำหรับสร้าง visualization ใน R ดังนี้

```
# create R squared plot using graphic package
plot(x = test_results$.pred,
    y = test_results$hwy,
    pch = 16,
    xlab = "predicted value",
    ylab = "actual value")
abline(a=1,b=1, lty=3, col="steelblue")
```

หรือใช้ ggplot2 ซึ่งเป็น package หนึ่งภายใต้ tidyverse framework

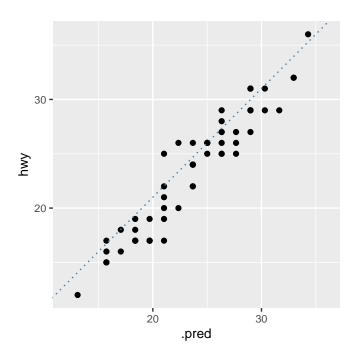


Figure 19: R squared plot via ggplot2

คำถาม

linear regression มีโมเดลทางสถิติที่มีข้อตกลงเบื้องต้นที่ค่อนข้างเข้มงวด ได้แก่ independence, homoscedasticity, normality, no multicollinearity, no outlier, ... คำถามคือในการพัฒนา ML model ดังกล่าวจำเป็นมั้ยที่จะต้องตรวจสอบข้อ ตกลงเบื้องต้นดังกล่าว เพราะอะไร?

6.11 กิจกรรม 4: พัฒนา regression model ด้วย tidymodel framework

- 1. น้ำเข้าข้อมูลจากไฟล์ TeacherSalaryData.csv
- 2. สำรวจข้อมูลจากชุดข้อมูลดังกล่าว แล้วตอบคำถาม
 - ชุดข้อมูลนี้มีตัวแปรทั้งหมดกี่ตัว
 - มีหน่วยข้อมูลทั้งหมดกี่หน่วย
 - หาค่าสถิติพื้นฐานของตัวแปรเชิงปริมาณในชุดข้อมูล
 - อาจารย์มหาวิทยาลัยส่วนใหญ่มีตำแหน่งวิชาการอะไร
- 3. แบ่งส่วนข้อมูลที่นำเข้าออกเป็นสองส่วน ได้แก่ training และ test dataset โดยกำหนดให้สัดส่วนระหว่างชุดข้อมูล ทั้งหมดเป็น 80 : 20
- 4. กำหนดให้ตัวแปรตามคือ salary (เงินเดือนของอาจารย์มหาวิทยาลัย) ลองพัฒนา supervised learning model 2 โมเดล โดยตัวแรกให้ใช้ linear regression model ที่ใช้ lm เป็น engine และตัวที่สองให้ใช้ decision tree ที่ใช้ rpart เป็น engine ทั้งนี้ให้ใช้ตัวแปรอิสระทุกตัวในชุดข้อมูลเป็นตัวแปรทำนาย
- 5. เปรียบเทียบประสิทธิภาพในการทำนายของโมเดลทั้งสอง ผลที่ได้เป็นอย่างไร