Zaawansowane uczenie maszynowe:
wykład 4

Paweł Cichosz

1. Podstawowe algorytmy uczenia się (część 3)
   - Algorytm SVM
2. Ocena jakości modeli

Algorytm SVM: margines klasyfikacji

Margines geometryczny dla przykładu x: odległość od granicy decyzyjnej (nieujemna jeśli klasyfikowany poprawnie, ujemna jeśli klasyfikowany niepoprawnie):

$$\gamma_{\mathbf{w}}(x) = c_{-}(x)\frac{\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x)}{\|\mathbf{w}_{1:n}\|}$$

gdzie $c_{-}(x) = 2c(x) - 1$.

Margines funkcyjny dla przykładu x:

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{w}}(x) = c_{-}(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x)$$

Margines geometryczny/funkcyjny dla zbioru trenującego:

$$\gamma_{\mathbf{w}}(T) = \min_{x \in T} \gamma_{\mathbf{w}}(x)$$

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{w}}(T) = \min_{x \in T} \hat{\gamma}_{\mathbf{w}}(x)$$

Algorytm SVM: twardy margines

Założenie: liniowo separowalny zbiór trenujący, poszukiwana granica decyzyjna poprawnie separująca wszystkie przykłady.

Postać kanoniczna wektora parametrów: można ograniczyć się do wektorów parametrów spełniających warunek $\hat{\gamma}_{\mathbf{w}}(T) = 1$ (granica decyzyjna niewrażliwa na skalowanie $\mathbf{w}$).

Maksymalizacja marginesu geometrycznego: równoważna maksymalizacji $\frac{1}{\|\mathbf{w}_{1:n}\|}$, co z kolei jest równoważne minimalizacji $\|\mathbf{w}_{1:n}\|^2$.

Zadanie optymalizacji:

minimalizacja:

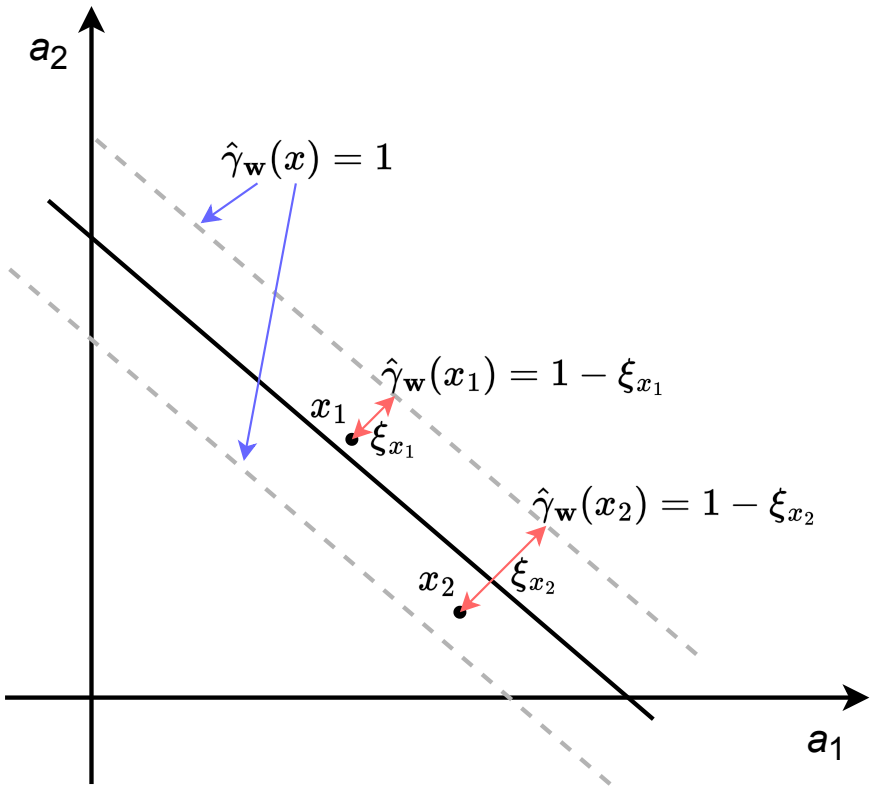
$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}_{1:n}\|^2$$

przy ograniczeniach:

$$(\forall x \in T) \quad c_-(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x) \geq 1$$

Wektory podpierające: przykłady, dla których $c_-(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x) = 1$ („leżące na marginesie").

Algorytm SVM: miękki margines



Założenie: zbiór trenujący niekoniecznie liniowo separowalny, poszukiwana granica decyzyjna nie musi poprawnie separować wszystkich przykładów.

Zmienne luzujące: ξ_x – wielkość naruszenia ograniczenia dla przykładu x.

Algorytm SVM: miękki margines

Zadanie optymalizacji:

minimalizacja:

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{w}_{1:n}\|^2 + \mathcal{C}\sum_x \xi_x$$

przy ograniczeniach:

$$(\forall x \in T) \quad c_-(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x) \geq 1 - \xi_x$$
$$(\forall x \in T) \quad \xi_x \geq 0$$

Koszt: $\mathcal{C}$ – koszt naruszenia ograniczenia (stosowane oznaczenie $\mathcal{C}$ zamiast C dla odróżnienia kosztu od zbioru klas).

Wektory podpierające: przykłady, dla których $c_-(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x) \leq 1$ („leżące na marginesie" jeśli $c_-(x)\mathbf{w} \circ \mathbf{a}(x) = 1$).

Algorytm SVM: właściwości

- Należy do najbardziej skutecznych i często używanych algorytmów dla zadań klasyfikacji:
  - maksymalizacja marginesu zmniejsza efektywny wymiar VC przestrzeni modeli,
  - zwiększona odporność na nadmierne dopasowanie nawet przy dużej liczbie atrybutów,
  - możliwość wyznaczenia modelu dla danych nieseparowalnych liniowo.
- Wymaga staranności przy doborze kosztu naruszenia ograniczeń.
- Brak możliwości bezpośredniej interpretacji modeli.
- Możliwość reprezentacji nieliniowych zależności przez zastosowanie funkcji jądrowych (o czym będzie mowa za kilka tygodni).

1. Podstawowe algorytmy uczenia się (część 3)
   - Algorytm SVM

2. Ocena jakości modeli

Macierz pomyłek

Macierz pomyłek na zbiorze S:

$$\mathrm{CM}_{S,c}(h)[d_1, d_2] = |S_{c=d_1, h=d_2}|$$

Przypadek dwuklasowy:

	h	
c	0	1
0	TN	FP
1	FN	TP

Miary jakości klasyfikacji

współczynnik prawdziwych pozytywnych (true positive rate):

$$\frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}$$

współczynnik fałszywych pozytywnych (false positive rate):

$$\frac{\mathrm{FP}}{\mathrm{TN}+\mathrm{FP}}$$

odzysk (recall): = współczynnik prawdziwych pozytywnych

precyzja (precision):

$$\frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}}$$

Miary jakości

miara F: średnia harmoniczna precyzji i odzysku:

$$F = \frac{1}{\frac{\frac{1}{recall} + \frac{1}{precision}}{2}} = \frac{2 \cdot recall \cdot precision}{recall + precision}$$

czułość (sensitivity): = współczynnik prawdziwych pozytywnych

specyficzność (specificity): = 1 − współczynnik fałszywych pozytywnych

Analiza ROC

Graficzna metoda oceny jakości klasyfikacji: wizualizacja punktów pracy modeli klasyfikacji za pomocą punktów i krzywych w układzie współrzędnych $(\text{TP rate}[y], \text{FP rate}[x])$.

Predykcja klas: pojedynczy punkt.

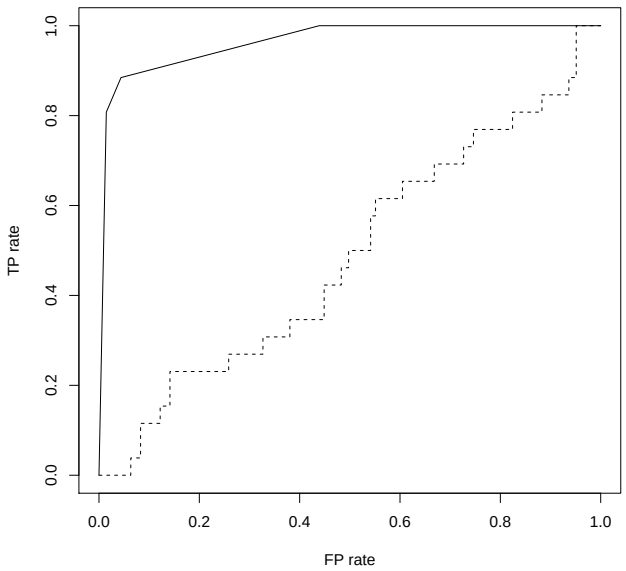
Predykcja probabilistyczna: krzywa (łamana) łącząca punkty odpowiadające różnym progom odcięcia $P(1|x)$.

Liczba punktów pracy: powiększona o 1 liczba różnych wartości $P(1|x)$.

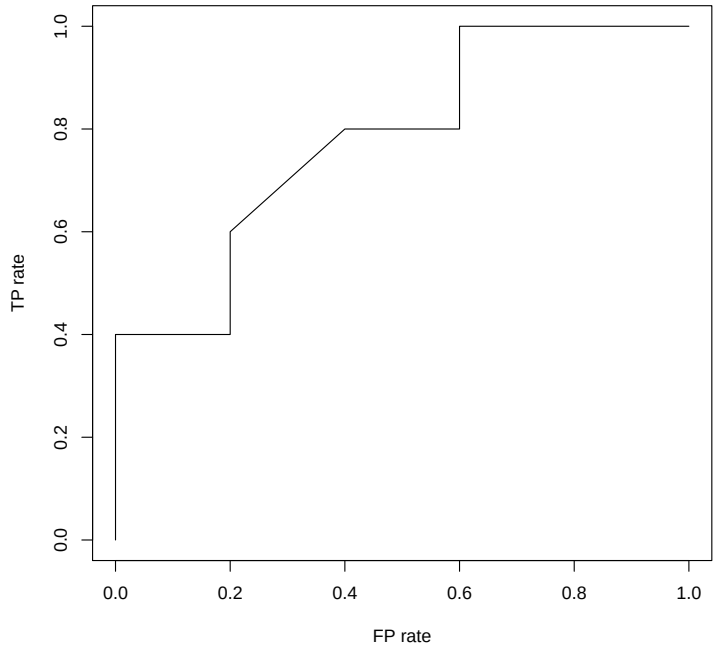
Zagregowana ocena predykcji probabilistycznych: pole pod krzywą ROC (AUC) – interpretowane jako prawdopodobieństwo, że losowo wybrany przykład klasy 1 uzyska większe $P(1|x)$ niż losowo wybrany przykład klasy 0.

Sporządzanie wykresu: sortowanie według $P(1|x)$, wyznaczanie zmiany TP i FP przy każdej zmianie progu odcięcia.

Analiza ROC



$P(1\|x)$	$c(x)$
0.1	0
0.1	0
0.3	1
0.4	0
0.5	0
0.5	1
0.6	1
0.7	0
0.9	1
0.9	1



Analiza PR

Krzywe PR (*precision-recall*, precyzja-odzysk): wykres analogiczny do ROC sporządzony dla precyzji (oś y) i odzysku (oś x).

Pole pod krzywą PR (PR AUC): średnia wartość precyzji w całym zakresie wartości odzysku.

Preferowane w przypadku niezrównoważonych klas:

- współczynnik fałszywych pozytywnych mało wrażliwy na FP jeśli TN $\gg$ FP, a tak jest zawsze gdy klasa 0 wyraźnie dominuje,
- precyzja znacznie bardziej wrażliwa na FP jeśli TP $\not\gg$ FP, a tak jest zwykle gdy klasa 0 wyraźnie dominuje.

Miary jakości regresji

Błąd bezwzględny (MAE, *mean absolute error*):

$$\mathrm{MAE}_{S,f}(h) = \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} |f(x) - h(x)|$$

Błąd średniokwadratowy (MSE, *mean square error*):

$$\mathrm{MSE}_{S,f}(h) = \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} (f(x) - h(x))^2$$

Pierwiastek błędu średniokwadratowego (RMSE, *root mean square error*):

$$\mathrm{RMSE}_{S,f}(h) = \sqrt{\mathrm{mse}_{S,f}(h)}$$

Miary jakości regresji

Błąd względny (RAE, *relative absolute error*):

$$\mathrm{RAE}_{S,f}(h) = \frac{\sum_{x \in S} |f(x) - h(x)|}{\sum_{x \in S} |f(x) - m_S(f)|} = \frac{\mathrm{MAE}_{S,f}(h)}{\frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} |f(x) - m_S(f)|}$$

gdzie $m_S(f)$ – średnia wartość f na zbiorze S.

Współczynnik determinacji:

$$\mathrm{R}^2{}_{S,f}(h) = 1 - \frac{\sum_{x \in S} (f(x) - h(x))^2}{\sum_{x \in S} (f(x) - m_S(f))^2} = 1 - \frac{|S| \mathrm{MSE}_{S,f}(h)}{(|S| - 1) s_S^2(f)}$$

gdzie $s_S^2(f)$ – wariancja f na zbiorze S.

Korelacja: współczynnik korelacji liniowej lub rangowej między wartościami f i h.

Procedury oceny

Podział na 2 podzbiory (*holdout*): losowy podział D na T (do budowy modelu) i Q (do oceny jakości modelu – tzw. zbiór testowy lub walidacyjny), $T \cap Q = \emptyset$.

k-krotna walidacja krzyżowa (k-CV):

- losowy podział D na równoliczne parami rozłączne podzbiory $D_1, D_2, \ldots, D_k$ (z zachowaniem rozkładu klas),
- tworzenie modelu h_i na podstawie $T_i = \bigcup_{j \neq i} D_j$,
- ocena modelu h_i na podstawie $Q_i = D_i$.

- Drugie spojrzenie na ocenę jakości modeli za jakiś czas...