ε.δε.μ²
ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτική Ταξινόμηση

1. Μετρικές Αξιολόγησης Μεθόδων, Μήτρα Σύγχυσης, ROC, AUC
2. Εκτίμηση MLE & MAP, Ταξινομητής Bayes
3. Αλγόριθμος Ταξινόμησης Naive Bayes

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης
maglaris@netmode.ntua.gr
www.netmode.ntua.gr

Video Conference μέσω Cisco Webex

Πέμπτη 20/5/2021

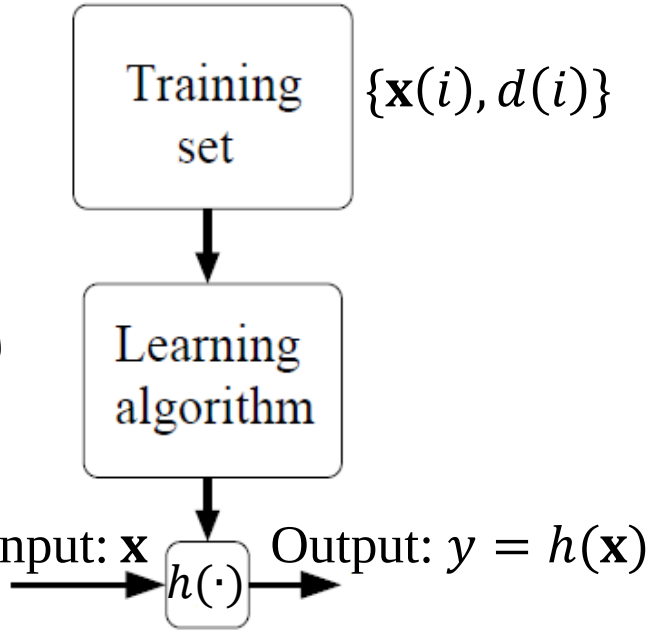
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Γενικό Μοντέλο Επιβλεπόμενης Μάθησης - Supervised Learning (*επανάληψη*)

Βασισμένο στο Andrew Ng, "CS229 Lecture Notes", Stanford University, Fall 2018

- Στόχος του συστήματος είναι η αντιστοίχηση ενός δειγματικού στοιχείου εισόδου (***input sample point***, ***example***) $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots x_m]^{\mathrm{T}}$ σε τιμές εξόδου y που εκτιμούν επιθυμητές (***desired***) τιμές d (π.χ. πρόβλεψη ή ταξινόμηση). Τα στοιχεία x_i είναι αριθμητικές τιμές που κωδικοποιούν m ειδοποιά χαρακτηριστικά (***features***) του δειγματικού στοιχείου $\mathbf{x}$

Ζητείται ο προσδιορισμός της συνάρτησης εισόδου - εξόδου $y = h(\mathbf{x}) \cong d$ που προκύπτει από δείγμα μάθησης (***Training Set***) N ***labeled*** ζευγών $\{\mathbf{x}(i), d(i)\}$, $i = 1,2, \dots, N$ γνωστών σε εξωτερικό εκπαιδευτή (***supervisor***)



- Η σχεδίαση της $h(\cdot)$ βασίζεται σε αλγόριθμο μάθησης, με προσαρμογή της μορφής και των παραμέτρων ενός μοντέλου ώστε να προσεγγίζεται ο στόχος της υπόθεσης

$$d(i) \cong y(i) = h(\mathbf{x}(i))$$

- Αν ο στόχος ικανοποιείται με μικρό αριθμό διακριτών επιλογών της y πρόκειται για πρόβλημα Ταξινόμησης, ***Classification*** (για δύο επιλογές έχουμε δυαδική ταξινόμηση)
- Αν η έξοδος y λαμβάνει συνεχείς τιμές, το πρόβλημα αναφέρεται σαν Παλινδρόμηση, ***Regression***

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μετρικές Αξιολόγησης Στατιστικής Ταξινόμησης: Confusion Matrix, ROC, AUC (1/2)

Στατιστική Δυαδική Ταξινόμηση

Αντιστοίχηση παραδειγμάτων (στοιχείων) δείγματος σε 2 κλάσεις:

Θετική (*Positive* P) - Αρνητική (*Negative* N)

- Διάγνωση μολύνσεων: **Θετικό ≙ Μολυσμένο Δειγματικό Στοιχείο**
- Διάγνωση (ανίχνευση) ανωμαλιών: **Θετικό ≙ Ανώμαλο Δειγματικό Στοιχείο**
- Αναγνώριση δυαδικών προτύπων (π.χ. γάτες – σκυλιά): **Θετικό ≙ Γάτα**, **Αρνητικό ≙ Σκύλος**

Οι αλγόριθμοι ταξινόμησης προκύπτουν από στατιστική γνώση (π.χ. εκτίμηση/πρόβλεψη παραμέτρων από ***labeled*** δείγμα μάθησης σε ***supervised learning*** μέσω ***regression*** και σύγκριση με δυαδικό κατώφλι - ***threshold*** ή σιγμοειδή συνάρτηση - ***logistic function***)

Μήτρα Σύγχυσης - Confusion Matrix

- Λανθασμένες Προβλέψεις : False Positives - **FP**, False Negatives - **FN**
- Ορθές Προβλέψεις: True Positives - **TP**, True Negatives - **TN**
- Ρυθμοί (Rates) Ορθών/Λανθασμένων Προβλέψεων :

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}\,, \qquad \mathrm{TNR} = \frac{\mathrm{TN}}{\mathrm{TN}+\mathrm{FP}}$$

$$\mathrm{FNR} = \frac{\mathrm{FN}}{\mathrm{FN}+\mathrm{TP}} = 1-\mathrm{TPR}\,, \qquad \mathrm{FPR} = \frac{\mathrm{FP}}{\mathrm{FP}+\mathrm{TN}} = 1-\mathrm{TNR}$$

Confusion Matrix

Actual class \ Predicted class	P	N
P	TP	FN
N	FP	TN

Ακρίβεια (***Accuracy***): $\mathrm{ACC} = \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}}{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}+\mathrm{FP}+\mathrm{FN}}$ (λόγος σωστών συνολικά προβλέψεων)

Ευαισθησία (***Sensitivity***, ***Recall***): $\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}$ (σωστές προβλέψεις θετικών παραδειγμάτων)

Θετική Ακρίβεια (***Precision***): $\mathrm{PRE} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}}$ (σωστές προβλέψεις θετικών προβλέψεων)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μετρικές Αξιολόγησης Στατιστικής Ταξινόμησης: Confusion Matrix, ROC, AUC (2/2)

Παράδειγμα Αναγνώρισης Εικόνας: Γάτα ή Σκύλος

https://en.wikipedia.org/wiki/Confusion_matrix

Test Sample 12 εικόνων: 8 γάτες (class 1), 4 σκύλοι (class 2)

Ο ταξινομητής μετά από στάδιο μάθησης προβλέπει 7 γάτες και 5 σκύλους (9 σωστά και 3 λάθη) όπως φαίνεται στη ***Confusion Matrix***

Actual class \ Predicted class	Cat	Dog
Cat	6	2
Dog	1	3

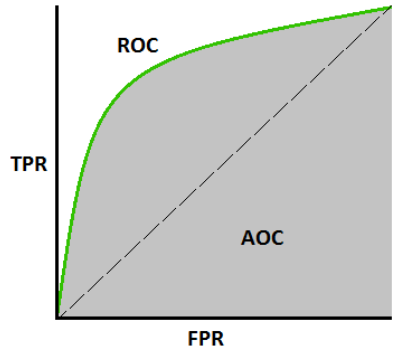
- Ακρίβεια (Accuracy): $\mathrm{ACC} = \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}}{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}+\mathrm{FP}+\mathrm{FN}} = \frac{6+3}{12} = 3/4$
- Ευαισθησία (Sensitivity): $\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}} = \frac{6}{6+2} = 3/4$

Receiver Operating Characteristics (ROC), Area Under the Curve (AUC)

https://towardsdatascience.com/understanding-auc-roc-curve-68b2303cc9c5

Ορισμοί από αναγνώριση στόχων σε δέκτες radar του Β' Παγκοσμίου Πολέμου
Λειτουργικές επιλογές διαχωρισμού (***threshold values***) σε σύστημα δυαδικής ταξινόμησης (***Positive*** – Καλή, ***Negative*** – Κακή Πρόβλεψη) ανάλογα με τις προτιμήσεις του διαχειριστή μέσω σημείων ***Receiver Operating Characteristics*** **(ROC)**

- Διάγραμμα **ROC**: Συνάρτηση $\mathrm{FPR} \to \mathrm{TPR}, \{0 \le \mathrm{FPR} \le 1,\ 0 \le \mathrm{TPR} \le 1\}$
- Καλές λειτουργικές επιλογές **ROC**: $\mathrm{TPR} \gg \mathrm{FPR}$
- Ιδανικό σημείο: $\mathrm{TPR} = 1, \mathrm{FPR} = 0$



Μέτρο διαχωριστικής ικανότητας ταξινομητή
AUC: Εμβαδόν (επιφάνεια) της **ROC** για $0 \le \mathrm{FPR} \le 1$

- Μη διαχωριστική ικανότητα: $\mathbf{AUC} = 0.5$
- Διαχωριστική δεινότητα: $\mathbf{AUC} \gg 0.5$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Εκτίμηση Παραμέτρων MLE, MAP (1/2)

http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/Joint_MLE_MAP.pdf

$$P(y|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x},y)}{P(\mathbf{x})} = \frac{P(\mathbf{x}|y)P(y)}{P(\mathbf{x})}$$ (Κανόνας **Bayes**)

$P(\mathbf{x})$: **Prior** (πρότερη) πιθανότητα παραδείγματος εισόδου $\mathbf{x}$ του δειγματικού χώρου $\{\mathbf{X}\}$

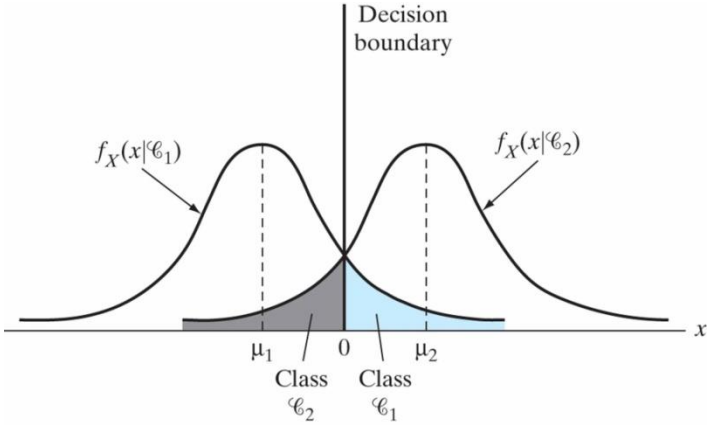
$P(y)$: **Class Prior** πιθανότητα εξόδου της τάξης y

$P(\mathbf{x}|y)$: **Likelihood** (πιθανοφάνεια) εισόδου $\mathbf{x}$ όταν η έξοδος υποδεικνύει την τάξη y

$P(y|\mathbf{x})$: **Posterior** (ύστερη) πιθανότητα ταξινόμησης στην τάξη y παραδείγματος εισόδου $\mathbf{x}$

Εκτίμηση Στατιστικών Παραμέτρων θ του Δειγματικού Χώρου $\{\mathbf{X}\}$

- Οι εκτιμήσεις $\hat{\theta}$ παραμέτρων θ (πιθανοτήτων, ροπών, κατανομών κλπ.) υποδεικνύουν συμμετοχή σε ***κλάσεις ταξινόμησης*** παραδειγμάτων του δειγματικού χώρου $\{\mathbf{X}\}$
- Οι $\hat{\theta}$ προκύπτουν από παρατηρήσεις στοιχείων $\mathbf{x}(i)$ ενός υποσύνολου D του $\{\mathbf{X}\}$ με εξόδους ή ***labels*** $d(i)$ γνωστές στον εκπαιδευτή. Το D ορίζει το ***δείγμα μάθησης***



Δυο Κοινοί Τρόποι Εκτίμησης $\hat{\theta} \approx \theta$

1. Maximum Likelihood Estimation (**MLE**)

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} P(D|\theta)$$

2. Maximum a Posteriori Probability (**MAP**) Estimation

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} P(\theta|D) = \arg\max_{\theta} \frac{P(D|\theta)P(\theta)}{P(D)} \propto \arg\max_{\theta} P(D|\theta)\,P(\theta)$$

$P(\theta)$: *Prior* Assumption (π.χ. εμπειρικές υποθέσεις για τον δειγματικό χώρο)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Εκτίμηση Παραμέτρων MLE, MAP (2/2)

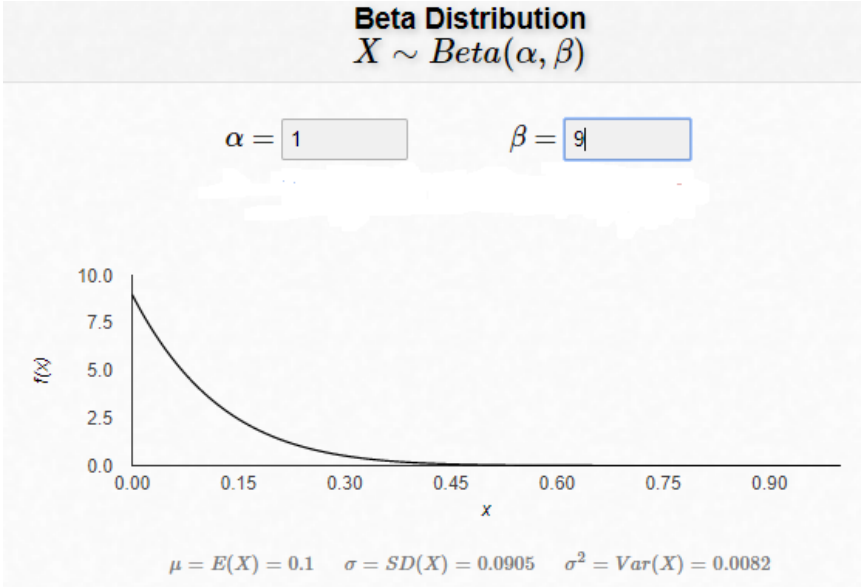
http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/Joint_MLE_MAP.pdf

$$P(y|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x},y)}{P(\mathbf{x})} = \frac{P(\mathbf{x}|y)P(y)}{P(\mathbf{x})}$$ (Κανόνας **Bayes**)

Παράδειγμα: Πείραμα Bernoulli για τυχαία μεταβλητή $X = \{heads, tails\} \triangleq \{1,0\}$
Δείγμα Μάθησης $\{x(1), x(2), \dots, x(50)\}$ με 50 δοκιμές για εκτίμηση $\hat{\theta}$ της $\theta = P(X = 1)$, της πιθανότητας $heads$. Αν οι δοκιμές έβγαλαν $a_1 = 24\ heads, a_0 = 26\ tails$, η εκτίμηση **MLE** είναι $\hat{\theta} = \frac{a_1}{(a_1+a_0)} = 0.48$.

Για εκτίμηση **MAP** απαιτείται γνώση των $P(\theta)$, π.χ. από εμπειρική παραδοχή για το δείγμα. Αν πιστεύουμε πως το νόμισμα είναι κάλπικο με $P(1) = 0.6$ μπορούμε να θεωρήσουμε $a_1 \to 24 + 9, a_0 \to 26 + 1$ οπότε $\hat{\theta} \to 0.55$

Προκύπτει με *Prior* $P(\theta) = Beta(\beta_0, \beta_1) = K\theta^{\beta_1 - 1}(1-\theta)^{\beta_0 - 1} = Beta(1,9)$



Αν ξέρουμε πως οι όλες οι επιλογές της θ έχουν ίσες πιθανότητες, τότε **MAP** ≡ **MLE**

https://homepage.divms.uiowa.edu/~mbognar/applets/beta.html

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Παράδειγμα Ταξινομητή Bayes

http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/NBayesLogReg.pdf

Πιθανοτήτες ~ Σχετική Συχνότητα Παραδειγμάτων $\{\mathbf{x}(i), d(i)\}$ στο Δείγμα Μάθησης

- Είσοδος $\mathbf{x}(i) = (Gender, HoursWorked)$ με 2 δυαδικές διαστάσεις (features)
- Έξοδος (label) $d(i) \cong y(i) = h(\mathbf{x}(i)) = Wealth$ δυαδική (poor, rich)

Gender	HoursWorked	Wealth	probability
female	< 40.5	poor	0.2531
female	< 40.5	rich	0.0246
female	≥ 40.5	poor	0.0422
female	≥ 40.5	rich	0.0116
male	< 40.5	poor	0.3313
male	< 40.5	rich	0.0972
male	≥ 40.5	poor	0.1341
male	≥ 40.5	rich	0.1059

Εκτιμήσεις Πιθανοτήτων

$P(\mathbf{x}, y) = P(\mathrm{G}, \mathrm{HW}, y)$

όπου

$\mathrm{G} \in \{M, F\}$

$\mathrm{HW} \in \{light, hard\}$

$y \in \{\mathrm{poor}, \mathrm{rich}\}$

Posterior $P(y|\mathbf{x})$: $P(\mathrm{rich}|F, light) = \frac{0.0246}{0.2531+0.0246} \sim \mathbf{0.09}$

Gender (G)	HrsWorked (HW)	*P*(rich | G,HW)	*P*(poor | G,HW)
F	<40.5 (*light*)	**0.09**	0.91
F	>40.5 (*hard*)	0.21	0.79
M	<40.5 (*light*)	0.23	0.77
M	>40.5 (*hard*)	0.38	0.62

$m = 2$ features $\{G, HW\}$ απαιτούν 4 εκτιμήσεις (m features απαιτούν 2^m εκτιμήσεις)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Ταξινομητής Naïve Bayes (1/2)

http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/NBayesLogReg.pdf

Κανόνας του Bayes για Τυχαίες Μεταβλητές X, Y: $P(Y|X) = \frac{P(X,Y)}{P(X)} = \frac{P(X|Y)P(Y)}{P(X)}$

Υπό Συνθήκη Ανεξαρτησία Τυχαίας Μεταβλητής $(X|Y,Z)$ από Y: $P(X|Y,Z) = P(X|Z)$

Προσεγγιστική Απλοποίηση – Naive Bayes Classifier

Οι τυχαίες μεταβλητές που κωδικοποιούν τα m χαρακτηριστικά (*features*) παραδείγματος $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots x_m]^{\mathrm{T}}$ υπό την συνθήκη εξόδου $y \approx d$ είναι υπό συνθήκη ανεξάρτητες οπότε για το *likelihood* ισχύει

$$P(\mathbf{x}|y) = P(x_1, x_2, \dots, x_m\,|y) \cong \prod_{k=1}^{m} P(x_k|y)$$

Ο ***Naive Bayes Classifier*** βασίζεται στην εκτίμηση της *posterior* $P(d|\mathbf{x}) \cong P(y|\mathbf{x})$ με βάση το training sample

$$P(y|\mathbf{x}) = \frac{P(y)P(\mathbf{x}|y)}{P(\mathbf{x})} \propto P(y)P(x_1|y)P(x_2|y)\dots P(x_m|y)$$

Απαιτούνται $\sim m$ εκτιμήσεις για ταξινόμηση ενός νέου παραδείγματος του δείγματος ***test***: $\mathbf{x}^{new} = [x_1^{new}\ x_2^{new}\ \dots x_m^{new}]^{\mathrm{T}}$ αντί για 2^m (αντιμετώπιση (;) του ***curse of dimensionality***)

Οι εκτιμήσεις των *prior* $P(y)$ προκύπτουν από τη συχνότητα εμφάνισης στα παραδείγματα του δείγματος μάθησης (***Multinomial Naive Bayes Classifier*** για **διακριτές** τιμές των x_i) ή από παραδοχή Gauss (***Gaussian Naive Bayes Classifier*** για **συνεχείς** x_i)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Ταξινομητής Naive Bayes (2/2)

http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/NBayesLogReg.pdf

Ο ***Naive Bayes Classifier*** βασίζεται στην προσέγγιση της *posterior* $P(d|\mathbf{x}) \cong P(y|\mathbf{x})$ σαν γινόμενο **ανεξαρτήτων** υπό συνθήκη *likelihoods* των χαρακτηριστικών (*features*)

$$P(y|\mathbf{x}) \propto P(y)P(x_1|y)P(x_2|y) \dots P(x_m|y)$$

Naive Bayes Algorithm:

Από το labeled δείγμα μάθησης $D = \{\mathbf{x}(i), d(i)\}, i = 1,2, \dots, N$ εκτιμώνται:

- Οι *prior* $P(d = c) \cong P(y = c) \triangleq \pi_c$ για όλες τις δυνατές κλάσεις c, π.χ. $c = \{0,1\}$ για δυαδική ταξινόμηση
- Οι *likelihood* $P(x_k = l|y = c) \triangleq \theta_{klc}$ για κάθε (διακριτό) χαρακτηριστικό $k = 1,2, \dots, m$ των στοιχείων μάθησης x_k που στο δείγμα μάθησης κατετάγη στη κλάση $y = c$

Νέο παράδειγμα του δείγματος ***test*** $\mathbf{x}^{new} = [x_1^{new}\ x_2^{new} \dots x_m^{new}]^{\mathrm{T}}$, $x_k^{new} = l$ θα καταταγεί στη κλάση y^{new} που προκύπτει από τη σχέση:

$$y^{new} \leftarrow \arg\max_y P(y) \prod_{k=1}^{m} P(x_k^{new}|y)$$

ή

$$y^{new} \leftarrow \arg\max_c \pi_c \prod_{k=1}^{m} \theta_{klc}$$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Παράδειγμα Ταξινομητή Naive Bayes

https://towardsdatascience.com/all-about-naive-bayes-8e13cef044cf

Δείγμα Μάθησης - Labeled Sample από 1000 Στοιχεία (Training Examples)

Fruit	Long	Sweet	Yellow	Total
Banana	**400** (80%)	**350** (70%)	**450** (90%)	**500** (50%)
Orange	**0** (0%)	**150** (50%)	**300** (100%)	**300** (30%)
Other	**100** (50%)	**150** (75%)	**50** (25%)	**200** (20%)
Total	**500** (50%)	**650** (65%)	**800** (80%)	**1000**

$$P(y|\mathbf{x}) \propto P(y)P(x_1|y)P(x_2|y) \dots P(x_m|y)$$

- $P(\text{Banana}|\text{Long}, \text{Sweet}, \text{Yellow}) \propto (0.5) \times (0.8) \times (0.7) \times (0.9) = 0.252$
- $P(\text{Orange}|\text{Long}, \text{Sweet}, \text{Yellow}) = 0$
- $P(\text{Other}|\text{Long}, \text{Sweet}, \text{Yellow}) \propto (0.2) \times (0.5) \times (0.75) \times (0.25) = 0.01875$

Ταξινόμηση Νέου Δειγματικού Στοιχείου (Test Example)

Φρούτα με χαρακτηριστικά $\mathbf{x} = (\text{Long}, \text{Sweet}, \text{Yellow})$ ανήκουν στην κλάση $y = (\text{Banana})$ με τη μεγαλύτερη posterior πιθανότητα $P(y|\mathbf{x}) \propto 0.252$

Σημείωση: Η τιμή της posterior μπορεί να εκτιμηθεί με κανονικοποίηση

$$P(y|\mathbf{x}) = \frac{0.252}{0.252 + 0.01875} = 0.931$$