ε.δε.μ²
ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ & ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μη-παραμετρικοί Ταξινομητές

K Πλησιέστερα Γειτονικά Στοιχεία (*K*-Nearest Neighbors - KNN)

Στατιστική Αξιολόγηση Δυαδικής Ταξινόμησης

Μετρικές Αξιολόγησης Μεθόδων, Μήτρα Σύγχυσης, ROC, AUC

Παραμετρική Πιθανοτική Ταξινόμηση

Εκτίμηση MLE & MAP, Ταξινομητής Bayes, Αλγόριθμος Naive Bayes

καθ. Βασίλης Μάγκλαρης

maglaris@netmode.ntua.gr

www.netmode.ntua.gr

Αίθουσα 002, Νέα Κτίρια ΣΗΜΜΥ

Τρίτη 16/5/2023

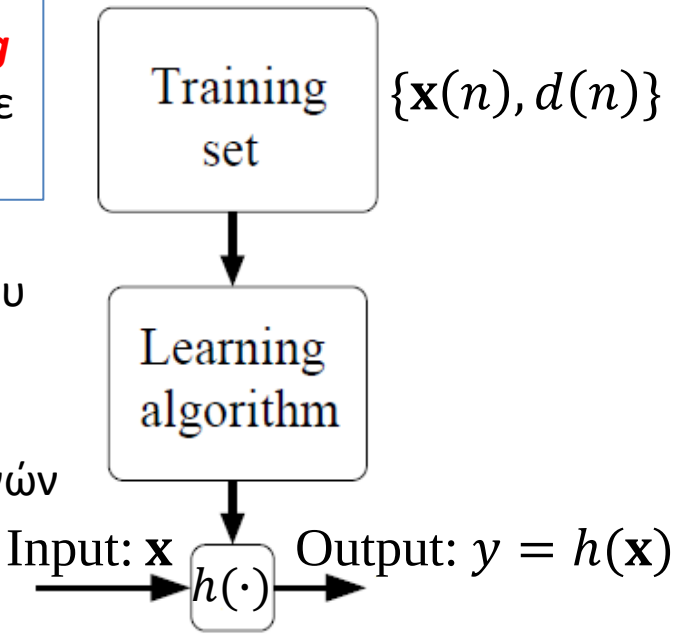
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

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***, ***instance***) $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots x_m]^{\mathrm{T}}$ σε τιμές εξόδου y που εκτιμούν επιθυμητές τιμές d (***labels***, ***targets***) 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 $\{\mathbf{x}(n), d(n)\}$, $n = 1,2, \dots, N$ γνωστών σε εξωτερικό εκπαιδευτή (***supervisor***)



- Η μορφή και οι παράμετροι της $h(\cdot)$ προσδιορίζονται με αλγόριθμο μάθησης που συγκλίνει σε προσέγγιση του στόχου της υπόθεσης για τα N στοιχεία του δείγματος μάθησης

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

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

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ταξινόμηση σύμφωνα με Πλειοψηφία *K* Πλησιέστερων Γειτονικών Στοιχείων (1/2)

Μη Παραμετρική Μέθοδος: Δεν θεωρεί πιθανοτικό μοντέλο δείγματος αλλά βασίζεται σε εκτιμήσεις *απόστασης* από στοιχεία μάθησης με γνωστά *labels*. Πλεονέκτημα όταν δεν είναι προσιτή η στατιστική δομή του δείγματος μάθησης, π.χ. ιστόγραμμα, αλλά συνήθως απαιτεί μεγαλύτερο αριθμό στοιχείων μάθησης από **Παραμετρικές Μεθόδους** εκτίμησης παραμέτρων μοντέλου πιθανοτήτων – π.χ. *Gauss*

Αλγόριθμος *K*-Nearest Neighbors (KNN)

Απαιτείται *labeled* δείγμα μάθησης $\{\mathbf{x}(n), d(n)\}, n = 1,2, \dots, N$ από στοιχεία (**πρότυπα**) $\mathbf{x}(n) = [x_1(n)\ x_2(n) \dots x_m(n)]^{\mathrm{T}}$, *labels* $d(n) \to \mathcal{C}$ της κλάσης του $\mathbf{x}(n)$, π.χ. $\mathcal{C} \in \{0,1\}$ για δυαδική ταξινόμηση προτύπων, και μέτρο απόστασης π.χ. *Euclidean distance* $\|\mathbf{x}(i), \mathbf{x}(j)\| = \sqrt{\sum_{k=1}^{m}\big(x_k(i) - x_k(j)\big)^2}$) ή απόσταση *Hamming* (ανόμοια δυαδικά ψηφία μεταξύ $\mathbf{x}(i)$, $\mathbf{x}(j)$)

- **Φάση Μάθησης** (*Lazy Learning Method*): Αποθήκευση στη μνήμη του δείγματος μάθησης των N *labeled* διανυσμάτων - προτύπων $\{\mathbf{x}(n), d(n)\}$
- **Φάση Test**: Νέο στοιχείο $\hat{\mathbf{x}}$ ταξινομείται σύμφωνα με τη κλάση (*label*) της *πλειοψηφίας* των K πλησιέστερων διανυσμάτων από τα N στοιχεία μάθησης - πρότυπα $\mathbf{x}(n)$

K: Κρίσιμη **υπερπαράμετρος**, φυσικός αριθμός (περιττός για δυαδική ταξινόμηση) που συνήθως απαιτεί δοκιμές ακρίβειας (π.χ. μέσω *cross validation*) για τον προσδιορισμό του

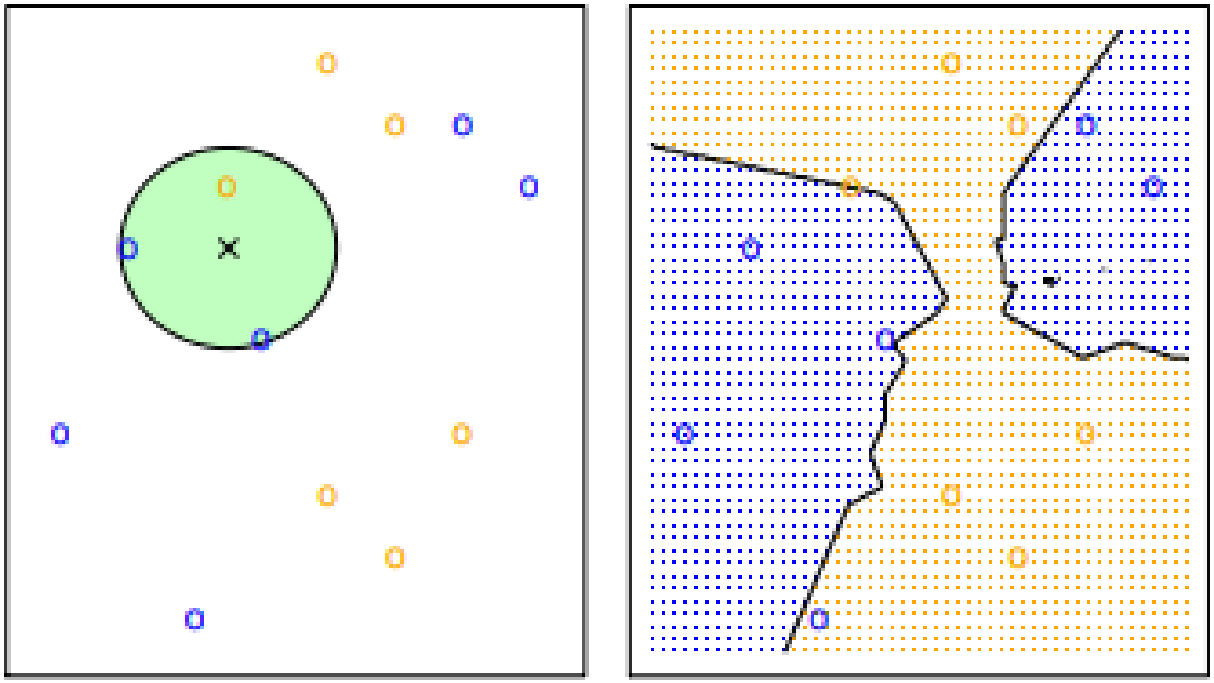
- $K = 1$: Νέο δειγματικό στοιχείο $\hat{\mathbf{x}}$ ταξινομείται σύμφωνα με τη κλάση του πλησιέστερου γείτονα του στο δείγμα μάθησης
- $K \gg 1$: Αντοχή σε παραμορφώσεις/θορύβους - εξομάλυνση περιοχών κατάταξης *αλλά* με αποθηκευτικό κόστος και πιθανή βλαβερή επιρροή *outliers* (στοιχείων με ασυνήθη χαρακτηριστικά) → κανονικοποίηση *dataset*, φιλτράρισμα συνιστωσών, διαγραφή *outliers*

https://www.cs.upc.edu/~mmartin/DM3%20-%20NB%20i%20KNN.pdf

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Ταξινόμηση σύμφωνα με Πλειοψηφία *K* Πλησιέστερων Γειτονικών Στοιχείων (2/2)

https://hastie.su.domains/ISLR2/ISLRv2_website.pdf



Δυαδική Ταξινόμηση

$\mathcal{C} \in \{\text{Blue}, \text{Orange}\}$

- Blue Πρότυπα: **o**
- Orange Πρότυπα: **o**
- Σημείο Test: **x**

FIGURE 2.14. *The KNN approach, using $K = 3$, is illustrated in a simple situation with six blue observations and six orange observations.* Left: *a test observation at which a predicted class label is desired is shown as a black cross. The three closest points to the test observation are identified, and it is predicted that the test observation belongs to the most commonly-occurring class, in this case blue.* Right: *The KNN decision boundary for this example is shown in black. The blue grid indicates the region in which a test observation will be assigned to the blue class, and the orange grid indicates the region in which it will be assigned to the orange class.*

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μετρικές Αξιολόγησης Στατιστικής Ταξινόμησης: Confusion Matrix, ROC, AUC (1/3)

Στατιστική Δυαδική Ταξινόμηση - Παραμετρικοί Ταξινομητές

Αντιστοίχηση παραδειγμάτων (στοιχείων) δείγματος σε 2 κλάσεις $\mathcal{C} \in \{\boldsymbol{P}, \boldsymbol{N}\}$:
Θετική (***Positive*** $\boldsymbol{P}$) **- Αρνητική** (***Negative*** $\boldsymbol{N}$)

- 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 **παραμετρικοί** αλγόριθμοι ταξινόμησης προκύπτουν από στατιστική εκτίμηση κατανομής του δείγματος μάθησης (π.χ. θεώρηση κατανομής ***Gauss***, πρόβλεψη παραμέτρων από ***labeled*** δείγμα μάθησης σε ***supervised learning*** μέσω ***regression*** και σύγκριση με δυαδικό κατώφλι - ***threshold*** ή σιγμοειδή συνάρτηση - ***logistic function***)

https://www.section.io/engineering-education/parametric-vs-nonparametric/
Παραμετρικές Μέθοδοι: Linear & Logistic Regression, Perceptron Convergence, Bayes Classifiers…
Μη-παραμετρικές Μέθοδοι: KNN, Decision Trees, SVM…

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μετρικές Αξιολόγησης Στατιστικής Ταξινόμησης: Confusion Matrix, ROC, AUC (2/3)

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 :

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

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

		Predicted class: P	Predicted class: N
Actual Class	P	True Positives (TP)	False Negatives (FN)
	N	False Positives (FP)	True Negatives (TN)

Confusion Matrix

Μετρικές Αξιολόγησης Ταξινομητή

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

Sensitivity, **Recall** (Ευαισθησία): $\mathbf{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}}$ (σωστές προβλέψεις σε θετικά παραδείγματα)

Precision (Θετική Ακρίβεια): $\mathbf{PRE} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FP}}$ (σωστές προβλέψεις από θετικές προβλέψεις)

F1-Score: $\mathbf{F1} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\frac{1}{2}(\mathrm{FP}+\mathrm{FN})} = \frac{2}{\mathbf{TPR}^{-1}+\mathbf{ACC}^{-1}}$ (αρμονικός μέσος όρος ευαισθησίας & ακρίβειας)

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Μετρικές Αξιολόγησης Στατιστικής Ταξινόμησης: Confusion Matrix, ROC, AUC (3/3)

Παράδειγμα Αναγνώρισης Εικόνας: Γάτα ή Σκύλος

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

Test Sample 12 εικόνων: 8 γάτες (class $\boldsymbol{P}$), 4 σκύλοι (class $\boldsymbol{N}$)

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

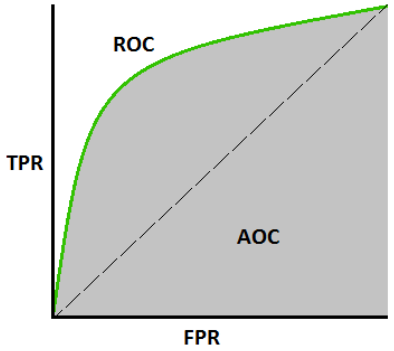
Receiver Operating Characteristics (ROC), Area Under the Curve (AUC)

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*** – Θετική, ***Negative*** – Αρνητική 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 (1/3)

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

Κανόνας **Bayes**

$$P(\mathrm{y}|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}, y)}{P(\mathbf{x})} = \frac{P(\mathbf{x}|y)P(y)}{P(\mathbf{x})}$$

Παραμετρικό Μοντέλο Εκτίμησης Bayes

- Θεωρώ πως τα στοιχεία $\mathbf{x}(i) \in \{\mathbf{X}\}$ είναι κατανεμημένα σύμφωνα με γνωστή κατανομή (π.χ. ***Gauss***) σε ***κλάσεις ταξινόμησης*** $\mathcal{C}$ με βάση ***διακριτές πιθανοτικές παραμέτρους*** θ του δειγματικού χώρου, π.χ. μέση τιμή των $\mathbf{x}(i)$ για κάθε κλάση
- Οι εκτιμήσεις $\hat{\theta}$ των παραμέτρων θ υποδεικνύουν συμμετοχή σε ***κλάσεις ταξινόμησης*** παραδειγμάτων $\mathbf{x}(i)$
- Οι $\hat{\theta}$ προκύπτουν από παρατηρήσεις στοιχείων $\mathbf{x}(i)$ ενός υποσύνολου (***δείγμα μάθησης***) $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ του δειγματικού χώρου, με εξόδους ή ***labels*** $d(i) = \theta$ γνωστές στον εκπαιδευτή (***επιβλεπόμενη μάθηση***) και με βάση τον κανόνα του ***Bayes***:

$$P(\theta|\boldsymbol{\mathcal{D}}) = \frac{P(\boldsymbol{\mathcal{D}}|\theta)P(\theta)}{P(\boldsymbol{\mathcal{D}})}$$

όπου

- $P(\boldsymbol{\mathcal{D}})$: **Evidence**, πιθανότητα παραδειγμάτων $\mathbf{x}(i)$ υποσύνολου $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ δειγματικού χώρου $\{\mathbf{X}\}$
- $P(\theta)$: **Prior**, πιθανότητα παραμέτρου θ δειγματικού χώρου $\{\mathbf{X}\}$
- $P(\boldsymbol{\mathcal{D}} \mid \theta)$: **Likelihood**, πιθανοφάνεια παραδειγμάτων στο $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ όταν η παράμετρος είναι θ
- $P(\theta \mid \boldsymbol{\mathcal{D}})$: **Posterior**, ύστερη πιθανότητα παραμέτρου θ για παραδείγματα $\boldsymbol{\mathcal{D}}$

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Εκτίμηση Παραμέτρων MLE, MAP (2/3)

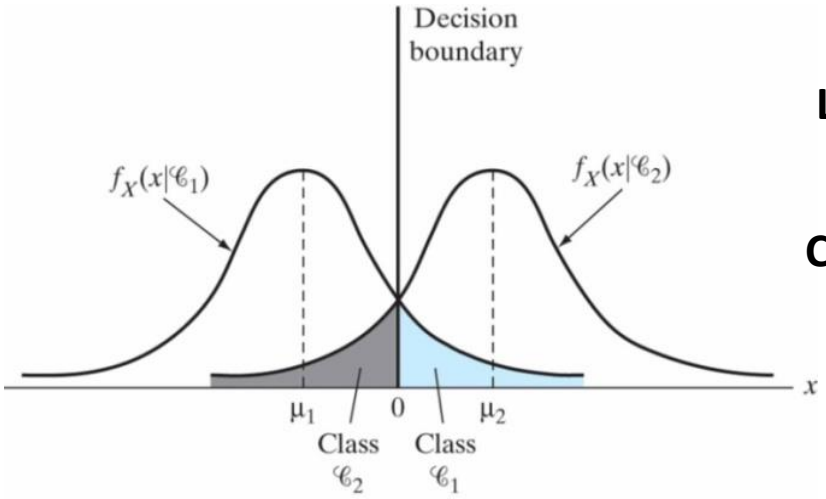
http://www.cs.cmu.edu/~tom/mlbook/Joint_MLE_MAP.pdf

$$P(\theta|\boldsymbol{\mathcal{D}}) = \frac{P(\boldsymbol{\mathcal{D}}|\theta)P(\theta)}{P(\boldsymbol{\mathcal{D}})}$$

$P(\theta)$: *Prior Assumption* π.χ. εκτιμήσεις από εμπειρικές υποθέσεις για τον δειγματικό χώρο ή εκτιμήσεις από *labeled training set* $\boldsymbol{\mathcal{D}}$

Παράδειγμα Παραμετρικού Δυαδικού Ταξινομητή

Υπόθεση: Κατανομή ***Gauss*** με μέση τιμή $\theta = \mu_1$ αν $x_n \rightarrow \mathcal{C}_1$ ή $\theta = \mu_2$ αν $x_n \rightarrow \mathcal{C}_2$



Likelihood Densities: $f_X(x|\mathcal{C}_1), f_X(x|\mathcal{C}_2)$

Classification Errors: Shaded areas

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

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

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

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

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

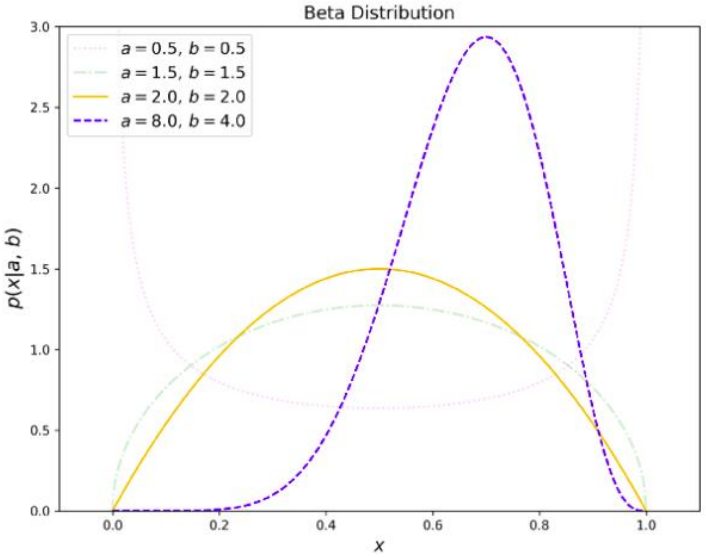
ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

Πιθανοτικά Μοντέλα Ταξινόμησης, Εκτίμηση Παραμέτρων MLE, MAP (3/3)

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

Παράδειγμα: Πείραμα Bernoulli για τυχαία μεταβλητή $X = \{heads, tails\} \triangleq \{1,0\}$
Δείγμα Μάθησης $\boldsymbol{\mathcal{D}} = \{x(1), x(2), \dots, x(50)\}$ 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 $\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} P(\boldsymbol{\mathcal{D}}|\theta) = \frac{a_1}{(a_1+a_0)} = 0.48$, όπου $P(\boldsymbol{\mathcal{D}}|\theta) = \theta^{a_1}(1-\theta)^{a_0}$

Για εκτίμηση **MAP** απαιτείται γνώση των *Prior* $P(\theta)$, π.χ. από εμπειρική παραδοχή για το δείγμα. Αν πιστεύουμε πως το νόμισμα είναι κάλπικο με $P(1) = 0.6$ μπορούμε να θεωρήσουμε $a_1 \to a_1 + \beta_1 = 24 + 9 = 33,\ a_0 \to a_0 + \beta_0 = 26 + 1 = 27$ και $\hat{\theta} = \frac{33}{33+27} = 0.55$



https://towardsdatascience.com/understanding-conjugate-priors-21b2824cddae

- Η *Likelihood* $P(\boldsymbol{\mathcal{D}}|\theta) = \theta^{a_1}(1-\theta)^{a_0}$ (*Bernoulli*)
- Εκτιμούμε πως η *Prior* $P(\theta) \approx K\theta^{\beta_1-1}(1-\theta)^{\beta_0-1} = Beta(\beta_1, \beta_0) = Beta(9,1)$
- Θεωρούμε πως η *Posterior* $P(\theta|\boldsymbol{\mathcal{D}})$ έχει την ίδια μορφή με την *Prior* $P(\theta)$ (***Conjugate Distributions***):
  $$P(\theta) \sim Beta(\beta_1, \beta_0)$$
  $$P(\theta|\boldsymbol{\mathcal{D}}) \sim Beta(\alpha_1 + \beta_1, \alpha_0 + \beta_0)$$
- Η εκτίμηση $\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} P(\theta|\boldsymbol{\mathcal{D}})$ προκύπτει από τη μέγιστη τιμή της $Beta(33,27)$ για $\theta \cong 0.55$

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

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 $\mathcal{D}$

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

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

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

όπου

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

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

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

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

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

Για δείγμα 2 χαρακτηριστικών $\mathbf{x} = [x_1\ x_2]^{\mathrm{T}}$ θεωρώ ότι τα x_i είναι ανεξάρτητα υπό τη συνθήκη της εξόδου y: $P(x_1|x_2, y) \cong P(x_1|y)$ οπότε:

$$P(\mathbf{x}|y) = \mathrm{P}(x_1, x_1|y) = P(x_1|x_2, y) \times P(x_2|y) \cong P(x_1|y) \times P(x_2|y)$$

Γενικεύοντας την ανεξαρτησία υπό συνθήκη της εξόδου y για m χαρακτηριστικά (*features*) παραδείγματος $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ \dots x_m]^{\mathrm{T}}$ ισχύει για το *likelihood*

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

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 $\boldsymbol{\mathcal{D}} = \{(\mathbf{x}(1), d(1)), \dots, (\mathbf{x}(N), d(N))\}$ εκτιμώνται:

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

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

$$y^{new} \leftarrow \arg \max_d P(d) \prod_{k=1}^{m} \theta_{kld}$$

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

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