Úvod do statistického učení

Matematické metody pro ITS (11MAMY)

Jan Přikryl

s využitím díla G. James et al., *An Introduction to Statistical Learning*

7. přednáška 11MAMY

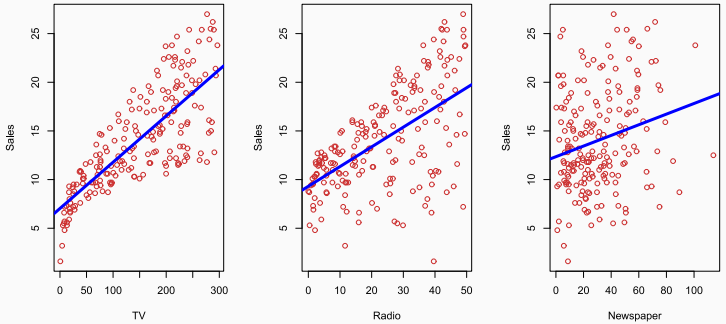
úterý 14. března 2023

verze: 2023-03-13 18:14

Ústav aplikované matematiky
ČVUT v Praze, Fakulta dopravní

Úvod do metod statistického učení

Co je statistické učení?



Vidíme grafy `Prodeje (Sales)` versus `TV`, `Rozhlas (Radio)` a `Noviny (Newspaper)` s modrou přímkou lineární regrese pro každý případ jednotlivě. Můžeme předpovídat `Prodeje` pomocí těchto tří diagramů? Možná se nám to povede lépe, použijeme-li nějaký model:

$$\texttt{Prodeje} \approx f(\texttt{TV}, \texttt{Rozhlas}, \texttt{Noviny})$$

Označení

V modelu jsou `Prodeje` *odpověď* nebo *cílová hodnota*. Odpověď obvykle značíme y.
`TV` je *charakteristika*, *vlastnost*, *vstup* nebo *prediktor*, označíme ho x_1.
Podobně označíme `Rozhlas` jako x_2 a tak dále.
Můžeme potom odkazovat na *vstupní vektor* souhrnně jako na

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}.$$

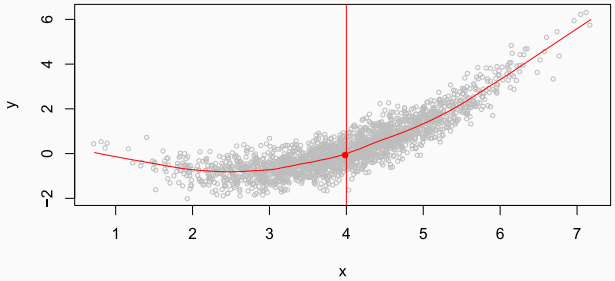
Náš model nyní zapíšeme jako

$$y = f(\mathbf{x}) + \epsilon,$$

kde ϵ zachycuje chyby měření a jiné nepřesnosti.

K čemu je $f(\mathbf{x})$ dobré?

- S dobrým f můžeme dělat předpovědi y v nových bodech $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$.
- Můžeme přijít na to, které složky $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_p)^\mathsf{T}$ jsou pro pochopení y důležité a které jsou irelevantní. Tak např. `Stáří` a `Rokyvzdělávání` mají velký vliv na `Příjem`, ale `Rodinný stav` typicky ne.
- V závislosti na složitosti funkce f můžeme být schopni pochopit, jak každá složka x_j vektoru $\mathbf{x}$ ovlivňuje y.



Existuje zde ideální $f(x)$?

Konkrétně: Co je dobrou hodnotou $f(x)$ pro libovolně zvolenou hodnotu x, řekněme $x = 4$?

Pro $x = 4$ můžeme mít naměřeno mnoho různých hodnot y. Dobrá hodnota funkce f je

$$f(4) = E[Y|X = 4].$$

$E[Y|X = 4]$ značí *očekávanou hodnotu* (průměr) hodnot náhodné veličiny Y pro dané $X = 4$.

Tato ideální funkce $f(x) = E[Y|X = x]$ se nazývá *regresní funkce*.

Regresní funkce $f(x)$

- Je také definována pro vektor $\mathbf{x}$, např. $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, x_3) = E[Y|X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3]$
- Je to *ideální* nebo *optimální* prediktor Y vzhledem ke střední kvadratické chybě: $f(x) = E[Y|X = x]$ je funkce, která minimalizuje $E[(Y - g(x))^2|X = x]$ přes všechny funkce g ve všech bodech $X = x$.
- $\epsilon = Y - f(x)$ je *neredukovatelná* (neodstranitelná) chyba – tj. i kdybychom znali $f(x)$ zcela přesně, stejně bychom dělali chyby v předpovídání, neboť v každém bodě $X = x$ typicky existuje rozložení pravděpodobnosti výskytu možných hodnot Y.
- Pro každý odhad $\hat{f}(x)$ funkce $f(x)$ máme

$$E[(Y - \hat{f}(x))^2|X = x] = \underbrace{\left(f(x) - \hat{f}(x)\right)^2}_{\text{redukovatelné}} + \underbrace{\text{var}(\epsilon)}_{\text{neredukovatelné}}$$

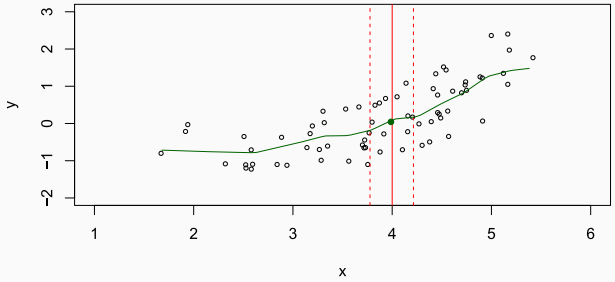
Jak odhadnout f – Metoda nejbližších sousedů

Typicky máme málo bodů pro $X = 4$ změřeno přesně (pokud vůbec nějaké) ...

- Takže $E[Y|X = x]$ nemůžeme spočítat!
- Zmírněme definici a položme

$$\hat{f}(x) = \text{average}(Y|X \in \mathcal{R}(x))$$

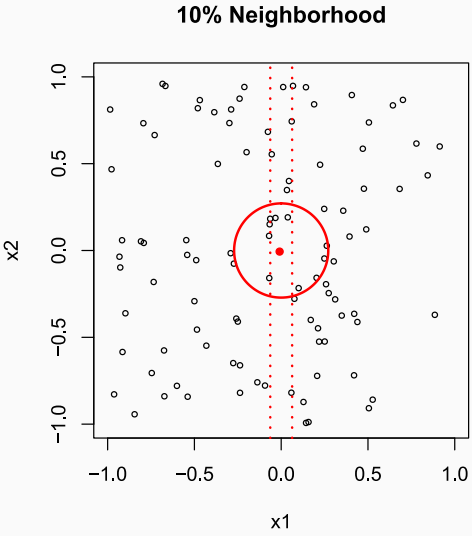
kde $\mathcal{R}(x)$ je nějaké *okolí* bodu x a average je průměr.

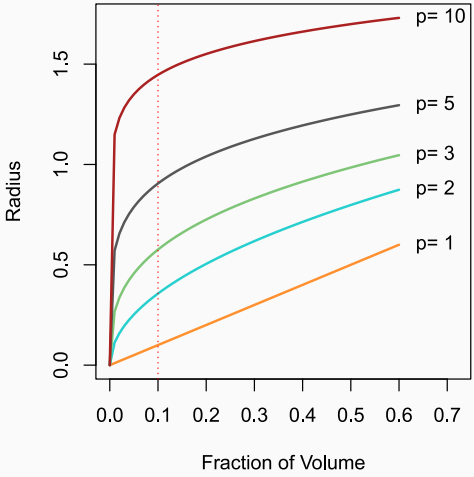


Jak odhadnout f – pokračování

- Metoda nejbližších sousedů může být docela dobrá pro malá p a spíše velká N.
- Metoda nejbližších sousedů může být *velmi špatná*, je-li p velké.
- Důvod: *prokletí dimensionality*. Ve více dimenzích mají nejbližší sousedé tendenci být hodně daleko.
  - Abychom snížili rozptyl, potřebujeme ke zprůměrování získat rozumný podíl N hodnot y_i, např. 10 %.
  - 10 % okolí ve vysokých dimenzích už nemusí být lokální, takže ztrácíme ducha odhadu $E[Y|X = x]$ lokálním průměrováním.

Prokletí dimensionality



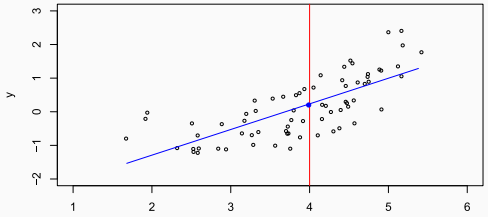


Lineární model je důležitý příklad parametrického modelu:

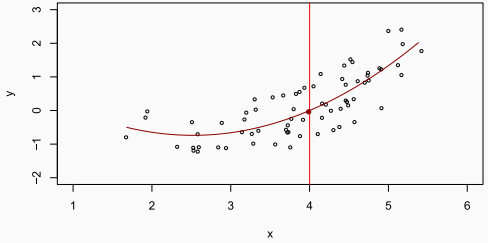
$$f_L(\mathbf{x}) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_p x_p.$$

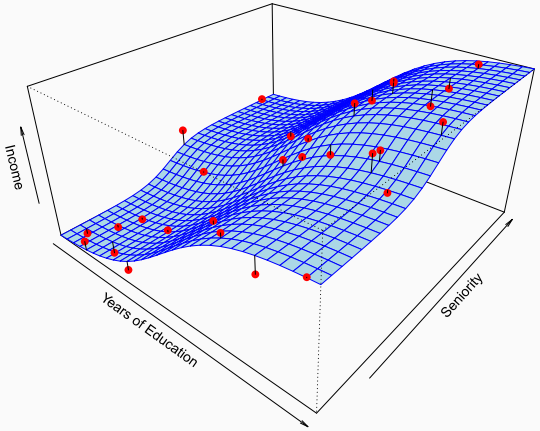
- Lineární model se specifikuje prostřednictvím $p + 1$ parametrů $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$.
- Parametry odhadneme prokládáním modelu trénovacími daty.
- Ačkoli lineární model téměř *nikdy není správný*, často slouží jako dobrá a interpretovatelná aproximace neznámé skutečné funkce $f(\mathbf{x})$.

Lineární model $\hat{f}_{\mathrm{L}}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x$ zde dává rozumnou aproximaci:



Kvadratický model $\hat{f}_{\mathrm{Q}}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x + \hat{\beta}_2 x^2$ prochází daty o něco lépe:

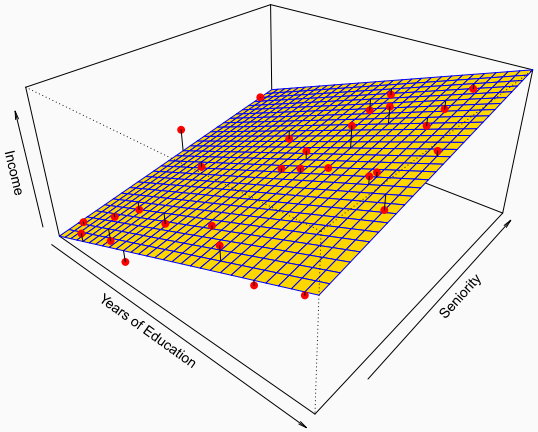




Simulovaný příklad. Červené body jsou simulované hodnoty příjmu z modelu

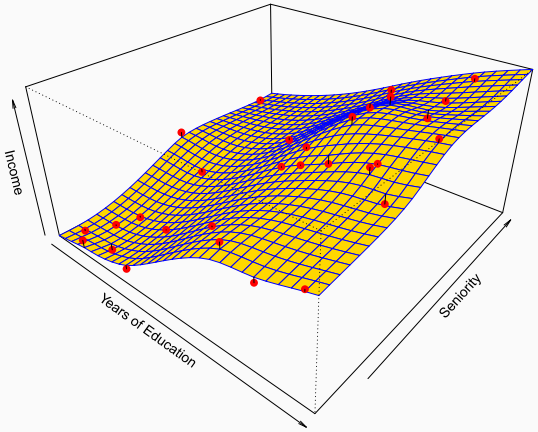
$$\texttt{income} = f(\texttt{education}, \texttt{seniority}) + \epsilon,$$

f je ta modrá plocha.

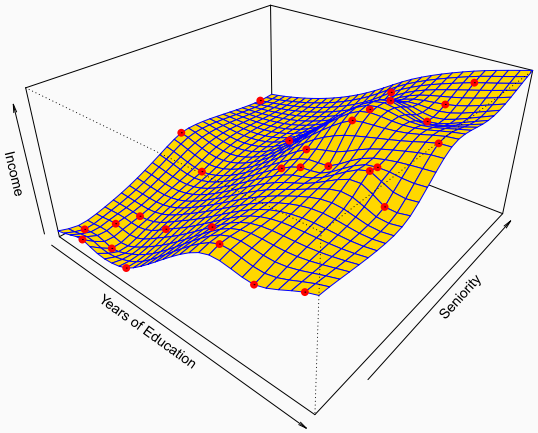


Lineární regresní model proložený nasimulovanými daty:

$$\hat{f}_{\mathrm{L}}(\texttt{education}, \texttt{seniority}) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \times \texttt{education} + \hat{\beta}_2 \times \texttt{seniority}$$



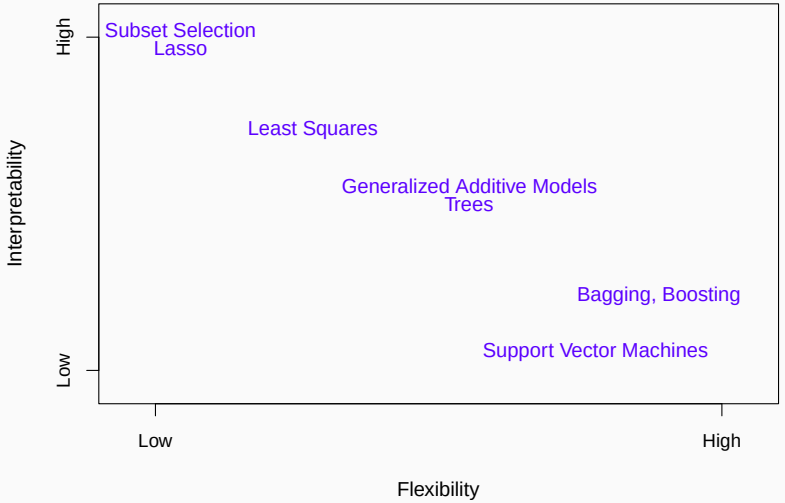
Flexibilnější regresní model $\hat{f}_S(\texttt{education}, \texttt{seniority})$ proložený nasimulovanými daty. Používáme zde postup nazývaný *splajn tenké desky* (thin-plate spline), abychom proložili pružnou plochu. Ovládáme hrbolatost této aproximace (ISLR, kapitola 7).



Ještě flexibilnější regresní model $\hat{f}_S(\texttt{education}, \texttt{seniority})$ pomocí splajnu proložený nasimulovanými daty. Proložený model zde v trénovacích datech nedělá žádné chyby! Známo také jako *přeurčení* nebo *přetrénování* (overfitting).

Některé kompromisy

- Přesnost předpovědi versus interpretovatelnost.
  — Lineární modely se snadno interpretují, splajny tenké desky nikoli.
- Dobrá aproximace versus přeurčení nebo podurčení.
  — Jak poznáme, že aproximace je zrovna ta pravá?
- Úspornost versus černá skřínka.
  — Často dáváme přednost jednoduššímu modelu s méně proměnnými před prediktorem typu černé skřínky, který je zahrnuje všechny.



Překlad názvů metod (zleva doprava, odshora dolů): výběr podmnožiny, Lasso, nejmenší čtverce. zobecněné aditivní modely, stromy, bagging, boosting, metoda podpůrných vektorů.

Posouzení přesnosti modelu

Předpokládejme, že proložíme nějakými trénovacími daty $\texttt{Tr} = \{x_i, y_i\}_1^N$ model $\hat{f}(x)$ a chceme vědět, jak dobře si vede.

- Mohli bychom vypočítat střední kvadratickou chybu předpovědi přes $\texttt{Tr}$:

  $$\text{MSE}_{\texttt{Tr}} = \text{average}_{i \in \texttt{Tr}} \left(y_i - \hat{f}(x_i) \right)^2$$

  Tento přístup ale může více stranit přeurčeným modelům!

  Q: Proč tomu tak je?

- Místo toho bychom měli, pokud je to možné, vypočítat chybu předpovědi pomocí nových *testovacích* dat $\texttt{Te} = \{x_i, y_i\}_1^M$:

  $$\text{MSE}_{\texttt{Te}} = \text{average}_{i \in \texttt{Te}} \left(y_i - \hat{f}(x_i) \right)^2$$

Posouzení přesnosti modelu

Předpokládejme, že proložíme nějakými trénovacími daty $\texttt{Tr} = \{x_i, y_i\}_1^N$ model $\hat{f}(x)$ a chceme vědět, jak dobře si vede.

- Mohli bychom vypočítat střední kvadratickou chybu předpovědi přes $\texttt{Tr}$:

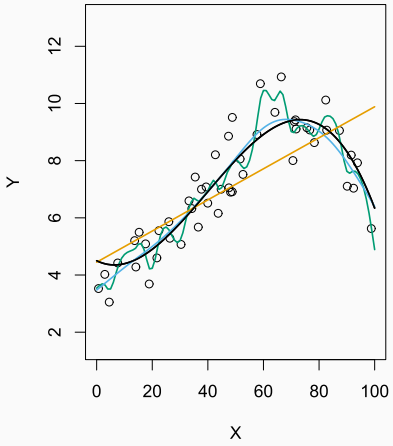
  $$\text{MSE}_{\texttt{Tr}} = \text{average}_{i \in \texttt{Tr}} \left(y_i - \hat{f}(x_i) \right)^2$$

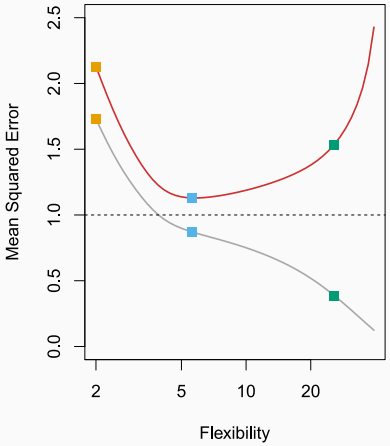
  Tento přístup ale může více stranit přeurčeným modelům!

  Q: Proč tomu tak je?

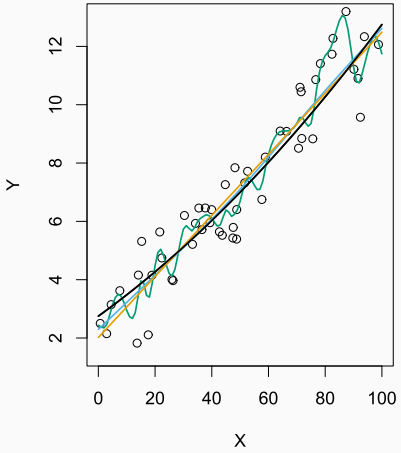
- Místo toho bychom měli, pokud je to možné, vypočítat chybu předpovědi pomocí nových *testovacích* dat $\texttt{Te} = \{x_i, y_i\}_1^M$:

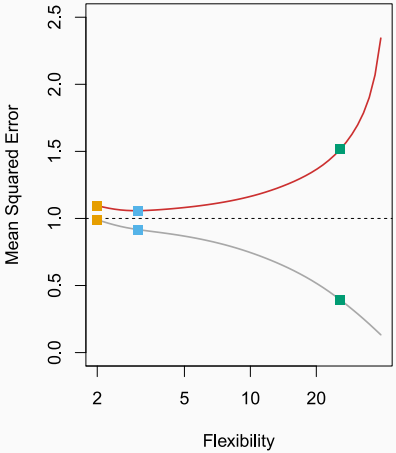
  $$\text{MSE}_{\texttt{Te}} = \text{average}_{i \in \texttt{Te}} \left(y_i - \hat{f}(x_i) \right)^2$$



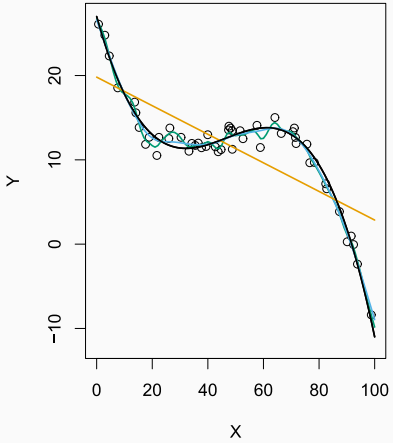


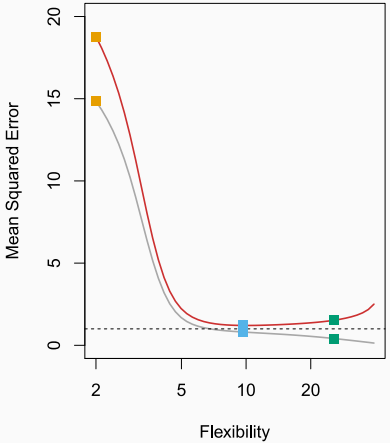
Černá křivka je skutečnost. Červená křivka vpravo je $\mathrm{MSE}_{\mathtt{Te}}$, šedá křivka je $\mathrm{MSE}_{\mathtt{Tr}}$. Oranžová, modrá a zelená křivka (a čtverečky těchto barev) odpovídají aproximacím různé flexibility.





Zde je skutečnost hladší, takže hladší aproximace a lineární model si vedou opravdu dobře.





Zde je skutečnost zvlněná a šum je malý, takže si nejlépe vedou flexibilnější aproximace.

Kompromis mezi zkreslením a rozptylem

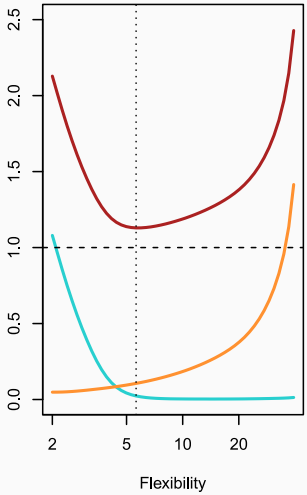
Předpokládejme, že jsme nějakými trénovacím daty `Tr` proložili model $\hat{f}(x)$ a nechť (x_0, y_0) je testovací pozorování vyvozené z této populace. Jestliže skutečný model je $y = f(x) + \epsilon$ (kde $f(X) = E[Y|X = x]$), pak

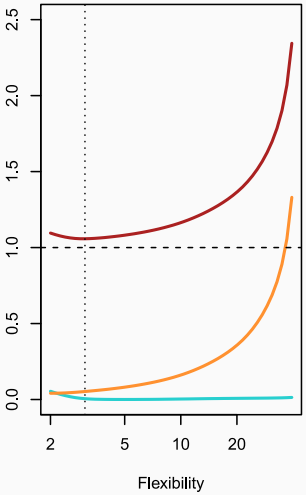
$$E\left[y_0 - \hat{f}(x_0)\right]^2 = \text{var}(\hat{f}(x_0)) + \left[\text{bias}(\hat{f}(x_0))\right]^2 + \text{var}(\epsilon).$$

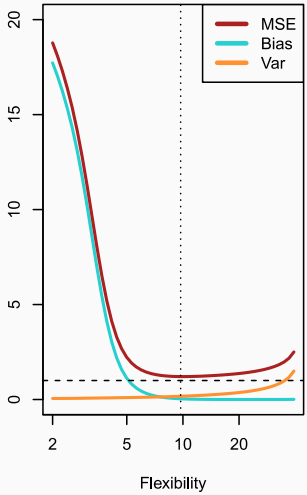
Očekávaná hodnota průměruje přes variabilitu v y_0 a rovněž variabilitu v `Tr`, která ovlivňuje $\hat{f}$. Poznamenejme, že $\text{bias}(\hat{f}(x_0)) = E[\hat{f}(x_0)] - f(x_0)$.

Typické je, že jak roste *flexibilita* $\hat{f}$, roste její rozptyl a zkreslení (bias) se snižuje. Takže volba flexibility založená na střední *testovací* chybě odpovídá *kompromisu mezi zkreslením a rozptylem*.

Kompromis mezi zkreslením a rozptylem na našich třech příkladech





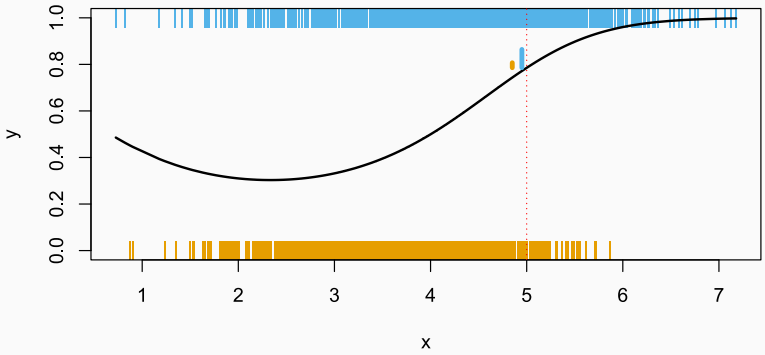


Klasifikační úlohy

Proměnná odpovědi Y je zde *kvalitativní* — např. email je jeden z prvků $\mathcal{C} = (\texttt{spam}, \texttt{ham})$ ($\texttt{ham}$ = dobrý email), třída číslic je jedna z $\mathcal{C} = \{0, 1, \ldots, 9\}$.

Naše cíle jsou:

- Vytvořit klasifikátor $C(X)$, který přiřadí značku třídy z $\mathcal{C}$ budoucímu neoznačenému pozorování X.
- Ohodnotit nejistotu v každé klasifikaci.
- Porozumět roli různých prediktorů mezi složkami $X = (X_1, X_2, \ldots, X_p)$.

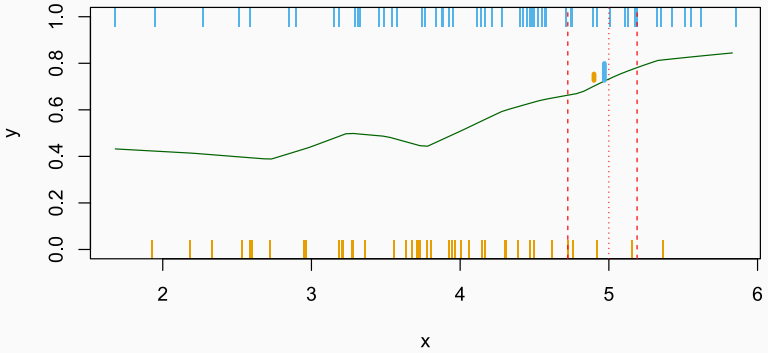


Existuje ideální $C(X)$? Předpokládejme, že K prvků množiny $\mathcal{C}$ je očíslováno $1, 2, \ldots, K$. Položme

$$p_k(x) = \mathrm{P}(Y = k | X = x), \quad k = 1, 2, \ldots, K.$$

Toto jsou *podmíněné pravděpodobnosti tříd* pro dané x, viz např. malý sloupcový graf pro $x = 5$. *Bayesův optimální klasifikátor* pro x je pak

$$C(x) = j \quad \text{jestliže} \quad p_j(x) = \max\{p_1(x), p_2(x), \ldots, p_K(x)\}.$$



Dá se zde stejně jako dříve použít průměrování přes nejbližší sousedy.
A pro rostoucí dimenze se to také hroutí. Avšak dopad na $\hat{C}(x)$ je menší než na $\hat{p}_k(x), k = 1, 2, \ldots, K$.

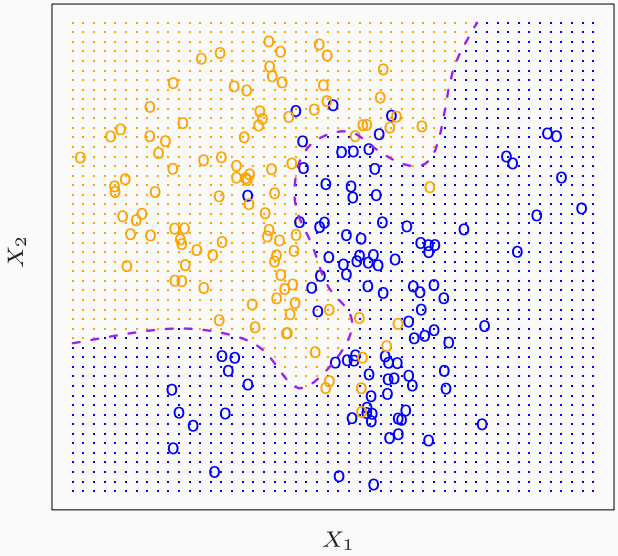
Klasifikace: některé detaily

- Výkonnost klasifikátoru $\hat{C}(x)$ typicky měříme pomocí míry chyby nesprávné klasifikace:

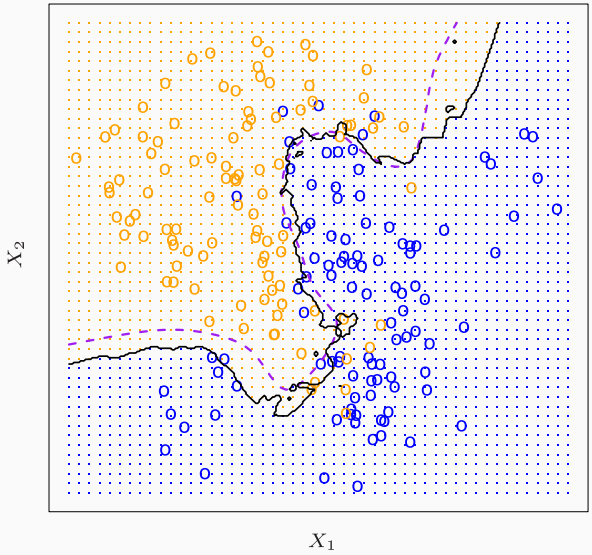
$$\text{Err}_{\texttt{Te}} = \text{average}_{i \in \texttt{Te}} \begin{cases} 1 & \text{pokud } y_i \neq \hat{C}(x_i), \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

- Bayesův klasifikátor (užívající skutečné hodnoty $p_k(x)$) má nejmenší chybu (v dané populaci).
- Metoda podpůrných vektorů (SVM) vytváří strukturované modely $C(x)$, schopné zahrnout do modelu i vztahy mezi jednotlivými třídami (tedy strukturu vstupních dat).
- Budeme také vytvářet strukturované modely pro reprezentaci $p_k(x)$, např. logistickou regresi, zobecněné aditivní modely.

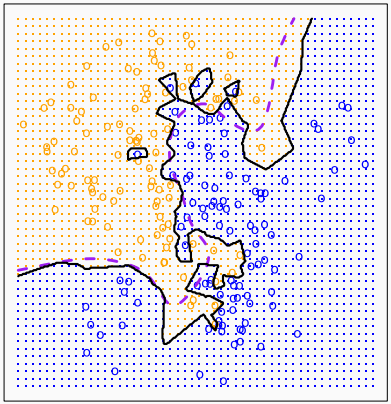
Příklad: K nejbližších sousedů ve dvou dimenzích



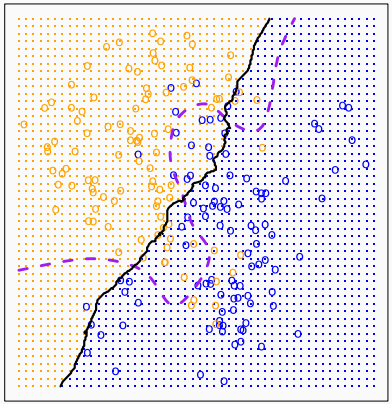
Příklad: K nejbližších sousedů ve dvou dimenzích – $K = 10$

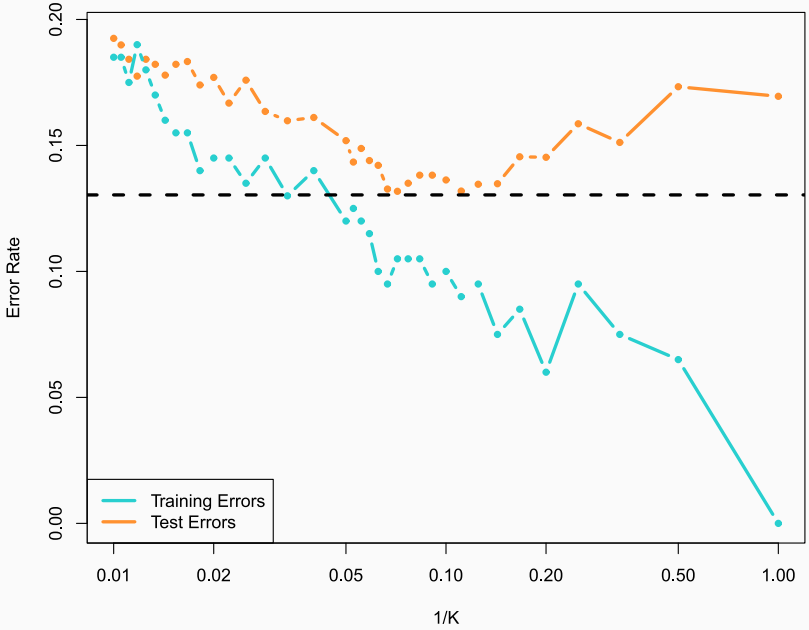


KNS: $K = 1$



KNS: $K = 100$




0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
Error Rate
Training Errors
Test Errors
0.01
0.02
0.05
0.10
0.20
0.50
1.00
1/K