Strojno učenje
3 (I dio)
Evaluacija modela

Tomislav Šmuc

PMF, Zagreb, 2020

Pregled

i. Greške (stvarna; T - na osnovu uzorka primjera)
ii. Resampling metode procjene greške
iii. Usporedba modela ili algoritama (na istim podacima)
iv. Mjere
    i. Klasifikacija:
        - Krivulja učenja, TP,FP... Matrica konfuzije
        - točnost, osjetljivost, preciznost
    ii. IR (+ klasifikacija): F_1 , ROC (AUC)

Tokom drugih predavanja – uz pojedina područja

i. Regresija – RMSE; RAE
ii. Clustering: Mjere “dobrote” clusteringa
iii. Učenje pravila (podrška/pouzdanost/”pojačanje” - support/confidence/lift)

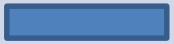
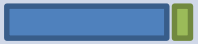
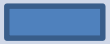
Structural Risk Minimization i VC dimenzija

Pretpostavimo da imamo na izbor niz "strojeva" ili algoritama
– koji uče hipoteze iz prostora H_i (funkcije) različitih $VC(H_i)$ tako da vrijedi:

$$VC(H_1) \leq VC(H_2) \leq VC(H_3) \leq VC(H_4) \leq \ldots \leq VC(H_N)$$

Koji ćemo od "strojeva" - algoritama koristiti ?
- Treniramo svaki od strojeva i mjerimo e_T ... i procjenjujemo e_{test} na osnovu:

$$e_\Delta \approx e_{test} \leq e_T + \sqrt{\frac{VC(H)(\log(2N/VC(H))+1) - \log(\eta/4)}{N}}$$

rbr	H_i	e_T	$\sqrt{}$ (VC(H)….	~e_{test}	Rang
1	H_1				4
2	H_2				1
3	H_3				1
4	H_4				1
5	H_5				5

Druge metode procjene

bazirane samo na $e_T(h)$ i procjeni rizika

AIC (Akaike Information Criterion)

$$AIC(f(x,\alpha) = e_T(f(x,\alpha) + 2 \cdot \frac{d(\alpha)}{N} \cdot \hat{\sigma}_\varepsilon^{\,2}$$

d(α) – broj parametara modela
σ - procijenjena pristranost (bias) modela

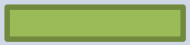
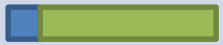
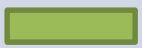
BIC (Bayesian information Criterion)

$$BIC(f(x,\alpha) = \frac{N}{\hat{\sigma}_\varepsilon^{\,2}}\left[\, e_T(f(x,\alpha)) + (\log N) \cdot \frac{d(\alpha)}{N} \cdot \hat{\sigma}_\varepsilon^{\,2} \,\right]$$

The Elements of Statistical Learning,
Hastie, Tibshirani, Friedman

MDL (Minimum Description Length)

$$DL = -\log P(\mathbf{y} \mid \alpha, f, \mathbf{x}) - \log P(\alpha \mid h)$$

rbr	H_i	e_T	AIC/BIC/DL	$\sim e_{test}$	Rang
1	H_1				
2	H_2				
3	H_3				
4	H_4				
5	H_5				

Glasači vs. Ne-glasači (HR) – binarni klasifikacijski problem

(Skup podataka za učenje – u tekstu *T* ili *S*)

- **Godine: (‘18-25’,’26-35’,’36-45’,…,76+)**
- **Spol: {M, Ž}**
- **Brak: {Da, Ne}**
- **Obrazovanje: {nš,oš,sš,vš,vsš}**
- **Broj djece: (‘0’,’<=2’,’3+’)**
- **Regija: {I,S,J,Z,C}**
- **Primanja {<50, 50-100, 100-200, >200}**
- **Zaduženost (krediti): {0-50, 50-100, 100-200, >200}**
- **Najčešće čita novine {V, JL, M, SN, Os}**
- **Klasa: {1,0}**

Godine	Spol	Brak	Obrazovanje	Broj djece	Regija	Primanja (kHRK/god)	Zaduženost (kHRK)	Novine	Klasa G(+)/ NG(-)
‘26-35’	m	Da	sš	‘<=2’	I	‘50-100’	‘50-100’	V	-
‘26-35’	ž	Ne	vss	‘0’	S	‘<50’	‘0-50’	JL	+
‘56-65’	ž	Da	ss	‘3+’	J	‘100-200’	‘100-200’	Os	-
‘66-75’	m	Ne	vss	‘<=2’	Z	‘<50’	‘>100’	M	+
‘18-25’	m	Ne	ss	‘0’	C	‘<50’	‘0-50’	SN	+
.....	.....		.....	.....	.....		.....	.....	.....

x y

Kako mjerimo grešku:
Empirijska evaluacija uspješnosti učenja

Neki (očiti) zaključci:

a. $e_T(h)$ je gotovo uvijek pristrana (en biased) /optimistična procjena $e_\Delta(h)$

(bias $\equiv E[e_T(h)] - e_\Delta(h)$)

Da izbjegnemo ovaj optimistični *bias, h* i *T* moraju biti odabrani nezavisno !?

a. Čak i ako imamo ne-pristrano odabran skup točaka *T*, $e_T(h)$ se može značajno razlikovati od $e_\Delta(h)$

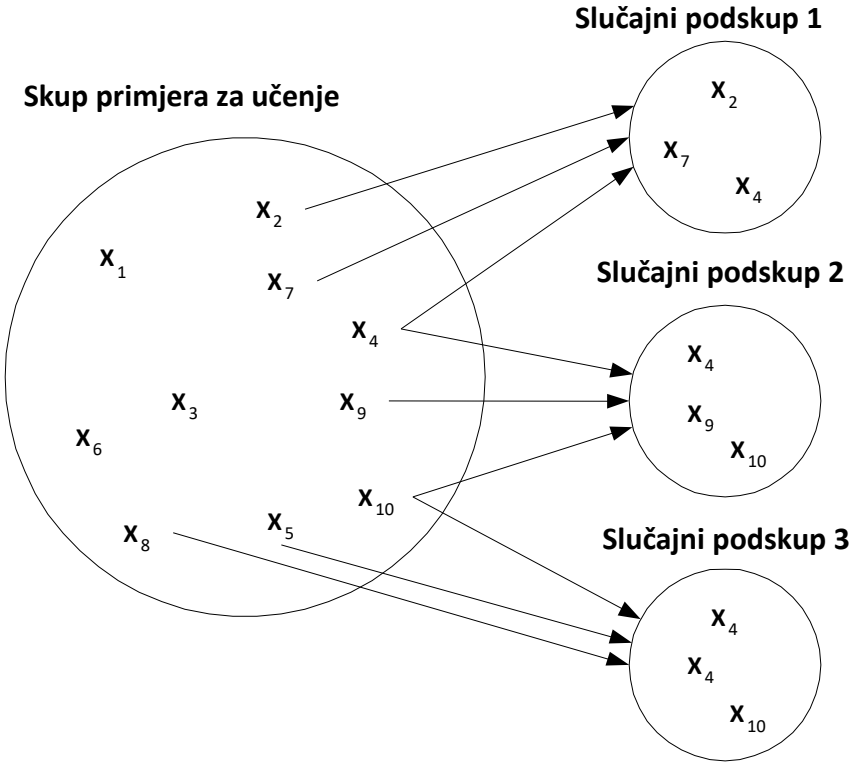
Varijanca X => $V(X) \equiv E[(X - E(X))^2]$

Empirijska procjena greške - validacija modela

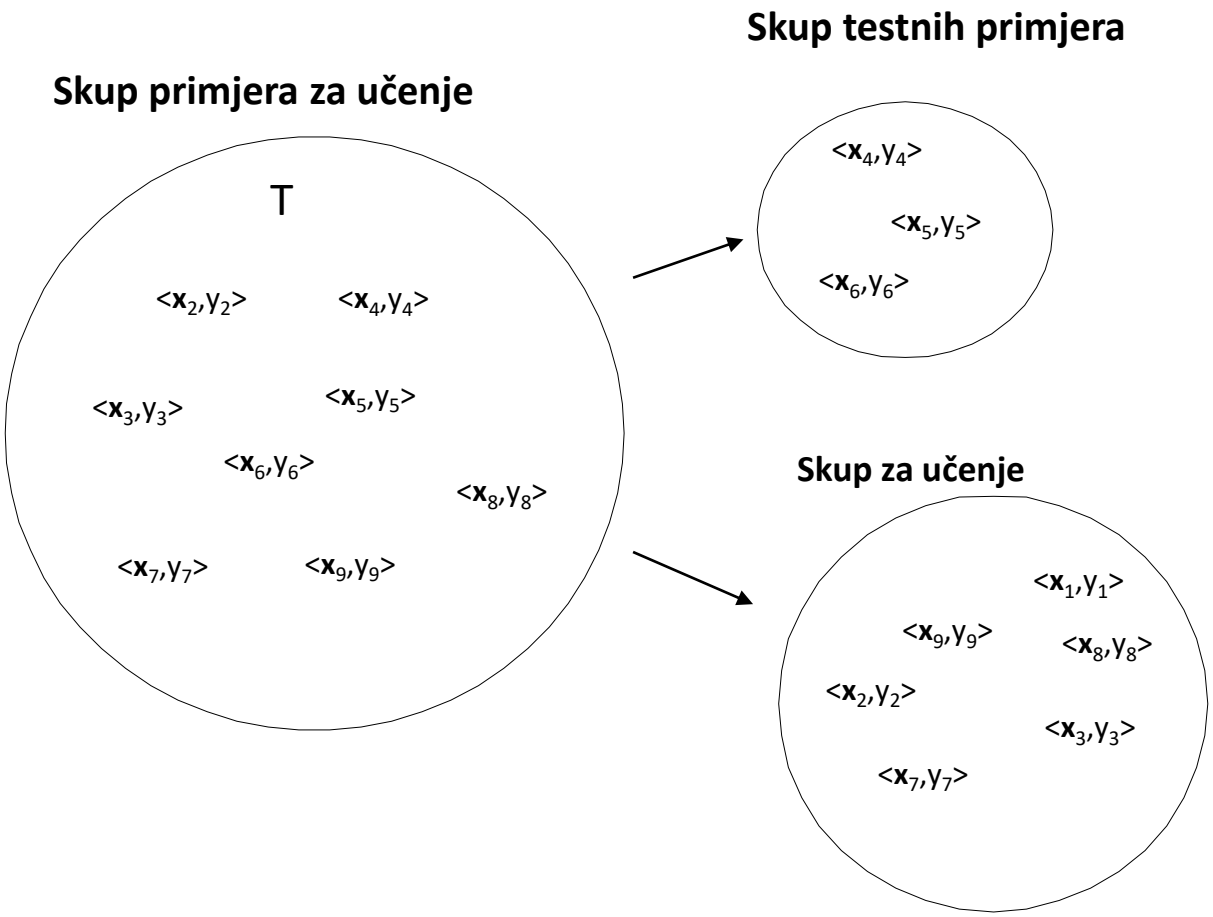
Tehnike probira (en. resampling)

- Train & Test metoda
- Unakrsna validacija (en. Cross-Validation)
- LOOCV (en. Leave-One-Out-Cross-Validation)
- Out-of-Bag

Probir - osnove



Probir - osnove



Train & test metoda

a. Slučajno odaberemo 1/3 od dostupnih primjera za učenje i stavimo ih u novi – **skup za testiranje (en. Test set)**
b. Ostatak od 2/3 primjera iskoristimo za učenje modela – **skup za učenje (en. Training set)**
c. Naučimo model na skupu za učenje
d. Procijenimo stvarnu grešku modela “testirajući” novi model na **skupu za testiranje.**

Train & test metoda

Karakteristike

DOBRO:

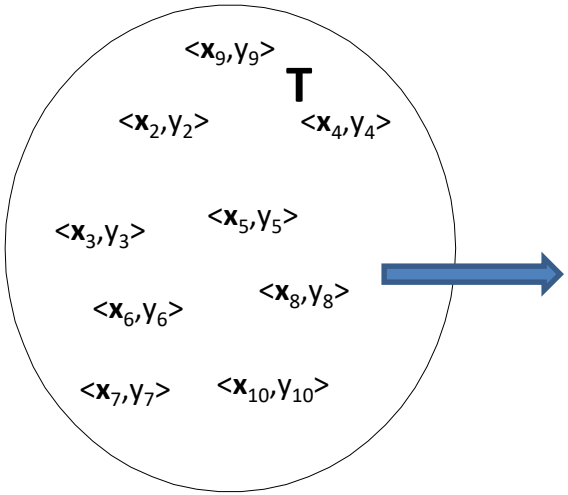
Jednostavna metoda - odabiremo onaj model koji daje najmanju grešku na testnom skupu

LOŠE:

a. “Gubimo” vrijedne podatke! 1/3 podataka se uopće ne koristi za izradu modela

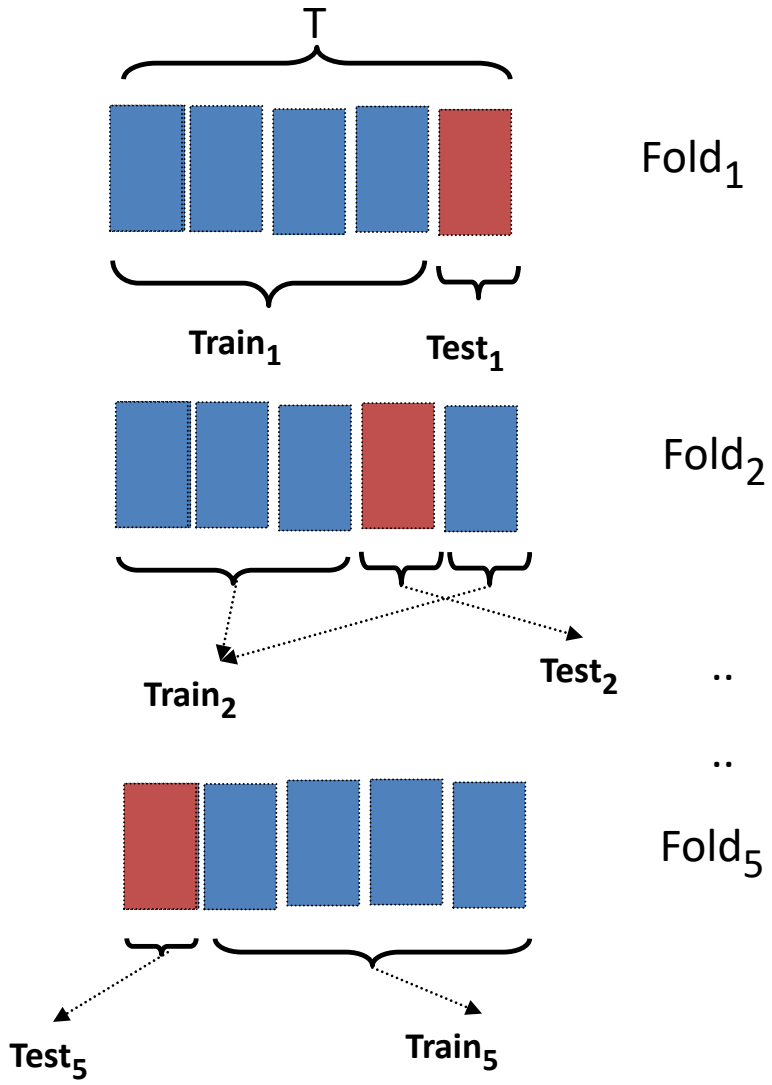
b. Ako imamo relativno malo podataka za učenje ocjena greške na testnom skupu će biti vrlo nepouzdana (>> varijanca greške)

Skup primjera za učenje



Unakrsna validacija (primjer: 5-fold CV)

fold~dio



k-struka unakrsna validacija (k-fold cross validation)

a. Slučajno rasporediti primjere za učenje u k odvojenih skupova T_i, $i=1,k$ (tipično po 30+ primjera)

b. Za $i=1$ do k

   a. Koristi T_i kao testni skup a ostale podatke $(T_m\ m \neq i)$, iskoristi za učenje modela h_i

   b. Na testnom skupu T_i izračunaj grešku L_m modela h_m

c. Izračunaj prosječnu grešku za svih k modela

$$\overline{L}_{k-fold} = \frac{1}{k} \sum_{m=1,k} L_m$$

Pojedinačna unakrsna validacija
Leave-one-out cross validation (LOOCV)

Na skupu primjera za učenje $(\boldsymbol{x}_i, y_i) \in D, \quad i=1,N$

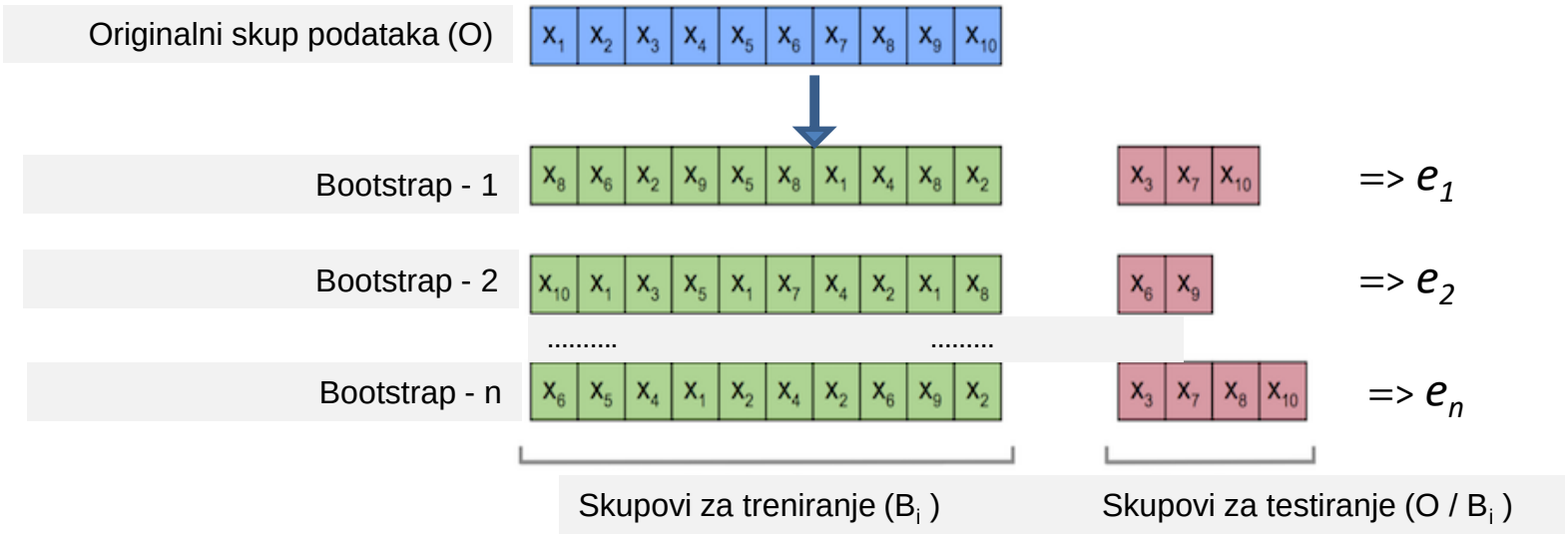
a. Za *i=1* do *N*
   a. Privremeno izdvoji primjer $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ iz skupa primjera za učenje
   b. Nauči model h_m na preostalim primjerima (*N-1*)
   c. Izračunaj grešku modela h_m primjeru $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$

b. Izračunaj prosječnu grešku za svih *N* modela

$$\overline{L}_{LOOCV} = \frac{1}{N} \sum_{m=1,N} L_m$$

„Out-of-bag” greška

OOB – „out-of-bag” greška bazirana je na tzv. „bootstrap sampling-u” (uzorkovanju s ponavljanjem), koje se najčešće koristi kod **ansambl** algoritama (Random Forest). Primjeri van bootstrap-trening skupa koriste se za procjenu greške (OOB)



$$OOB = \frac{1}{m}\sum_{1}^{n} e_i$$

Karakteristike metoda evaluacije probirom

Metoda	Dobre strane	Loše strane
Train & Test	▪ Jeftina – učimo samo jednom	▪ Gubimo puno primjera za učenje ▪ Nepouzdana procjena stvarne greške
K-fold CV	▪ Gubimo samo N/k za učenje jednog modela ▪ Stabilnija procjena greške	▪ K puta "skuplja" od T&T – učimo k modela
LOOCV	▪ Praktički učimo na svim primjerima (-1) ▪ Dobra za mali broj primjera	▪ Vrlo skupa za veliki N – učimo N modela !
Out-of-bag	▪ Slična procjene greške kao kod CV ▪ najčešće se koristi kod ansambl metoda	▪ Skupa; zavisi o broju uzorkovanja (bootstarpping)

Statistička evaluacija greške

Statistički problem – određivanje parametara i testiranje hipoteza

Neka je *f(**x**)* ciljna funkcija koju želimo naučiti koja savršeno klasificira primjere iz Δ

Stvarna greška našeg modela

$$e_{\Delta}(h) \equiv P_{x \in \Delta}[\, f(\mathbf{x}) \neq h(\mathbf{x}) \,]$$

Ono što možemo lako dobiti jest greška na skupu *S(=T)* primjera na kojem učimo:

$$e_S(h) \equiv \frac{1}{n} \sum_{x \in S} \delta(f(\mathbf{x}) \neq h(\mathbf{x})); \qquad \delta(f(\mathbf{x}) \neq h(\mathbf{x})) = 1, \quad \delta(f(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x})) = 0$$

$e_S(h)$ je rezultat slučajnog eksperimenta (slično je i s e_S^{CV})

Koliko je $e_S(h)$ / e_S^{CV} dobra procjena $e_{\Delta}(h)$?

Statistička evaluacija greške

Primjer:

a. *h* griješi na 20 od 100 primjera

b. $e_S(h) = 20/100 = 0.2$

c. Koliki je $e_\Delta(h)$?

Kao da imamo binarni klasifikator (0,1) - slično bacanju novčića

i neka je $e_\Delta(h) = \Theta$ stvarna greška *h*

Tada imamo u pozadini određivanja $e_\Delta(h)$ iz rezultata $e_S(h)$

binomnu distribuciju !

Statistička evaluacija greške

Što predstavlja naš eksperiment ?

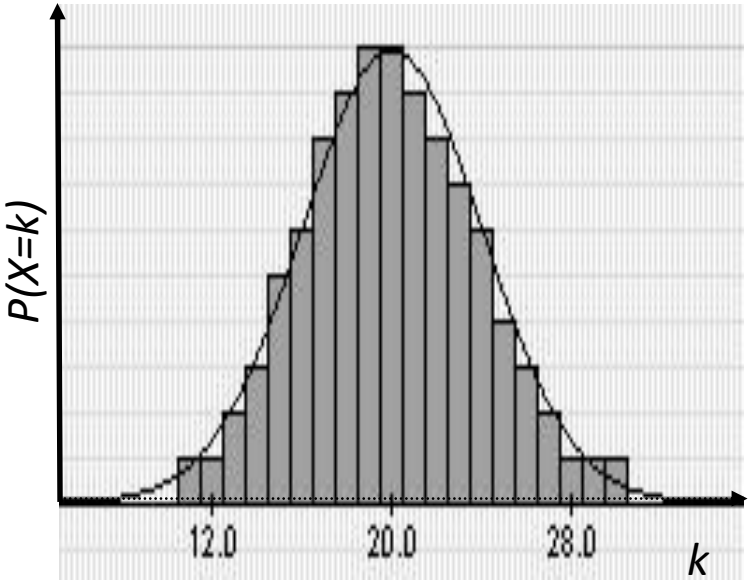
- Neka su h i $e_{\Delta}(h)$ fiksni (poznati)
- S je slučajnog karaktera - eksperiment je dakle probir primjera iz Δ u S !
- $R = e_S(h) \cdot |S|$ - greška je slučajna varijabla koja ovisi o S !

U našem slučaju:

- $|S| = 100$, a $e_S(h) = 0.2$. Koliko je vjerojatno da je ustvari $e_{\Delta}(h) = 0.3$?

Treba pogledati binomnu raspodjelu !

Binomna raspodjela



P(X=k) – vjerojatnost da ćemo imati *k* puta ishod=*glava* u *n* pokušaja (p/g)

P=P(glava)

Srednja vrijednost

$$E(X) \equiv \sum_{i=0}^{n} iP(i) = np$$

Varijanca - Var(X)=σ^2

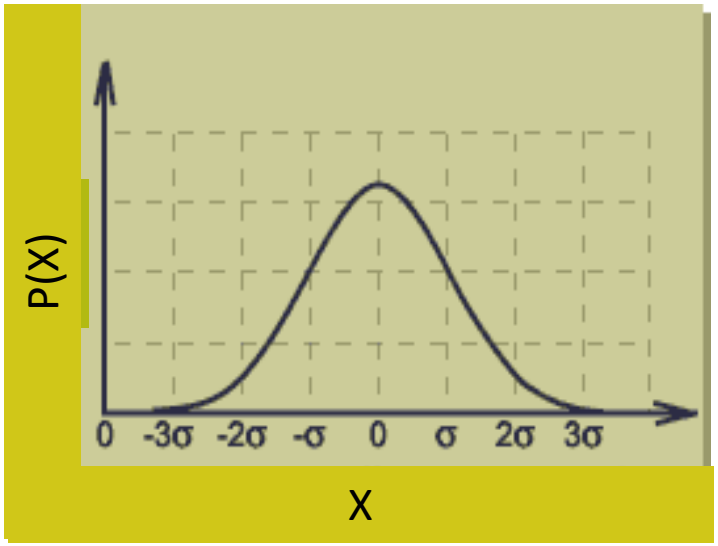
$$Var(X) \equiv E\left[\ (X - E[X])^2 \ \right] = np(1-p)$$

$$P(X = k) = \frac{n!}{k!(n-k)!} p^k (1-p)^{n-k}$$

Standardna devijacija X - $\sigma_X = \sigma$

$$\sigma_X \equiv \sqrt{E\left[\ (X - E[X])^2 \ \right]} = \sqrt{np(1-p)}$$

Normalna raspodjela



Vjerojatnost da će X biti u intervalu (a,b) je

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}$$

- srednja vrijednost $E(X)=\mu$
- Varijanca $Var(X)=\sigma^2$
- Standardna devijacija $\sigma_X = \sigma$

Mjerenje uspješnosti učenja

Sve naše pretpostavke:

- *h* i *S* su nezavisno odabrani
- *n > 30* – binomna raspodjela dobro je aproksimirana normalnom raspodjelom

- $\mu(e_S(h)) = e_\Delta(h)$

$$\sigma(e_S(h)) = \sqrt{\frac{e_S(h)(1-e_S(h))}{n}} \approx \sqrt{\frac{e_\Delta(h)(1-e_\Delta(h))}{n}}$$

Za veći *n* (*n* > 30) normalna raspodjela je dobra aproksimacija binomne raspodjele !

Poznato: Sa *N%* vjerojatnosti, $e_{\Delta}(h)$ se nalazi u intervalu:

$$e_{\Delta}(h) = e_S(h) \pm z_N \sqrt{\frac{e_S(h)(1-e_S(h))}{n}}$$

Gdje vrijedi:

N%	*50%*	*68%*	*90%*	*95%*	*98%*	*99%*
z_N	*0.67*	*1.00*	*1.64*	*1.96*	*2.33*	*2.58*

Računanje razlika između modela

1. Želimo odrediti razliku u uspješnosti dva modela h_1 i h_2:

$$\delta \equiv e_{\Delta}(h_1) - e_{\Delta}(h_2)$$

2. Na osnovu procjena dobivenih na S_1 i S_2

$$\hat{\delta} \equiv e_{S_1}(h_1) - e_{S_2}(h_2)$$

3. Odredimo distribuciju vjerojatnosti koja je u pozadini naše procjene

$$\sigma_{\hat{\delta}} \approx \sqrt{\frac{e_{S_1}(h_1)(1-e_{S_1}(h_1))}{n_1} + \frac{e_{S_2}(h_2)(1-e_{S_2}(h_2))}{n_2}}$$

4. Na kraju nađemo interval *N%* vjerojatnosti u koji spada δ

$$\delta \approx \hat{\delta} \pm z_N \sqrt{\frac{e_{S_1}(h_1)(1-e_{S_1}(h_1))}{n_1} + \frac{e_{S_2}(h_2)(1-e_{S_2}(h_2))}{n_2}}$$

Usporedba 2 algoritma strojnog učenja

Vrlo često:

a. Želimo pronaći najbolji algoritam za naš problem

b. Odrediti razliku u uspješnosti algoritama i ustanoviti da li je ona statistički značajna

Statistički test mora kontrolirati nekoliko izvora varijacije:

- u izboru testnih podataka
- u izboru podataka za učenje
- slučajni odabiri/odluke u algoritmima

Usporedba dva algoritma (1)

1) Koristeći Trening + test skup i dva algoritma (modela) - L_1 i L_2

$$H_0\colon \mu_0 = \mu_1 \; vs \; H_1\colon \mu_0 \neq \mu_1$$

McNemar test

e_{00}: broj primjera koji su pogrešno klasificirani od strane L_1 i L_2	e_{01}: broj primjera koji su pogrešno klasificirani od strane L_1 ali ne i od L_2
e_{10}: broj primjera koji su pogrešno klasificirani od strane L_2 ali ne i od L_1	e_{11}: broj primjera ispravno klasificiranih od L_1 i L_2

2) Pod H_0 očekujemo:

$$e_{01} = e_{10} = (e_{01} + e_{10})/2$$

$$\frac{(|e_{01} - e_{10}| - 1)^2}{e_{01} + e_{10}} \sim \chi_1^2$$

H_0 je prihvatljiva ako:

$$\frac{(|e_{01} - e_{10}| - 1)^2}{e_{01} + e_{10}} < \chi_{\alpha,1}^2 \qquad \alpha \ll 1 \; (\text{npr. } 0.01)$$

Usporedba dva algoritma (2)

- k-struki test koristeći unakrsnu validaciju (**paired t-test**)

p_i^1, p_i^2: greške algoritma 1 i 2, na foldu *i*

$p_i = p_i^1 - p_i^2$ - razlika na foldu *i*

$H_0: \mu_0 = 0 \; vs \; H_1: \mu_0 \neq 0$

– nul hipoteza je da je srednja vrijednost p_i = 0

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{K} p_i}{K} \qquad s^2 = \frac{\sum_{i=1}^{K} (p_i - m)^2}{K-1}$$

$$\frac{\sqrt{K}(m-0)}{s} = \frac{\sqrt{K}m}{s} \sim t_{K-1}$$

- Dvo-strani test: $H_0: \mu_0 = 0$

$$\text{ako } \frac{\sqrt{K}m}{s} \epsilon \; (-t_{\frac{\alpha}{2},5}, \; t_{\frac{\alpha}{2},5})$$

Usporedba dva algoritma (3)

5x2struka unakrsna validacija - **Dietterichov test**

$$H_0\colon \mu_0 = \mu_1 \; vs \; H_1\colon \mu_0 \neq \mu_1$$

$p_i^{(j)}$:razlika u broju grešaka algoritma 1 i 2, na foldu *(j),j=1,2,* u replici *i=1,5*

$$\bar{p}_i = \frac{p_i^{(1)} + p_i^{(2)}}{2}$$

$$s_i^2 = \left(p_i^{(1)} - \bar{p}_i\right)^2 + \left(p_i^{(2)} - \bar{p}_i\right)^2$$

$$\frac{p_1^{(1)}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{5} s_i^2/5}} \sim t_5$$

Dvo-strani test - za neki α, $H_0\colon \mu_0 = \mu_1$ ako $\frac{p_1^{(1)}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{5} s_i^2/5}} \epsilon \left(-t_{\frac{\alpha}{2},5}, t_{\frac{\alpha}{2},5}\right)$

Usporedba > 2 algoritma na više nezavisnih skupova podataka

primjene:

- usporedbe novog algoritma sa drugim pristupima
- novi problemi => selekcija najboljeg modela

problem:

L algoritama, **K** skupova podataka (K*treniranje i K*testiranje) (
(L grupa sa K vrijednosti)

- Treba usporediti L uzoraka i ustanoviti da li su razlike između algoritama statistički značajne.

pristup: Analiza varijance (ANOVA)

Nul hipoteza:

H_0: $\mu_0 = \mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_L$ vs H_1: $\mu_i \neq \mu_j$ - za barem jedan par algoritama (r,s)

Kritika „frequentist" pristupa usporedbi algoritama

- Ne znamo veličinu efekta (stvarnu razliku)
- statistička signifikantnost ≠ praktička značajnost

➔ Bayesovski pristup – usporedbe i testovi na osnovu distribucija razlika

Mjere/statistike uspješnosti u klasifikaciji

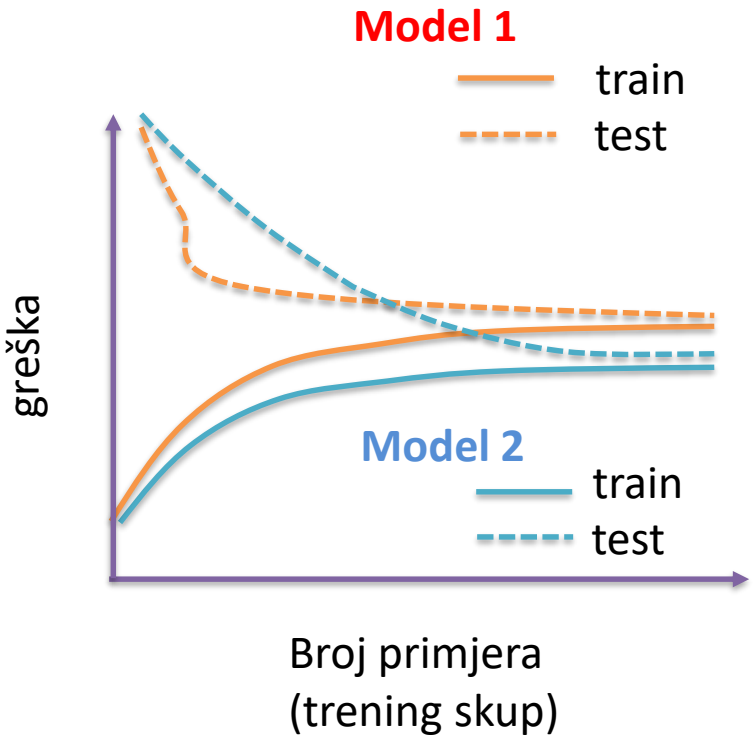
- Neke od mjera/statistika postoje u principu od vremena prije nastanka pojma strojno učenje
- Osim SU neke od ovih mjera su uobičajene i u području IR (en. information retrieval)
- Neke od mjera uspješnosti modela
  - Krivulja (točnosti) učenja
  - Matrica konfuzije
    - Točnost, Osjetljivost, Preciznost (Recall/Precision)
  - F_1 , ROC – Receiver Operating Curve - (AUC)
  - Kappa

Problem – Glasači vs. Ne-glasači (HR)

- **Godine: (‘18-25’,’26-35’,’36-45’,…,76+)**
- **Spol: {M, Ž}**
- **Brak: {Da, Ne}**
- **Obrazovanje: {nš,oš,sš,vš,vsš}**
- **Broj djece: (‘0’,’<=2’,’3+’)**
- **Regija: {I,S,J,Z,C}**
- **Primanja {<50, 50-100, 100-200, >200}**
- **Zaduženost (krediti): {0-50, 50-100, 100-200, >200}**
- **Najčešće čita novine {V, JL, M, SN, Os}**
- **Klasa: {1,0}**

Godine	Spol	Brak	Obrazovanje	Broj djece	Regija	Primanja (kHRK/god)	Zaduženost (kHRK)	Novine	Klasa G(+)/ NG(-)
‘26-35’	m	Da	sš	‘<=2’	I	‘50-100’	‘50-100’	V	-
‘26-35’	ž	Ne	vss	‘0’	S	‘<50’	‘0-50’	JL	+
‘56-65’	ž	Da	ss	‘3+’	J	‘100-200’	‘100-200’	Os	-
‘66-75’	m	Ne	vss	‘<=2’	Z	‘<50’	‘>100’	M	+
‘18-25’	m	Ne	ss	‘0’	C	‘<50’	‘0-50’	SN	+
.....	.....		.....	.....	.....		.....	.....	.....

Krivulja učenja



Naš naučeni model *h* aproksimira ciljnu funkciju *f* koja preslikava ***x*** ***(G,S,B,O,BrD,R,P,Z,N)*** u Klasu {**+,-**}

Matrica konfuzije (confusion matrix)		**Stvarna klasa**	
		G (+) Pozitivni	**NG (-) Negativni**
Predviđeno modelom *h*	**G (+) Pozitivni**	TP	FP
	NG (-) Negativni	FN	TN

TP - true positives (broj stvarno pozitivnih primjera, točno predviđenih od strane modela *h*)

FP - false positives (broj stvarno negativnih primjera, koji su netočno predviđeni od strane modela *h* kao pozitivni)

TN – true negatives (broj stvarno negativnih primjera, koji su točno predviđeni od strane modela *h* kao negativni)

FN – false negatives (broj stvarno pozitivnih primjera, koji su netočno predviđeni od strane modela *h* kao negativni)

Matrica konfuzije (confusion matrix)		**Stvarna klasa**	
		G (+) Pozitivni	**NG (-) Negativni**
Predviđeno modelom *h*	**G (+) Pozitivni**	TP	FP
	NG (-) Negativni	FN	TN

Točnost (en. Accuracy) = (*TP+TN*) / (*TP+FP+TN+FN*)

Omjer točno klasificiranih primjera u odnosu na ukupan broj primjera (recimo u testnom skupu primjera)

- vrlo česta i uobičajena mjera - ne uvijek i ono što nam treba:

  - pozitivni primjeri su nam daleko važniji (medicina)
    (točnost daje *istu težinu* i pozitivnim i negativnim primjerima)
  - u mnogim problemima imamo veliki nesrazmjer između broja pozitivnih i negativnih primjera

Matrica konfuzije (confusion matrix)		**Stvarna klasa**	
		G (+) Pozitivni	**NG (-) Negativni**
Predviđeno modelom *h*	**G (+) Pozitivni**	TP	FP
	NG (-) Negativni	FN	TN

Osjetljivost (en. Sensitivity / Recall /True positive rate)

R = TP / (TP+FN)

Udio točno pozitivnih primjera koje je model prepoznao kao pozitivne, od ukupnog broja pozitivnih primjera.

- npr. Moramo imati R≈1 – da ne bi "ispustili" teškog bolesnika

Specifičnost = *TN / (FP+TN)* *S≈1* = P [Test je negativan | Pacijent je zdrav]

Preciznost

P = TP / (TP+FP)

Udio stvarno pozitivnih primjera u svima koji su modelom predviđeni kao pozitivni => pretraživači/preporučitelji - Information Retrieval (IR)

Evaluacija IR (information retrieval) sistema (npr. pretraživači)

- Učinkovitost (Effectiveness)
  - Pronalaženje **relevantnog** sadržaja (dokumenata iz korpusa – npr. Internet)

    Ostali elementi
    - Efikasnost (indeksiranje, brzina)
    - Ekspresivnost (kompleksnost informacija)
    - ....

IR - Kvantifikacija relevantnosti

~ klasifikacija (važni/nevažni)

- Pretraživač (~ klasifikator)
  (problem: razlučiti važno/nevažnog)
- korpus dokumenata = testni skup

IR - Kvantifikacija relevantnosti

- IR sistem vrati određeni skup dokumenata
- Možemo opet upotrijebiti matricu konfuzije !

Matrica konfuzije (confusion matrix)		**Stvarna klasa**	
		V (+) Važni	**NV (-) NeVažni**
Predviđeno pretraživačem	**G (+) Važni**	TP	FP
	NG (-) NeVažni	FN	TN

Točnost i IR

- **Točnost: Acc = (*TP+TN*) / (*TP+FP+TN+FN*)**

  = Udio točnih klasifikacija

  – Za IR – neupotrebljivo !

  |Važno | <<< |Nevažno |

  TP <<< TN

  Acc= (1 + 997) / (1+1+997+1)= 99.8% =>

Matrica konfuzije (confusion matrix)		Stvarna klasa	
		V (+) Važni	NV (-) NeVažni
Pretraživač	G (+) Važni	1	1
	NG (-) NeVažni	1	997

Acc=(0 + 998) / (0+0+998+2)= 99.8% =>

Matrica konfuzije (confusion matrix)		Stvarna klasa	
		V (+) Važni	NV (-) NeVažni
Pretraživač	G (+) Važni	0	1
	NG (-) NeVažni	2	997

- Preciznost $P = tp/(tp+fp)$
  - Udio važnih dokumenata od onih koji su "pronađeni" (klasificirano kao važni !)
  - *P* [*pronađeni važni* | *ukupno "pronađeni"*]

- Osjetljivost – recall $R = tp/(tp+fn)$
  - Udio od ukupno važnih koji su i pronađeni kao važni
  - *P* [*pronađeni važni | ukupno važnih*]

  - R može biti jednak 1 - ali je tada preciznost loša !

- Dobar IR
  - Balans Preciznost/Osjetljivost
  - Tipično:
    - preciznost pada kako osjetljivost raste, i obratno
  - F_β : tzv. F-mjera koja povezuje Preciznost/Osjetljivost

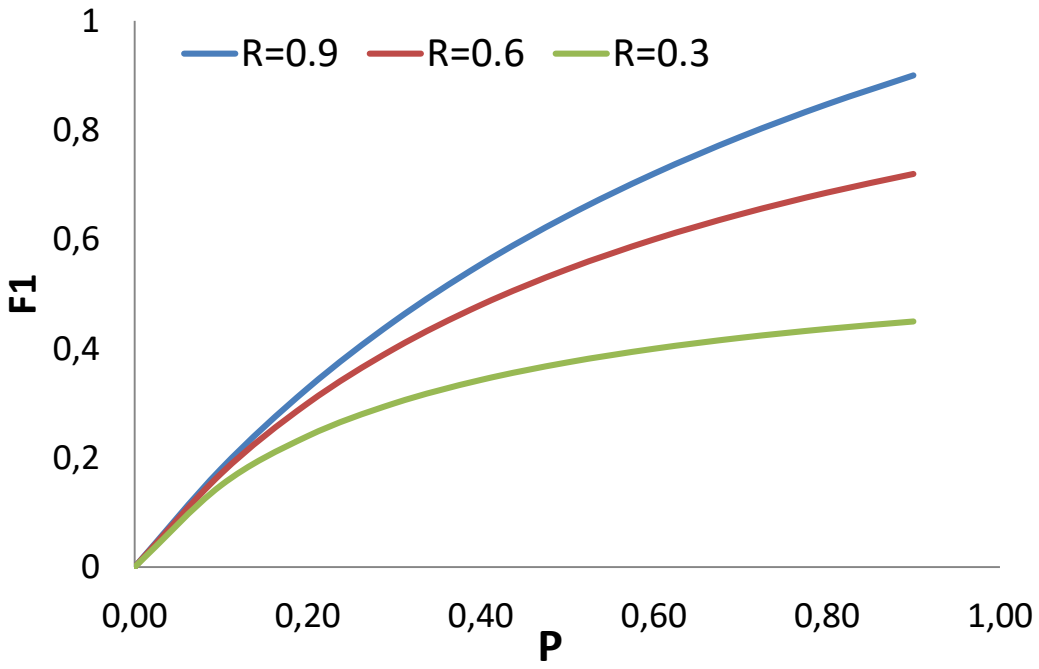
F_β : *harmonijska sredina P i R - uz težinski faktor* β

$$F_\beta = \frac{1}{\alpha \frac{1}{P} + (1-\alpha)\frac{1}{R}} = \frac{(\beta^2+1)PR}{\beta^2 P + R}$$

Uobičajeno se u Information Retrieval koristi *F-mjera:*

F_1 : Balansirani P i R (tj $\beta = 1$ ili $\alpha = ½$)

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{P} + \frac{1}{R}} = \frac{2PR}{P+R}$$



Klasifikator kao IR-sistem

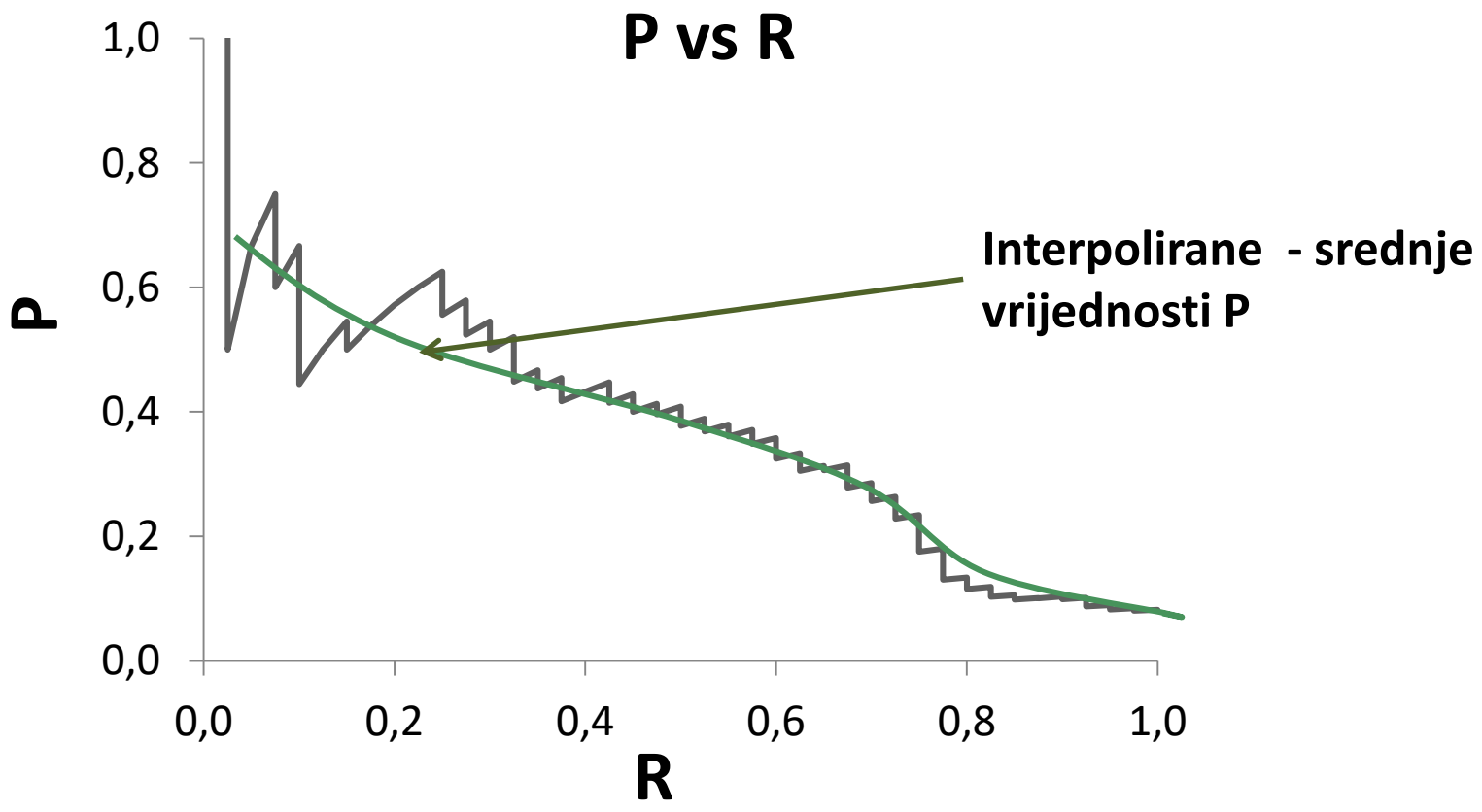
IR-sistem rangira dokumente:

R, P, F_1 - f (odabranog broja rangiranih dokumenata)

Ako **klasifikator** rangira primjere

npr. prema vjerojatnosti pripadanja određenoj klasi:

R, P, F_1 - f (odabranog broja rangiranih primjera)


P vs R
1,0
0,8
0,6
0,4
0,2
0,0
P
0,0
0,2
0,4
0,6
0,8
1,0
R
Interpolirane - srednje vrijednosti P

Mjere vezane uz rangiranje primjera

- **P(k)** – preciznost za top k rangiranih primjera
- **R(k)** – osjetljivost za top k rangiranih primjera

ROC (Receiver Operating Characteristic) – krivulja

- prikazuje odnos TPR u odnosu na FPR
  - *TPR* – broj korektnih klasifikacija u (pozitivnoj) klasi u odnosu na ukupan broj pozitivnih primjera

$$TPR = tp/(tp+fn) \qquad = R$$

  - *FPR* – broj krivih klasifikacija u (pozitivnoj) klasi u odnosu na ukupan broj negativnih primjera

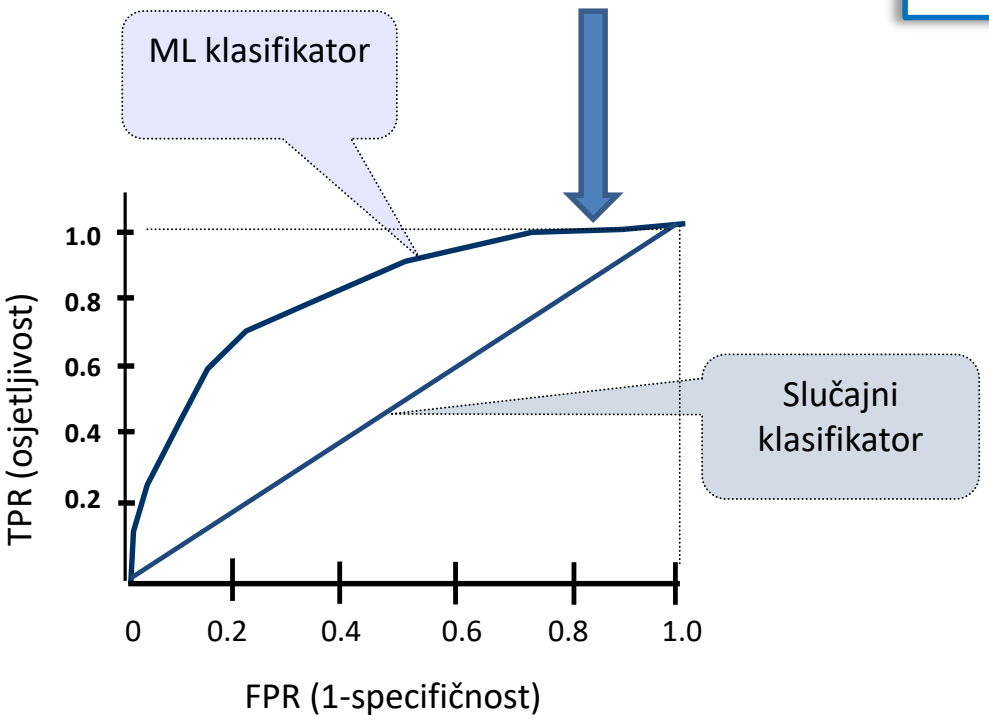
$$FPR = fp/(fp+tn) = 1 - specifičnost$$

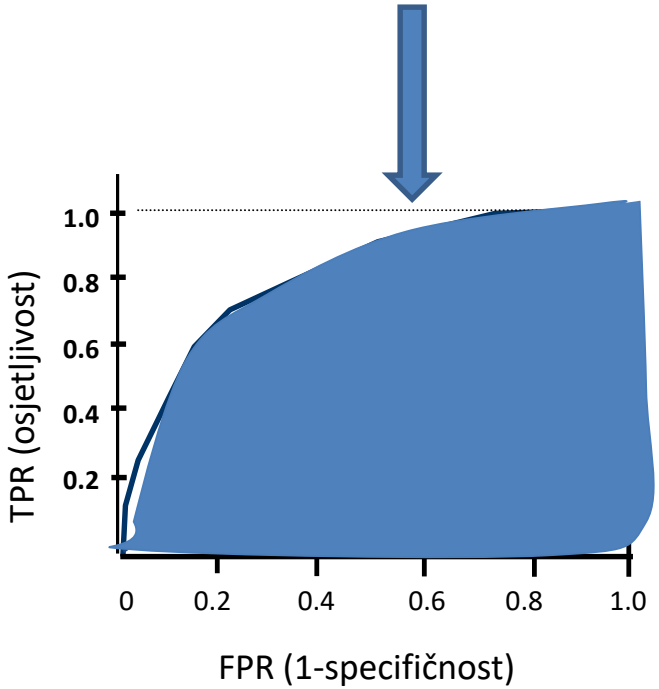
ROC – krivulja

Mjera uspješnosti klasifikatora – na nivou jedne klase primjera !

AUC - Površina ispod ROC krivulje
(en. AUC – Area Under Curve)

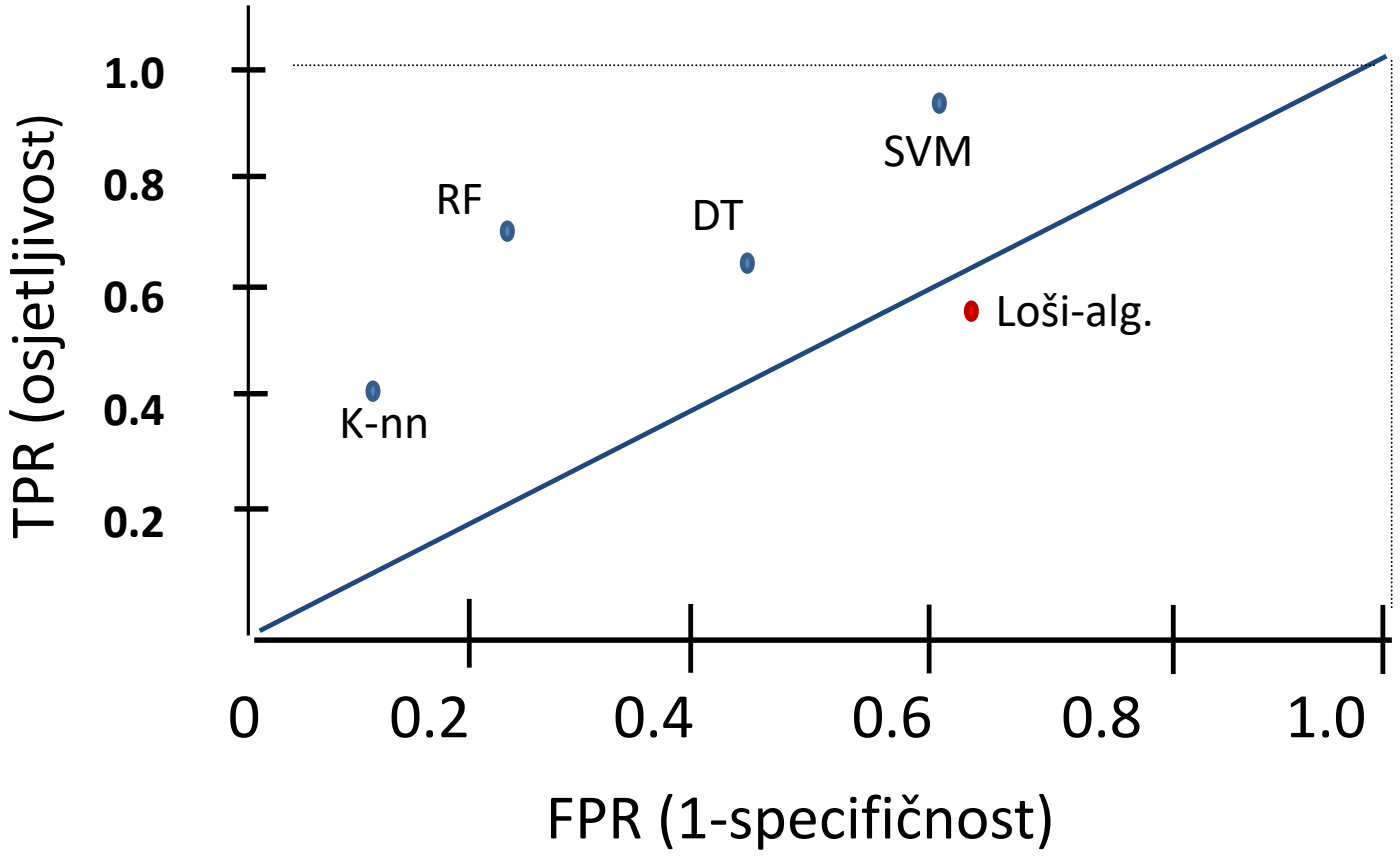
- AUC=0.5 – slučajno „pogađalo”
- AUC=1 – savršeni klasifikator





ROC -prostor za komparaciju hipoteza/algoritama

Nemamo rangirane primjere - h u točki (prosječni-TPR,FPR)



Kappa - mjera slaganja eksperata u predikciji (Inter-Judge Agreement)

$$\kappa = \frac{P(A) - P(S)}{1 - P(S)}$$

$P(A)$: proporcija primjera kod kojih se eksperti slažu

$P(S)$: očekivana proporcija primjera kod kojih se slaganje postiže slučajnim predikcijama

- $\kappa = 0$: sasvim slučajno slaganje;
- $\kappa = 1$: savršeno slaganje;
- $\kappa > 0.8$: dobro slaganje
- $0.67 < \kappa < 0.8$: tentativno slaganje

Kako to funkcionira – slaganje eksperata ?

Broj primjera	Ekspert 1	Ekspert 2
200	važno	važno
50	nevažno	nevažno
30	važno	nevažno
20	nevažno	važno

$P(E1=E2) = (200+50)/300 = 0.83$
$P(\text{nevažno}) = (20+30+50+50)/(300+300) = 0.25$
$P(\text{važno}) = (20+30+200+200)/(300+300) = 0.75$
$P(\textit{slučajno}) = 0.25^2 + 0.75^2 = 0.63$

$\kappa = (0.83 - 0.63)/(1-0.63) = 0.54$

Kako to funkcionira - u klasifikaciji?

		Stvarna klasifikacija - ekspert 1	
Predikcija Klasifikatora - ekspert 2		v	n
	v	200	20
	n	30	50

$P(E1=E2) = (200+50)/300 = 0.83$
$P(\text{nevažno}) = (20+50)/(300) = 0.25$
$P(\text{važno}) = (30+200)/(300) = 0.75$
$P(\textit{slučajno}) = 0.25^2 + 0.75^2 = 0.642$

Što pretpostavlja P(slučajno)?

$\kappa = (0.83 - 0.63)/(1-0.63) = 0.53$

Sažetak

Teorijske procjene greške

Resampling metode

Statistička evaluacija

odabir/usporedba modela i algoritama

Mjere uspješnosti u klasifikaciji

Literatura:

Evaluacija modela:

Machine learning

T. Mitchel (ch. 5)

The Elements of Statistical Learning

Hastie, Tibshirani, Friedman (ch. 7)

ROC (Receiver Operating Characteristic)

P.A. Flach – ROC tutorijali + članci

Model selection (statistička evaluacija, usporedba modela/algoritama):

T Dietterich, Approximate statistical tests for comparing supervised classification learning algorithms, Neural Computation, (1998), 10, 1895-1923
Introduction to Machine Learning - E. Alpaydin (ch. 19)

A Benavoli et al, Time for a Change: a Tutorial for Comparing Multiple Classifiers Through Bayesian Analysis, JMLR, (2017)

Pristranost i varijanca modela (en. bias & variance)

Greška modela i kompleksnost modela

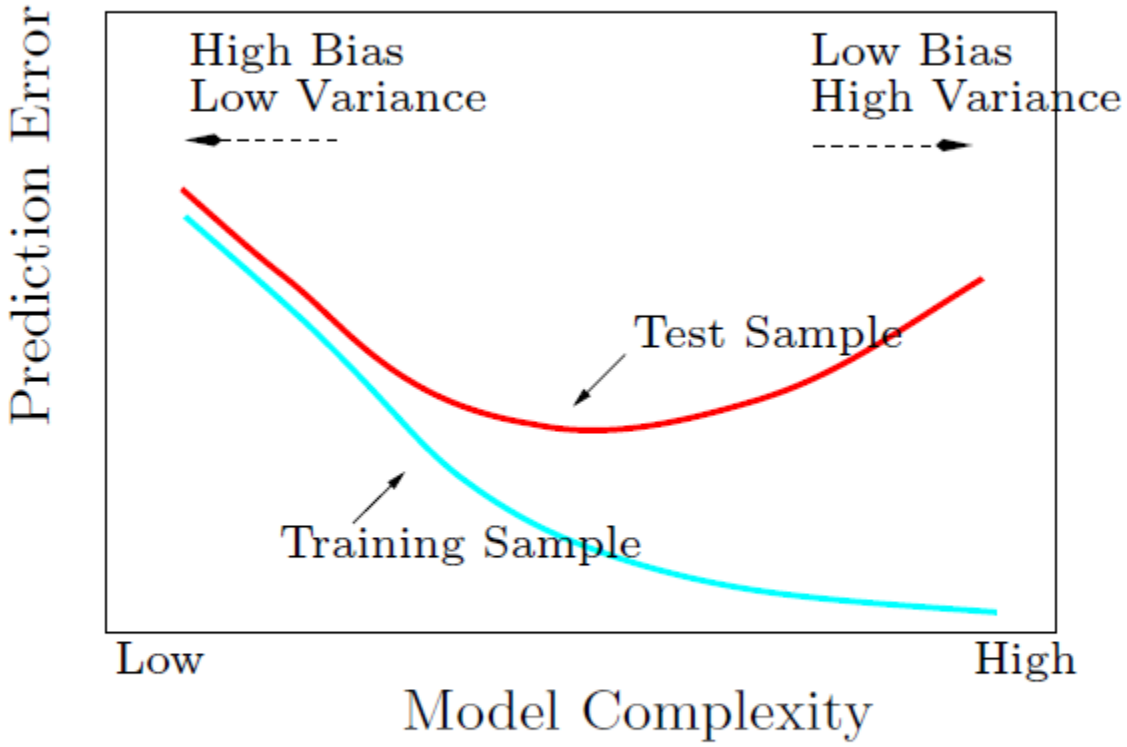


FIGURE 2.11. *Test and training error as a function of model complexity.*

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

Kod određivanja aproksimacije funkcije
– ciljna varijabla *y* se obično može izraziti kao:

$$y(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + \varepsilon$$

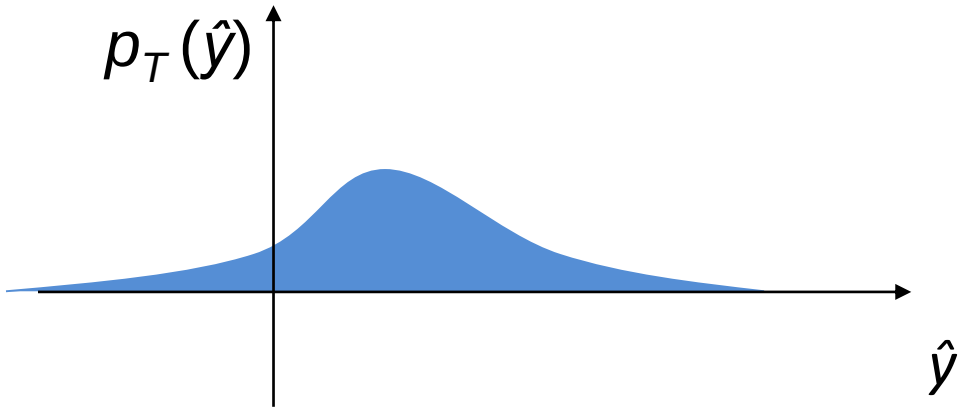
- $f(x)$ - "ciljna funkcija"
- ε - šum; obično $E(\varepsilon \mid \boldsymbol{x}) = 0$

Uz određene modifikacije slijedeće razmatranje se može promijeniti i na klasifikacijske probleme

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

Skup za učenje je T slučajno uzorkovan

=> predikcija $\hat{y}$ slučajna varijabla



Dekompozicija prediktivne pogreške
Pristranost i varijanca

$$Y = f(X) + \varepsilon, \qquad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon)$$

$$SE(x) = E\left[(Y - \hat{f}(x))^2\right]$$ Očekivana vrijednost kvadratne pogreške

$$SE(x) = \underbrace{(E\left[\hat{f}(x)\right] - f(x))^2}_{\text{Pristranost}} + \underbrace{E\left[(\hat{f}(x) - E[\hat{f}(x))^2\right]}_{\text{varijanca}} + \underbrace{\sigma_\varepsilon^2}_{\text{ne-reducibilna greška}}$$

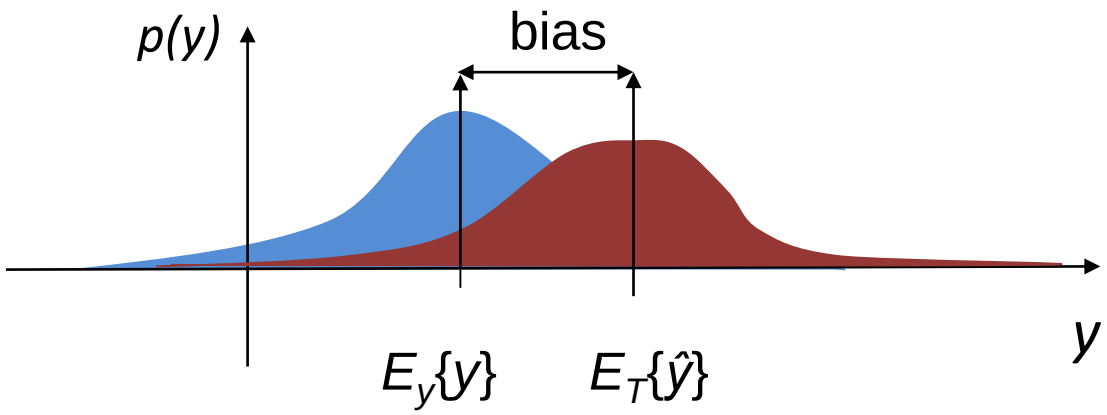
Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

Očekivane vrijednosti

$$E(e) = \text{pristranost} + \text{varijanca} + \text{šum}$$
$$\qquad\quad a \qquad\qquad b \qquad\qquad c$$

- Pristranost/Bias: sistematska greška na točki
  x - prosjek preko "svih" skupova za učenje T veličine N
- Varijanca: Varijacija greške oko prosječne vrijednosti predikcije
- Šum: Greška u određivanju stvarnih vrijednosti $f(x)$

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

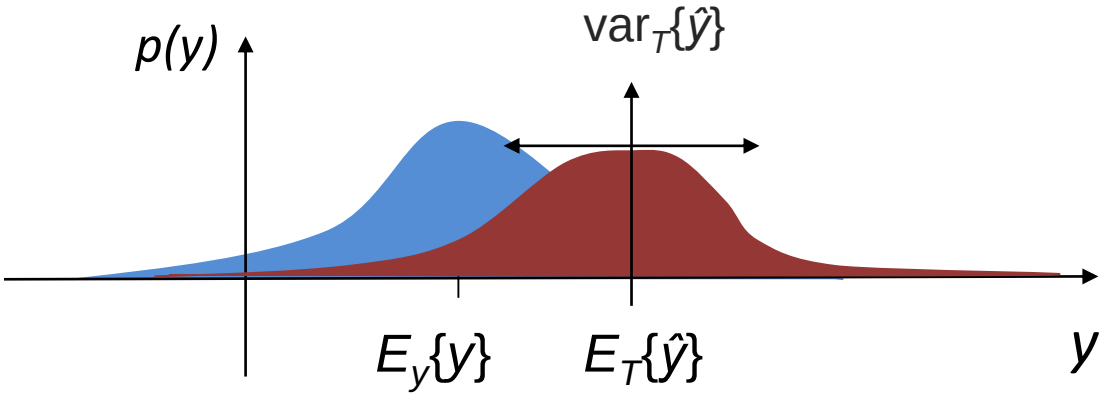


$$(E_y\{y\}-E_T\{\hat{y}\})^2$$

$E_T\{\hat{y}\}$ = prosječni rezultat modela (preko svih T)

bias = greška između stvarne vrijednosti i prosječnog estimacijskog modela

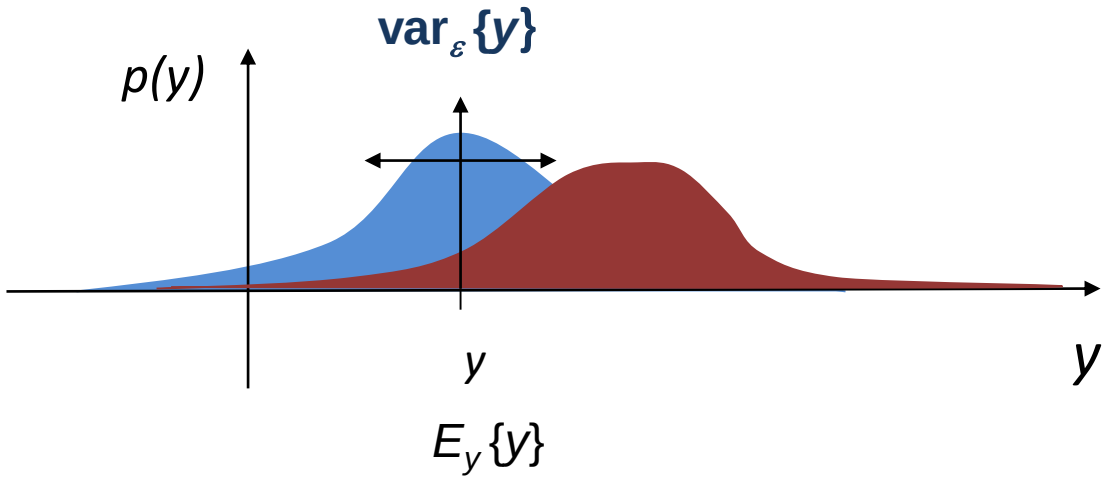
Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela



$$\text{var}_T\{y\} = E_T\{(\hat{y} - E_T\{\hat{y}\})^2\}$$

$\text{var}_T\{\hat{y}\}$ = estimacijska varijanca = zbog over-fitinga

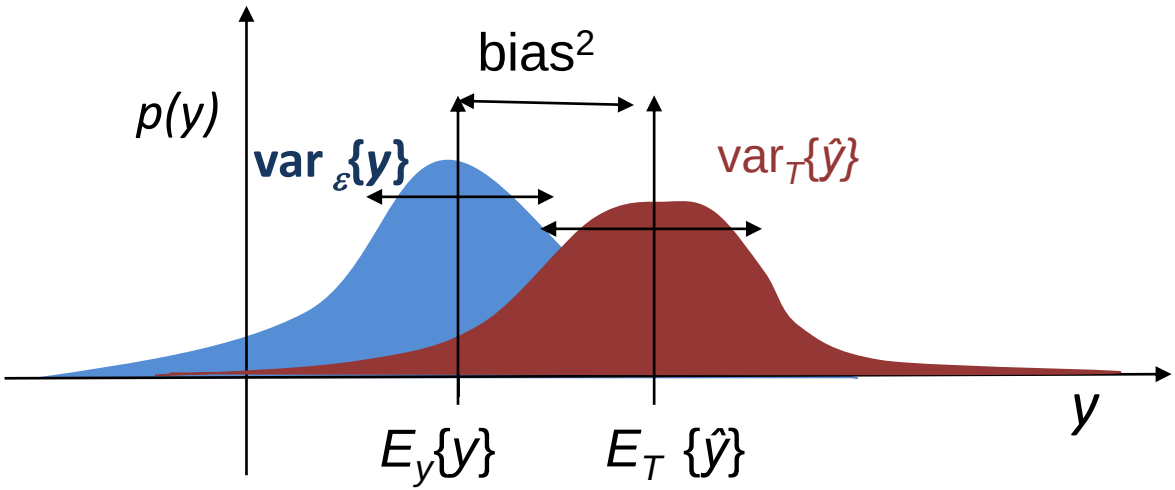
Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela



$$\text{var}_\varepsilon\{y\} = E_y\{(y - E_y\{y\})^2\}$$

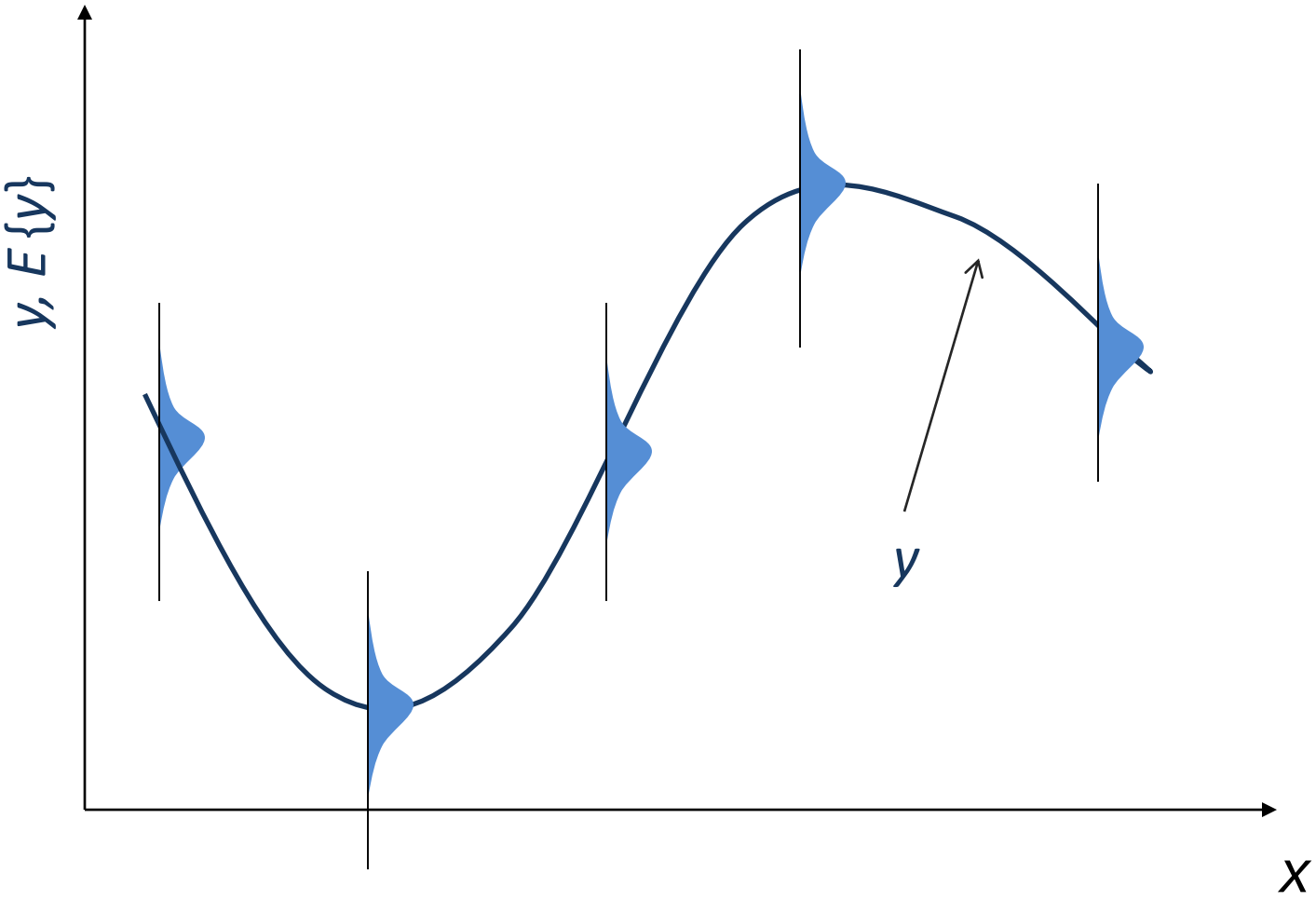
rezidualna greška = minimalna greška koju možemo dostići

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

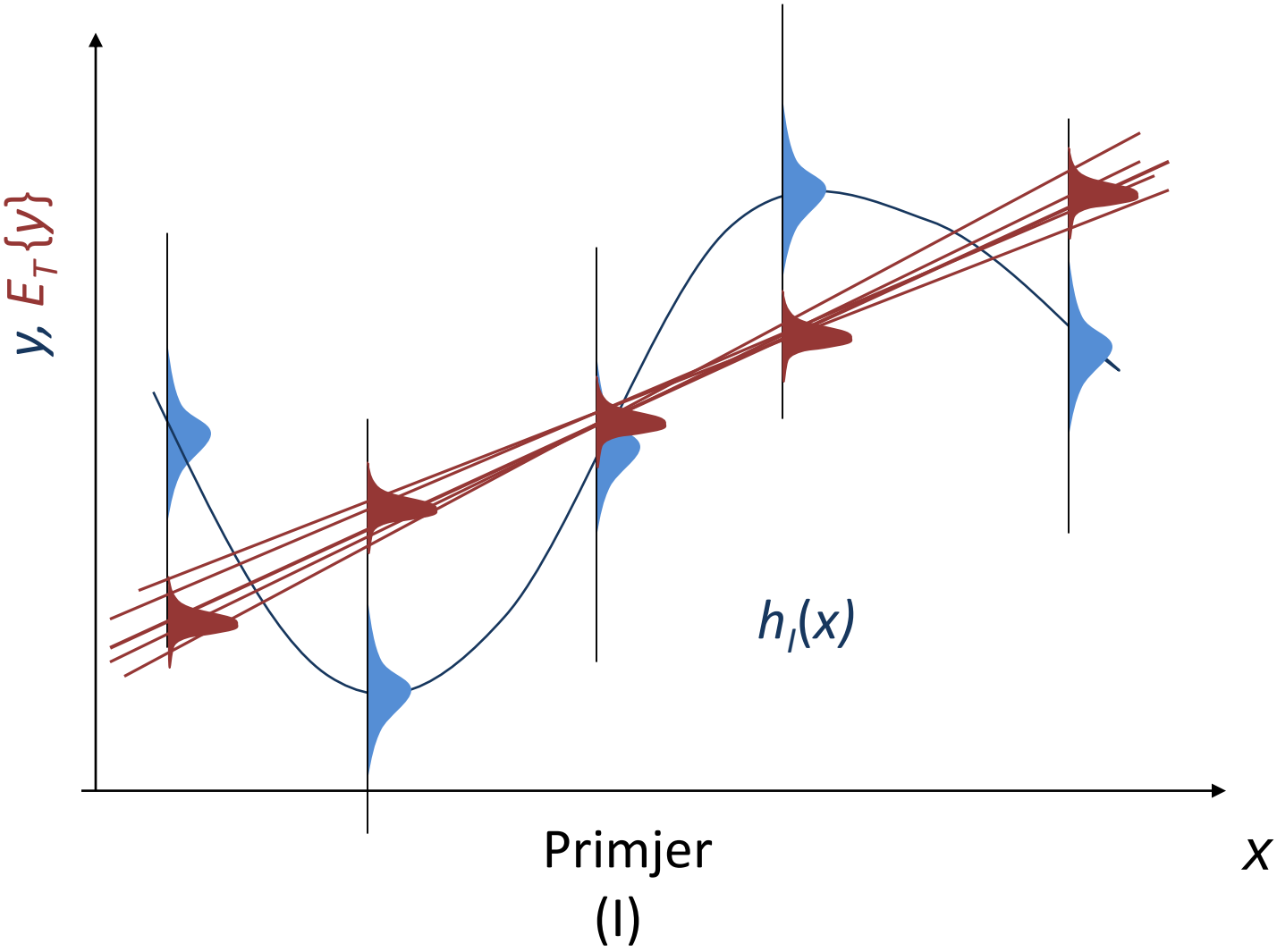


$$E = \text{var}_{\varepsilon}\{y\} + \text{bias}^2 + \text{var}_{T}\{y\}$$

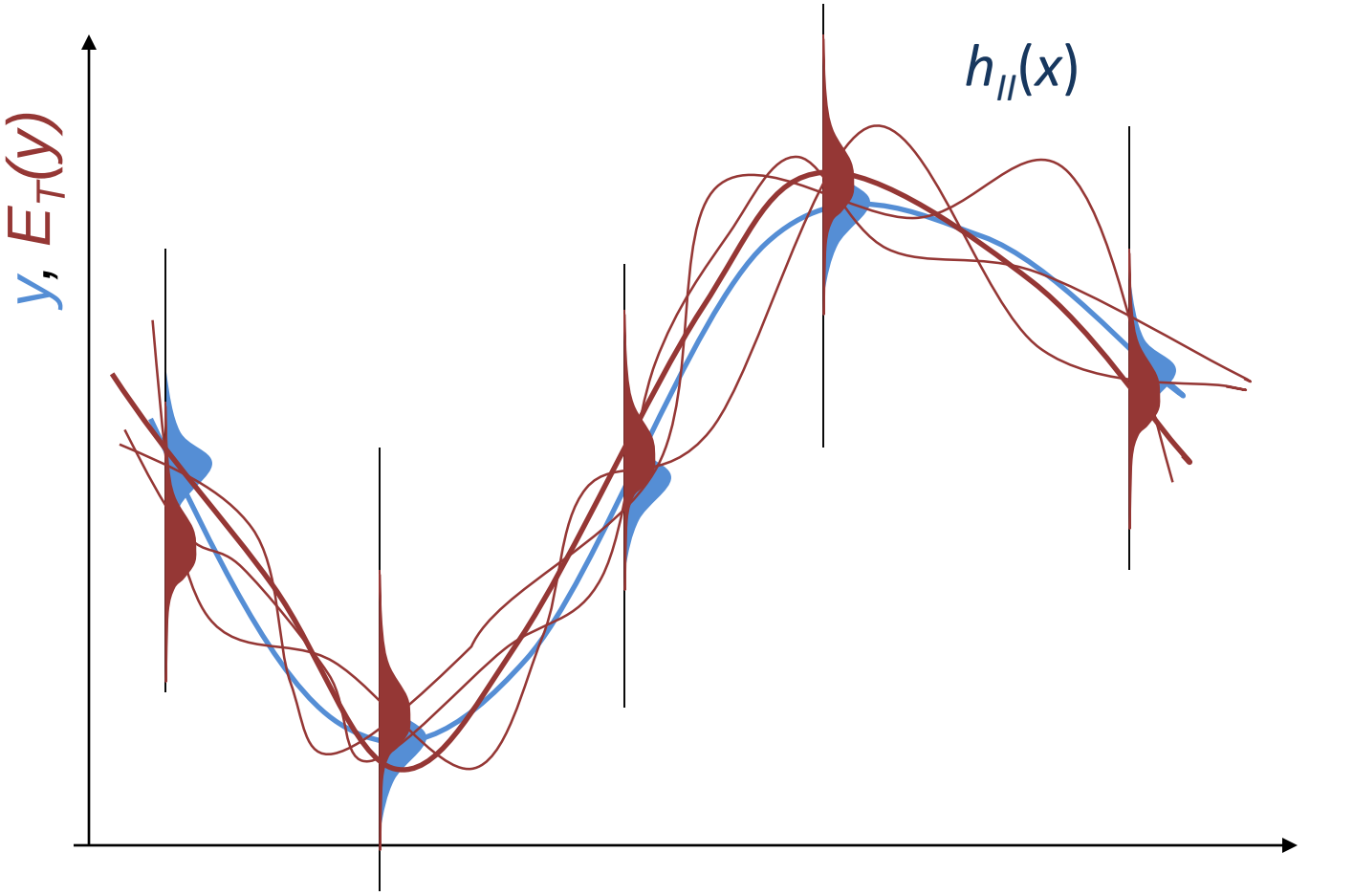
Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela



Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

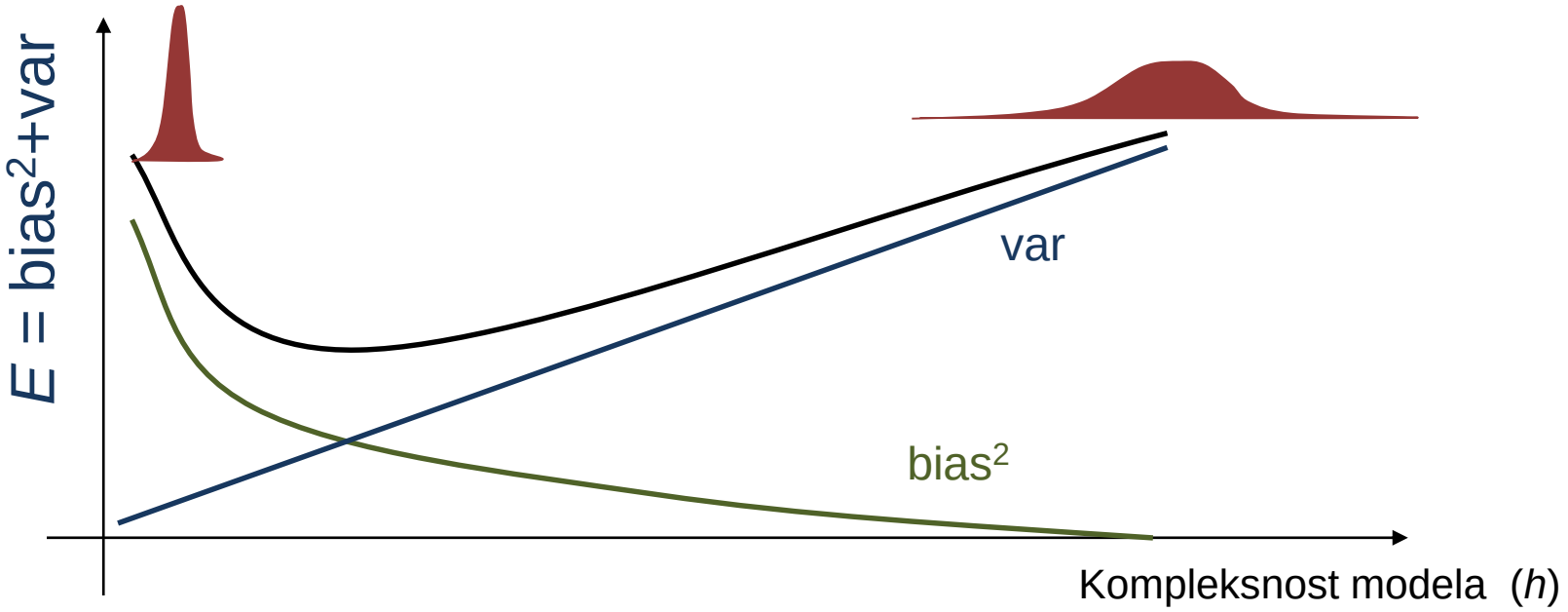


Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela



Primjer
II

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela



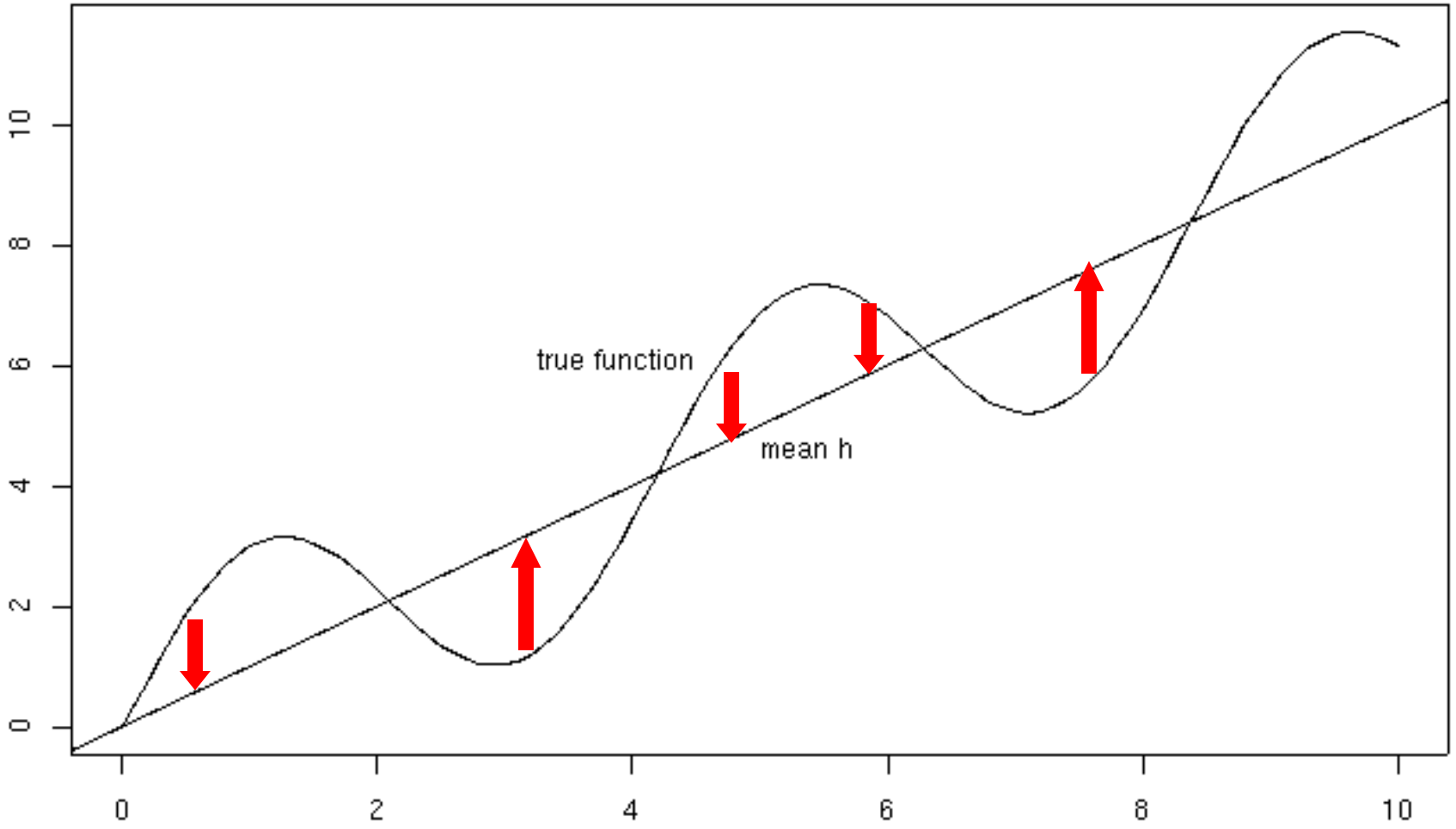
Pristranost (bias) obično pada s povećanjem kompleksnosti modela, dok se varijanca povećava s kompleksnosti modela

Dekompozicija prediktivne pogreške: Pristranost i varijanca modela

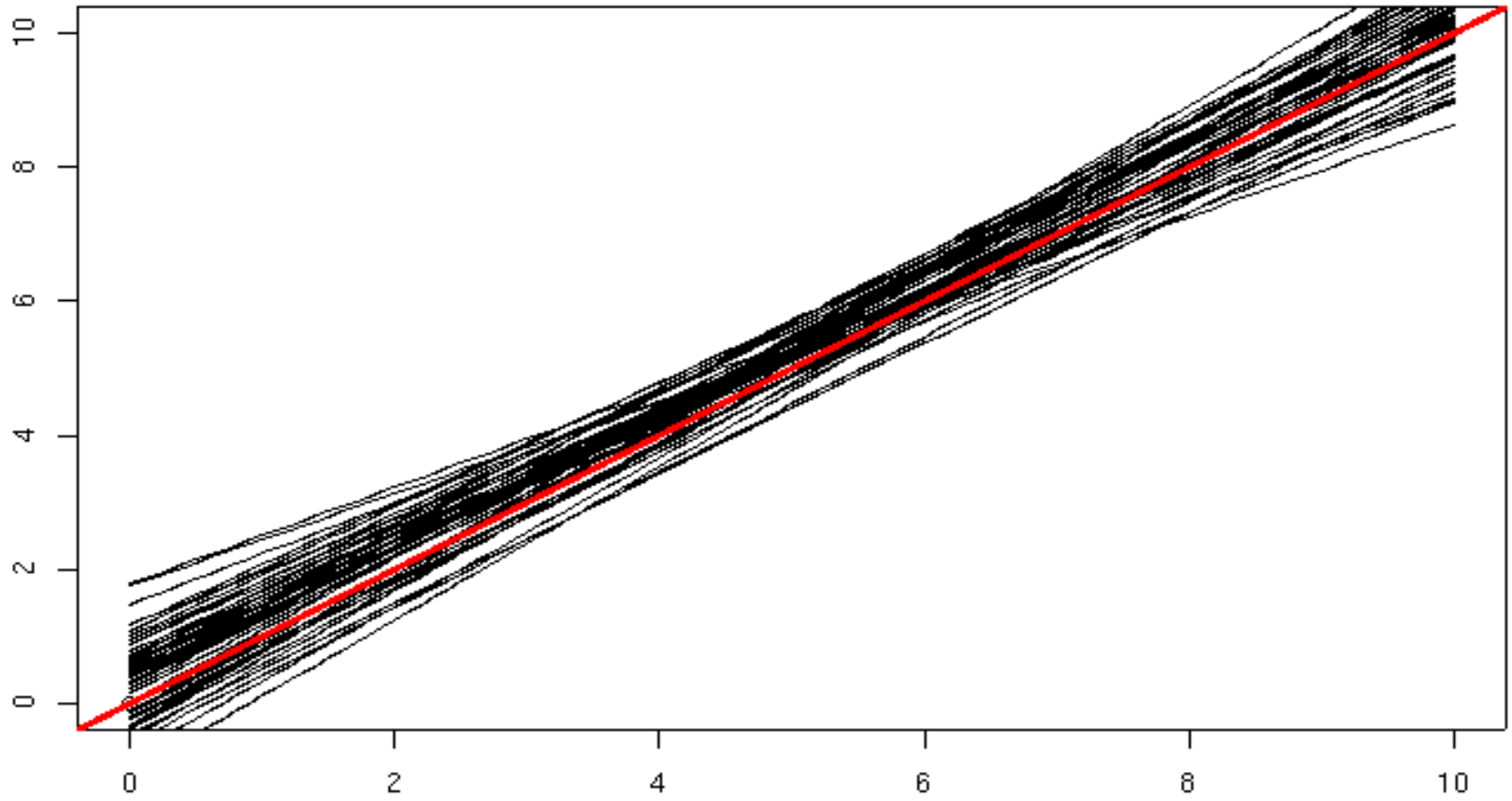
Mjerenje pristranosti (bias) i varijance

- Pristranosti i varijanca – definirani su kao očekivanja !
- Da bi se odredili moramo simulirati velik broj skupova *T*
- Na taj način možemo odrediti i velik broj modela – te ih iskoristiti za određivanje prosječnih vrijednosti

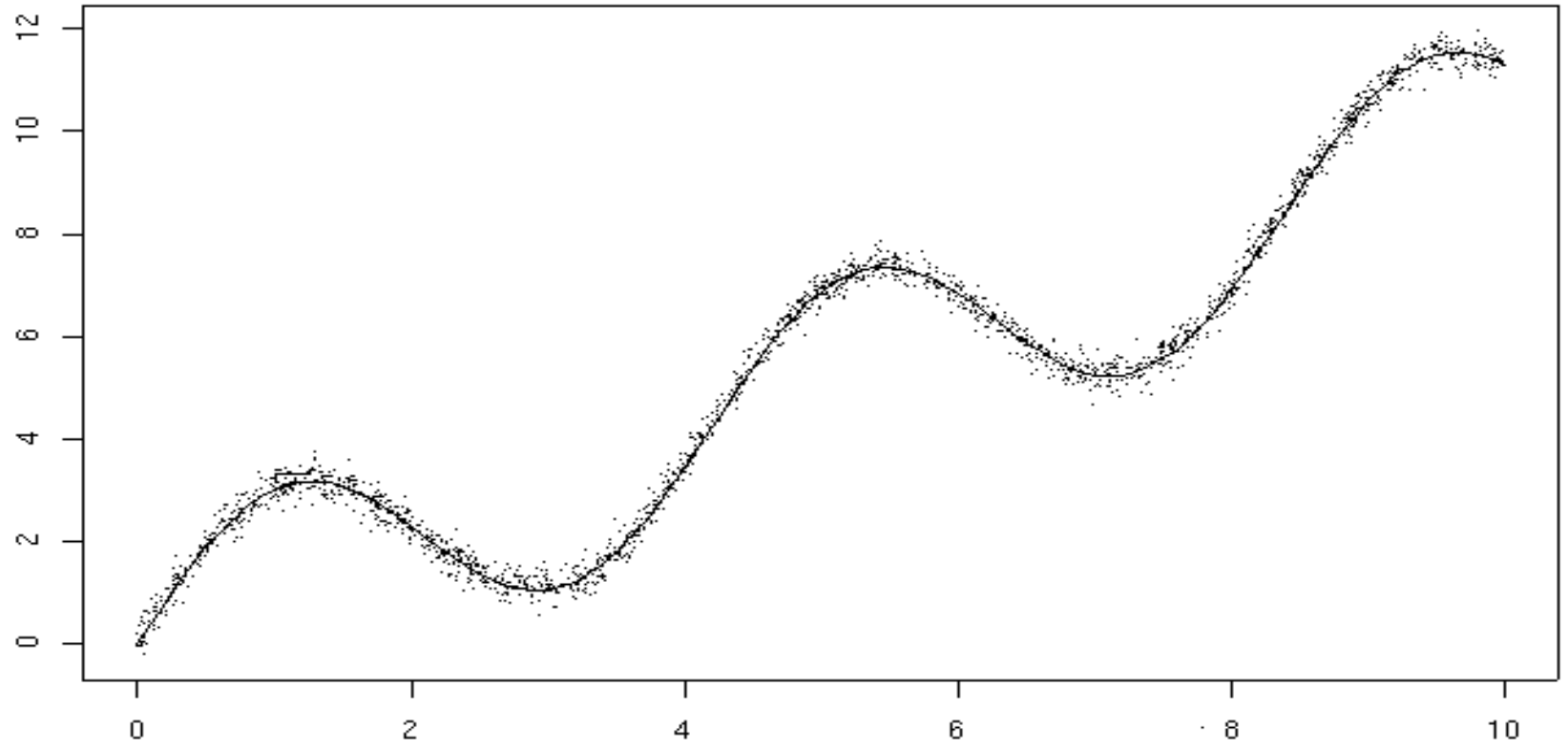
Pristranost modela (Bias)



Varijanca



Šum



Bootstrap pristup

1 Uz dani skup podataka *D,* odvojimo (1/3) podataka u skup za testiranje (D_h – hold-out set), a preostale ostavimo u D_t ;

2 Iz skupa D_t *(*veličine *N),* konstruiramo tzv. "bootstrap" repliku skupa - D_b , tako da slučajno uzorkujemo *N* primjera iz D_t (uz dozvoljeno višestruko izvlačenje istog primjera!) ;

3 Algoritmom strojnog učenja konstruiramo model h_b , treniranjem na D_b

4 Korištenjem h_b odredimo predikcije na primjerima iz D_h , te odredimo grešku

5 Ovaj proces se tipično ponovi velik broj puta (K>30)

Određivanje pristranosti(bias) i varijance korištenjem bootstrap uzoraka

1 Za svaki **x** – skup predikcija $h_1(\boldsymbol{x}), h_2(\boldsymbol{x}), \ldots, h_K(\boldsymbol{x})$

Prosječna predikcija:

$$\bar{h}(\mathbf{x}) = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} h_k(\mathbf{x})$$

2 Bias :

$$Bias(\mathbf{x}) = y - \bar{h}(\mathbf{x})$$

3 Varijanca:

$$Varijanca(\mathbf{x}) = \frac{1}{K-1}\sum_{k=1}^{K} (h(\mathbf{x}) - \bar{h}(\mathbf{x}))^2$$

Literatura:

- The Elements of Statistical Learning
  Hastie, Tibshirani, Friedman (ch. 15)

- Introduction to Machine Learning
  E. Alpaydin (ch. 19)

- AI – Modern approach
  Russel & Norvig (ch 18.4)