Curs 5-6:

Clasificarea datelor (II)

Structura

- Clasificatori bazaţi pe modele probabiliste
- Clasificatori bazaţi pe reţele neuronale
- Clasificatori bazaţi pe vectori suport

Modele probabiliste de clasificare

Exemplu: Presupunem că ne interesează să estimăm probabilitatea ca un pacient care are simptomul S să aibă boala T

- Probabilitatea de estimat: P(T|S) = probabilitatea evenimentului T condiţionată de evenimentul S

- Presupunem că se cunosc:

  - P(S) – dacă simptomul este prezent se poate considera P(S)=1 (evidence)
  - P(T) – estimată pe baza unor analize preliminare (e o măsură a frecvenţei de apariţie a bolii) (prior)
  - P(S|T) – se estimează pe baza cunoştinţelor medicale (cât de frecvent este simptomul S în cazul bolii T) (likelihood)

- Regula de calcul (regula probabilităţii condiţionate – formula lui Bayes):

  $P(T|S)=P(S|T)P(T)/P(S)$

- Cum se analizează cazul în care nu e un singur simptom S, ci mai multe simptome $S_1,S_2,\ldots,S_n$?

Modele probabiliste de clasificare

Exemplu: Presupunem că ne interesează să estimăm probabilitatea ca un pacient care are simptomele $S_1,S_2,\ldots,S_n$ să aibă boala T

- Probabilitatea de estimat: $P(T| S_1,S_2,\ldots,S_n)$
- Se foloseşte regula Bayes:
  - $P(T| S_1,S_2,\ldots,S_n)=P(S_1,S_2,\ldots,S_n|T)P(T)/P(S_1,S_2,\ldots,S_n)$
- Ipoteză simplificatoare: simptomele $(S_1,S_2,\ldots,S_n)$ corespund unor evenimente independente (această ipoteză nu este întotdeauna adevărată însă poate fi acceptată în anumite situaţii practice)
- Considerând că $P(S_1,S_2,\ldots,S_n)=1$ (simptomele sunt prezente)

$$P(T| S_1,S_2,\ldots,S_n)=P(S_1|T)\ P(S_2|T)\ldots P(S_n|T)P(T)$$

Clasificatorul Naïve Bayes

Problema de clasificare:

- Pentru o dată $D_i=(a_{i1},a_{i2},\ldots,a_{in})$ se pune problemă determinării clasei căreia îi aparţine

Ideea principală

- Estimează $P(C_k| D_i)=P(a_{i1},a_{i2},\ldots,a_{in}|C_k)P(C_k)/ P(a_{i1},a_{i2},\ldots,a_{in})$ pt fiecare k din {1,2,…,K} şi selectează probabilitatea maximă; aceasta va indica cărei clase îi aparţine, cel mai probabil data

- Ipoteză simplificatoare: atributele sunt independente (acesta este motivul pentru care clasificatorul este denumit "naiv")

- $P(C_k| D_i)= P(a_{i1}|C_k)\ P(a_{i2}|C_k)\ldots P(a_{in}|C_k)P(C_k)$

- Estimarea probabilităţii de clasificare necesită cunoaşterea lui $P(a_{i1}|C_k)$, $P(a_{i2}|C_k)$, …, $P(a_{in}|C_k)$ şi $P(C_k)$
- Aceste probabilităţi pot estimate pe baza setului de date (ca frecvenţe relative) – această estimare corespunde procesului de învăţare specific clasificatorului Naïve Bayes

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no

P(C1)=P(no)=5/14 P(C2)= P(yes)=9/14

A1: outlook

P(sunny|C1)=P(sunny,C1)/P(C1)
=(3/14)/(5/14)=3/5

P(sunny|C2)=P(sunny,C2)/P(C2)
=(2/14)/(9/14)=2/9

P(overcast|C1)=P(overcast,C1)/P(C1)
=0

P(overcast|C2)=P(overcast,C2)/P(C2)
=(4/14)/(9/14)=4/9

P(rainy|C1)=P(rainy,C1)/P(C1)
=(2/14)/(5/14)=2/5

P(rainy|C2)=P(rainy,C2)/P(C2)
=(3/14)/(9/14)=3/9

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no

P(C1)=P(no)=5/14 P(C2)= P(yes)=9/14

A2: temperature

P(hot|C1)=P(hot,C1)/P(C1)=2/5

P(hot|C2)=P(hot,C2)/P(C2)=2/9

P(mild|C1)=P(mild,C1)/P(C1)=2/5

P(mild|C2)=P(mild,C2)/P(C2)=4/9

P(cool|C1)=P(cool,C1)/P(C1)
=(2/14)/(5/14)=1/5

P(cool|C2)=P(cool,C2)/P(C2)=2/9

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no

P(C1)=P(no)=5/14 P(C2)= P(yes)=9/14

A3: humidity

P(high|C1)=P(high,C1)/P(C1)=4/5

P(high|C2)=P(high,C2)/P(C2)=3/9

P(normal|C1)=P(normal,C1)/P(C1)=1/5

P(normal|C2)=P(normal,C2)/P(C2)=6/9

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no

P(C1)=P(no)=5/14 P(C2)= P(yes)=9/14

A4: windy

P(FALSE|C1)=P(FALSE,C1)/P(C1)=2/5

P(FALSE|C2)=P(FALSE,C2)/P(C2)=6/9

P(TRUE|C1)=P(TRUE,C1)/P(C1)=3/5

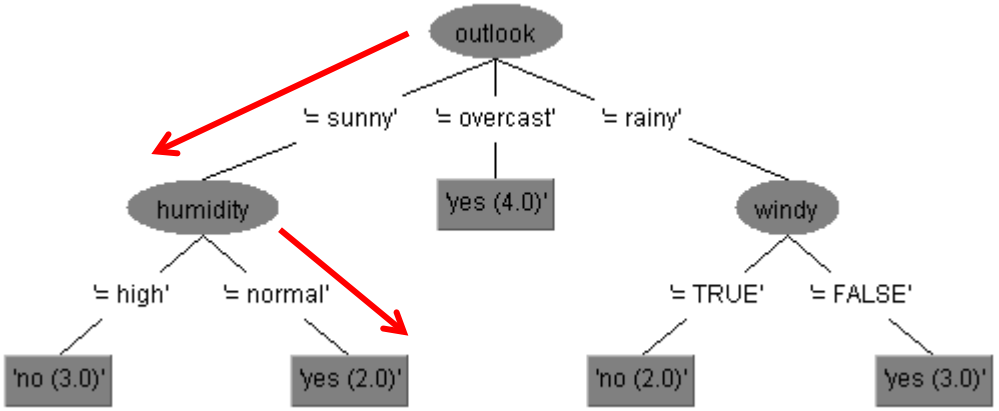
P(TRUE|C2)=P(TRUE,C2)/P(C2)=3/9

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no



D=(outlook=sunny, temperature=mild, humidity=normal, windy=False)
P(C1|D)=P(sunny|C1)*P(mild|C1)*P(normal|C1)*P(FALSE|C1)*P(C1)/P(D)=
=3/5*2/5*1/5*2/5*5/14/P(D)=6/125

P(C2|D)=P(sunny|C2)*P(mild|C2)*P(normal|C2)*P(FALSE|C2)*P(C2)/P(D)=
=2/9*4/9*6/9*6/9*9/14/P(D)=144/729 ➔ yes

Clasificatorul Naïve Bayes

Exemplu:

Relation: weather.symbolic

No.	outlook Nominal	temperature Nominal	humidity Nominal	windy Nominal	**play** Nominal
1	sunny	hot	high	FALSE	no
2	sunny	hot	high	TRUE	no
3	overcast	hot	high	FALSE	yes
4	rainy	mild	high	FALSE	yes
5	rainy	cool	normal	FALSE	yes
6	rainy	cool	normal	TRUE	no
7	overcast	cool	normal	TRUE	yes
8	sunny	mild	high	FALSE	no
9	sunny	cool	normal	FALSE	yes
10	rainy	mild	normal	FALSE	yes
11	sunny	mild	normal	TRUE	yes
12	overcast	mild	high	TRUE	yes
13	overcast	hot	normal	FALSE	yes
14	rainy	mild	high	TRUE	no

Obs: dacă pt o anumită valoare de atribut (a_{ij}) şi o anumită clasă C_k nu există exemplu în setul de antrenare, atunci $P(a_{ij}| C_k)=0$ şi (datorită ipotezei de independenţă) pt orice instanţă având valoarea a_{ij} pt atributul A_i , probabilitatea să aparţină clasei C_k este 0.

Această situaţie poate să apară în special în cazul claselor mici.

Tratarea acestor situaţii prin regula de “netezire de tip Laplace”:

$P(a_{ij}| C_k)=(count(a_{ij},C_k)+alpha)/(count(C_k)+m_i*alpha)$
alpha = parametru de netezire Laplace
m_i= nr de valori distincte ale atributului A_i

Clasificatorul Naïve Bayes

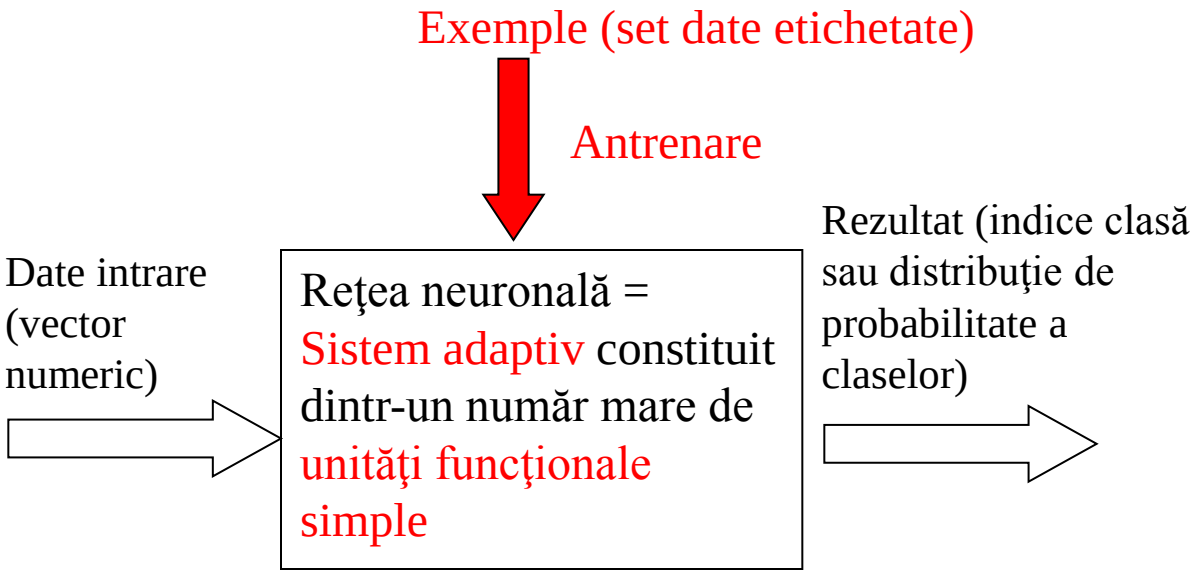
Obs:

- Acest model poate fi aplicat direct atributelor discrete şi se bazează pe unul din următoarele modele probabiliste:
  - Binomial
  - Multinomial
- In cazul atributelor numerice care iau valori într-un domeniu continuu există două abordări principale:
  - Atributele sunt discretizate înainte de utilizarea clasificatorului (performanţa acestuia depinde de procesul de discretizare)
  - Se folosesc modele probabiliste continue (e.g. Gaussian) cu parametri estimaţi pe baza setului de antrenare

Retele neuronale artificiale

Particularităţi:

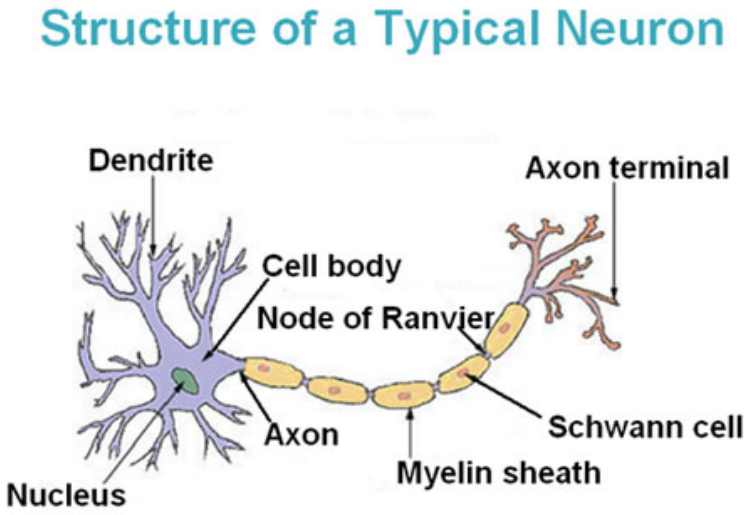
- Sunt clasificatori de tip black-box = permit predicţia clasei dar nu furnizează reguli explicite de clasificare (nu posedă modul explicativ)

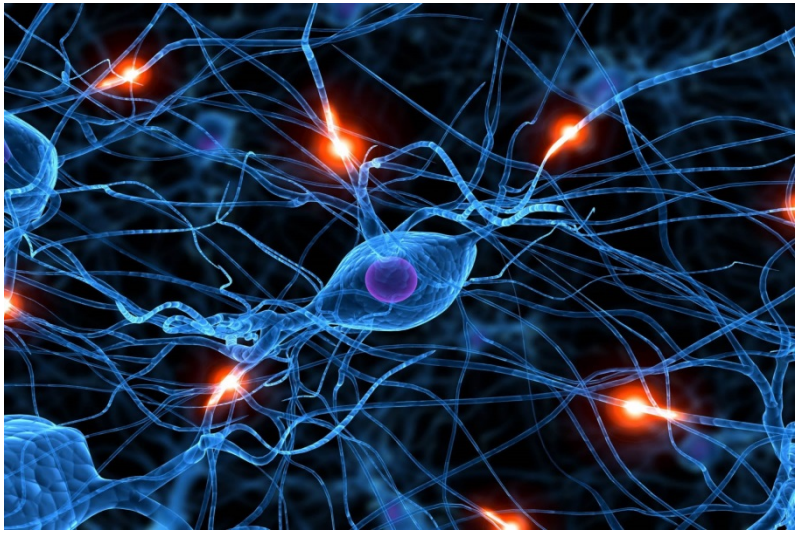


Retele neuronale – modelul biologic

Particularităţi:

- Inspirate iniţial de structura şi funcţionarea creierului = sistem de neuroni interconectaţi
- Creier = 10^{10} neuroni si 10^{14} sinapse





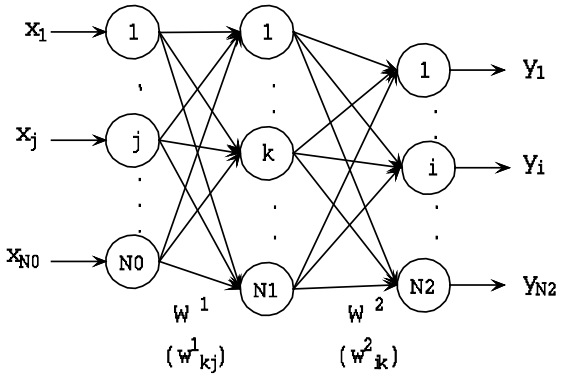
Retele neuronale artificiale

- RNA = set de neuroni artificiali (unităţi functionale) interconectaţi
  - Fiecare neuron primeşte mai multe semnale de intrare si produce un semnal de ieşire
  - RNA primeşte un vector de intrare (prin neuronii de intrare) şi produce un vector de ieşire (prin neuronii de ieşire)
- Aspecte ale unei RNA:
  - Arhitectura = graf orientat etichetat; fiecare arc are asociată o pondere numerică care modelează permeabilitatea sinaptică
  - Funcţionare = procesul prin care RNA transformă un vector de intrare într-un vector de ieşire
  - Antrenare = procesul prin care sunt stabilite valorile ponderilor sinaptice şi ale altor parametri ai reţelei)

Retele neuronale artificiale

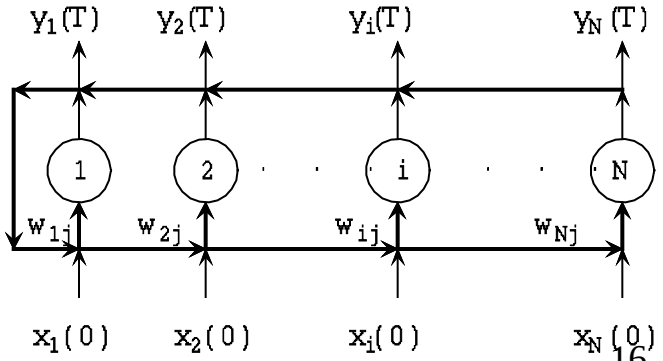
Principalele tipuri de arhitecturi:

- Feed-forward:
  - Graful suport nu conţine cicluri (neuronii sunt de obicei plasaţi pe mai multe nivele)
  - Semnalul de ieşite poate fi calculat prin compunerea unor funcţii de agregare şi de activare (transfer)
- Recurentă:
  - Graful suport conţine cicluri
  - Semnalul de ieşire este calculat prin simularea unui sistem dinamic (proces iterativ)



Feed-forward (multilayer perceptron)

RNA recurentă (reţea complet interconectată)



16

Retele neuronale artificiale

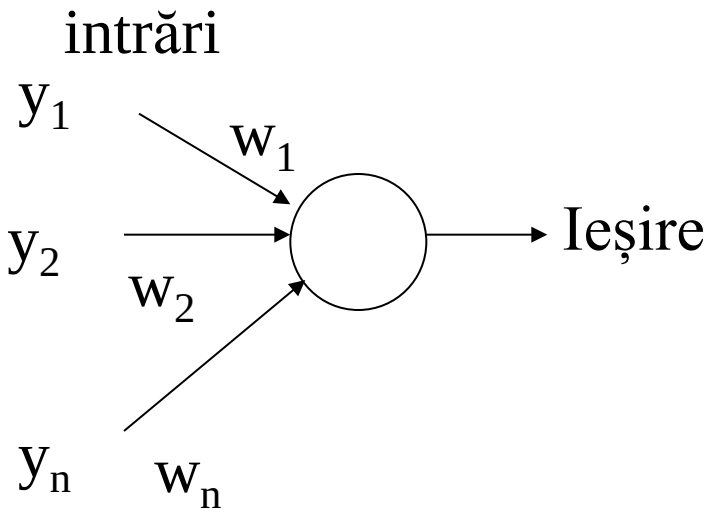
Proiectarea unei RNA:

- Alegerea arhitecturii: număr de nivele, număr de unităţi pe fiecare nivel, funcţii de activare, tip interconectare
- Antrenare: determinarea valorilor ponderilor folosind un set de antrenare şi un algoritm de învăţare
- Validare/testare: analiza comportamentului reţelei pentru exemple care nu fac parte din setul de antrenare

Obs:

- Pt o problema de clasificare a unor date N-dimensionale in M clase reţeaua ar trebui să aibă:
  - N unităţi de intrare
  - M unităţi de ieşire
- Modelul de clasificare este incorporat în ponderile sinaptice

Rețele neuronale artificiale



w_1,w_2, ...:
Ponderi numerice atașate conexiunilor

Rețea neuronală artificială = ansamblu de unități simple de prelucrare (neuroni) interconectate

Unitate funcțională: mai multe intrări, o ieșire (model computațional simplificat al neuronului)

Notații:

semnale de intrare: $y_1,y_2,\ldots,y_n$

ponderi sinaptice: $w_1,w_2,\ldots,w_n$

(modelează permeabilitatea sinaptică)

prag (bias): b (sau w_0)

(modelează pragul de activare al neuronului)

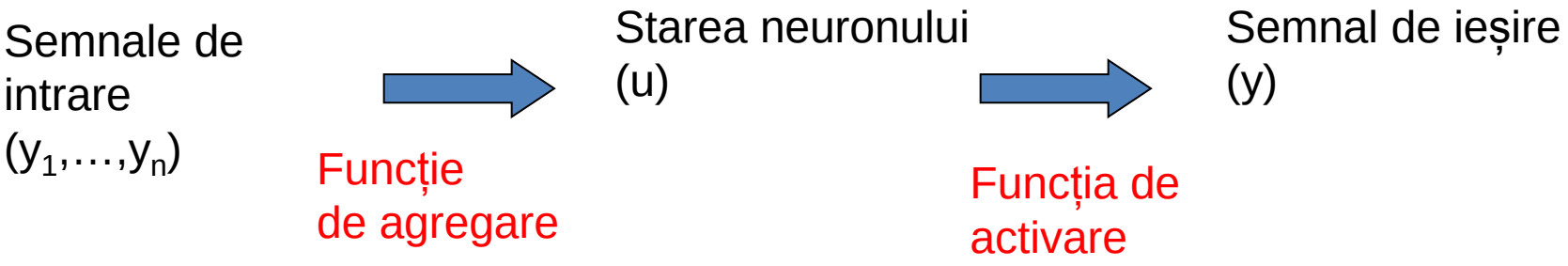
ieșire: y

Obs: Toate valorile sunt numere reale

Unități funcționale

Generarea semnalului de ieșire:

- Se “combină” semnalele de intrare utilizând ponderile sinaptice și pragul de activare
  - Valoarea obținută modelează potențialul local al neuronului
  - Combinarea semnalelor de intrare în unitate se realizează printr-o funcție de agregare (integrare)
- Se generează semnalul de ieșire aplicand o funcție de activare (transfer)
  - corespunde generării impulsurilor de-a lungul axonului



Unități funcționale

Exemple de funcții clasice de agregare

Suma ponderată

$$u = \sum_{j=1}^{n} w_j y_j - w_0$$

Distanța euclidiană

$$u = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} (w_j - y_j)^2}$$

$$u = \prod_{j=1}^{n} y_j^{w_j}$$

Neuron multiplicativ

$$u = \sum_{j=1}^{n} w_j y_j + \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij} y_i y_j + \ldots$$

Conexiuni de ordin superior

Observatie: pentru varianta cu suma ponderată se poate asimila pragul cu o pondere sinaptică corespunzătoare unei intrări fictive (cu valoare -1) astfel că starea neuronului poate fi exprimată prin suma ponderată:

$$u = \sum_{j=0}^{n} w_j y_j$$

Unități funcționale

Exemple de funcții de activare (transfer)

$$f(u) = \text{sgn}(u) = \begin{cases} -1 & u \le 0 \\ 1 & u > 0 \end{cases}$$

signum

$$f(u) = H(u) = \begin{cases} 0 & u \le 0 \\ 1 & u > 0 \end{cases}$$

Heaviside

$$f(u) = \begin{cases} -1 & u < -1 \\ u & -1 \le u \le 1 \\ 1 & u > 1 \end{cases}$$

rampă

$$f(u) = u$$

liniară

$$f(u) = \max\{0, u\}$$

Semi-liniară (rectified linear unit - ReLU)

Obs: utilizate în rețelele cu structură adâncă (Deep NN)

Unități funcționale

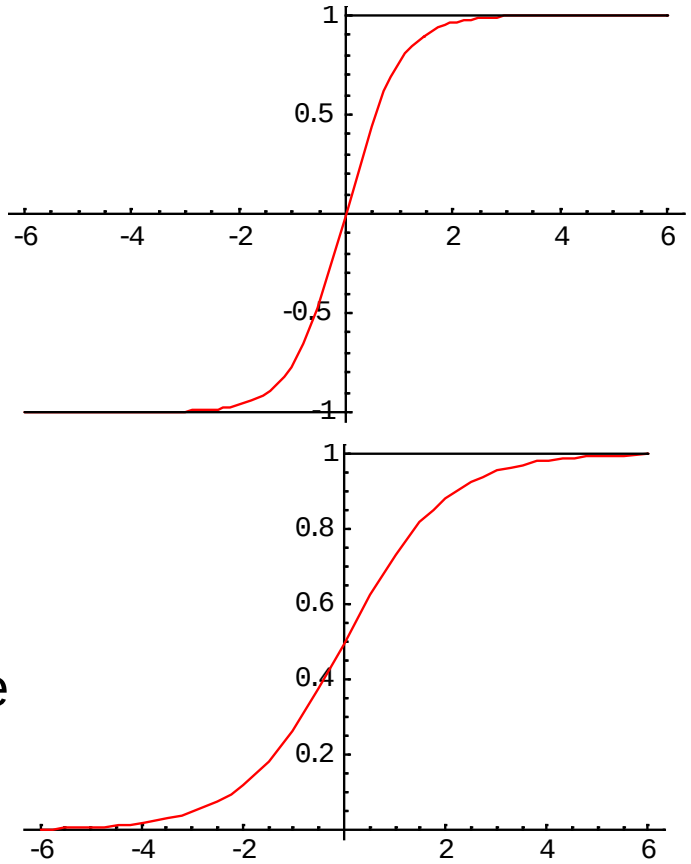
Exemple de funcții de activare (funcții sigmoidale)

(tangenta hiperbolică)

$$f(u) = \tanh(u) = \frac{\exp(2u) - 1}{\exp(2u) + 1}$$

$$f(u) = \frac{1}{1 + \exp(-u)}$$

(logistică)



Observație: uneori se folosește un parametru numit pantă (slope) care multiplică argumentul funcției de activare: y=f(p*u)

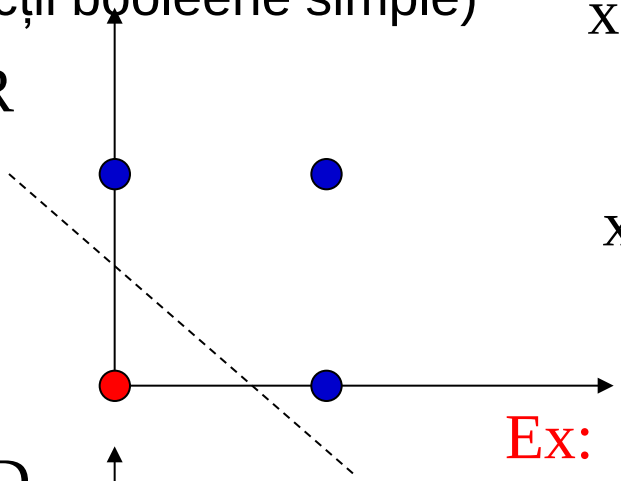
Unități funcționale

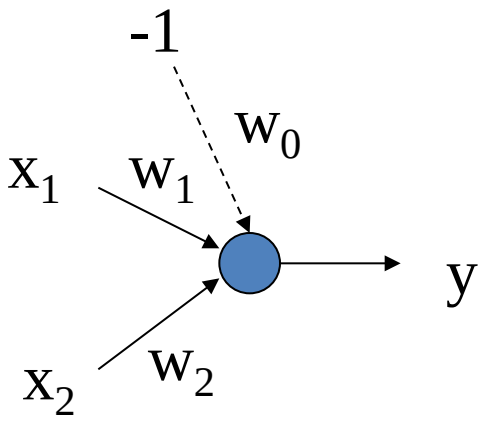
- Ce se poate face cu un singur neuron ?

Se pot rezolva probleme simple de clasificare (ex: se pot reprezenta funcții booleene simple)

	0	1
0	0	1
1	1	1

OR



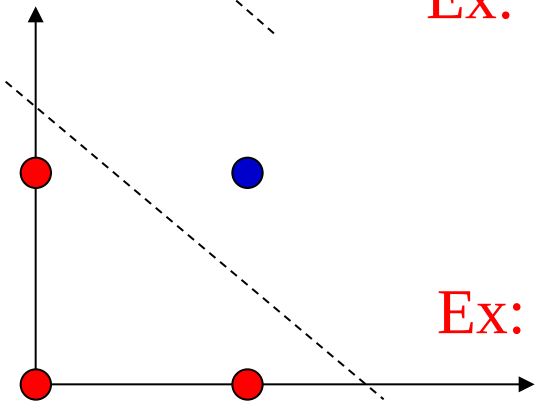


$y=H(w_1x_1+w_2x_2-w_0)$

Ex: $w_1=w_2=1$, $w_0=0.5$

	0	1
0	0	0
1	0	1

AND

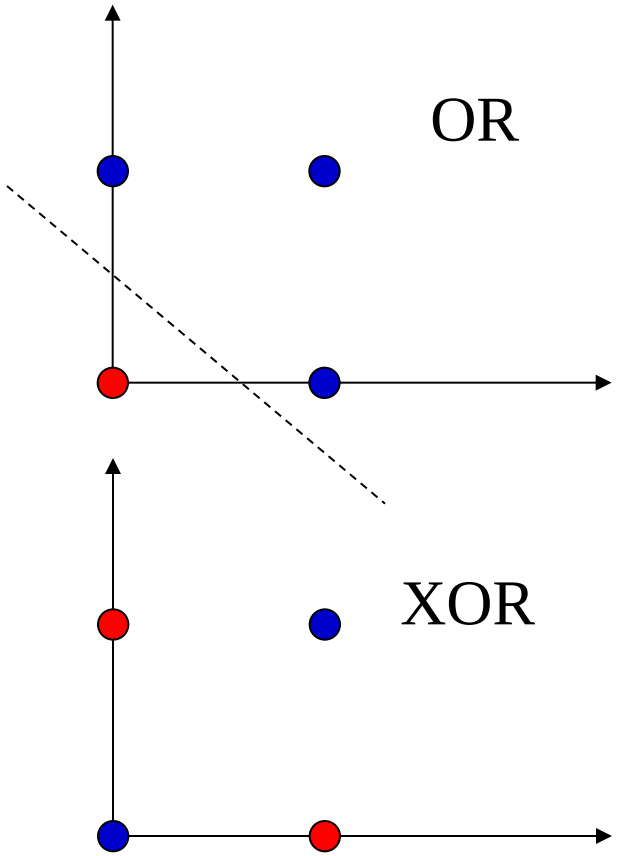


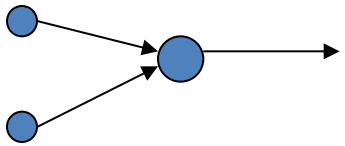
$y=H(w_1x_1+w_2x_2-w_0)$

Ex: $w_1=w_2=1$, $w_0=1.5$

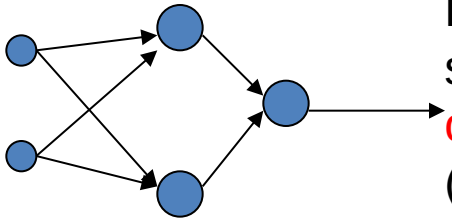
Liniar/neliniar separabilitate

Reprezentarea unor funcții booleene: $f:\{0,1\}^N \rightarrow \{0,1\}$





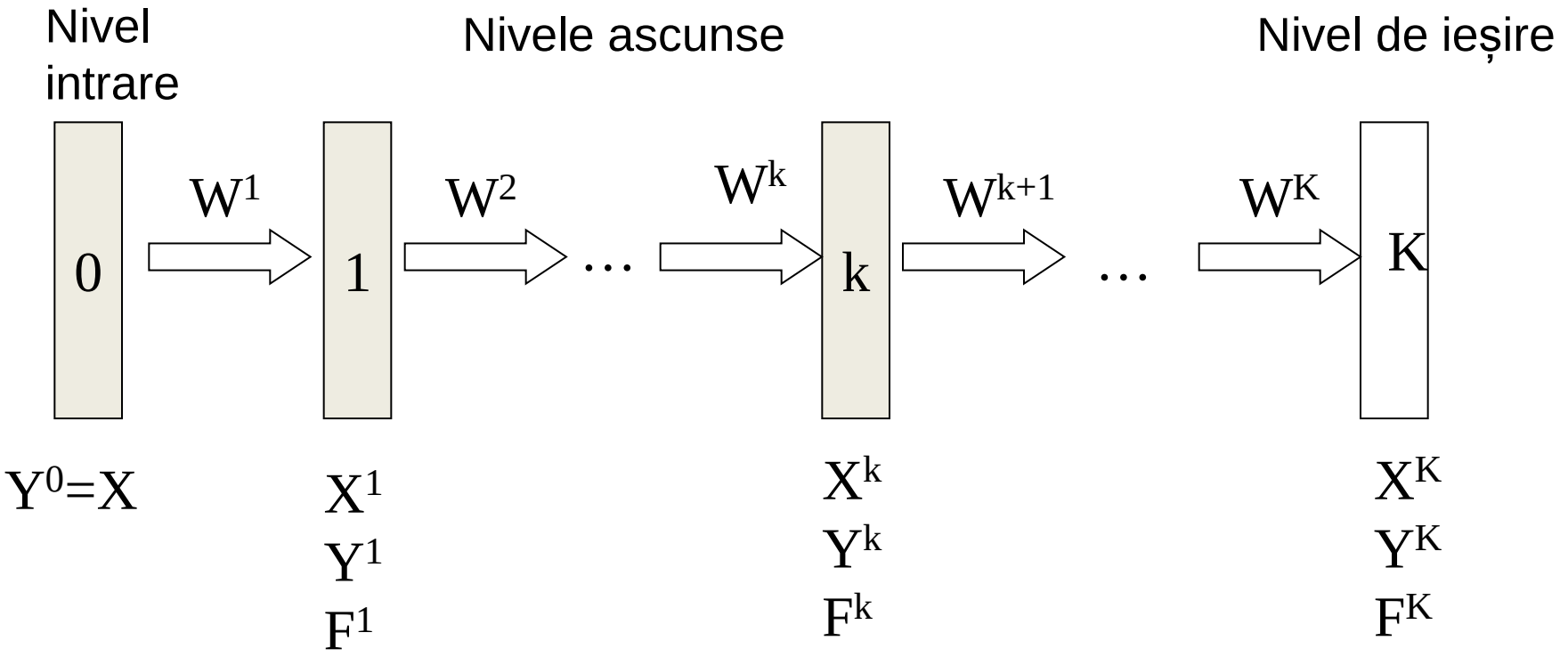
Problema liniar separabilă – e suficientă o rețea uninivel



Problema neliniar separabilă – e necesară o rețea multinivel (cel puţin un nivel ascuns)

Rețele feedforward - arhitectura

Arhitectura și funcționare (K nivele funcționale)



X = vector intrare, Y= vector ieșire, F=funcție vectorială de activare

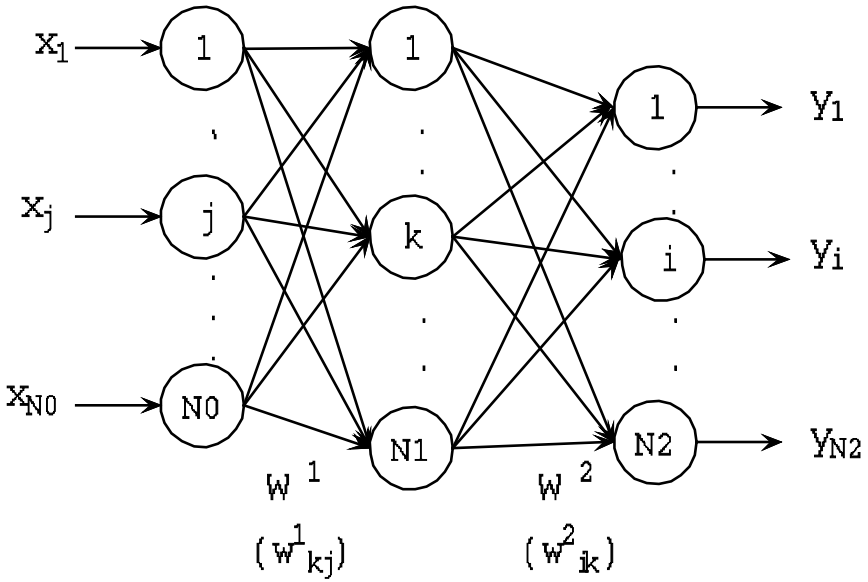
Calcul vector de ieșire: $Y=F^K(W^K*F^{K-1}(W^{K-1}*F^{K-2}(.....F^1(W^1*X))))$

Rețele feedforward – funcționare

Arhitectura și funcționare

(caz particular: un nivel ascuns)

Parametrii modelului: matricile cu ponderi W^1 si W^2 (setul tuturor ponderilor e notat cu W)



$$y_i = f_2\left(\sum_{k=0}^{N_1} w^{(2)}{}_{ik}\, f_1\left(\sum_{j=0}^{N_0} w^{(1)}{}_{kj}\, x_j\right)\right),\ i = 1..N_2$$

Obs:

- în mod tradițional se lucrează cu unul sau două nivele ascunse
- În ultimii ani au devenit din ce în ce mai folosite rețelele cu număr mare de nivele (Deep Neural Networks) folosite în particular pentru recunoașterea imaginilor și a vorbirii (http://deeplearning.net)

Rețele feedforward - antrenare

Antrenare (supervizată):

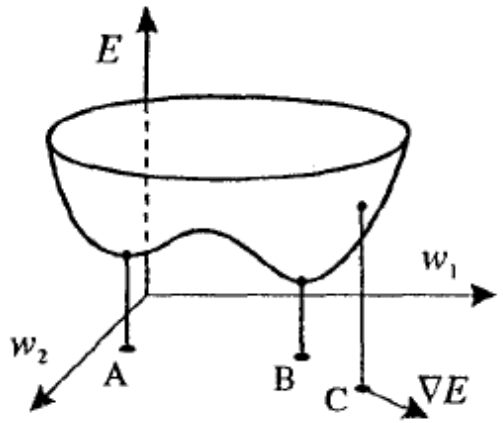
- Set de antrenare: $\{(x^1,d^1), \ldots, (x^L,d^L)\}$

  (x^l = vector intrare, d^l = vector de ieșire corect)

- Funcție de eroare (suma pătratelor erorilor):

$$E(W) = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{L}\sum_{i=1}^{N2}\left(d_i^l - f_2\left(\sum_{k=0}^{N1} w_{ik} f_1\left(\sum_{j=0}^{N0} w_{kj} x_j^l\right)\right)\right)^2$$

- Scopul antrenării: minimizarea funcției de eroare
- Metoda de minimizare: metoda gradientului



Rețele feedforward - antrenare

Relația de ajustare (metoda gradientului):

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) - \eta \frac{\partial E(w(t))}{\partial w_{ij}}$$

Pas descreștere = Rata de învățare

Functia de eroare:

$$E(W) = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{L} \sum_{i=1}^{N2} \left(d_i^l - f_2 \left(\sum_{k=0}^{N1} w_{ik} f_1 \underbrace{\left(\sum_{j=0}^{N0} w_{kj} x_j^l \right)}_{x_k} \right) \right)^2$$

y_k

x_i

y_i

Notații:

$E_l(W)$ (eroarea corespunzatoare exemplului l)

Rețele feedforward - antrenare

- Calculul derivatelor partiale

$$E(W) = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{L}\sum_{i=1}^{N2}\left(d_i^l - f_2\left(\sum_{k=0}^{N1} w_{ik}\, f_1\left(\sum_{j=0}^{N0} w_{kj} x_j^l \right) \right) \right)^2$$

x_k

y_k

x_i

y_i

$$\frac{\partial E_l(W)}{\partial w_{ik}} = -(d_i^l - y_i)\, f_2'(x_i)\, y_k = -\delta_i^l y_k$$

$$\frac{\partial E_l(W)}{\partial w_{kj}} = -\sum_{i=1}^{N2} w_{ik}(d_i^l - y_i)\, f_2'(x_i)\, f_1'(x_k) x_j^l = -\left(f_1'(x_k)\sum_{i=1}^{N2} w_{ik}\delta_i^l \right) x_j = -\delta_k^l x_j^l$$

Obs: δ_i reprezintă o măsură a erorii corespunzătoare unității de ieșire i iar δ_k reprezintă eroarea de la nivelul unității ascuns k (obținut prin propagarea înapoi in rețea a erorii de la nivelul de ieșire)

Rețele feedforward - antrenare

$$\frac{\partial E_l(W)}{\partial w_{ik}} = -(d_i^l - y_i) f_2^{'}(x_i) y_k = -\delta_i^l y_k$$

$$\frac{\partial E_l(W)}{\partial w_{kj}} = -\sum_{i=1}^{N2} w_{ik}(d_i^l - y_i) f_2^{'}(x_i) f_1^{'}(x_k) x_j^l = -\left(f_1^{'}(x_k) \sum_{i=1}^{N2} w_{ik} \delta_i^l \right) x_j = -\delta_k^l x_j^l$$

Obs: derivatele funcțiilor tradiționale de activare (logistica și tanh) pot fi calculate simplu folosind următoarele proprietăți:

Logistica: f'(x)=f(x)(1-f(x)) => f'(x)=y(1-y)

Tanh: $f'(x)=1-f(x)^2 \Rightarrow f'(x)=1-y^2$

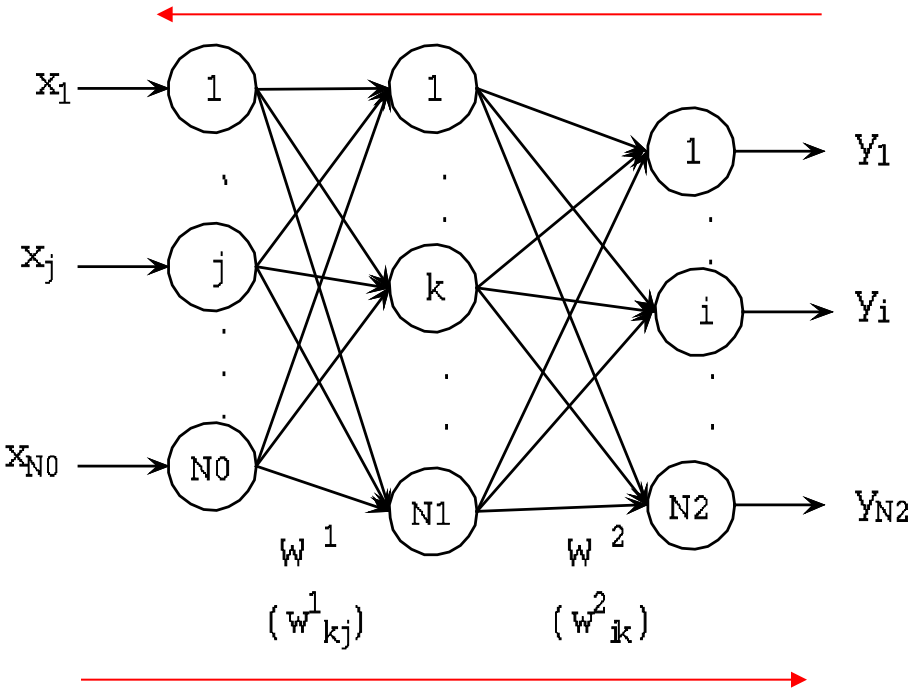
Algoritmul BackPropagation

Idee:

Pentru fiecare exemplu din setul de antrenare:

- se determină semnalul de ieșire
- se calculează eroarea la nivelul de ieșire
- se propagă eroarea înapoi în rețea și se reține factorul delta corespunzător fiecărei ponderi
- se aplică ajustarea corespunzătoare fiecărei ponderi

Calcul semnal eroare (BACKWARD)



Calcul semnal ieșire (FORWARD)

Algoritmul BackPropagation

Inițializarea aleatoare a ponderilor

REPEAT

epoca

- FOR l=1,L DO
  - etapa FORWARD
  - etapa BACKWARD
  - ajustare ponderi
- Recalcularea erorii

UNTIL <condiție oprire>

Obs.

- Valorile inițiale se aleg aleator in [0,1] sau [-1,1]
- La ajustare se ține cont de rata de învățare
- Recalcularea erorii presupune determinarea semnalului de ieșire pentru fiecare dată de intrare
- Condiția de oprire depinde de valoarea erorii și/sau numărul de epoci de antrenare

Algoritmul BackPropagation

Varianta serială

$w_{kj}^1 = rand(-1,1), w_{ik}^2 = rand(-1,1)$

$p = 0$

REPEAT

FOR $l = 1, L$ DO

/ * Etapa FORWARD * /

$$x_k^l = \sum_{j=0}^{N0} w_{kj}^1 x_j^l,\ y_k^l = f_1(x_k^l),\ x_i^l = \sum_{k=0}^{N1} w_{ik}^2 y_k^l,\ y_i^l = f_2(x_i^l)$$

/ * Etapa BACKWARD * /

$$\delta_i^l = f_2^{'}(x_i^l)(d_i^l - y_i^l),\ \delta_k^l = f_1^{'}(x_k^l)\sum_{i=1}^{N2} w_{ik}^2 \delta_i^l$$

/ * Etapa de ajustare * /

$$w_{kj}^1 = w_{kj}^1 + \eta \delta_k^l x_j^l,\ \ w_{ik}^2 = w_{ik}^2 + \eta \delta_i^l y_k^l$$

ENDFOR

Obs. varianta "stochastic gradient descent" se caracterizeaza prin parcurgerea in ordine aleatoare a exemplelor din setul de antrenare

Algoritmul BackPropagation

/ * Calculul erorii * /

$E = 0$

FOR $l = 1, L$ DO

/ * Etapa FORWARD (cu noile valori ale ponderilor) * /

$$x_k^l = \sum_{j=0}^{N0} w_{kj}^1 x_j^l,\ y_k^l = f_1(x_k^l),\ x_i^l = \sum_{k=0}^{N1} w_{ik}^2 y_k^l,\ y_i^l = f_2(x_i^l)$$

/ * Sumarea erorii * /

$$E = E + \sum_{l=1}^{L} (d_i^l - y_i^l)^2$$

ENDFOR

$E = E/(2L)$

$p = p + 1$

UNTIL $p > p_{\max}$ OR $E < E^*$

E* reprezintă toleranța la erori a rețelei

p_{max} reprezintă numărul maxim de epoci de antrenare

Algoritmul BackPropagation

Varianta pe blocuri (se bazează pe cumularea ajustarilor)
– batch variant

$$w_{kj}^1 = rand(-1,1), w_{ik}^2 = rand(-1,1),\ i = 1..N2, k = 0..N1,\ j = 0..N0$$

$$p = 0$$

REPEAT

$$\Delta_{kj}^1 = 0, \Delta_{ik}^2 = 0$$

FOR $l = 1, L$ DO

/ * Etapa FORWARD * /

$$x_k^l = \sum_{j=0}^{N0} w_{kj}^1 x_j^l,\ y_k^l = f_1(x_k^l),\ x_i^l = \sum_{k=0}^{N1} w_{ik}^2 y_k^l,\ y_i^l = f_2(x_i^l)$$

/ * Etapa BACKWARD * /

$$\delta_i^l = f_2^{'}(x_i^l)(d_i^l - y_i^l),\ \delta_k^l = f_1^{'}(x_k^l)\sum_{i=1}^{N2} w_{ik}^2 \delta_i^l$$

/ * Etapa de ajustare * /

$$\Delta_{kj}^1 = \Delta_{kj}^1 + \eta \delta_k^l x_j^l,\ \Delta_{ik}^2 = \Delta_{ik}^2 + \eta \delta_i^l y_k^l$$

ENDFOR

$$w_{kj}^1 = w_{kj}^1 + \Delta_{kj}^1,\ w_{ik}^2 = w_{ik}^2 + \Delta_{ik}^2$$

Algoritmul BackPropagation

/ * Calculul erorii * /

$E = 0$

FOR $l = 1, L$ DO

/ * Etapa FORWARD (cu noile valori ale ponderilor) * /

$$x_k^l = \sum_{j=0}^{N0} w_{kj}^1 x_j^l,\ y_k^l = f_1(x_k^l),\ x_i^l = \sum_{k=0}^{N1} w_{ik}^2 y_k^l,\ y_i^l = f_2(x_i^l)$$

/ * Sumarea erorii * /

$$E = E + \sum_{l=1}^{L} (d_i^l - y_i^l)^2$$

ENDFOR

$E = E/(2L)$

$p = p + 1$

UNTIL $p > p_{\max}$ OR $E < E^*$

Variante

Altă funcţie de eroare:

- MSE (eroarea medie pătratică) este mai potrivită pentru problemele de regresie
- In cazul problemelor de clasificare o variantă mai adecvată este entropia încrucişată (cross-entropy error):
- Caz particular: clasificare binară (un neuron de ieşire):
  - d_l aparţine lui {0,1} (0 corespunde clasei 0 şi 1 corespunde clasei 1)
  - y_l aparţine lui (0,1) şi poate fi interpretat ca probabilitatea clasei 1

$$CE(W) = -\sum_{l=1}^{L}(d_l \log y_l + (1-d_l)\log(1-y_l))$$

Obs: forma derivatelor parţiale se schimbă, deci şi termenii utilizaţi în ajustarea ponderilor

Probleme ale algoritmului Backpropagation

P1. Viteza mică de convergență (eroarea descrește prea încet)

P2. Oscilații (valoarea erorii oscilează în loc să descrească în mod continuu)

P3. Problema minimelor locale (procesul de învățare se blochează într-un minim local al funcției de eroare)

P4. Stagnare (procesul de învățare stagnează chiar dacă nu s-a ajuns într-un minim local)

P5. Supraantrenarea și capacitatea limitată de generalizare

Probleme ale algoritmului BP

P1: Eroarea descreşte prea încet sau oscilează în loc să descrească

Cauze:

- Valoare inadecvată a ratei de învățare (valori prea mici conduc la convergența lentă iar valori prea mari conduc la oscilații)

  Soluție: adaptarea ratei de învățare

- Metoda de minimizare are convergență lentă

  Soluții:

  - modificarea euristică a variantei standard (varianta cu moment)
  - utilizarea unei alte metode de minimizare (Newton, gradient conjugat)

Probleme ale algoritmului BP

- Rata adaptivă de învățare:
  - Dacă eroarea crește semnificativ atunci rata de învățare trebuie redusă (ajustările obținute pentru valoarea curentă a ratei sunt ignorate)
  - Daca eroarea descrește semnificativ atunci rata de învățare poate fi mărită (ajustările sunt acceptate)
  - In toate celelalte cazuri rata de învățare rămâne neschimbată

$$E(p) > (1+\gamma)E(p-1) \Rightarrow \eta(p) = a\,\eta(p-1), 0 < a < 1$$
$$E(p) < (1-\gamma)E(p-1) \Rightarrow \eta(p) = b\,\eta(p-1), 1 < b < 2$$
$$(1-\gamma)E(p-1) \le E(p) \le (1+\gamma)E(p-1) \Rightarrow \eta(p) = \eta(p-1)$$

Exemplu: γ=0.05

Probleme ale algoritmului BP

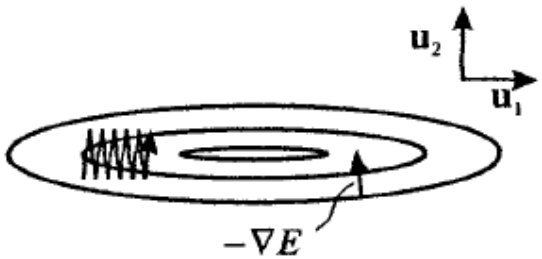
- Varianta cu “moment” (termen de inerție):
  - Se introduce o “inerție” în calculul ponderilor:
    - termenul de ajustare a ponderilor de la epoca curentă se calculează pe baza semnalului de eroare precum și a ajustărilor de la epoca anterioară
  - Acționează ca o adaptare a ratei de învățare: ajustările sunt mai mari în porțiunile plate ale funcției de eroare și mai mici în cele abrupte
  - Se combină cu varianta pe blocuri (batch)

$$\Delta w_{ij}(p+1) = \eta \delta_i y_j + \alpha \Delta w_{ij}(p)$$

$$\alpha = 0.9$$

Probleme ale algoritmului BP

- Varianta cu “moment” (termen de inerție):
  - Se introduce o “inerție” în calculul ponderilor:
    - termenul de ajustare a ponderilor de la epoca curentă se calculează pe baza semnalului de eroare precum și a ajustărilor de la epoca anterioară



Metoda clasică

Utilizarea unui termen de inerţie

Probleme ale algoritmului BP

Alte metode de minimizare (mai rapide însă mai complexe):

- Metoda gradientului conjugat (și variante ale ei)
- Metoda lui Newton (caz particular: Levenberg Marquardt)

Particularități ale acestor metode:

- Convergența rapidă (ex: metoda gradientului conjugat converge în n iterații pentru funcții pătratice cu n variabile)

- Necesită calculul matricii hessiene (matrice conținând derivatele de ordin doi ale funcției de eroare) și uneori a inversei acesteia

Probleme ale algoritmului BP

- Exemplu: metoda lui Newton

$E: R^n \to R,\ w \in R^n$ (vectorul ce contine toate ponderile)

Prin dezvoltare in serie Taylor in $w(p)$ (estimarea corespunzatoare epocii p)

$$E(w) \cong E(w(p)) + (\nabla E(w(p)))^T (w - w(p)) + \frac{1}{2}(w - w(p))^T H(w(p))(w - w(p))$$

$$H(w(p))_{ij} = \frac{\partial^2 E(w(p))}{\partial w_i \partial w_j}$$

Derivand dezvoltarea in serie Taylor in raport cu w si punand conditia de punct critic noua aproximare pentru w se va obtine ca solutie a ec :

$$H(w(p))w - H(w(p))w(p) + \nabla E(w(p)) = 0$$

Noua estimare a lui w va fi :

$$w(p+1) = w(p) - H^{-1}(w(p)) \cdot \nabla E(w(p))$$

Probleme ale algoritmului BP

Caz particular: metoda Levenberg-Marquardt

- Metoda lui Newton adaptată pentru cazul în care eroarea este o sumă de pătrate de diferențe (cum este eroarea medie patratică)

$$E(w) = \sum_{l=1}^{L} E_l(w),\ e: R^n \to R^L, e(w) = (E_1(w),..., E_L(w))^T$$

$$w(p+1) = w(p) - (J^T(w(p)) \cdot J(w(p)) + \mu_p I)^{-1} J^T(w(p)) e(w(p))$$

$J(w) =$ jacobianul lui $e(w) =$ matricea derivatelor lui e in raport cu toate argumentele

$$J_{ij}(w) = \frac{\partial E_i(w)}{\partial w_j}$$

Termen de perturbare care elimina cazurile singulare (cand matricea este neinversabila)

Avantaje:

- Nu necesită calculul hessianei
- Pentru valori mari ale factorului de atenuare ajustarea devine similară celei de la metoda gradientului

Probleme ale algoritmului BP

P2: Problema minimelor locale (procesul de învățare se blochează într-un minim local al funcției de eroare)

Cauza: metoda gradientului este o metodă de minimizare locală

Soluții:

- Se restartează antrenarea de la alte valori inițiale ale ponderilor
- Se introduc perturbații aleatoare (se adaugă la ponderi după aplicarea ajustărilor):

$$w_{ij} := w_{ij} + \xi_{ij}, \quad \xi_{ij} = \text{valori aleatoare uniform sau normal distribuite}$$

Probleme ale algoritmului BP

Soluție:

- Inlocuirea metodei gradientului cu o metodă aleatoare de optimizare
- Inseamnă utilizarea unei perturbații aleatoare în locul celei calculate pe baza gradientului
- Ajustările pot conduce la creșterea valorii erorii

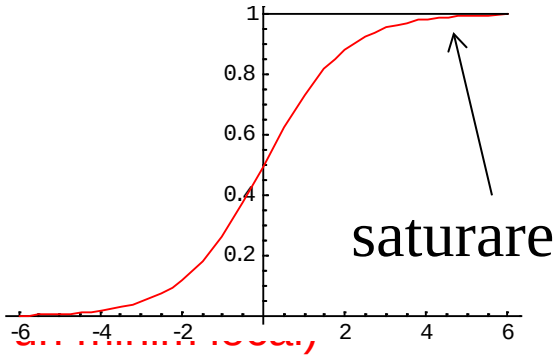
$$\Delta_{ij} := \text{valori aleatoare}$$

$$\text{IF } E(W+\Delta) < E(W) \text{ THEN se accepta ajustare } (W := W + \Delta)$$

Obs:

- Ajustările sunt de regulă generate în conformitate cu repartiția normală de medie 0 și dispersie adaptivă
- Daca ajustarea nu conduce la o descreștere a valorii erorii atunci nu se acceptă deloc sau se acceptă cu o probabilitate mică
- Algoritmii aleatori de minimizare nu garanteaza obținerea minimului dar unii dintre ei satisfac proprietăți de convergență în sens probabilist.

Probleme ale algoritmului BP



- Pb 3: Stagnare

(procesul de învățare stagnează chiar dacă nu s-a ajuns într[illegible])

- Cauza: ajustările sunt foarte mici întrucât se ajunge la argumente mari ale funcțiilor sigmoidale ceea ce conduce la valori foarte mici ale derivatelor; argumentele sunt mari fie datorită faptului ca datele de intrare nu sunt normalizate fie întrucât valorile ponderilor sunt prea mari

- Soluții:
  - Se "penalizează" valorile mari ale ponderilor prin regularizare
  - Se utilizeaza doar semnele derivatelor nu și valorile lor
  - Se normalizează datele de intrare (valori în apropierea intervalului (-1,1))
  - Se utilizează funcții de activare de tip ReLU

Probleme ale algoritmului BP

Penalizarea valorilor mari ale ponderilor: se adaugă un termen de penalizare la funcția de eroare (similar cu tehnicile de regularizare folosite în metodele de optimizare)

$$E_{(r)}(W) = E(W) + \lambda \sum_{i,j} w_{ij}^2$$

Ajustarea va fi:

$$\Delta_{ij}^{(r)} = \Delta_{ij} - 2\lambda w_{ij}$$

Probleme ale algoritmului BP

Utilizarea semnului derivatei nu și a valorii

(Resilient BackPropagation – RPROP)

$$\Delta w_{ij}(p) = \begin{cases} -\Delta_{ij}(p) & \text{if } \frac{\partial E(W(p-1))}{\partial w_{ij}} > 0 \\ \Delta_{ij}(p) & \text{if } \frac{\partial E(W(p-1))}{\partial w_{ij}} < 0 \end{cases}$$

$$\Delta_{ij}(p) = \begin{cases} a\Delta_{ij}(p-1) & \text{if } \frac{\partial E(W(p-1))}{\partial w_{ij}} \cdot \frac{\partial E(W(p-2))}{\partial w_{ij}} > 0 \\ b\Delta_{ij}(p-1) & \text{if } \frac{\partial E(W(p-1))}{\partial w_{ij}} \cdot \frac{\partial E(W(p-2))}{\partial w_{ij}} < 0 \end{cases}$$

$0 < b < 1 < a$

Probleme ale algoritmului BP

Pb 4: Supraantrenare și capacitate limitată de generalizare

Cauze:

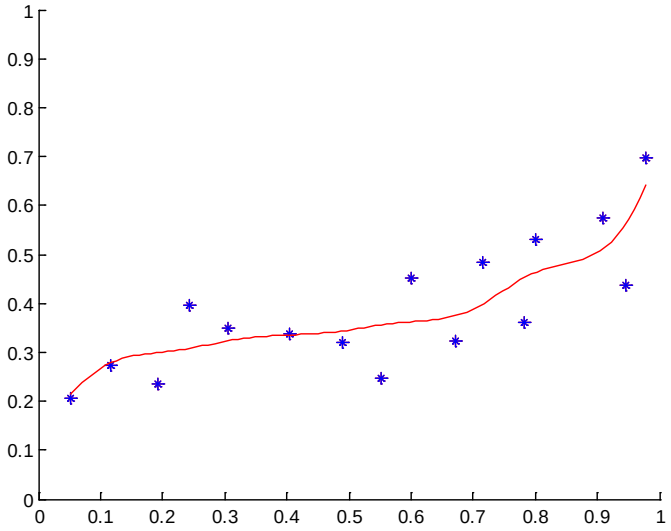
- Arhitectura rețelei (numărul de unitați ascunse)
  - Un număr prea mare de unități ascunse poate provoca supraantrenare (rețeaua extrage nu doar informațiile utile din setul de antrenare ci și zgomotul)
- Dimensiunea setului de antrenare
  - Prea puține exemple nu permit antrenarea și asigurarea capacității de generalizare
- Numărul de epoci (toleranța la antrenare)
  - Prea multe epoci pot conduce la supraantrenare

Soluții:

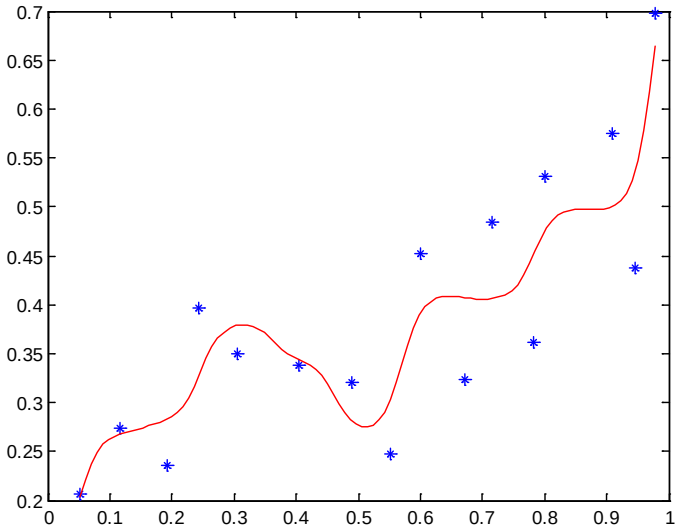
- Modificarea dinamică a arhitecturii
- Criteriul de oprire se bazează nu pe eroarea calculată pentru setul de antrenare ci pentru un set de validare

Probleme ale algoritmului BP

Supraantrenare – influența numărului de unități ascunse



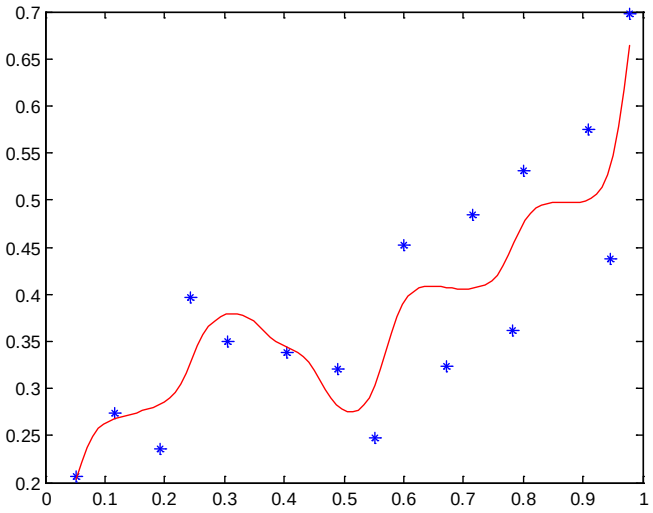
5 unități ascunse



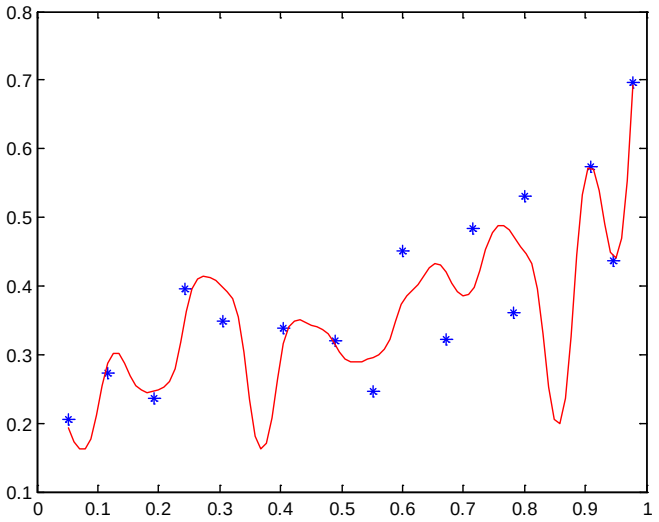
10 unități ascunse

Probleme ale algoritmului BP

Supraantrenare – influența numărului de unități ascunse



10 unități ascunse



20 unități ascunse

Probleme ale algoritmului BP

Modificarea dinamică a arhitecturii:

- Strategie incrementală:
  - Se pornește cu un număr mic de unități ascunse
  - Dacă antrenarea nu progresează se adaugă succesiv unități; pentru asimilarea lor se ajustează în câteva epoci doar ponderile corespunzătoare

- Strategie decrementală:
  - Se pornește cu un număr mare de unități
  - Dacă există unități care au impact mic asupra semnalului de ieșire atunci acestea se elimină

Probleme ale algoritmului BP

Criteriu de oprire bazat pe eroarea pe setul de validare :

- Se imparte setul de antrenare în m părți: (m-1) sunt folosite pentru antrenare și una pentru validare
- Ajustarea se aplică până când eroarea pe setul de validare începe să crească (sugerează că rețeaua începe să piardă din abilitatea de generalizare)

Validare încrucișată:

- Algoritmul de învățare se aplică de m ori pentru cele m variante posibile de selecție a subsetului de validare

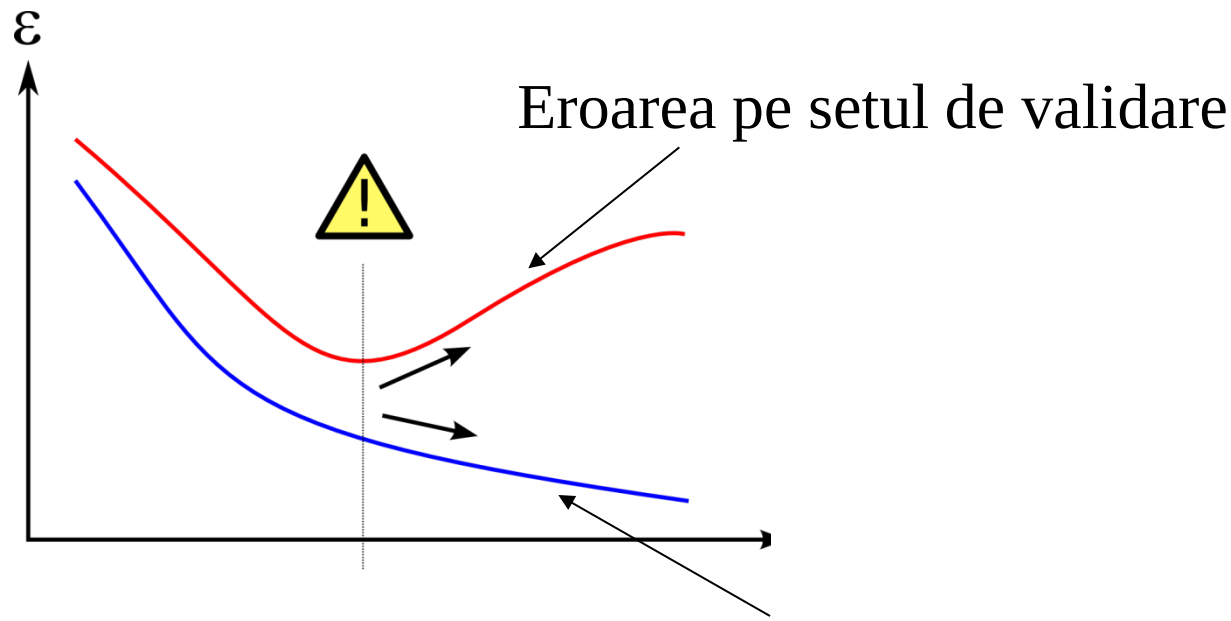
1: S=(S1,S2, ...,Sm)

2: S=(S1,S2, ...,Sm)

....

m: S=(S1,S2, ...,Sm)

Probleme ale algoritmului BP



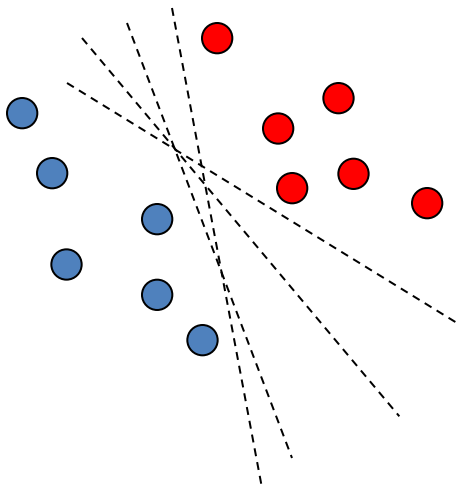
Support Vector Machines

Support Vector Machine (SVM) = tehnică de clasificare caracterizată prin:

- Antrenare bazată pe o metodă de optimizare cu restricţii şi funcţie obectiv pătratică. Obs: se evită problemele ce apar la antrenarea de tip Backpropagation (blocarea în minime locale si supraantrenarea)
- Asigură o bună capacitate de generalizare
- Se bazează pe rezultate teoretice din domeniul analizei statistice a metodelor de învățare (principalii contributori: Vapnik și Chervonenkis)
- Aplicații: recunoaștere scris, identificarea vorbitorului, recunoaștere obiecte etc
- Bibliografie: C.Burges – A Tutorial on SVM for Pattern Recognition, Data Mining and Knowledge Discovery, 2, 121–167 (1998)

Support Vector Machines

Considerăm o problemă simplă de clasificare binară



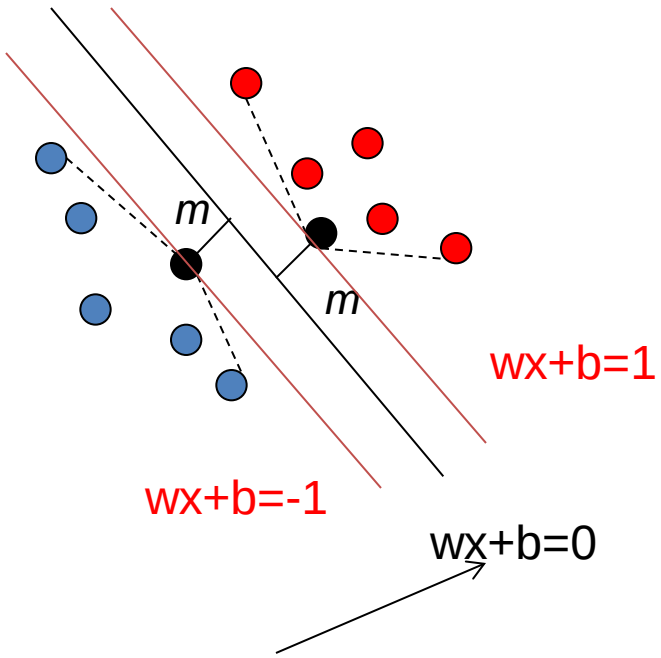
Problema e liniar separabilă și se observă că există o infinitate de drepte (hiperplane, în cazul general) care permit separarea celor două clase

Care dintre hiperplanele separatoare este mai bun ?

Cel care ar conduce la o bună capacitate de generalizare = clasificare corectă nu doar pentru datele din setul de antrenare ci și pentru potențialele date de test

Support Vector Machines

Care e cea mai bună dreaptă (hiperplan) separatoare ?



Ecuația dreptei (hiperplanului) separatoare

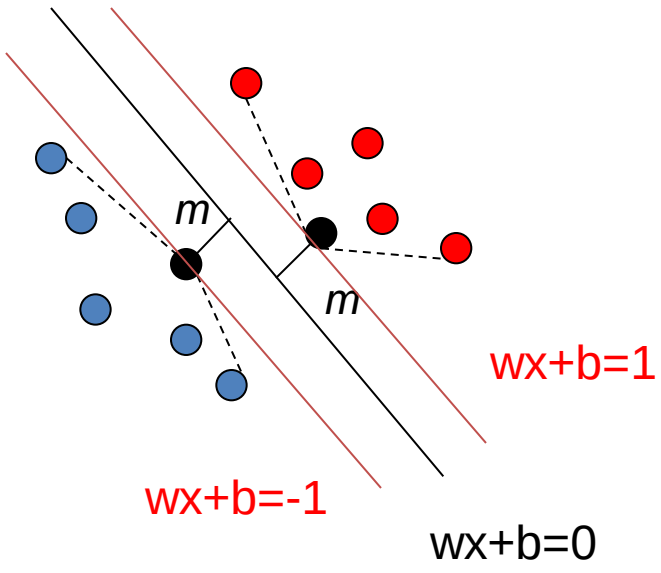
Cea pentru care distanța minimă față de punctele aflate pe înfășurătoarea convexă a setului de puncte corespunzător fiecărei clase este maximă

Dreptele care trec prin punctele marginale sunt considerate drepte canonice

Distanța dintre dreptele canonice este $2/||w||$, deci a maximiza lărgimea zonei separatoare este echivalent cu a minimiza norma lui w

Support Vector Machines

Cum se poate determina hiperplanul separator ?



Se determină w și b care

Minimizează $||w||^2$

(maximizează marginea separatoare)

și satisface

$(wx_i+b)d_i-1>=0$

pentru toate elementele setului de antrenare $\{(x_1,d_1),(x_2,d_2),\ldots,(x_L,d_L)\}$

d_i=-1 pentru clasa albastră

d_i=1 pentru clasa roșie

(clasifică corect exemplele din setul de antrenare)

Support Vector Machines

Problema de minimizare cu restricții se poate rezolva folosind metoda multiplicatorilor lui Lagrange:

Problema inițială:

Minimizează $||w||^2$ astfel încât $(wx_i+b)d_i-1>=0$ pentru i=1..L

Introducerea multiplicatorilor lui Lagrange transformă problema în determinarea punctului șa (saddle point) pentru V:

$$V(w,b,\alpha) = \frac{1}{2}\|w\|^2 - \sum_{i=1}^{L}\alpha_i(d_i(w\cdot x_i + b) - 1),\ \alpha_i \geq 0$$

$$(w^*,b^*,\alpha^*) \text{ este punct sa daca : } V(w^*,b^*,\alpha^*) = \max_\alpha \min_{w,b} V(w,b,\alpha)$$

Construirea funcției duale:

$$W(\alpha) = \min_{w,b} V(w,b,\alpha)$$

$$\frac{\partial V(w,b,\alpha)}{\partial w} = 0 \Rightarrow w = \sum_{j=1}^{L}\alpha_j d_j x_j \qquad \frac{\partial V(w,b,\alpha)}{\partial b} = 0 \Rightarrow 0 = \sum_{j=1}^{L}\alpha_j d_j$$

Support Vector Machines

Se ajunge astfel la problema maximizării funcției duale (în raport cu α):

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^{L} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{L} \alpha_i \alpha_j d_i d_j (x_i \cdot x_j)$$

(cunoscute din setul de antrenare)

Cu restricțiile:

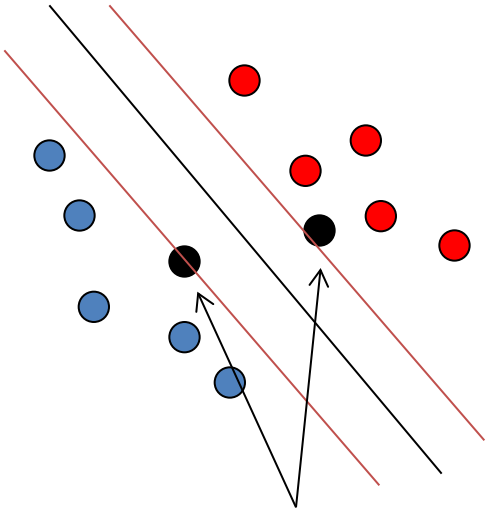
$$\alpha_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{L} \alpha_i d_i = 0$$

După rezolvarea problemei de mai sus (în raport cu multiplicatorii α) se calculează elementele hiperplanului separator astfel:

$$w^* = \sum_{i=1}^{L} \alpha_i d_i x_i, \quad b^* = 1 - w^* \cdot x_k$$

unde k este indicele unui multiplicator nenul iar x_k este exemplul corespunzător ce aparține clasei de etichetă +1

Support Vector Machines



Observații:

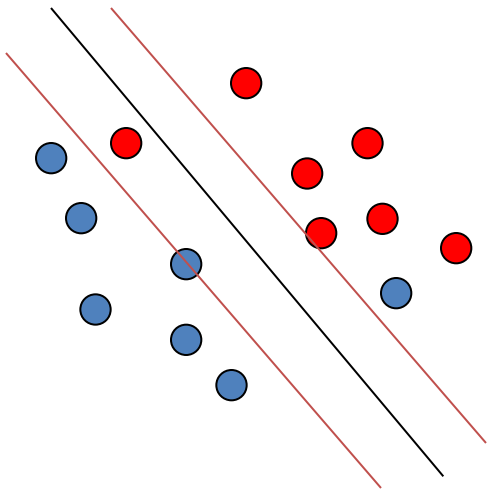
- Multiplicatorii nenuli corespund exemplelor pentru care restricțiile sunt active (w x+b=1 sau w x+b=-1). Aceste exemple sunt denumite vectori suport și sunt singurele care influențează ecuația hiperplanului separator (celelalte exemple din setul de antrenare pot fi modificate fără a influența hiperplanul separator)

- Multiplicatorii nuli corespund elementelor din setul de antrenare care nu influențează hiperplanul separator
- Funcția de decizie obținută după rezolvarea problemei de optimizare pătratică este:

$$D(z) = \text{sgn}(\sum_{i=1}^{L} \alpha_i d_i (x_i \cdot z) + b^*)$$

Support Vector Machines

Ce se întâmplă în cazul în care datele nu sunt foarte bine separate ?



Se relaxează condiția de apartenență la o clasă:

$$w \cdot x_i + b \geq 1 - \xi_i, \quad \text{daca } d_i = 1$$
$$w \cdot x_i + b \leq -1 + \xi_i, \quad \text{daca } d_i = -1$$

Funcția de minimizat devine:

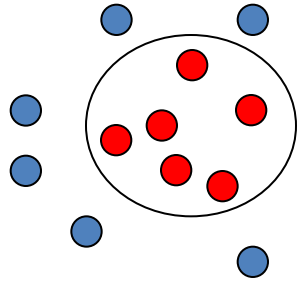
$$V(w, b, \alpha, \xi) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{L}\xi_i - \sum_{i=1}^{L}\alpha_i(d_i(w \cdot x_i + b) - 1)$$

Ceea ce schimbă restricțiile din problema duală astfel:

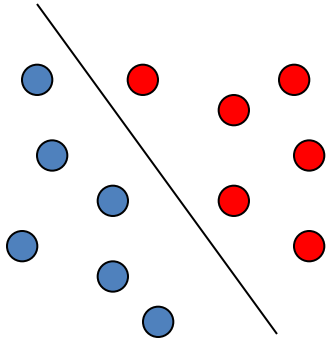
$$\text{in loc de } \alpha_i \geq 0 \text{ se introduce } 0 \leq \alpha_i \leq C$$

Support Vector Machines

Ce se întâmplă în cazul in care problema NU este liniar separabilă?



$$x_1^2 + x_2^2 - R^2 = 0$$



$$w \cdot z + b = 0,\ \ z_1 = x_1^2, z_2 = x_2^2$$

$$w_1 = w_2 = 1,\ \ b = -R^2$$

$$x_1 \rightarrow \theta(x_1) = x_1^2$$

$$x_2 \rightarrow \theta(x_2) = x_2^2$$

Support Vector Machines

In cazul general se aplică transformarea:

$x \to \theta(x)$ iar produsul scalar al vectorilor transformati este

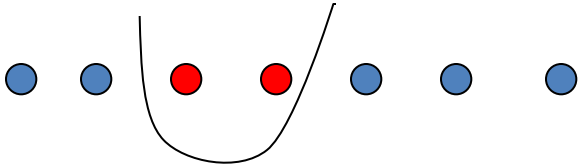
$\theta(x) \cdot \theta(x') = K(x, x')$

Intrucât în rezolvarea problemei de optimizare intervin doar produsele scalare nu este necesară cunoașterea expresiei explicite a funcției de transformare θ ci este suficient să se cunoască doar funcția nucleu K

Support Vector Machines

Exemplu 1: Transformarea unei probleme neliniar separabile într-una liniar separabilă prin trecerea la o dimensiune mai mare

$$(x-\alpha)(x-\beta) = x^2 - (\alpha+\beta)x + \alpha\beta$$



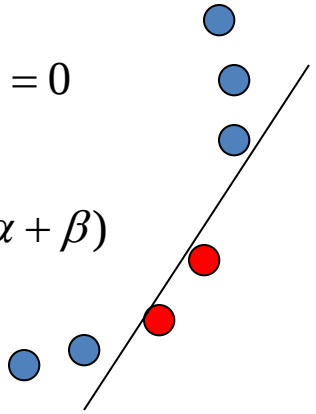
Pb. 1-dimensională neliniar separabilă

$$w_1 z_1 + w_2 z_2 + b = 0$$

$$z_1 = x^2, z_2 = x$$

$$w_1 = 1, w_2 = -(\alpha+\beta)$$

$$b = \alpha\beta$$



Pb. 2-dimensională liniar separabilă

Exemplu 2: Deducerea unei funcții nucleu în cazul în care suprafața de decizie este dată de o funcție pătratică oarecare (se trece de la dimensiunea 2 la dimensiunea 5)

$$\theta(x_1, x_2) = (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, 1)$$

$$K(x, x') = \theta(x_1, x_2) \cdot \theta(x'_1, x'_2) = (x^T \cdot x' + 1)^2$$

Support Vector Machines

Exemple de functii nucleu:

$$K(x, x') = (x^T \cdot x' + 1)^d$$

$$K(x, x') = \exp(-\frac{\|x - x'\|^2}{2\sigma^2})$$

$$K(x, x') = \tanh(kx^T \cdot x' + b)$$

Functia de decizie devine:

$$D(z) = \text{sgn}(\sum_{i=1}^{L} \alpha_i y_i K(x_i, z) + b^*)$$

Support Vector Machines

Implementări

LibSVM [http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/]: (+ link-uri catre implementari in Java, Matlab, R, C#, Python, Ruby)

SVM-Light [http://www.cs.cornell.edu/People/tj/svm_light/]: implementare in C

Spider [http://www.kyb.tue.mpg.de/bs/people/spider/tutorial.html]: implementare Matlab

Interfață SciLab pt LibSVM (http://atoms.scilab.org/toolboxes/libsvm)

SciKit-learn – implementări în Python

R – pachet caret

Curs următor

Gruparea datelor

- Concepte de bază
- Evaluarea calităţii grupării
- Algoritmi partiţionali
- Algoritmi ierarhici