Metody eksploracji danych
4. Klasyfikacja

Piotr Szwed
Katedra Informatyki Stosowanej AGH
2016

Wprowadzenie
Regresja Logistyczna

Zagadnienie klasyfikacji

- Dane:
  - Zbiór uczący: $\mathrm{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1,m}$
  - (x_i, y_i) – obserwacje, instancje
  - x_i - obserwacje (wartości atrybutów różnego typu)
  - $y_i \in \{c_1, \ldots, c_k\}$ - etykiety klas
- Celem jest znalezienie modelu $c(x)$: $x \rightarrow \{c_1, \ldots, c_k\}$ pozwalającego na przypisanie etykiety klasy nieznanym wektorom x
- Klasyfikacja binarna $k = 2$ wówczas $c(x)$: $x \rightarrow \{c_1, c_2\}$
- Efektywność otrzymanego modelu powinna być oceniana z użyciem odrębnego zbioru danych
  - Podział (test split) oryginalnego zbioru danych na D_{train} i D_{test}
  - Zastosowanie walidacji krzyżowej (CV, cross validation)

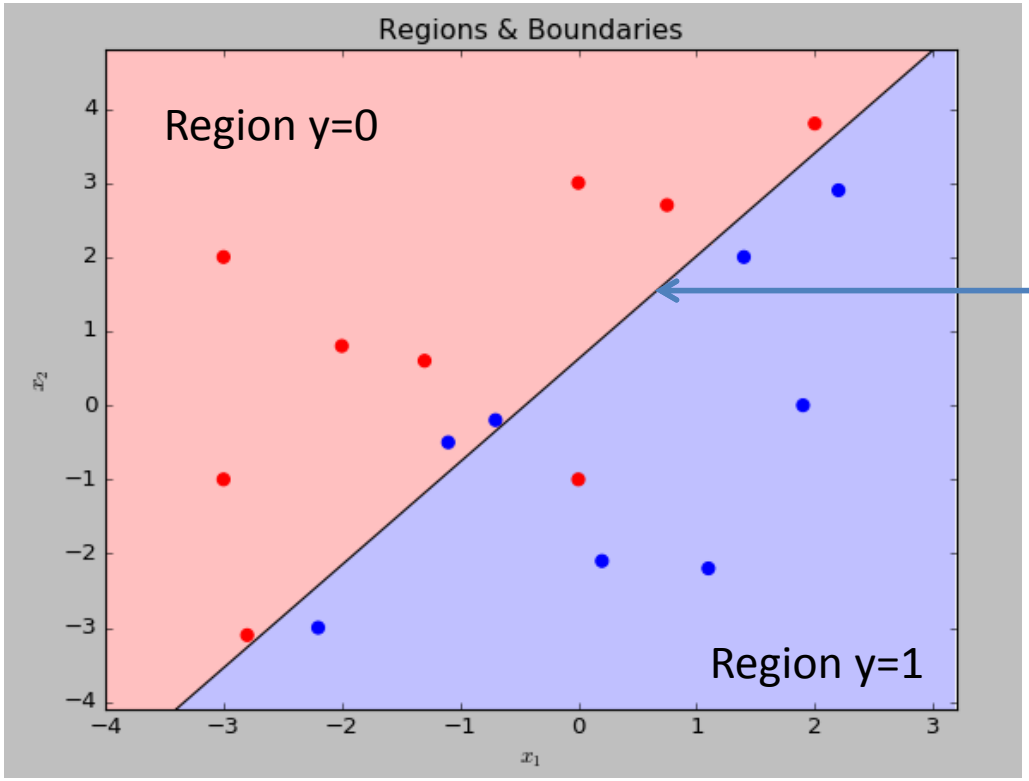
Przykłady zagadnień klasyfikacji

- Klasyfikacja transakcji kartami płatniczymi (autoryzowane czy oszustwa)
- Klasyfikacja wniosków kredytowych (udzielić/odrzucić)
- Klasyfikacja roszczeń ubezpieczeniowych (uzasadnione czy próba wyłudzenia)
- Przewidywanie odejścia klientów firm telekomunikacyjnych (ang. churn)
- Kategoryzacja tekstów (np. wiadomości, artykułów) jako: finanse, pogoda, rozrywka, sport
- Filtrowanie spamu
- Detekcja twarzy, postaci, obiektów na obrazach
- Określanie, czy zmiany rakowe w komórkach są łagodne lub złośliwe
- Klasyfikacja struktury białek

Porównanie klasyfikacji i regresji

- Podobieństwa
  - Model ma postać funkcji $X \rightarrow \mathrm{Y}$
  - W obu zagadnieniach problemem jest **wymiar** X (tzw. klątwa wymiarowości). Jeżeli wymiar X wynosi n, aby równomiernie pokryć X k obserwacjami w kierunku każdego wymiaru potrzeba k^n obserwacji.
  - W obu przypadkach istotne są **zdolności generalizacji** modelu: wyznaczanie błędu testowego w zależności od złożoności, zjawisko nadmiernego dopasowania (overfitting)
  - Część modeli może być użyta zarówno do regresji, jak i klasyfikacji: drzewa regresji/decyzyjne, sieci neuronowe
- Różnice
  - W zagadnieniach klasyfikacji wartości wyjściowe są kategoryczne (dyskretne, skończony zbiór wartości): 0/1, tak/nie
  - Możliwa jest klasyfikacja wielowartościowa (multilabel), wówczas $Y = 2^C$, gdzie C jest zbiorem etykiet, np. kategoryzacja tekstów
  - Stosowane są inne funkcje oceny

Regiony decyzyjne i granice klas

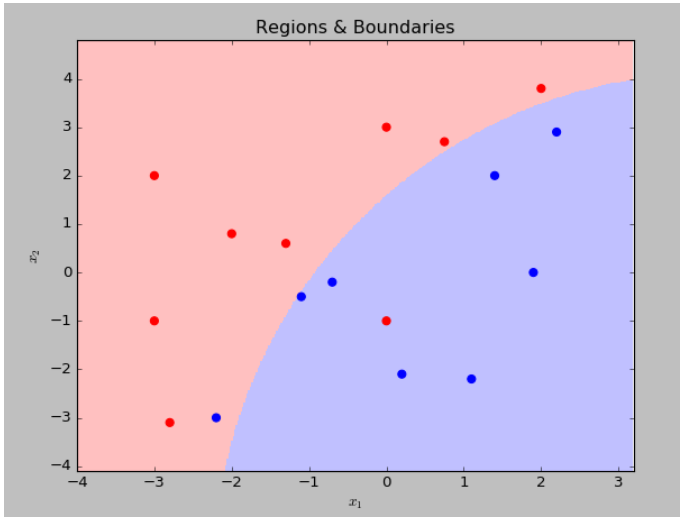


Granica klas
(decision boundary)

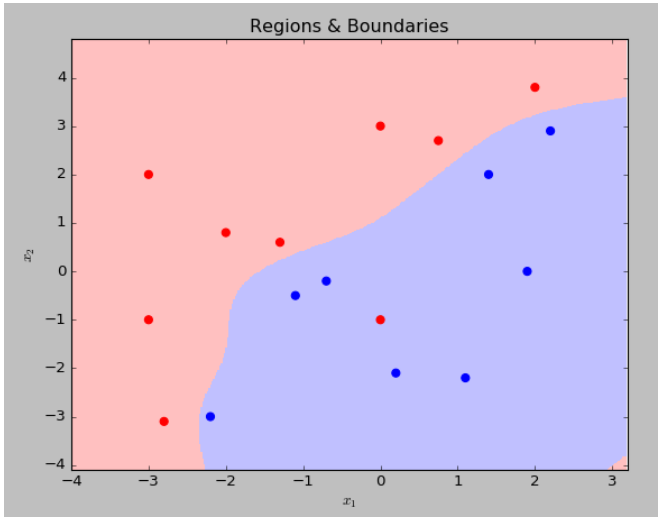
- Region decyzyjny dla danej klasy c_i to podzbiór obserwacji $X(c_i) = \{x \in \mathrm{X} : c(x) = c_i\}$, którym klasyfikator przypisze klasę (decyzję) c_i.
- Granica klas to brzeg regionu

Regiony decyzyjne i granice klas

- Regiony decyzyjne na ogół nie są wyznaczane analitycznie, ale są pochodną parametrów wyznaczonego modelu. Dla modeli nieparametrycznych mogą być określone wyłącznie przez testowanie wartości wejściowych.
- Kształty regionów mocno zależą od przyjętego modelu i jego złożoności



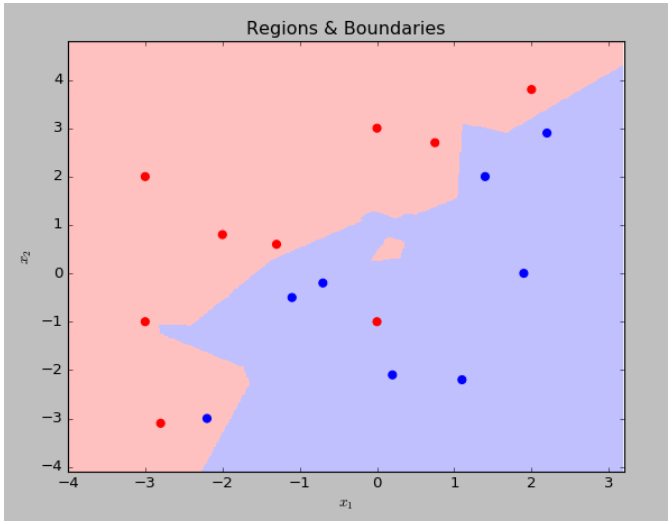
Naive Bayes



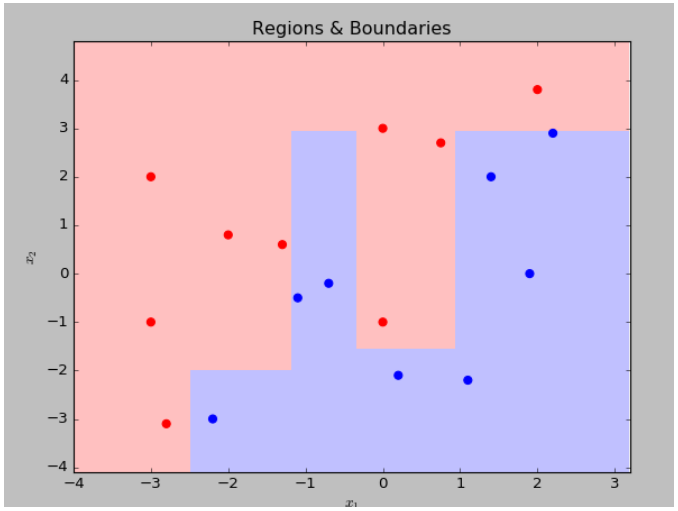
SVM + RBF kernel

Regiony decyzyjne i granice klas: inne przykłady

- W zależności od metody granice regionów mogą być krzywymi separującymi dane, mieć postać łamanych, zawierać wyspy.
- Nie wszystkie obserwacje zbioru uczącego muszą być przypisane do regionu zgodnego z etykietą klasy.
- Złożone kształty regionów decyzyjnych najczęściej są oznaką nadmiernego dopasowania do danych uczących (dużej wariancji)
- Wizualizacje 2D mają raczej charakter poglądowy, niż znaczenie praktyczne



k-NN (k=3)



Drzewo decyzyjne

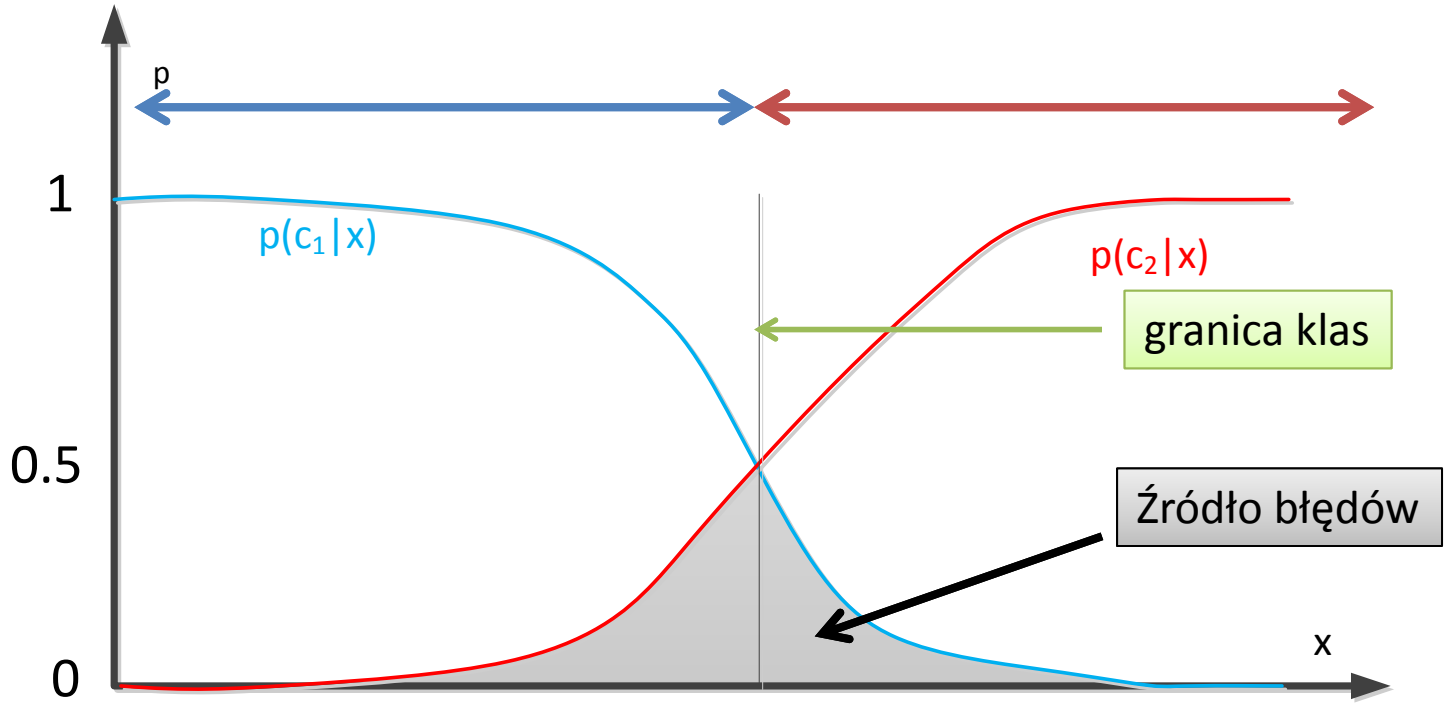
Perspektywa probabilistyczna

- Niech $\mathrm{C} = \{c_1, \ldots, c_k\}$
- $p(c_i)$ to prawdopodobieństwo wystąpienia klasy c_i w pewnym zbiorze obserwacji.
  - Jeżeli zbiorem tym jest zbiór danych uczących D i dla pewnej klasy c_j, $p(c_j)$ jest małe, wówczas zbiór ten nazywany jest niezrównoważonym (niezbalansowanym, ang. unbalanced).
- $p(c_i|x)$ to prawdopodobieństwo, przypisania do obserwacji x klasy c_i.
- Zakładając, że klasyfikator jest w stanie wyznaczyć $p(c_i|x)$, dla $i = 1, \ldots, k$, wówczas optymalną decyzją jest wybór klasy:

$$c_m = \arg max \{p(c_i|x): i = 1, k\}$$

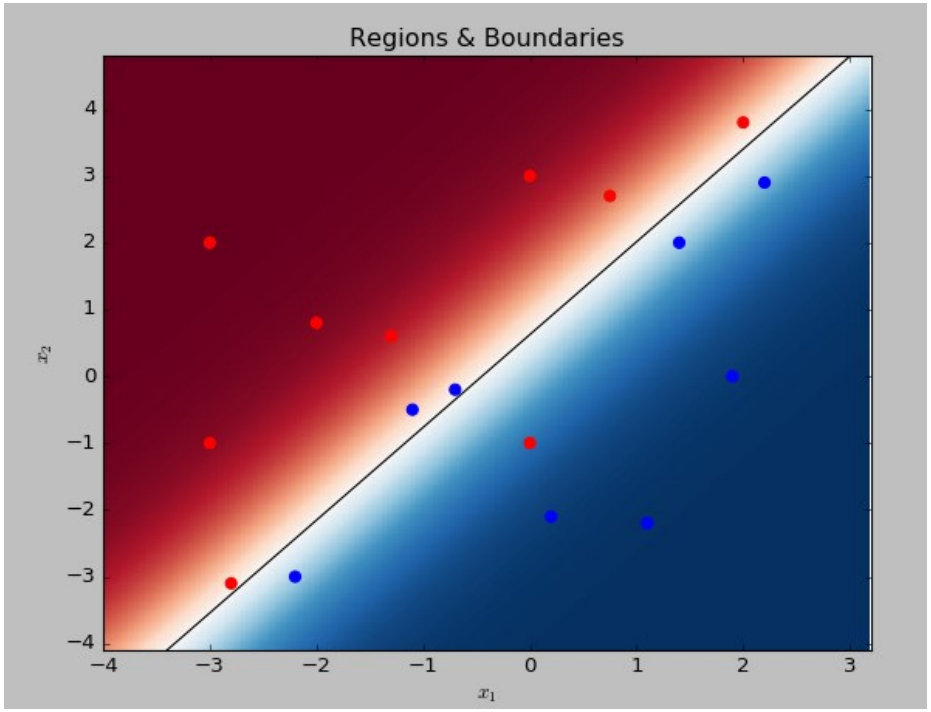
Jednowymiarowy przypadek klasyfikacji binarnej

- Regiony decyzyjne dla danej klasy : wartości, gdzie klasa jest bardziej prawdopodobna, czyli $p(c_1|x) > p(c_2|x)$
- Granica klas: $p(c_1|x) = p(c_2|x) = 0.5$
- **Sigmoidalna** funkcja prawdopodobieństwa: dowolny zakres x może zostać odwzorowany w przedział [0,1]



Przykład: regresja logistyczna

- Binarne zagadnienie klasyfikacji
- Granica klas jest hiperpłaszczyzną (linią w przypadku dwuwymiarowym)
- Prawdopodobieństwo jednej z klasy rośnie, a drugiej maleje wraz z oddalaniem się od granicy klas
- Na granicy: $p(c_1|x) = p(c_2|x) = \frac{1}{2}$



Modele Bayesowskie

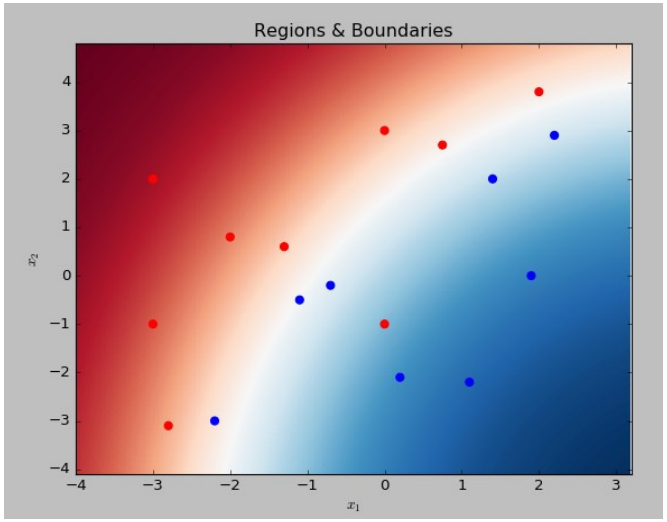
- Modele Bayesowskie wykorzystują prawdopodobieństwo wystąpienia obserwacji x dla klasy c_i, czyli prawdopodobieństwa warunkowe:

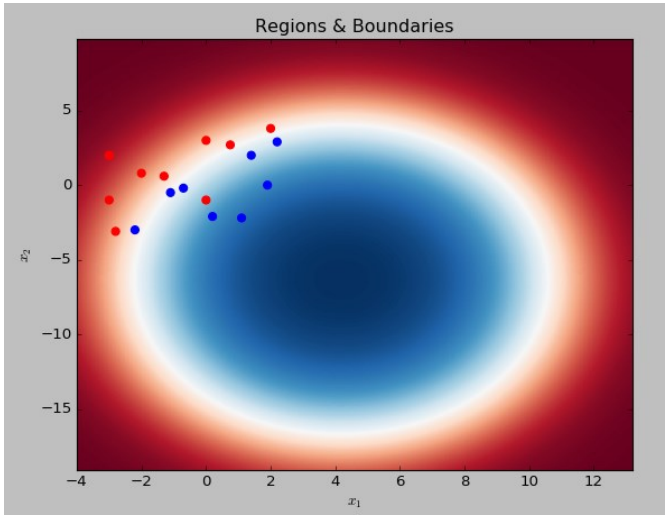
$$p(x|c_i), i = 1, \dots, k$$

- Następnie $p(c_i|x)$ jest wyznaczane za pomocą reguły Bayesa:

$$p(c_i\ |x) = \frac{p(x|c_i)p(c_i)}{p(x)},$$

- Prawdpodobieństwo $p(x)$ jest obliczane jako: $p(x) = \sum p(x|c_i)p(c_i)$
- Ponieważ celem jest wyznaczenie $\arg max\ \{p(c_i|x): i = 1, k\}$, prawdopodobieństwo $p(x)$ jako wspólny czynnik skalujący może zostać pominięte.

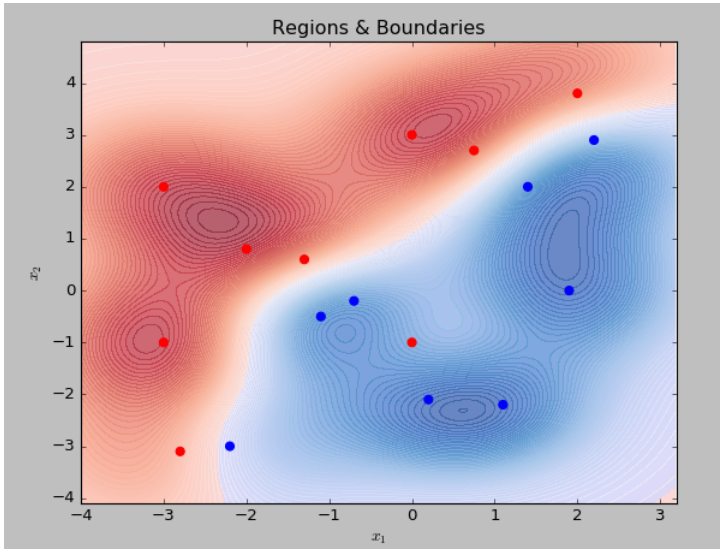




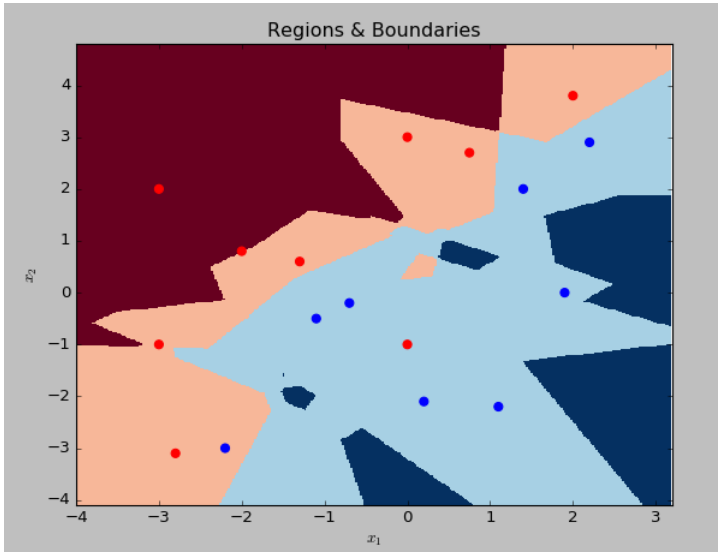
Rozkład $p(c_i\ |x)$ wyznaczony przez naiwny klasyfikator Bayesa

Inne metody

- Wiele metod nie korzysta z modeli probabilistycznych. Regiony decyzyjne i granice klas są wyznaczane na podstawie różnych parametrów:
  - SVM: margines pomiędzy obserwacjami
  - drzewa: zysk informacyjny
  - kNN: klasa przeważająca w sąsiedztwie
- Dla części z nich prawdopodobieństwa $p(c_i \mid x)$ mogą zostać przypisane do obserwacji x po wyznaczeniu modelu.



SVM z kernelem RBF



kNN (k=3)

Podział klasyfikatorów

- **Generatywne (obserwacje uwarunkowane etykietami klas)**
  - Wyznaczają pełny model $p(x|c_i)$
  - Używają reguły Bayesa do określenia granic klas
  - Przykłady: naiwny model Bayesa, Gaussian mixture model
  - Granice klas są zazwyczaj funkcjami kwadratowymi
- **Dyskryminatywne**
  - **Oparte na regresji:**
    - Modelują $p(c_i|x)$ bezpośrednio
    - Przykłady: regresja logistyczna, sieci neuronowe
  - **Nie wykorzystujące bezpośrednio prawdopodobieństw**, skupione na wyznaczaniu optymalnych granic klas:
    - SVM (support vector machines): liniowe i nieliniowe regiony decyzyjne
    - Najbliższych sąsiadów (nearest neighbor) - granice klas w postaci łamanych
    - Drzewa decyzyjne – granice klas wzdłuż osi atrybutów

Funkcje oceny klasyfikatora

- Podstawową funkcją oceny klasyfikatora jest trafność klasyfikacji.
- Oznaczmy przez $L(i,j)$ koszt błędnej klasyfikacji:

$$L(i,j) = \begin{cases} 1 \text{ gdy i} \neq j \\ 0 \text{ gdy i} = j \end{cases}$$

$$accuracy = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L(y_i, c(x_i))$$

- Jednakże algorytmy uczące nie minimalizują bezpośrednio tej funkcji, raczej posługują się różnymi funkcjami zastępczymi, które są optymalizowane

Macierz pomyłek/błędów

- Macierz pomyłek (macierz błędów, ang. confusion matrix) jest typowym narzędziem oceny modelu klasyfikacji.
- Jej elementy $e[i,j]$ określają liczby próbek prawdziwej klasy c_i sklasyfikowanych jako należących do klasy c_j.

True\predicted	c_1	c_2	c_3
c_1	5	0	2
c_2	1	7	2
c_3	1	4	3

nieprawidłowo sklasyfikowane

prawidłowo sklasyfikowane

Na podstawie macierzy pomyłek można wyznaczyć trafność:

$$accuracy = \frac{\sum_{i=1}^{k} e[i,i]}{\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k} e[i,k]}$$

i inne miary pochodne:

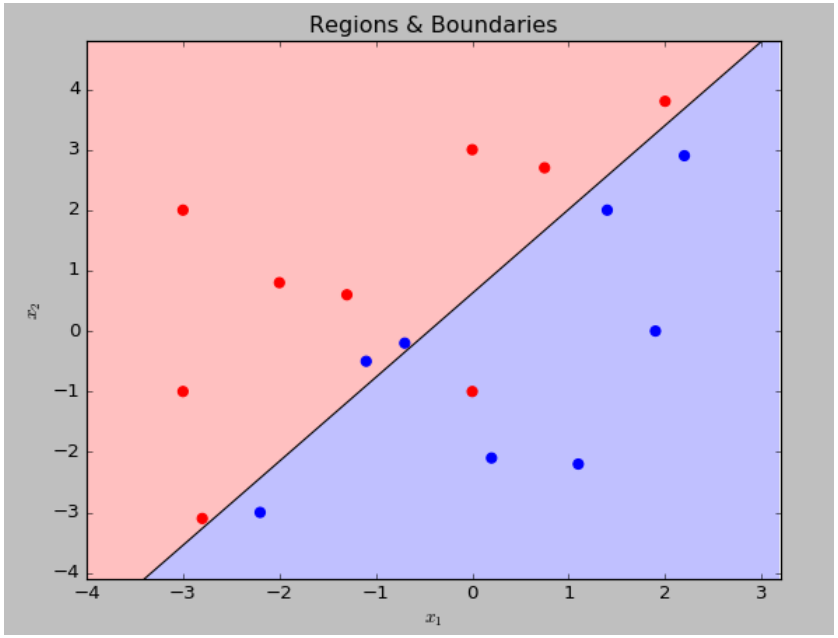
$precision(c_i) = \frac{e[i,i]}{\sum_{j=1}^{k} e[j,i]}$ oraz $recall(c_i) = \frac{e[i,i]}{\sum_{j=1}^{k} e[i,j]}$

Regresja logistyczna

Regresja logistyczna

Regresja logistyczna jest zagadnieniem klasyfikacji binarnej:

- Wartości x są wektorami n-wymiarowymi: $x \in \mathrm{R}^n$
- Zbiór decyzji (klas) Y zawiera dwa elementy, np. $Y = \{0,1\}$
- Granica klas jest n-1 wymiarową hiperpłaszczyzną, czyli np. prostą w przypadku 2D



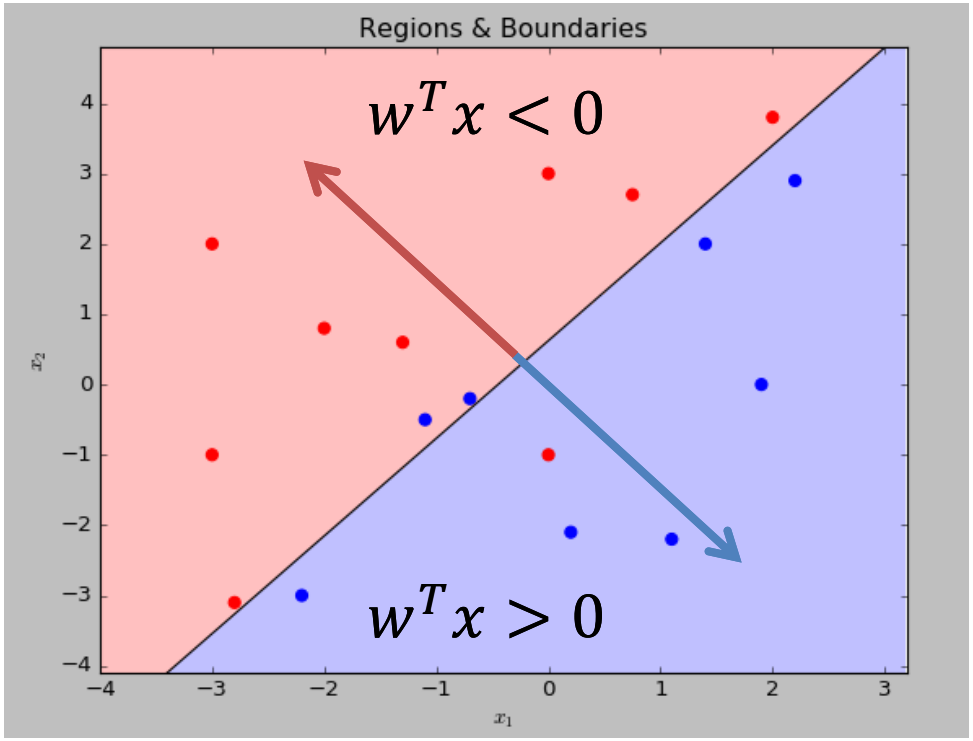
Regresja logistyczna: hiperpłaszczyzna

- Równanie hiperpłaszczyzny (x_i oznacza i-ty element wektora):
$$w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_n x_n = 0$$
- Wektor normalny: $z = [w_1, \ldots, w_n]$
- Norma z (długość) : $\|z\| = \sqrt{\sum w_i^2}$
- Odległość punktu x_k od hiperpłaszczyzny:
$$d(x_k) = \frac{|w_0 + \sum_{i=1}^{n} w_i x_{ki}|}{\|z\|}$$
- Przekształcając X do R^{n+1}: $x \rightarrow [1 : x]$
możemy zapisać:
  - równanie hiperpłaszczyzny: $w^T x = 0$
  - odległość punktu od hiperpłaszyzny: $d(x_k) = \frac{|w^T x_k|}{\|z\|}$

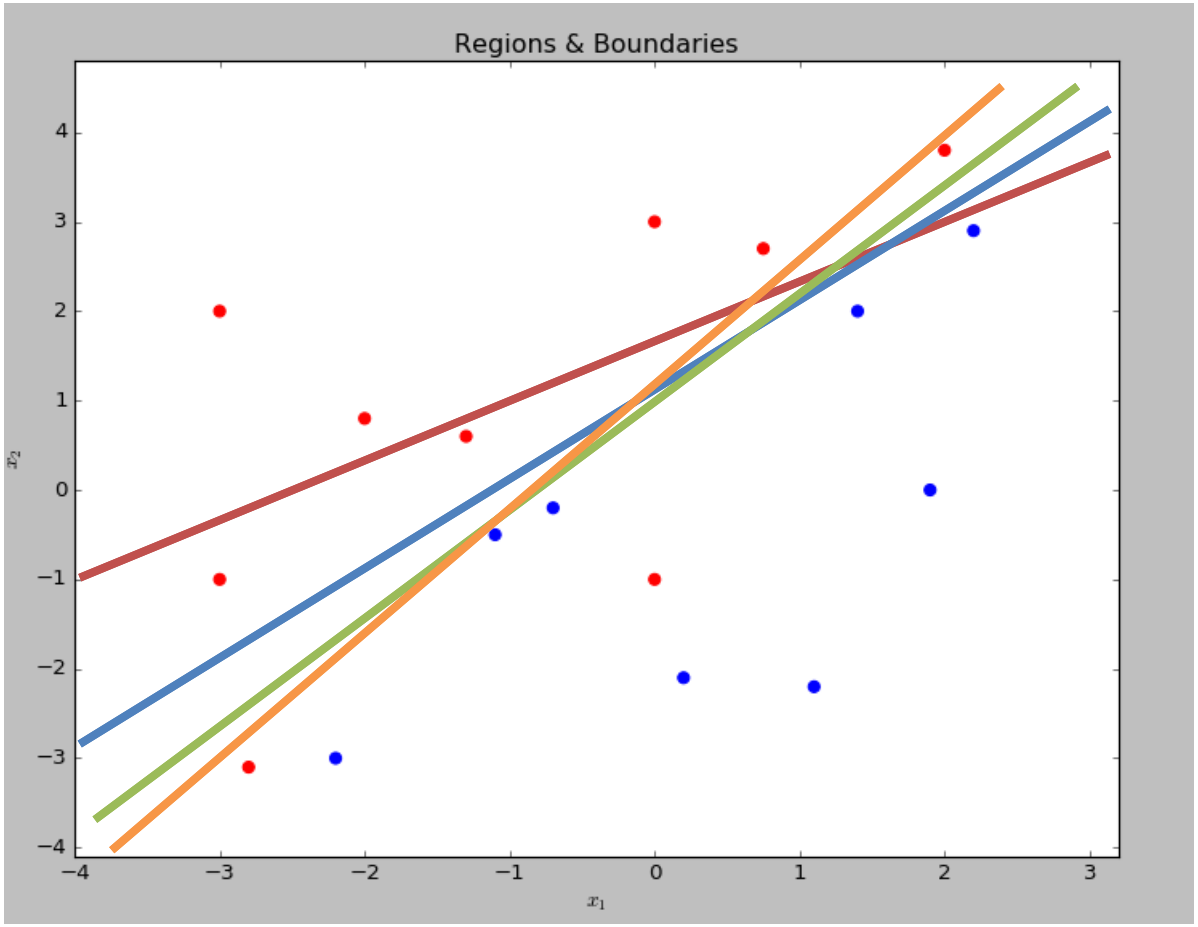
Regresja logistyczna: funkcja klasyfikacji

Najprostszą formą wyboru funkcji klasyfikacji $c(x)$ jest przypisanie klasy na podstawie wartości $w^T x$

$$c(x) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } w^T x < 0 \\ 1 & \text{gdy } w^T x \geq 0 \end{cases}$$



Jak dobrać granicę klas?



4 sklasyfikowane błędnie

2 sklasyfikowane błędnie

2 sklasyfikowane błędnie

1 sklasyfikowany błędnie

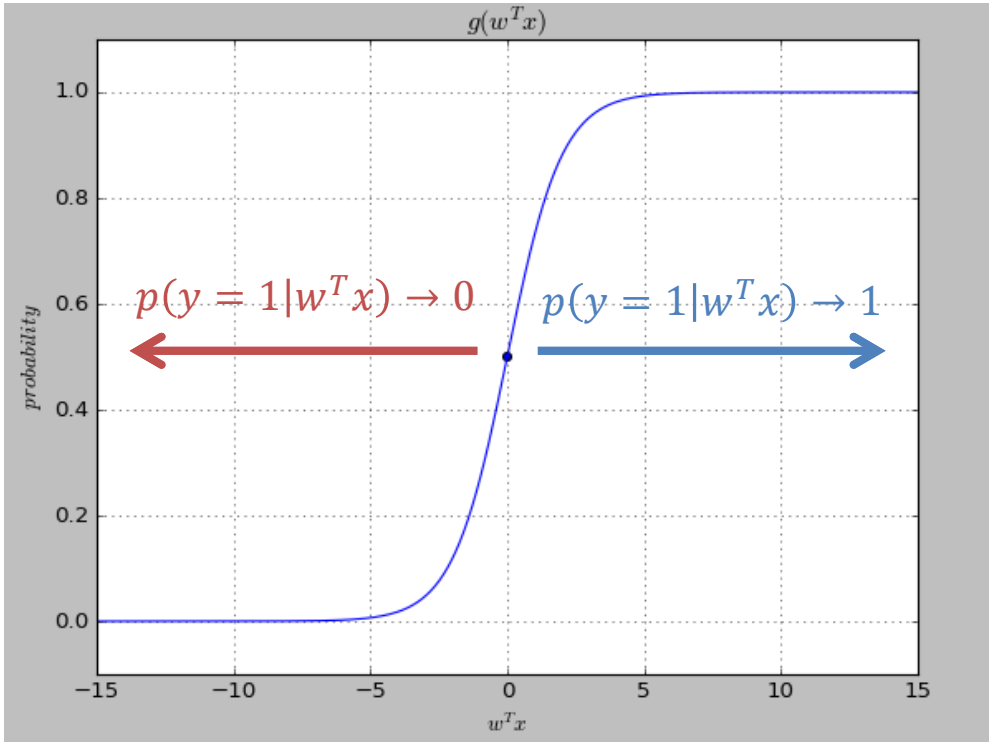
- Może warto wziąć pod uwagę odległość od prostej?
- Jeżeli prosta leży blisko punktów, wówczas model wykazuje wrażliwość na drobne zmiany w ich położeniu.

Regresja logistyczna: model

W modelu regresji logistycznej prawdopodobieństwo $p(c|x)$ jest wyznaczane bezpośrednio.

Ogólna idea:

- dla x w pobliżu granicy klas ($w^T x = 0$) prawdopodobieństwa dla obu klas wynoszą w przybliżeniu $\frac{1}{2}$
- wraz z oddalaniem się od granicy klas: $|w^T x| \to \infty$ prawdopodobieństwo $p(c_1|x)$ jednej z klas rośnie do 1, a drugiej maleje do 0.



Uogólniony model liniowy

Regresja logistyczna jest jednym z przypadków **uogólnionego modelu liniowego** (GLM, generalized linear model):

$$L(E[y|x]) = w^T x$$

- $E[y]$ – wartość oczekiwana zmiennej wyjściowej
- $L(x)$ - funkcja wiążąca (ang. link function)

- GLM stosuje się w przypadku, kiedy np. zmienna wyjściowa ma wartości dyskretne lub należy zamodelować inne rozkłady statystyczne niż normalny
- Zakładając, że mamy dwie klasy oznaczone przez 1 i 0, wartość oczekiwana wynosi:

$$E[y|x] = \sum_y y\, p(y|x) = 1 \cdot p(y = 1|x) + 0 \cdot p(y = 1|x)$$
$$= p(y = 1|x)$$

- Dla binarnych problemów klasyfikacji wystarczające jest aproksymowane jest prawdopodobieństwo wystąpienia wybranej klasy:

$$p(y = 0 \,|\, x) = 1 - p(y = 1 \,|\, x)$$

Szansa

- Rozważmy wyrażenie:

$$odds = \frac{p}{1-p}$$

- Jest to iloraz prawdopodobieństwa wystąpienia zdarzenia do zdarzenia przeciwnego,
  np. jeśli prawdopodobieństwo wygranej kandydata w wyborach wynosi 0.8, to szansa $odds = \frac{0.8}{0.2} = 4{:}\,1$
- Szansa przypisania x etykiety klasy 1:

$$odds(y = 1|x) = \frac{p(y = 1|x)}{1 - p(y = 1|x)}$$

- Szanasa $odds$ przybiera wartości z przedziału $[0, \infty]$

Logit

Rozważamy uogólniony model liniowy $L(E[y|x]) = L(p) = w^T x$,

gdzie L – funkcja wiążąca (ang. link function)

- Załóżmy, że funkcją wiążącą jest funkcja $logit(p)$

$$logit(p) = \ln\left(\frac{p}{1-p}\right)$$

- Dla $p \in [0,1]$, wartości $logit(p) \in [-\infty, \infty]$.
  Funkcja $logit(p)$ pozwala więc na powiązanie zakresu wartości prawdopodobieństw [0,1] z zakresem zmienności modelu liniowego $w^T x \in [-\infty, \infty]$
- Równanie uogólnionego modelu liniowego dla regresji logistycznej ma postać:

$$logit\big(p(y=1|x)\big) = \ln\left(\frac{p(y=1|x)}{1-p(y=1|x)}\right) = w^T x$$

Interpretacja logit

Zestawienie wyników egzaminu

- wykl – na ilu wykładach student był obecny
- zal – ocena z zaliczenia (min 3.0)
- zdal – czy po przystąpieniu zdał egzamin w pierwszym terminie (1/0)

Współczynniki regresji:

$$logit(p) = -11.63 + 0.24 * wykl + 2.70 * zal$$

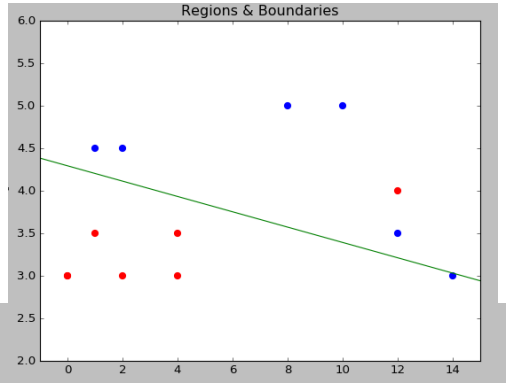
Dodatkowa obecność na jednym wykładzie:

- zwiększa $logit(p)$ o 0.24
- zwiększa szanse zdania razy $e^{0.24} = 1.27$ (czyli o 27%)

Ocena z zaliczenie o stopień wyższa:

- zwiększa $logit(p)$ o 2.7
- zwiększa szanse zdania razy $e^{2.7} = 14.87$ (czyli o 1387%)

wykl	zal	zdal
14	3.0	1
12	3.5	1
12	4.0	0
10	5.0	1
2	4.5	1
4	3.5	0
0	3.0	0
1	4.5	1
2	3.0	0
8	5.0	1
4	3.0	0
0	3.0	0
1	3.5	0



Prawdopodobieństwo p(y|x)

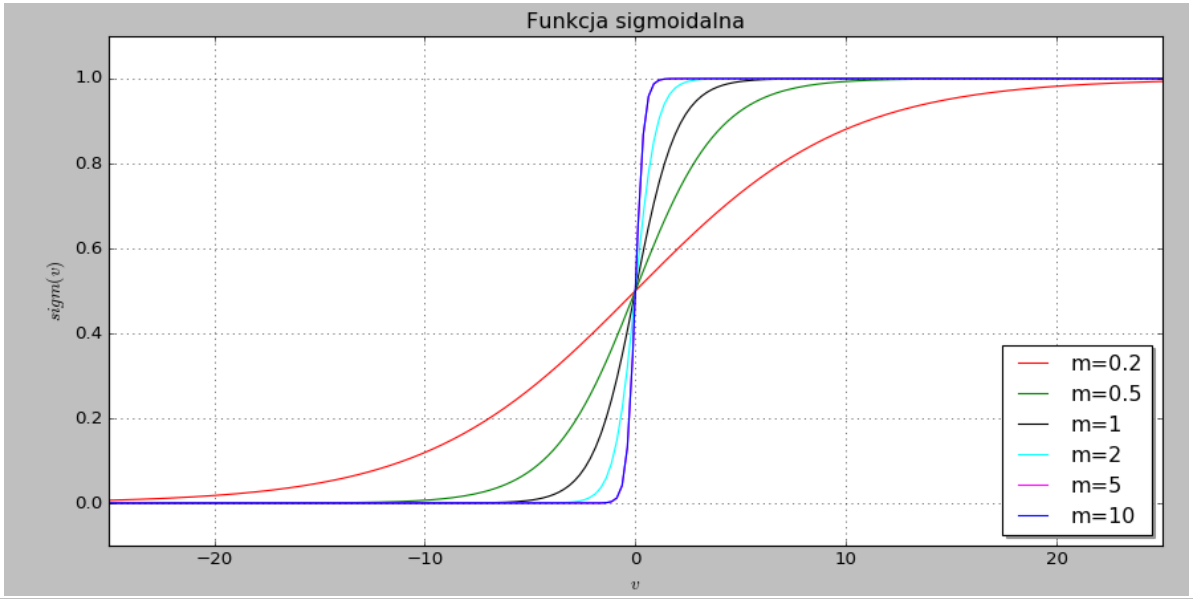
Przekształcając równanie:

$$\ln\left(\frac{p(y=1|x)}{1-p(y=1|x)}\right) = w^T x$$

otrzymujemy równoważną postać:

$$p(y=1|x) = \frac{1}{1+\exp(-w^T x)} = \frac{\exp(w^T x)}{1+\exp(w^T x)}$$

W równaniu występuje funkcja sigmoidalna: $sigm(v) = \frac{1}{1+\exp(-mv)}$

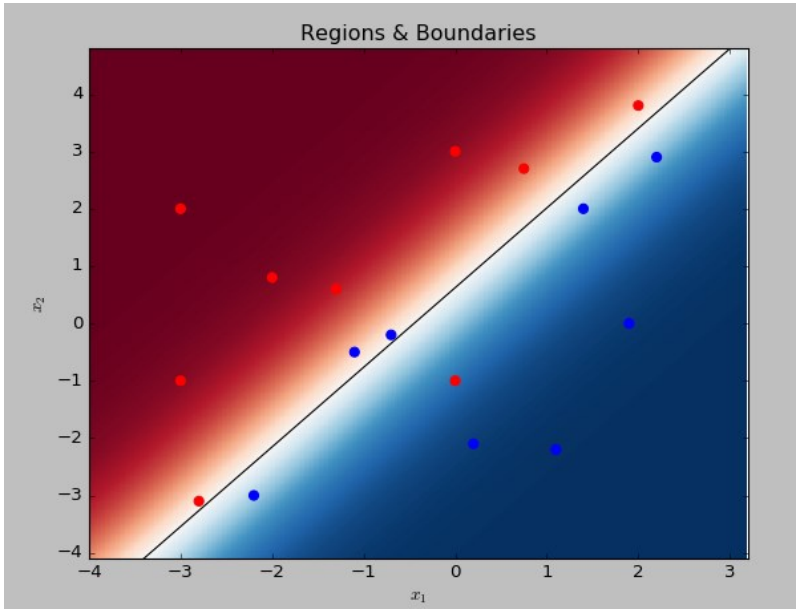


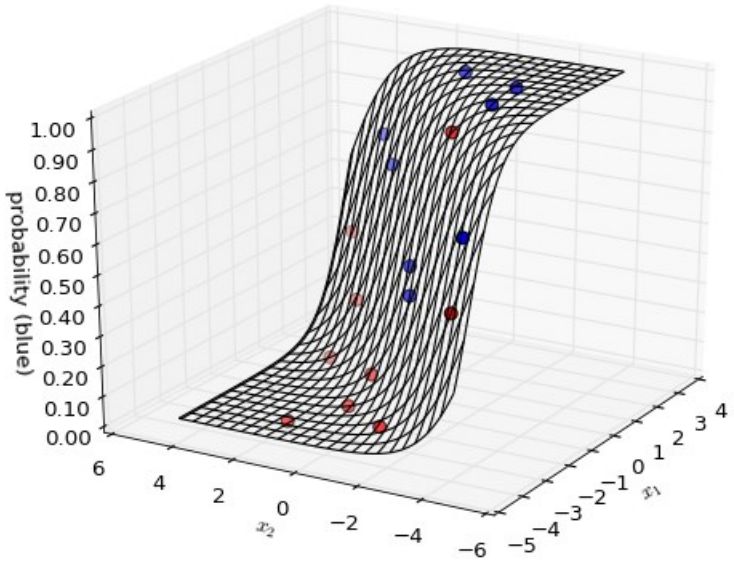
Wektor w jest celowo **nieznormalizowany**.

- Małe wartości wag (małe m) powodują, że krzywa $p(y=1|x)$ jest płaska
- Duże wartości – krzywa coraz bardziej przypomina funkcję skokową

Przykład

$$w^T x = 0.748 + 1.665\, x_1 - 1.198\, x_2$$





- Po lewej: obserwacje i granica klas:
  - biały obszar $p(y = blue|x) \approx p(y = red|x) \approx 0.5$
  - brązowy: $p(y = red|x) \to 1$
  - granatowy: $p(y = blue|x) \to 1$
- Po prawej: wykres gęstości prawdopodobieństwa $p(y = blue|x)$

Dobór parametrów hiperpłaszczyzny

- Dobór parametrów hiperpłaszczyzny jest problemem optymalizacyjnym:
  - definiujemy funkcję kosztu
  - przeprowadzamy optymalizację
- Dany jest zbiór uczący: $\mathrm{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1,m}$
- **Dla jakich parametrów regresji w obserwacje ze zbioru D są najbardziej prawdopodobne?**
  - $p(y_i = 1|w, x_i)$ – określone na podstawie poszukiwanego modelu prawdopodobieństwo, że $y_i = 1$
  - $p(y_i = 0|w, x_i)$ –prawdopodobieństwo, że $y_i = 0$
- Niezależnie od wartości y_i prawdopodobieństwo wystąpienia tej wartości dla x_i wynosi:

$$p(y_i = 1|w, x_i)^{y_i} \cdot p(y_i = 0|w, x_i)^{(1-y_i)}$$
$$= p(y_i = 1|w, x_i)^{y_i} \cdot (1 - p(y_i = 1|w, x_i))^{(1-y_i)}$$

  - Jeżeli $y_i = 1$, to drugi czynnik ma wartość $p^0 = 1$
  - Jeżeli $y_i = 0$, to pierwszy czynnik ma wartość 1

Estymacja największej wiarygodności

- Prawdopodobieństwo wystąpienia zbioru obserwacji:

$$L(w) = \prod_{i=1}^{m} p(y_i = 1|w, x_i)^{y_i} \cdot (1 - p(y_i = 1|w, x_i))^{(1-y_i)}$$

Estymacja największej wiarygodności (ang. MLE, Maximum likelihood estimation)

Wybierane są parametry w^*, dla których prawdopodobieństwo zaobserwowania zbioru uczącego $L(w)$ przybiera wartość maksymalną:

$$w^* = \arg max \ L(w)$$

Podstawiając:

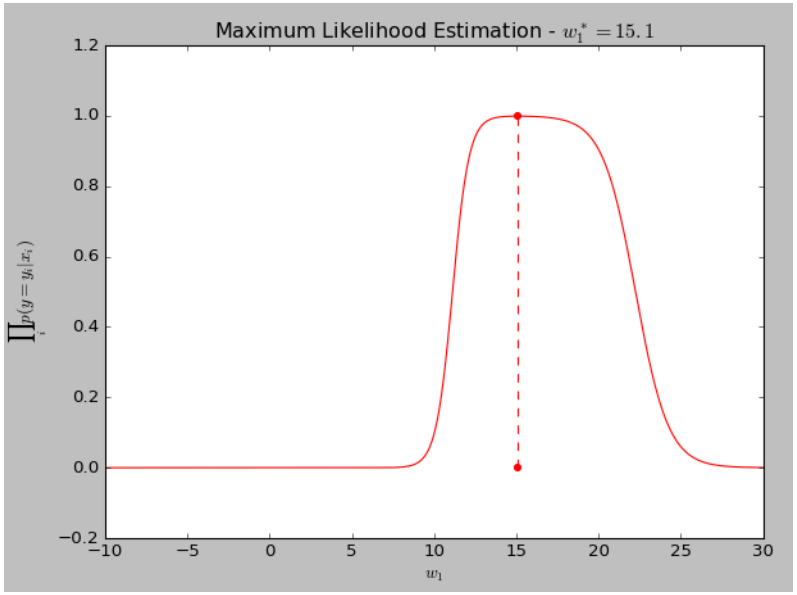
$$p(y_i = 1|x_i, w) = \frac{1}{1 + \exp(-w^T x_i)}$$

otrzymujemy:

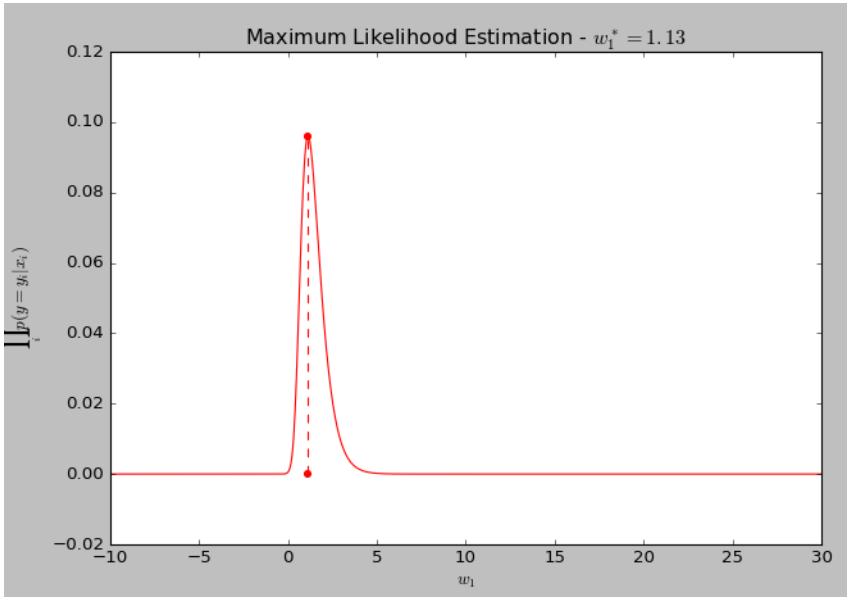
$$L(w) = \prod_{i=1}^{m} \left(\frac{1}{1 + \exp(-w^T x_i)} \right)^{y_i} \cdot \left(\frac{\exp(-w^T x_i)}{1 + \exp(-w^T x_i)} \right)^{(1-y_i)}$$

Przebieg L(w)

x	-4	-3	-2	-1	0	1
y	0	0	0	1	1	1



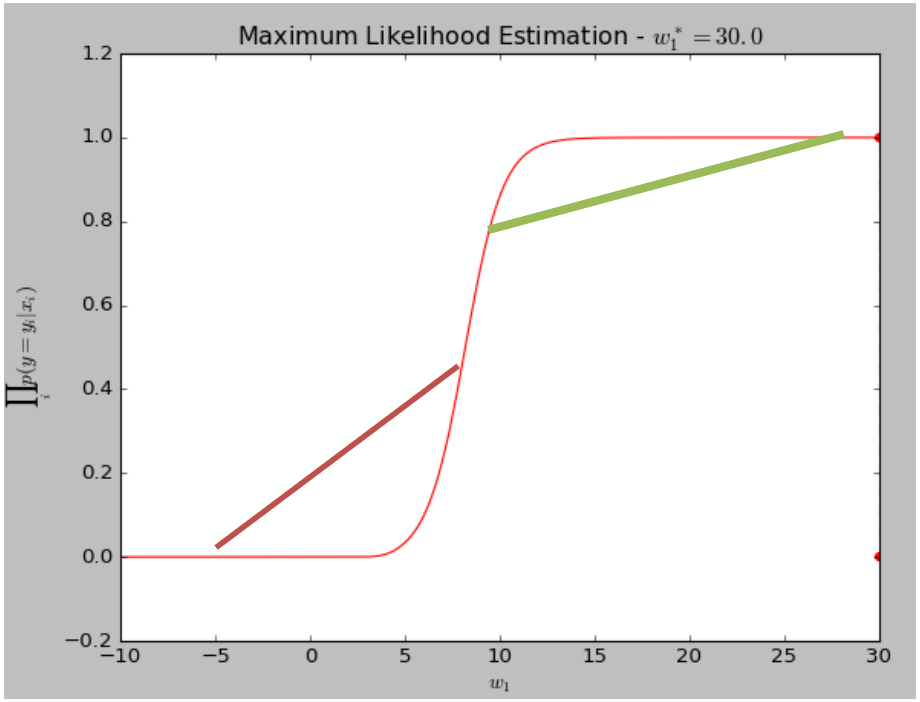
x	-3	-2	-1	1	2	3	4	5
y	0	0	0	1	0	1	1	1



- W jednowymiarowym zagadnieniu powinny być optymalizowane dwa parametry: w_0 i w_1. Wykresy sporządzono dla optymalnej wartości w_0^*
- Po lewej – dane są liniowo separowalne, więc prawdopodobieństwo $L(w)$ osiąga wartość 1
- Po prawej – nie są i musi być przyjęty kompromis. Stąd $\max \mathrm{L(w)} \approx 0.1$

Przebieg L(w)

x	-4	-3	-2	-1	0	1
y	0	0	0	0	1	1



- Szczególny przebieg – granica klas dla wartości 0
- Praktycznie wszystkie wartości w_1 powyżej 15 są dobre

- Funkcja L(w) jest na ogół funkcją wklęsłą
- Jej maksimum istnieje lub można wyznaczyć wartości bliskie optymalnym.
- Brak rozwiązania analitycznego

Logarytm L(w)

- Dla dużych m iloczyn prawdopodobieństw wchodzących w skład $L(w)$ byłby bardzo mały – problem niestabilny numerycznie
- Z tego powodu wyznaczany jest logarytm $L(w)$ - **iloczyn czynników** zastąpiony jest **sumą ich logarytmów**
- Dla jednego punktu:

$$ll_i(w) = \ln\left(\left(\frac{1}{1+\exp(-w^T x_i)}\right)^{y_i} \cdot \left(\frac{\exp(-w^T x_i)}{1+\exp(-w^T x_i)}\right)^{(1-y_i)}\right)$$

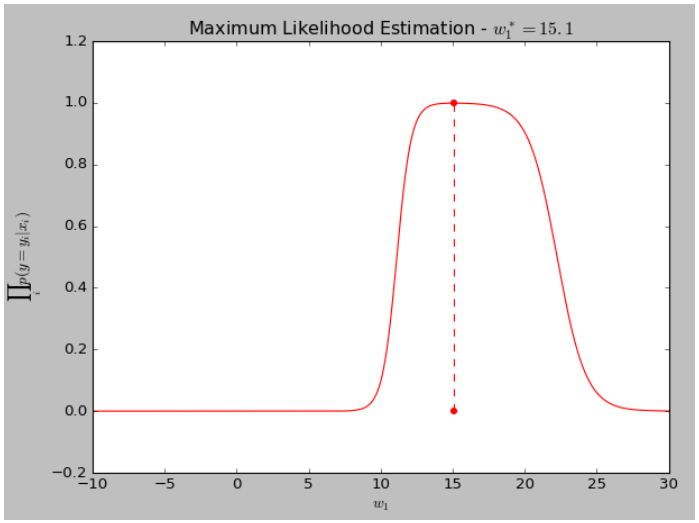
$$ll_i(w) = \ln(1^{y_i}) - \mathrm{y_i}\ln(1+\exp(-w^T x_i))$$
$$-(1-y_i)w^T x_i - (1-y_i)\ln(1+\exp(-w^T x_i))$$

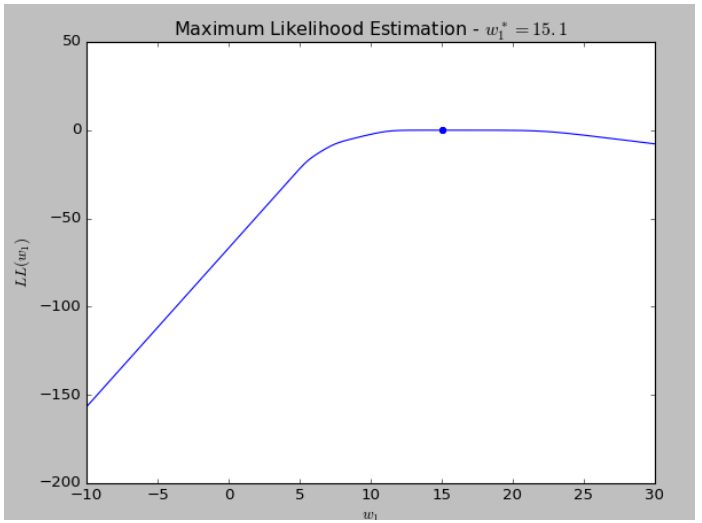
Stąd:

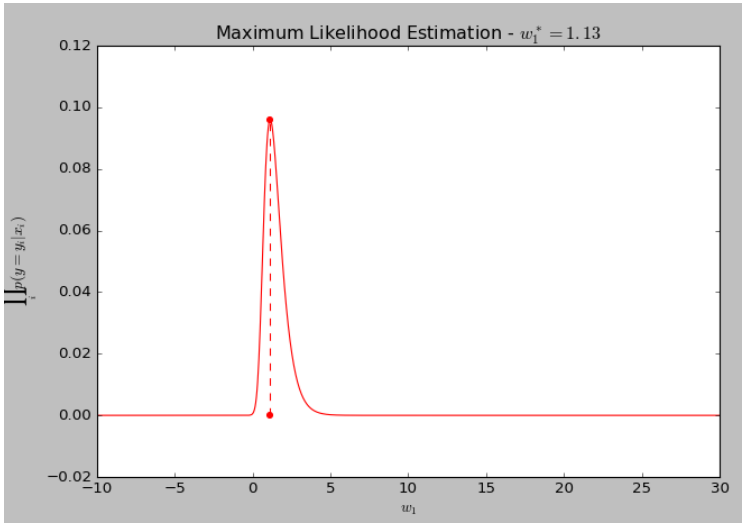
$$ll_i(w) = -(1-y_i)w^T x_i - \ln(1+\exp(-w^T x_i))$$

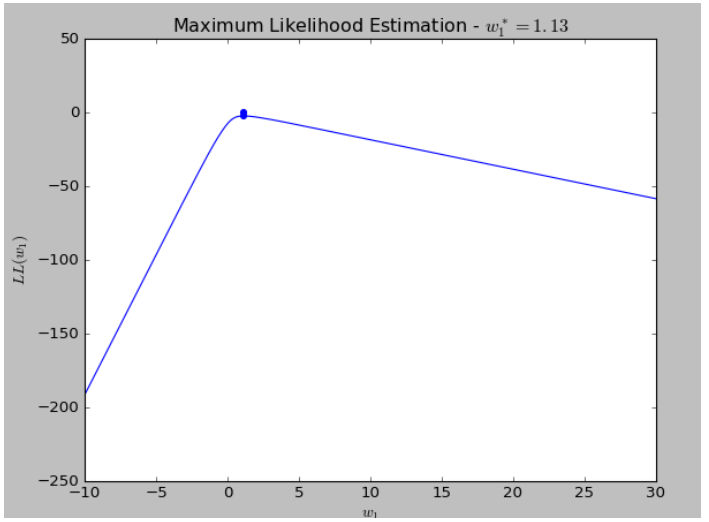
$$LL(w) = \sum_{i=1}^{m} ll_i(w)$$

Porównanie przebiegów L(w) i LL(w)









Gradient LL(w)

- Miejsce maksimum LL(w) wyznaczane jest za pomocą metod gradientowych (brak rozwiązania analitycznego)
- Dla pojedynczego punktu x_i:

$$ll_i(w) = -(1 - y_i)w^T x_i - \ln(1 + \exp(-w^T x_i))$$

$$\frac{d}{dw_j} ll_i(w) = x_{ij} y_i - x_{ij} - x_{ij} \frac{\exp(-w^T x_i)}{1 + \exp(-w^T x_i)}$$

$$\frac{d}{dw_j} ll_i(w) = x_{ij} \left(y_i - 1 - \frac{\exp(-w^T x_i)}{1 + \exp(-w^T x_i)} \right)$$

$$\frac{d}{dw_j} ll_i(w) = x_{ij} \left(y_i - \frac{1}{1 + \exp(-w^T x_i)} \right)$$

$$\frac{d}{dw_j} ll_i(w) = x_{ij}(y_i - p(y_i = 1|x_i, w))$$

- Jeżeli y_i i $p(y_i = 1|x_i, w)$ są zgodne: wkład punktu x_i do gradientu wynosi 0
- W przeciwnym przypadku gradient w kierunku w_j jest proporcjonalny do j-tej składowej wektora x_i

Gradient LL(w)

- Podsumowując:

Suma po obserwacjach

$$\frac{d}{dw_j} LL(w) = \sum_{i=1}^{m} x_{ij}(y_i - p(y_i = 1|x_i, w))$$

Dla każdego wymiaru

$$\nabla LL(w) = [\frac{d}{dw_0} LL(w), \frac{d}{dw_1} LL(w), \dots, \frac{d}{dw_n} LL(w),]$$

- Algorytm gradientu prostego (gradient ascent) ma postać:

  wybierz wartości początkowe $w(0)$

  while !stop():

  $$w(t+1) = w(t) + \eta \nabla LL(w)$$

- Zazwyczaj η jest małą stała lub maleje wraz z numerem iteracji t
- Warunek końca: liczba iteracji, $|\nabla LL(w)| \approx 0$ lub brak poprawy funkcji celu

Cechy

- W bardziej ogólnym przypadku, zamiast wektorów $x \in \mathrm{R}^n$ rozważany jest wektor **cech** (ang. features)

$$h(x) = [h_1(x), \dots, h_N(x)]$$

- Równanie regresji liniowej przybiera postać:

$$\ln\left(\frac{p(y=1|x)}{1-p(y=1|x)}\right) = w^T h(x)$$

$$p(y_i = 1|x_i, w) = \frac{1}{1+\exp(-w^T h(x_i))}$$

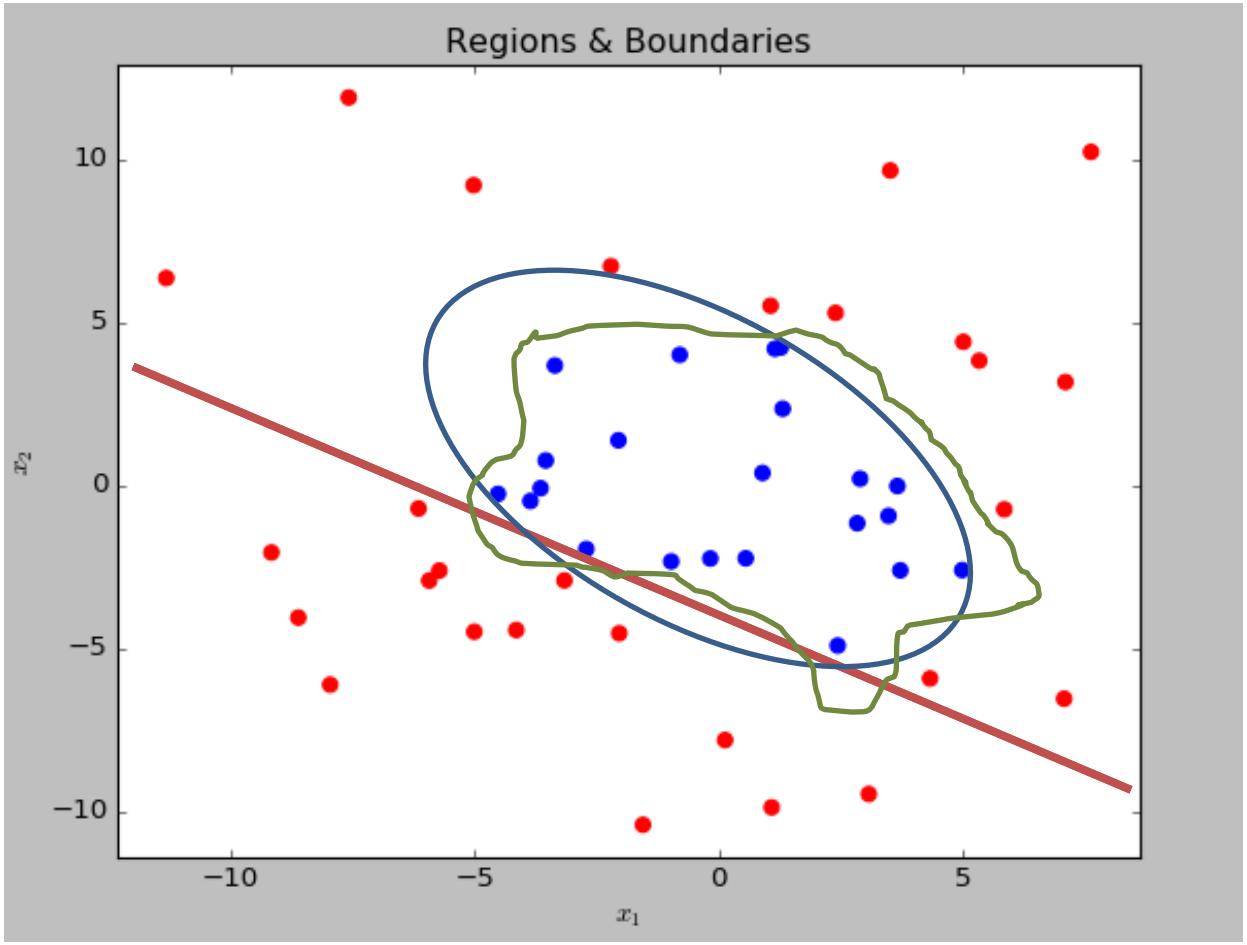
- Po uwzględnieniu cech, wzór służący do obliczenia pochodnej względem w_j przyjmuje postać:

$$\frac{d}{dw_j} LL(w) = \sum_{i=1}^{m} h_j(x_i)(y_i - p(y_i = 1|x_i, w))$$

- Dzięki zastosowaniu transformacji danych wejściowych do postaci cech możliwe jest uzyskanie bardziej złożonych przebiegów granic klas

Przykład

Błękitne punkty (klasa y=1) otoczone są punktami czerwonymi (y=0).



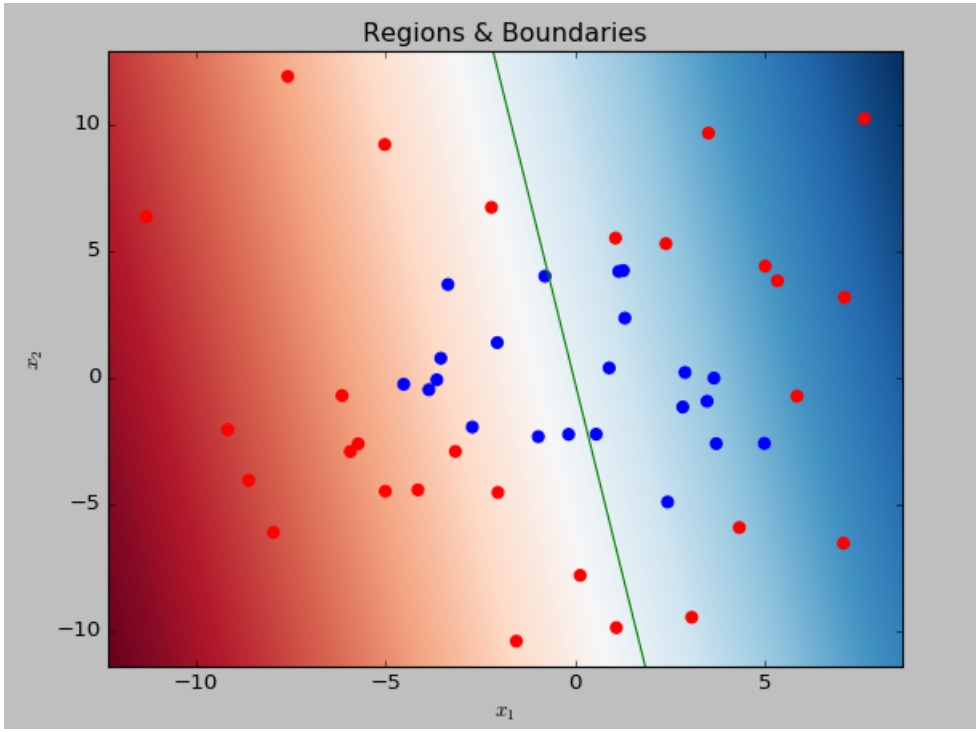
Prawdopodobnie źle?

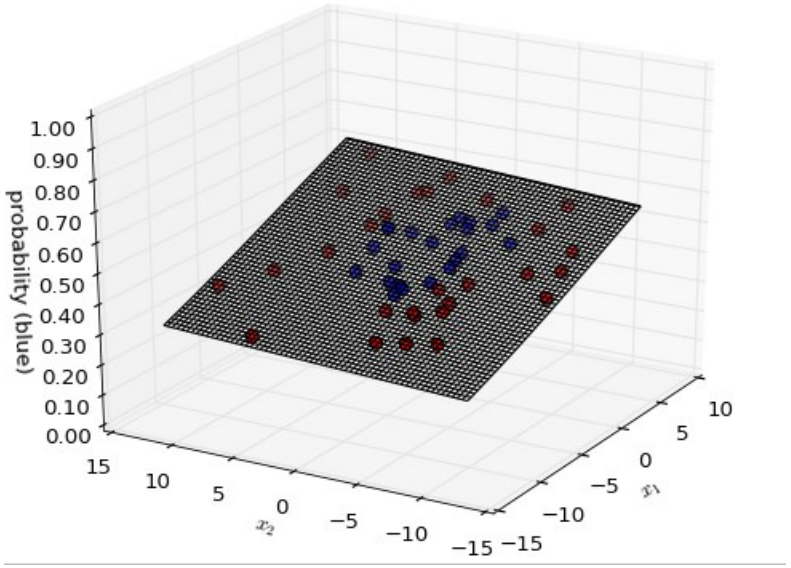
Pożądany kształt

Raczej overfitting

Przykład

- Wybór prostej jako granicy klas nie daje dobrych rezultatów
- Brak wyraźnego przejścia w funkcji gęstości prawdopodobieństwa

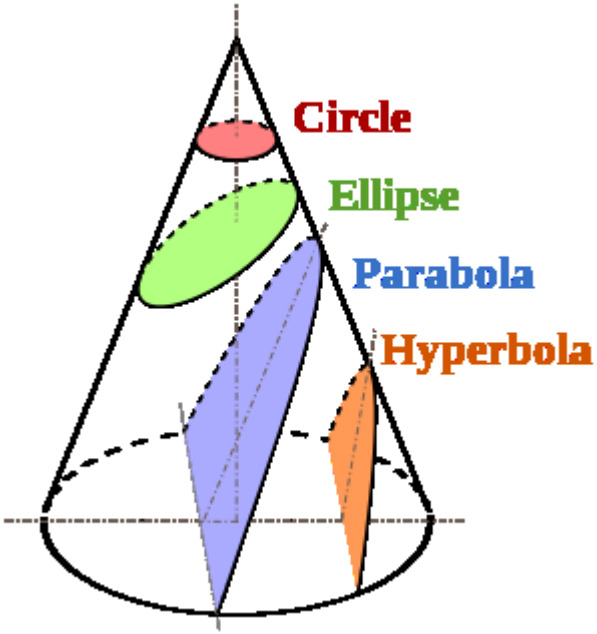




Przykład

Definiujemy cechy pochodne

- $h_0(x) = 1$ (bias)
- $h_1(x) = x_1$ (czytaj x[1])
- $h_2(x) = x_2$
- $h_3(x) = x_1^2$
- $h_4(x) = x_2^2$
- $h_5(x) = x_1 x_2$



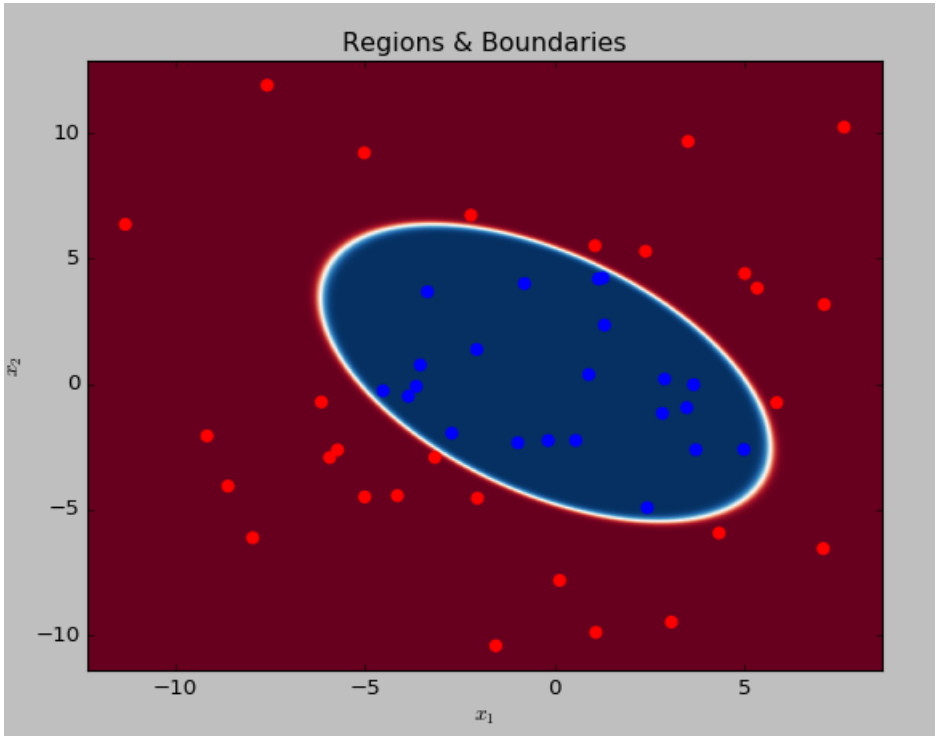
- Zestaw jest wystarczający, aby zdefiniować region decyzyjny w postaci krzywej stożkowej:

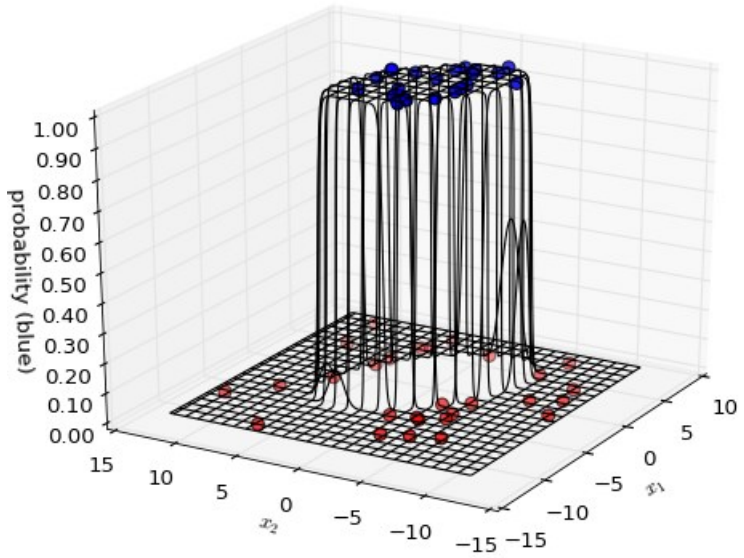
$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 + Dx + Ey + F = 0$$

- W przypadku elipsy współczynnik B odpowiada za obrót

[Rysunek: https://en.wikipedia.org/wiki/Conic_section]

Wyniki





- Wektor wag: w= [38.35, 0.05, 1.09, -1.47 -1.48 -1.48] – obecne współczynniki wyższego stopnia, w tym obrót
- Bardzo strome przejścia gęstości prawdopodobieństwa na granicy klas (dobre dopasowanie modelu)
- Nie zapominajmy jednak, że celem są dobre własności generalizacji

Konwersje danych do postaci numerycznej

Zarówno regresja zwykła, jak i logistyczna używa wyłącznie danych (cech) numerycznych. W zbiorze źródłowym mogą występować zmienne kategoryczne i tekstowe, które muszą zostać przekonwertowane do postaci cech numerycznych.

- Dane kategoryczne **binarne** można zastąpić wartościami ze zbioru $\{0,1\}$

$$\{YES, NO\} \rightarrow \{0,1\}$$

- Dane kategoryczne **porządkowe** o k wartościach można przekonwertować na zbiór liczb całkowitych z zakresu $0 \div k-1$:

$\{low, medium, high\}$: $low \rightarrow 0$, $medium \rightarrow 1$, $high \rightarrow 2$

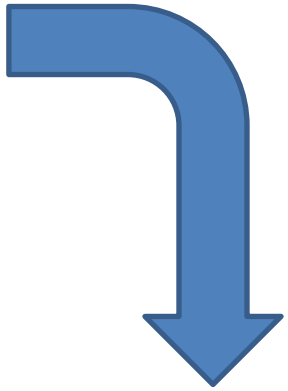
- Dane **nominalne** o k wartościach zamienia się na k-zmiennych o wartościach 0/1.
  Konwersja ta nazywa się **one-hot** (jedna linia danych „gorąca”)

Color=blue		
red	green	blue
0	0	1

Przykład

Relation: weather

No.	1: outlook Nominal	2: temperature Numeric	3: humidity Numeric	4: windy Nominal	5: **play** Nominal
1	sunny	85.0	85.0	FALSE	no
2	sunny	80.0	90.0	TRUE	no
3	overcast	83.0	86.0	FALSE	yes
4	rainy	70.0	96.0	FALSE	yes
5	rainy	68.0	80.0	FALSE	yes
6	rainy	65.0	70.0	TRUE	no
7	overcast	64.0	65.0	TRUE	yes
8	sunny	72.0	95.0	FALSE	no
9	sunny	69.0	70.0	FALSE	yes
10	rainy	75.0	80.0	FALSE	yes
11	sunny	75.0	70.0	TRUE	yes
12	overcast	72.0	90.0	TRUE	yes
13	overcast	81.0	75.0	FALSE	yes
14	rainy	71.0	91.0	TRUE	no



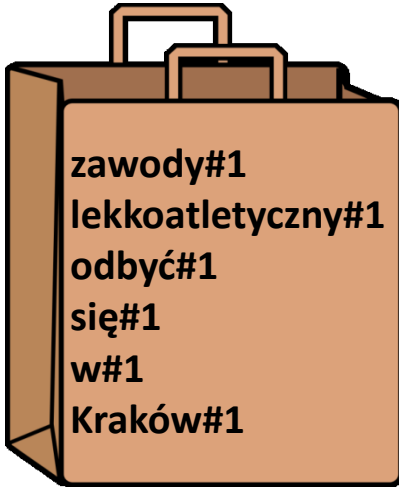
Weka zapewnia odpowiednie filtry, np.. **RenameNominalValues**

Relation: weather-weka.filters.unsupervised.attribute.RenameNominalValues-R4-NTRUE:1,FALSE:0-weka.filters.un

No.	1: outlook=sunny Numeric	2: outlook=overcast Numeric	3: outlook=rainy Numeric	4: temperature Numeric	5: humidity Numeric	6: windy Nominal	7: **play** Nominal
1	1.0	0.0	0.0	85.0	85.0	0	no
2	1.0	0.0	0.0	80.0	90.0	1	no
3	0.0	1.0	0.0	83.0	86.0	0	yes
4	0.0	0.0	1.0	70.0	96.0	0	yes
5	0.0	0.0	1.0	68.0	80.0	0	yes
6	0.0	0.0	1.0	65.0	70.0	1	no
7	0.0	1.0	0.0	64.0	65.0	1	yes
8	1.0	0.0	0.0	72.0	95.0	0	no
9	1.0	0.0	0.0	69.0	70.0	0	yes
10	0.0	0.0	1.0	75.0	80.0	0	yes
11	1.0	0.0	0.0	75.0	70.0	1	yes
12	0.0	1.0	0.0	72.0	90.0	1	yes
13	0.0	1.0	0.0	81.0	75.0	0	yes
14	0.0	0.0	1.0	71.0	91.0	1	no

Konwersje danych tekstowych

- Dla danych tekstowych typową reprezentacją jest **bag-of-words**, czyli przypisanie $string \rightarrow \mathrm{N}$



Zawody lekkoatletyczne odbyły się w Krakowie

W zawodach Polak zajął drugie miejsce

- Następnie tworzone są wektory słów – ich elementami są liczby wystąpień słów w dokumencie (czasem znormalizowane lub pomnożone przez wagi, np. reprezentujące znaczenie słów TF-IDF)
- Na ogół wektory te są bardzo rzadkie
- Jest to również konwersja typu **one-hot**: każde słowo staje się atrybutem

Przykład - Titanic

- W zbiorze danych **Titanic** występuje pole tekstowe name (nazwisko, imiona, forma grzecznościowa, itd.)
- Po konwersji filtrem Weka: **StringToWordVector** pojawiło się 1950 dodatkowych atrybutów, w tym *a*, *the*, *von*, *van*, *of*, *Mr*, *Mrs*, itd.

Relation: titanic31

No.	1: pclass Numeric	2: survived Numeric	3: name String	4: sex Nominal	5: age Numeric
1	1.0	1.0	Allen, Miss. Elisabeth Walton	female	29.0
2	1.0	1.0	Allison, Master. Hudson Trevor	male	0.9167
3	1.0	0.0	Allison, Miss. Helen Loraine	female	2.0
4	1.0	0.0	Allison, Mr. Hudson Joshua Creighton	male	30.0
5	1.0	0.0	Allison, Mrs. Hudson J C (Bessie Waldo Daniels)	female	25.0
6	1.0	1.0	Anderson, Mr. Harry	male	48.0
7	1.0	1.0	Andrews, Miss. Kornelia Theodosia	female	63.0
8	1.0	0.0	Andrews, Mr. Thomas Jr	male	39.0
9	1.0	1.0	Appleton, Mrs. Edward Dale (Charlotte Lamson)	female	53.0

Z analizy zbioru podobno wynika, że większe szanse na przeżycie katastrofy mieli członkowie kilkuosobowych rodzin.

Relation: titanic31-weka.filters.unsupervised.attribute.StringToWordVector-R3-W1000-...

70: Aline Numeric	71: Allen Numeric	72: Allis Numeric	73: Allison Numeric	74: Allum Numeric	75: Alma Numeric	76: Aloisia Numeric	77: Ar Nume
0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	