Training, validazione e test
Riduzione delle feature

Vincenzo Bonifaci

IN550 – Machine Learning

Training set e test set

Separiamo a caso i dati di esempio a nostra disposizione in due insiemi:

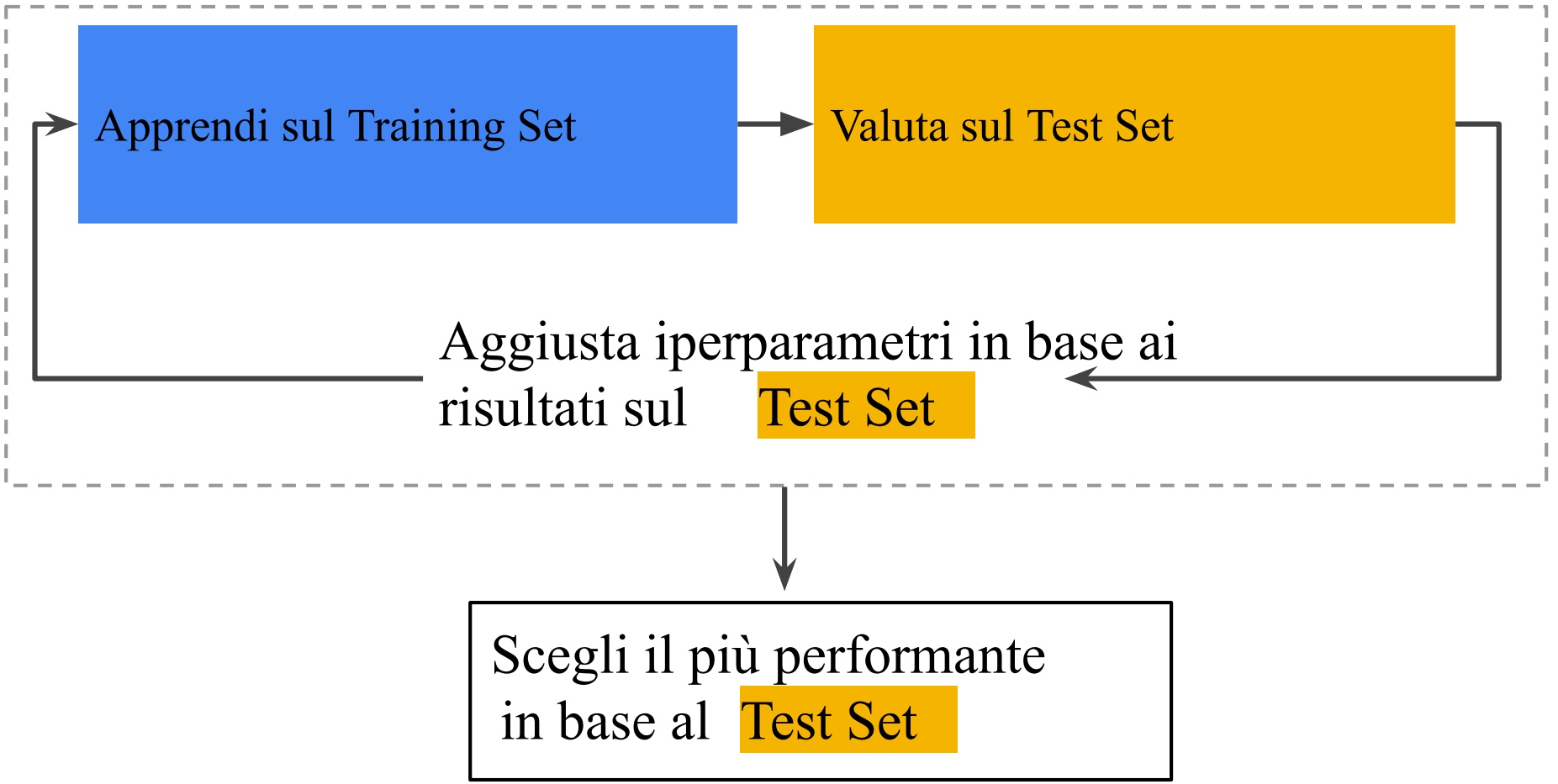
Impostazione degli iperparametri

Molti metodi di apprendimento richiedono di specificare iperparametri:

- η e T negli algoritmi basati su Gradient Descent
- K nei metodi K-Nearest Neighbor
- λ nei metodi con regolarizzazione
- ...

Quale metodologia per selezionare i valori degli iperparametri?

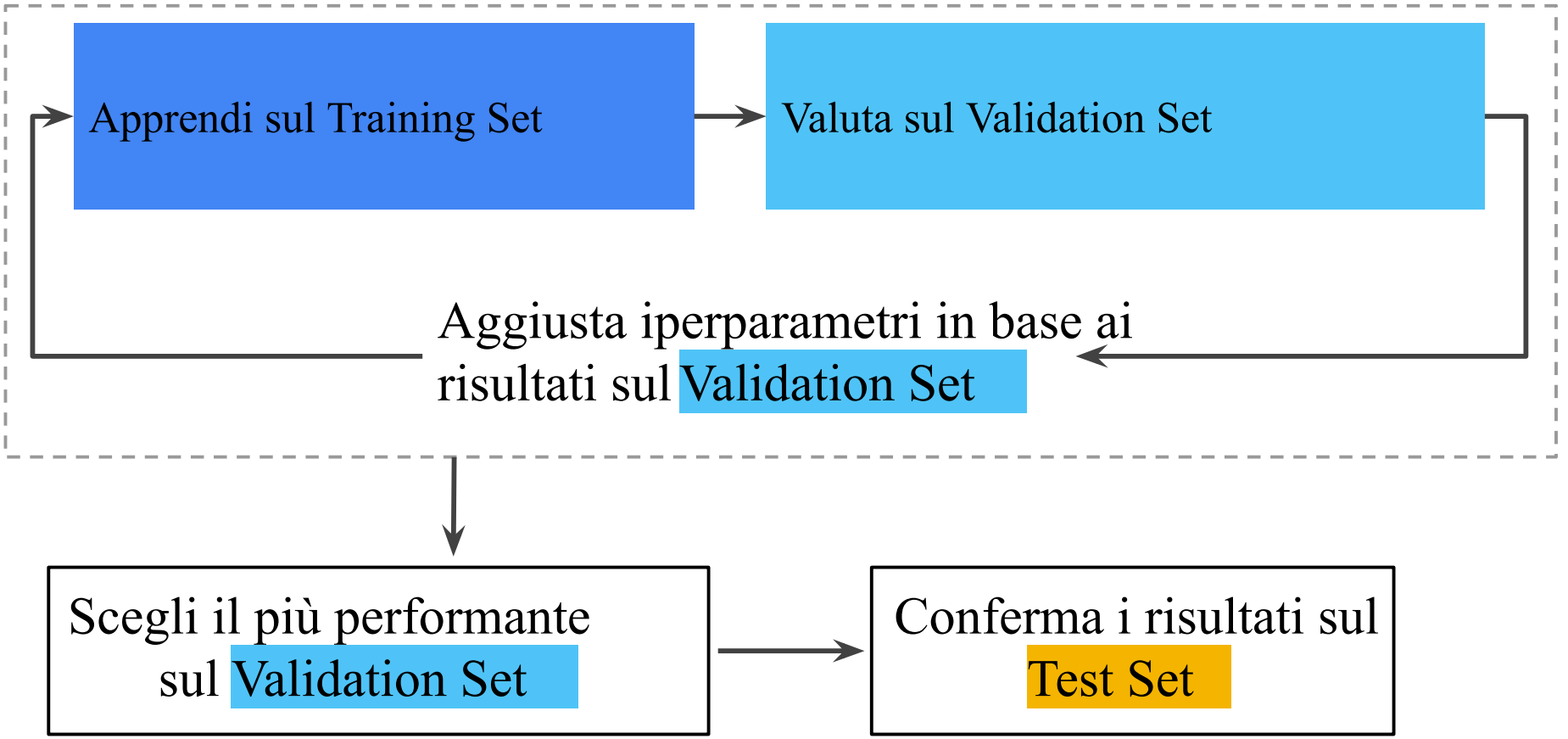
Un possibile schema di lavoro?



Il validation set

Separiamo a caso i dati di esempio a nostra disposizione in tre insiemi:

Uso di un validation set



Dimensionamento dei vari insiemi

- Validation set e test set devono essere sufficientemente grandi da poter stimare con la precisione desiderata il rischio atteso
- Compatibilmente col punto precedente, il training set deve essere il più grande possibile; sarà sempre il più grande dei tre insiemi

Dimensione del test set e stima del rischio atteso

Teorema (Dimensione del test set)

Sia h un'ipotesi e si consideri una funzione costo a valori in $[0, b]$. Allora per ogni $\delta \in (0, 1)$, con probabilità almeno $1 - \delta$ sulla scelta di un test set T di dimensione m_T si ha

$$|L_T(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \leq b\sqrt{\frac{\log(2/\delta)}{2m_T}}$$

Interpretazione: l'errore con cui il test set stima il rischio atteso decresce con la radice quadrata della dimensione del test set
$\Rightarrow$ per una stima di $L_{\mathcal{D}}(h) \pm 1\%$ è sufficiente m_T dell'ordine di 10,000

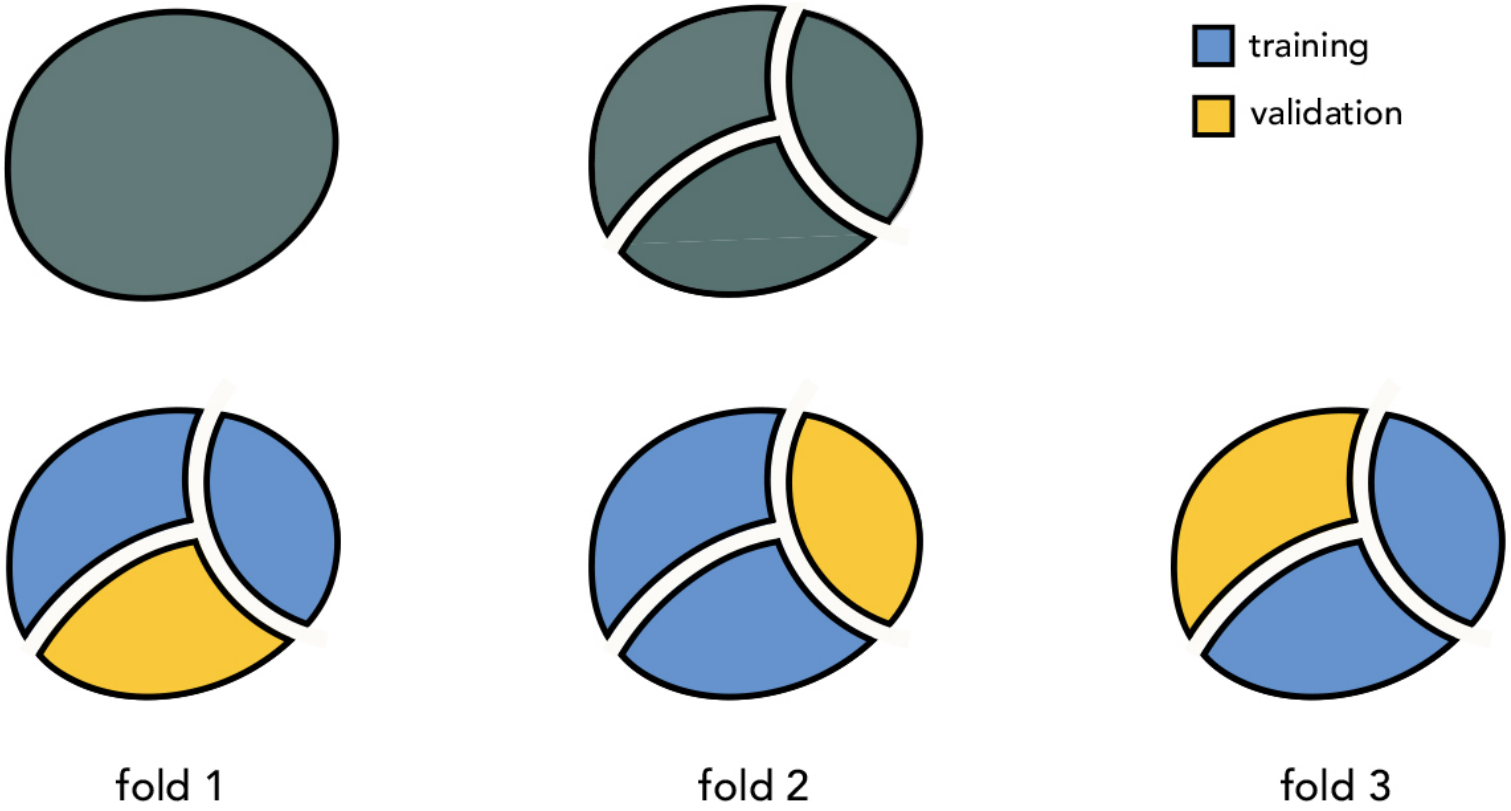
Dimensionamento dei vari insiemi in pratica

- Per dataset piccoli o medi ($\approx$ 100 – 10,000 osservazioni) è spesso usata una suddivisione 70%-30% oppure 60%-20%-20%:
  70% per il training set, 30% per il test set, o
  60% per il training set, 20% per il validation set, 20% per il test set
- Per dataset grandi ($\approx$ 100,000 – 1,000,000 osservazioni e oltre) può essere sufficiente mantenere validation set e test set intorno alle 10,000 o 100,000 osservazioni

Esempio: 1,000,000 osservazioni
98% training set, 1% validation set, 1% test set può essere accettabile

Validazione incrociata [Cross-validation]

Se i dati scarseggiano, possiamo fare a meno del validation set?



Validazione incrociata [Cross-validation]

K intero positivo (valore spesso utilizzato: $K = 10$)

K-fold Cross Validation (K-CV)

1. Partiziona il training set S in K sottoinsiemi (*fold*) $S_1, \ldots, S_K$
2. Ripeti per $i = 1, \ldots, K$:
   - Apprendi un'ipotesi h_i usando tutti i dati in S tranne quelli in S_i
   - Stima il rischio atteso di h_i usando i dati in S_i: $L_{S_i}(h_i)$
3. Restituisci, come stima del rischio atteso dell'ipotesi appresa su S, il rischio medio di validazione:

$$\frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} L_{S_i}(h_i)$$

Avvertenza: la validazione incrociata è un'euristica che spesso funziona bene in pratica, ma raramente è supportata da garanzie teoriche

Validazione incrociata per la selezione di un modello

La validazione incrociata permette anche di selezionare gli iperparametri

K-CV per la selezione degli iperparametri

Input: training set S, insieme di iperparametri Θ, algoritmo A, intero K

1. Partiziona il training set S in K sottoinsiemi (*fold*) $S_1, \ldots, S_K$
2. Per ogni $\theta \in \Theta$:
   - Per $i = 1, \ldots, K$: $h_{i,\theta} = A(S \setminus S_i; \theta)$
   - $\mathrm{risk}(\theta) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} L_{S_i}(h_{i,\theta})$
3. $\theta^* = \mathrm{argmin}_\theta \, \mathrm{risk}(\theta)$
4. $h^* = A(S; \theta^*)$

Riduzione delle feature

Perché ridurre le feature?

Supponiamo di avere d variabili di input e m osservazioni

Ridurre il numero di predittori (d) può essere importante per:

- Tenere sotto controllo la varianza (specialmente quando $d > m$)
- Migliorare l'interpretabilità del modello

Metodi di riduzione delle feature

- *Selezione*: selezioniamo un sottoinsieme di $d' < d$ predittori
- *Shrinkage (regolarizzazione)*: penalizziamo modelli in cui tanti predittori hanno grande influenza sulla predizione
- *Proiezione*: proiettiamo i d predittori su un sottospazio d'-dimensionale con $d' < d$

NB. Qui illustreremo i metodi nel contesto della regressione lineare, ma i principi sono generali

Metodi di selezione

Selezione: Best Subset Selection

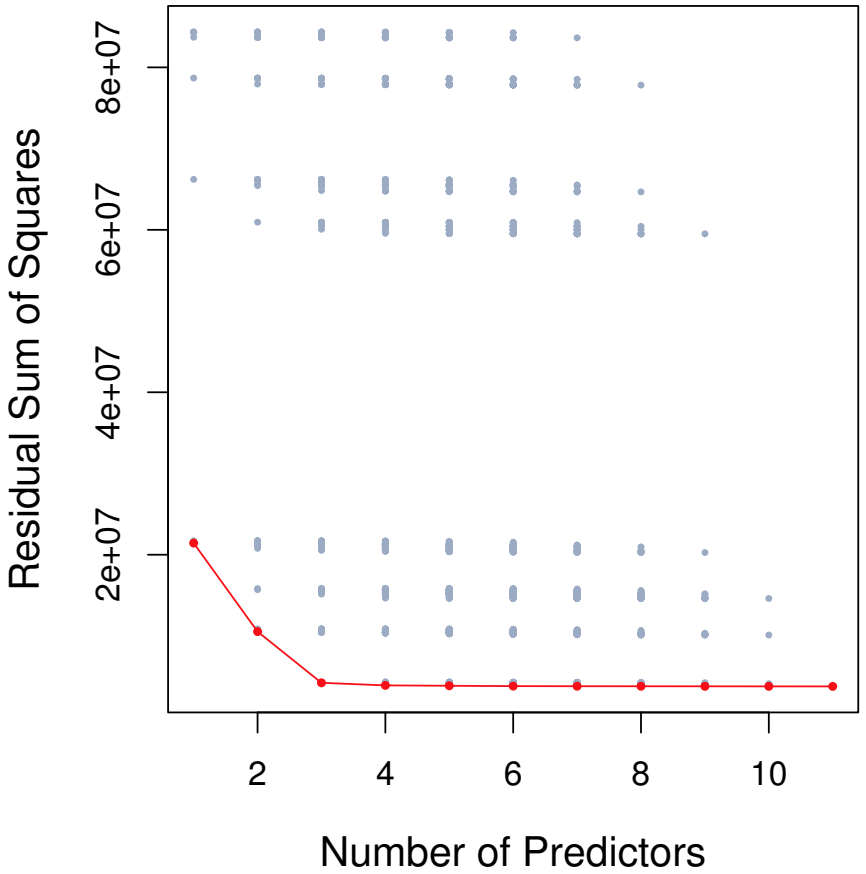
Best Subset Selection

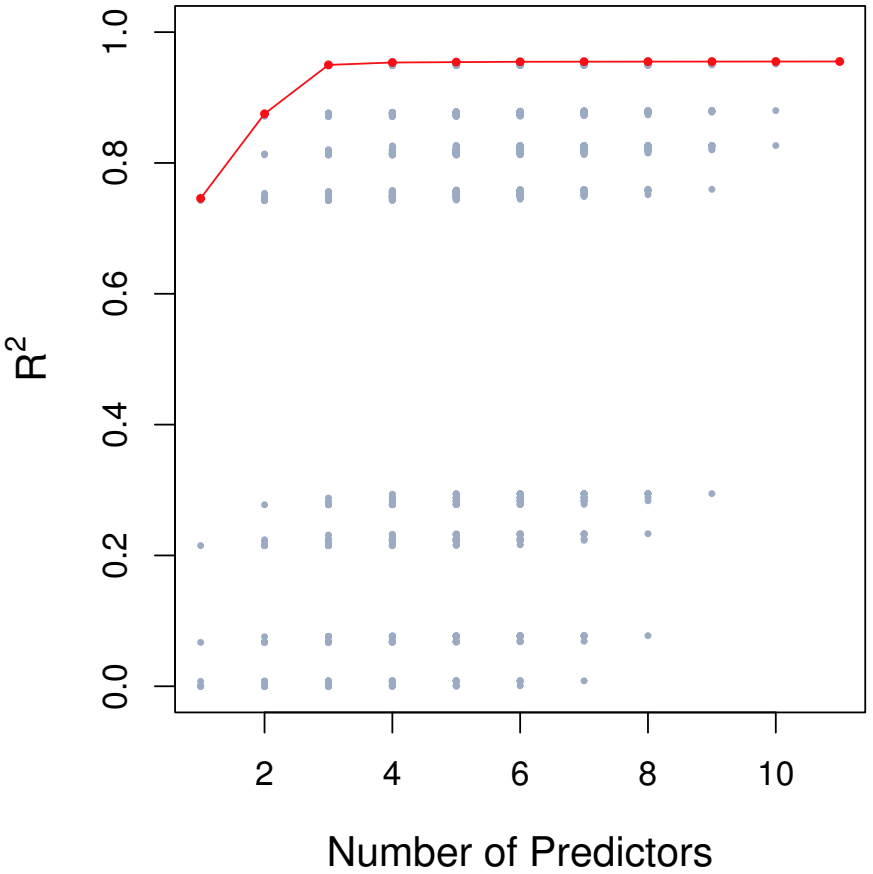
1. $h_0 \leftarrow$ miglior ipotesi costante, cioé con 0 predittori
   Per esempio, nella regressione lineare,

$$h_0(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} y^{(i)}$$

2. Per $k = 1, 2, \ldots, d$,
   - Apprendi tutte le $\binom{d}{k}$ ipotesi consistenti di k predittori
   - $h_k \leftarrow$ ipotesi col miglior rischio empirico tra queste
3. Restituisci l'ipotesi $h \in \{h_0, h_1, \ldots, h_d\}$ col minimo rischio atteso stimato sul validation set (o con la validazione incrociata)

Esempio di Best Subset Selection





Best Subset vs. selezione passo-passo

- Il numero totale di ipotesi considerate è 2^d: inapplicabile se d è molto grande
- Se d è grande, lo spazio di ricerca è enorme e può dare luogo ad overfitting
- Per questo motivo, un'alternativa è costituita dai metodi di *selezione passo-passo*

Selezione passo-passo in avanti

- Inizia con un'ipotesi senza predittori
- Aggiungi un predittore alla volta: quello che fornisce il massimo incremento della qualità del fit
- Restituisci l'ipotesi col minimo rischio atteso stimato (sul validation set) tra tutte le $d + 1$ ipotesi costruite

Selezione passo-passo in avanti

Forward Stepwise Selection

1. $h_0 \leftarrow$ miglior ipotesi costante, con 0 predittori
   - Per $k = 0, \ldots, d-1$, considera tutte le $d - k$ ipotesi con un predittore in più di h_k
   - $h_k \leftarrow$ ipotesi col miglior rischio empirico tra queste
2. Restituisci l'ipotesi $h \in \{h_0, h_1, \ldots, h_d\}$ col minimo rischio atteso stimato sul validation set (o con la validazione incrociata)

Vantaggi e svantaggi di Forward Stepwise Selection

- Ipotesi esplorate: $d + 1$ anziché 2^d
- Non garantisce il miglior modello tra i 2^d possibili

Esempio: `Credit` dataset

k	Best Subset	Forward Stepwise
1	`rating`	`rating`
2	`rating, income`	`rating, income`
3	`rating, income, student`	`rating, income, student`
4	`cards, income, student, limit`	`rating, income, student, limit`

Metodi di shrinkage e regolarizzazione

Regolarizzazione

Come cercare automaticamente un equilibrio tra bias e varianza?

Una *funzione di regolarizzazione* è una funzione $R : \mathcal{H} \to \mathbb{R}_+$

$R(h)$ è una qualche misura di complessità dell'ipotesi h

Regularized Loss Minimization (RLM)

Dato un insieme di esempi S, cerca una regola di predizione h che minimizzi il rischio empirico di h su S, più $R(h)$:

$$\min_{h \in \mathcal{H}} L_S(h) + R(h)$$

Se l'ipotesi h è codificata dai coefficienti $w \in \mathbb{R}^{d+1}$, scriveremo anche $R(w)$
(in tal caso R è vista come funzione definita su $\mathbb{R}^{d+1}$ anziché su $\mathcal{H}$)

Regressione Ridge

$w = (w_0, w_1, \ldots, w_d)$ include il termine costante w_0
$\omega = (w_1, w_2, \ldots, w_d)$ non lo include

Regolarizzazione ℓ_2 (di Tikhonov)

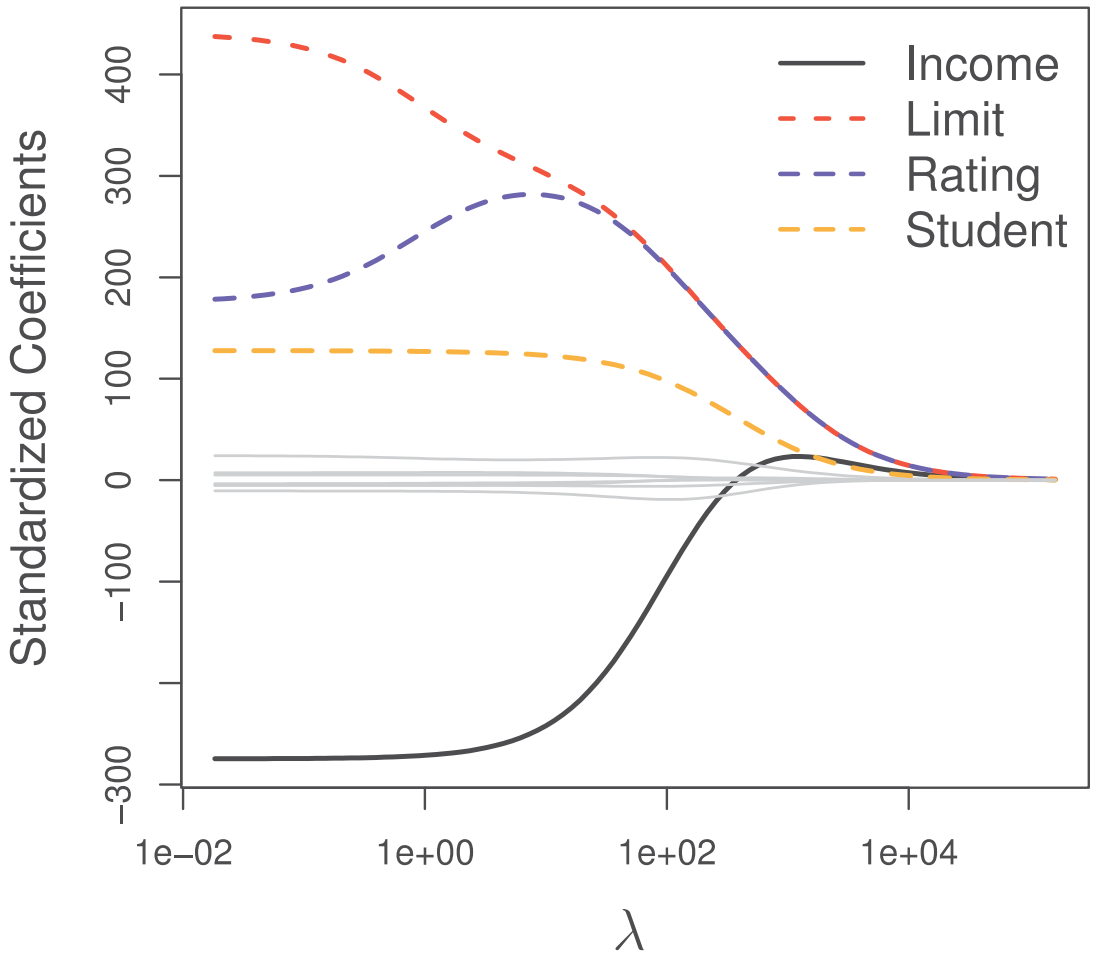
$$R(w) = \lambda(w_1^2 + w_2^2 + \ldots + w_d^2) = \lambda \|\omega\|_2^2 \qquad (\lambda \geq 0)$$

$\Rightarrow$ Regressione Ridge

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} L_S(h_w) + \lambda \|\omega\|^2 = \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \frac{1}{m} \|Xw - y\|^2 + \lambda \|\omega\|^2$$

- Per $\lambda = 0$, coincide con il metodo dei minimi quadrati
- Per $\lambda \to \infty$, i coefficienti w_k tendono a 0
- Ammette soluzione in forma chiusa: $w^* = (X^\top X + \lambda m \cdot I_0)^{-1} X^\top y$

Regressione Ridge



Valori dei coefficienti di una regressione ridge in funzione di λ

Regressione regolarizzata e standardizzazione delle variabili

Nella regressione regolarizzata è importante *standardizzare* i predittori, centrandoli sulla media e scalandoli per la deviazione standard:

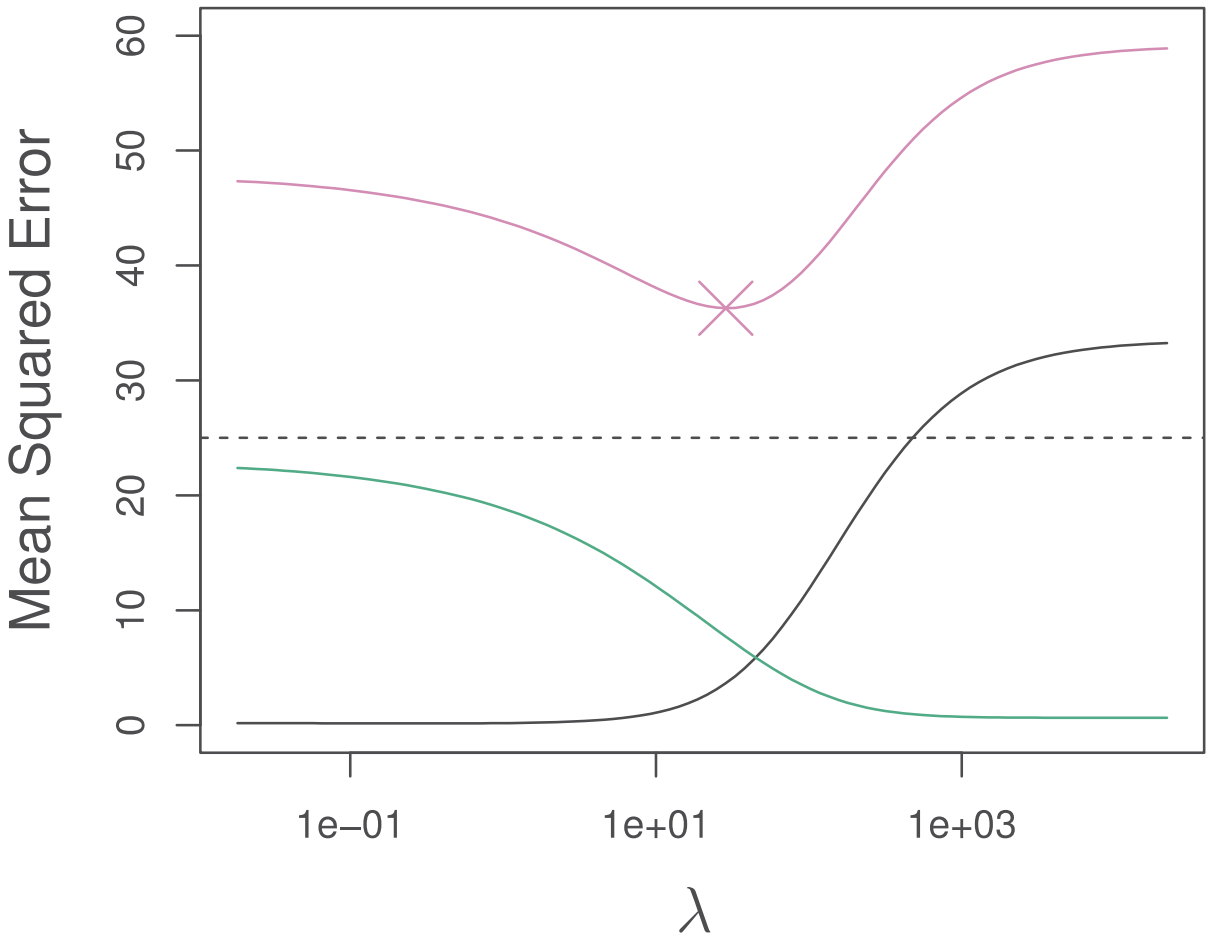
Standardizzazione di una variabile

Se v è un predittore, con esempi di valore $v_1, \ldots, v_m$ e media $\bar{v}$, poniamo

$$v \leftarrow \frac{v - \bar{v}}{\sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(v_i - \bar{v})^2}}$$

Questo non era necessario nella regressione lineare, perché lì i coefficienti erano *equivarianti* rispetto alla scala: moltiplicare v per c scalava il coefficiente corrispondente di $1/c$

Regressione Ridge



Bias^2 (nero), varianza (verde) e MSE di test (viola) per una regressione ridge in funzione di λ

Regressione LASSO

Regolarizzazione ℓ_1

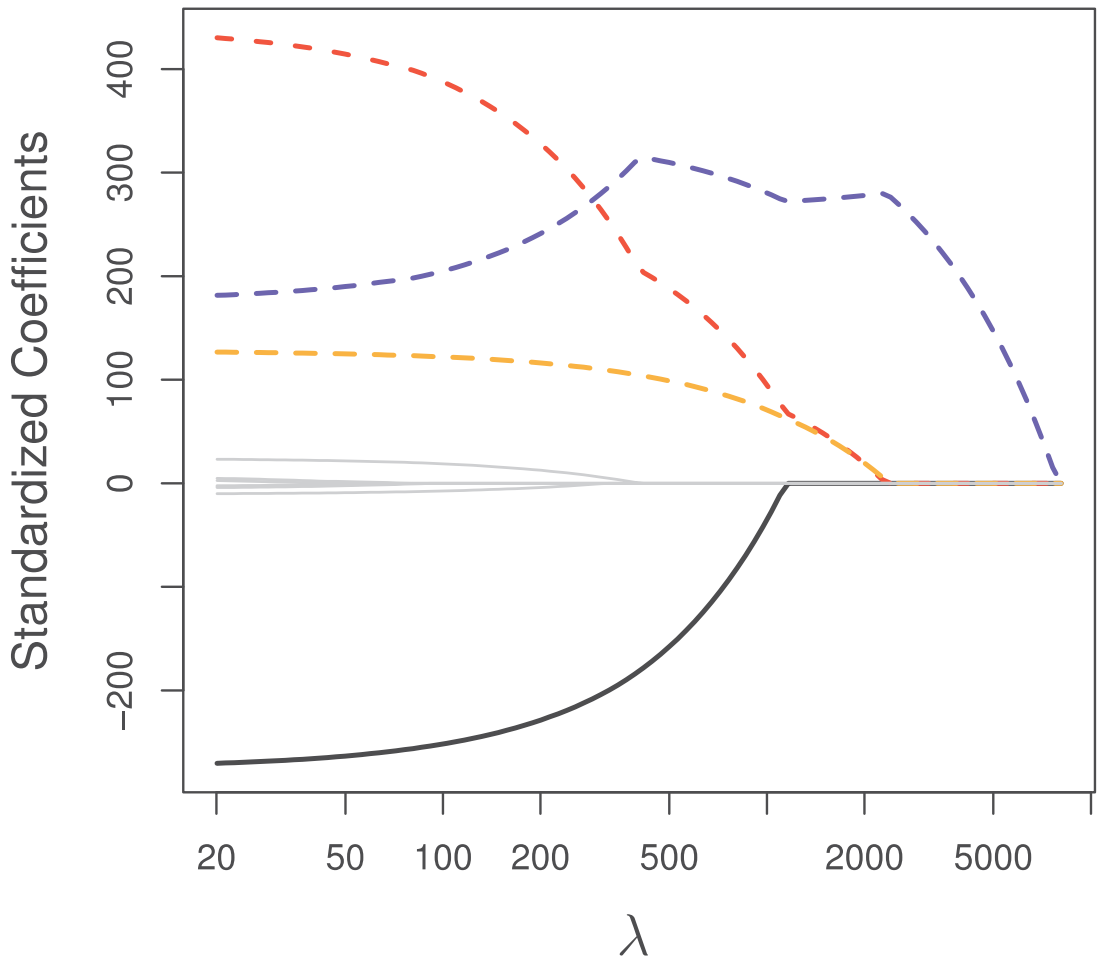
$$R(w) = \lambda(|w_1| + |w_2| + \ldots + |w_d|) = \lambda \|\omega\|_1 \qquad (\lambda \geq 0)$$

$\Rightarrow$ Regressione LASSO

$$\min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} L_S(h_w) + \lambda \|\omega\|_1 = \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \frac{1}{m} \|Xw - y\|^2 + \lambda \|\omega\|_1$$

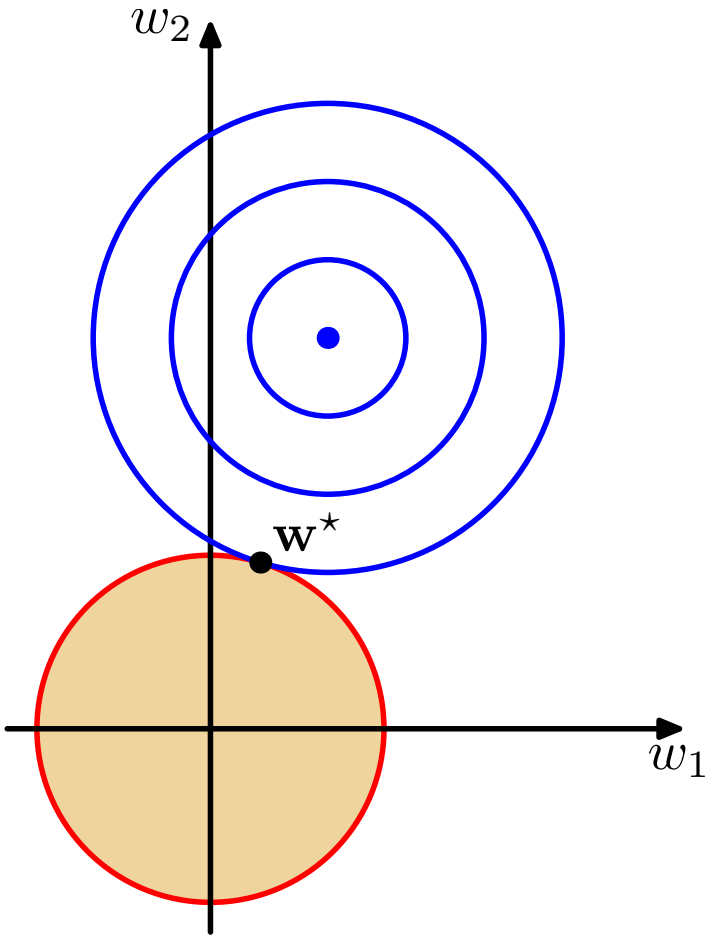
- Per $\lambda = 0$, coincide con il metodo dei minimi quadrati
- Per $\lambda \to \infty$, i coefficienti w_k tendono a 0
- Per λ crescente, alcuni coefficienti diventano esattamente pari a 0 ($\Rightarrow$ incentiva modelli *sparsi*)

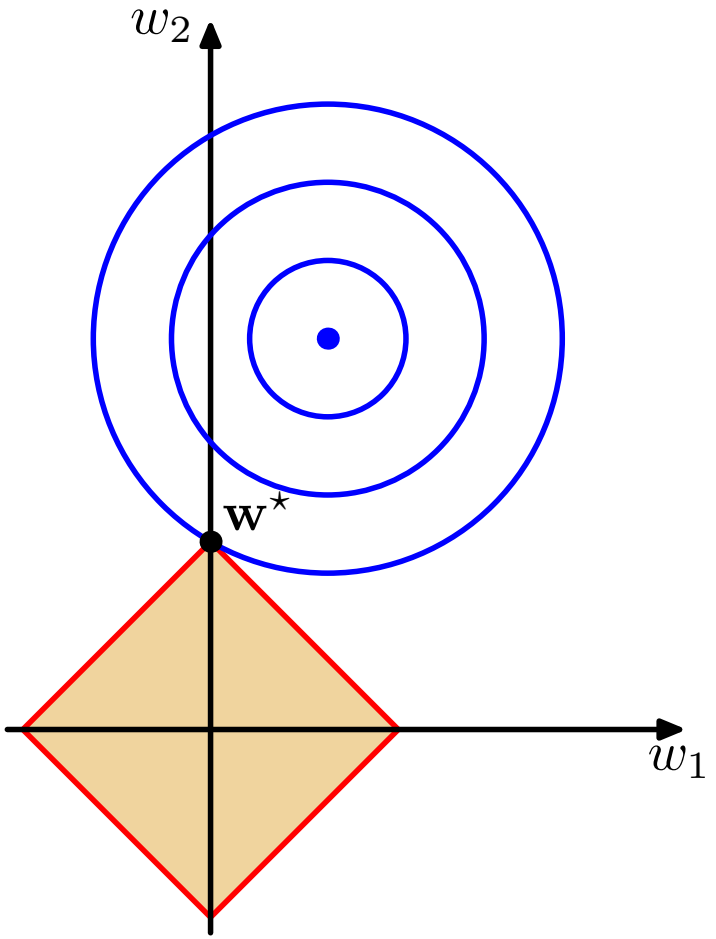
Regressione LASSO



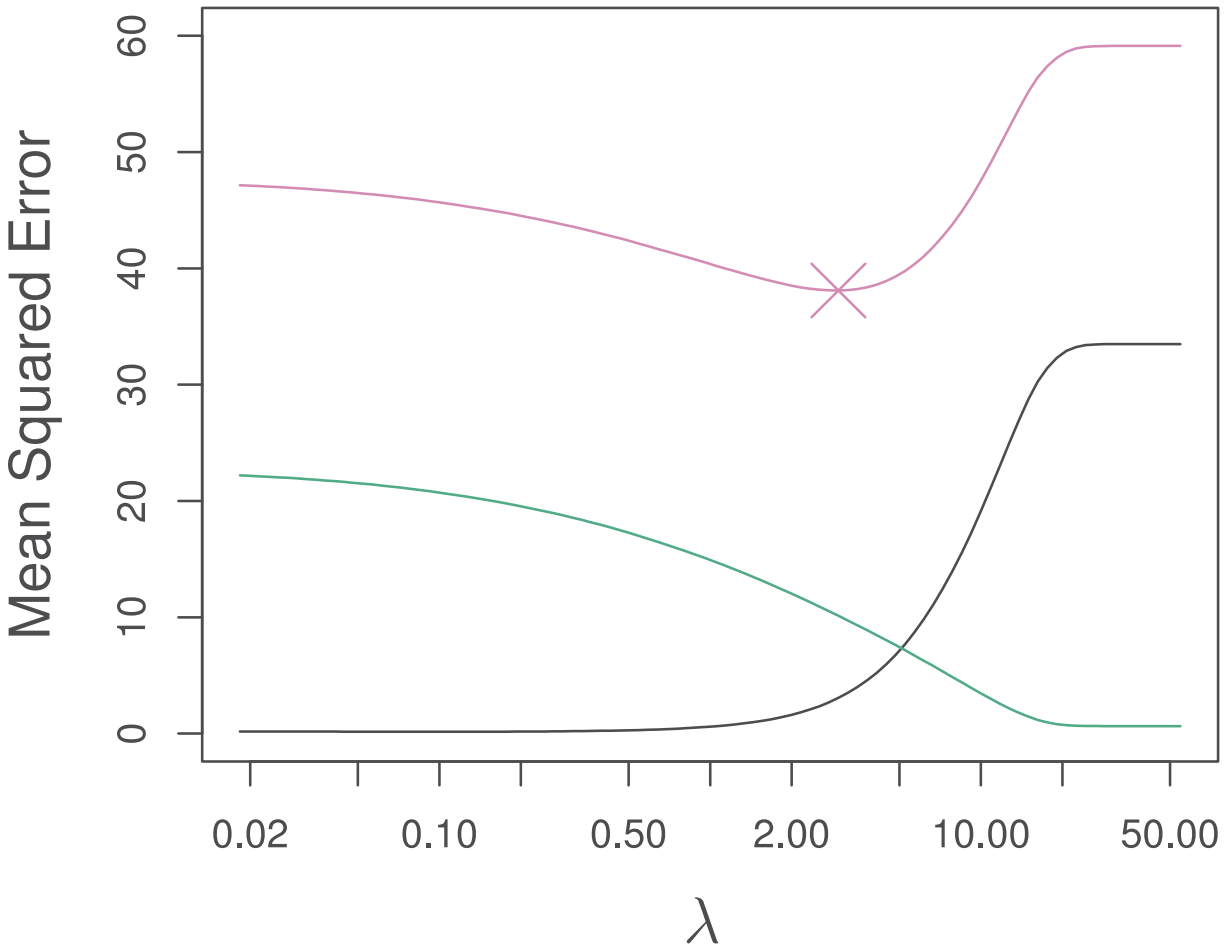
Valori dei coefficienti di una regressione LASSO in funzione di λ

Ridge ($\lambda \|w\|_2^2$) vs. LASSO ($\lambda \|w\|_1$)





Regressione LASSO



Bias^2 (nero), varianza (verde) e MSE di test (viola) per una regressione LASSO in funzione di λ

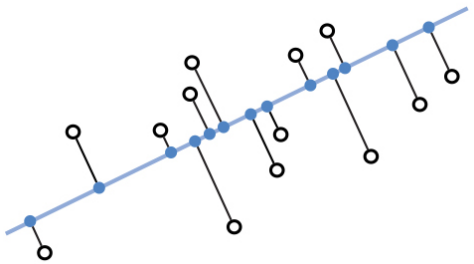
Metodi di regressione regolarizzata in `scikit-learn`

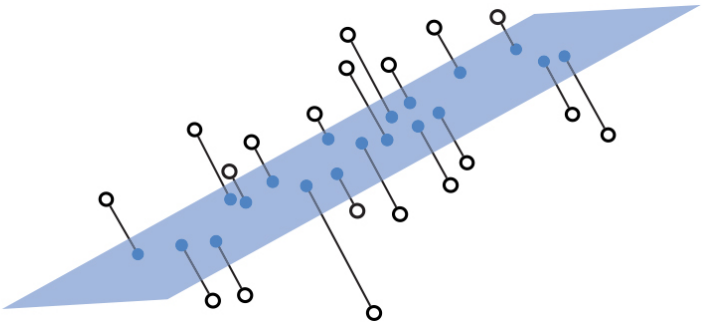
	Iperparametri	Interfaccia `scikit-learn`
Ridge (diretto)	λ	`Ridge`
Ridge (SGD)	η, T, λ	`SGDRegressor(penalty='l2')`
LASSO (SGD)	η, T, λ	`SGDRegressor(penalty='l1')`

Metodi di proiezione

Parleremo dei metodi di proiezione nel contesto dell'apprendimento non supervisionato

Esempio tipico: Principal Component Analysis





Debugging dell'apprendimento

Esempio di scenario

- Filtro spam. Avete scelto un insieme di 100 parole da utilizzare come feature (invece di utilizzare 50000+ parole della lingua).
- La regressione logistica regolarizzata, implementata tramite discesa del gradiente, ottiene un errore di test del 20%, che per la vostra applicazione è inaccettabile
- Cosa fate ora?

Messa a punto dell'algoritmo di apprendimento

- Approccio possibile: provare a migliorare l'algoritmo in diversi modi
  - Ottenendo più esempi di training
  - Provando un insieme di feature più piccolo
  - Provando un insieme di feature più grande
  - Usando feature diverse: intestazione mail vs. corpo mail
  - Aumentando il numero di iterazioni di Gradient Descent
  - Usando un metodo di ottimizzazione del secondo ordine
  - Usando un diverso valore del coefficiente di regolarizzazione λ
  - Usando una Support Vector Machine anziché la regressione logistica
- Questo approccio potrebbe funzionare, ma richiede molto tempo, e rischia di diventare una questione di fortuna

Diagnosi di bias e varianza

Approccio preferibile:

- Diagnosi del problema incontrato dall'apprendimento
- Correzione del problema

Nel nostro scenario, l'errore di test (20%) è troppo alto

Supponiamo che sospettiate che il problema sia uno tra i seguenti due:

- Overfitting (varianza alta)
- Troppe poche feature per una corretta classificazione dello spam (bias alto)

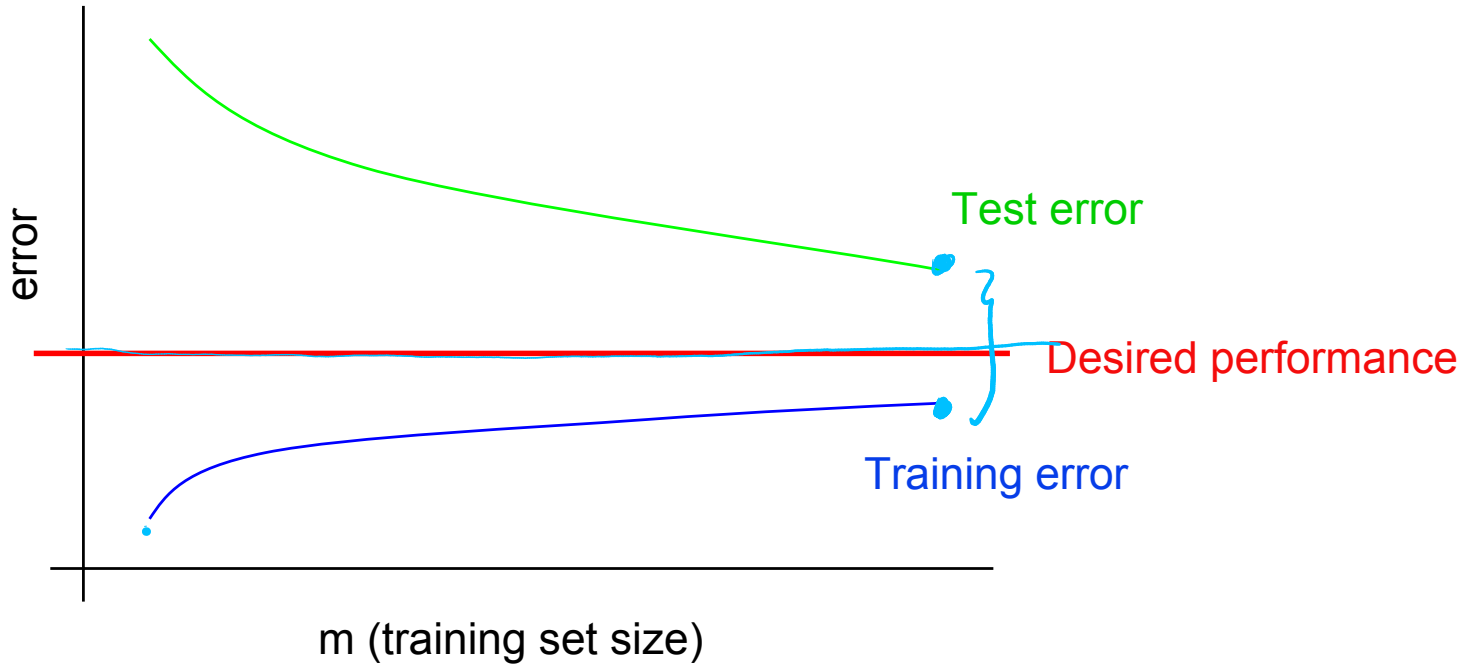
Errore training set vs Errore validation set (o test set)

Diagnosi:

- Varianza alta: l'errore di training sarà sostanzialmente inferiore dell'errore di test
- Bias alto: l'errore di training sarà alto, quasi quanto quello di test

Bias vs. varianza e curve di apprendimento

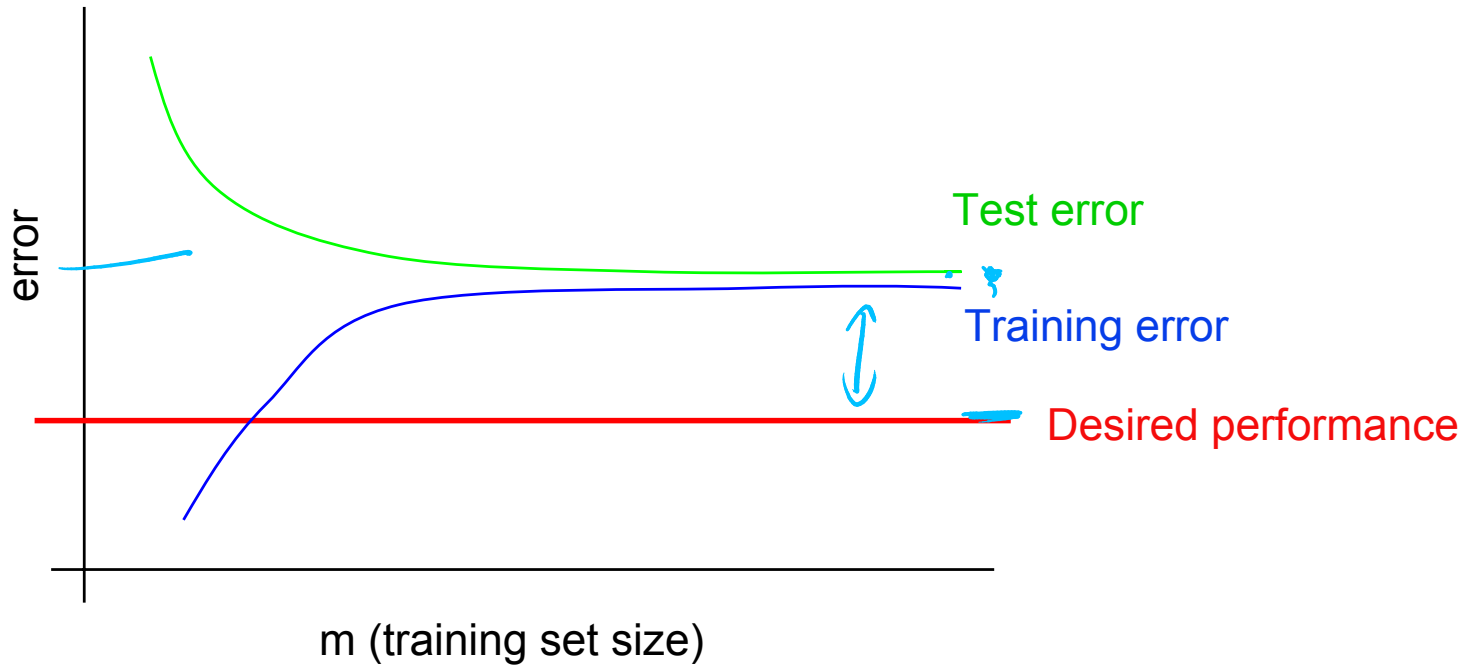
Curva di apprendimento tipica quando la varianza è alta:



- L'errore di test continua a decrescere con m crescente. Ciò suggerisce che un training set più grande possa essere utile
- Grande gap tra errore di test ed errore di training

Bias vs. varianza e curve di apprendimento

Curva di apprendimento tipica quando il bias è alto:



- Già l'errore di training è troppo alto!
- Piccolo gap tra errore di test ed errore di training

La diagnosi ci dice come intervenire

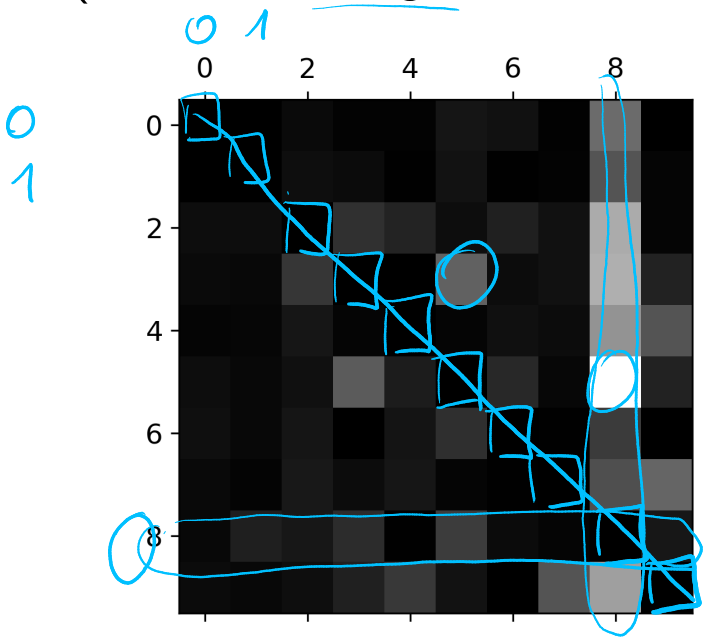
Nel nostro scenario, si può intervenire:

- Ottenendo più esempi di training — Diminuisce la varianza
- Provando un insieme di feature più piccolo — Diminuisce la varianza
- Provando un insieme di feature più grande — Diminuisce il bias
- Usando l'intestazione della mail — Diminuisce il bias
- Aumentando il numero di iterazioni di Gradient Descent
  Corregge l'algoritmo di ottimizzazione
- Usando un metodo del secondo ordine
  Corregge l'algoritmo di ottimizzazione
- Usando un diverso valore del coefficiente di regolarizzazione λ
  Aumentare λ diminuisce la varianza
- Usando una Support Vector Machine
  Corregge l'obiettivo dell'ottimizzazione

Analisi degli errori

Esempio: classificazione cifre MNIST

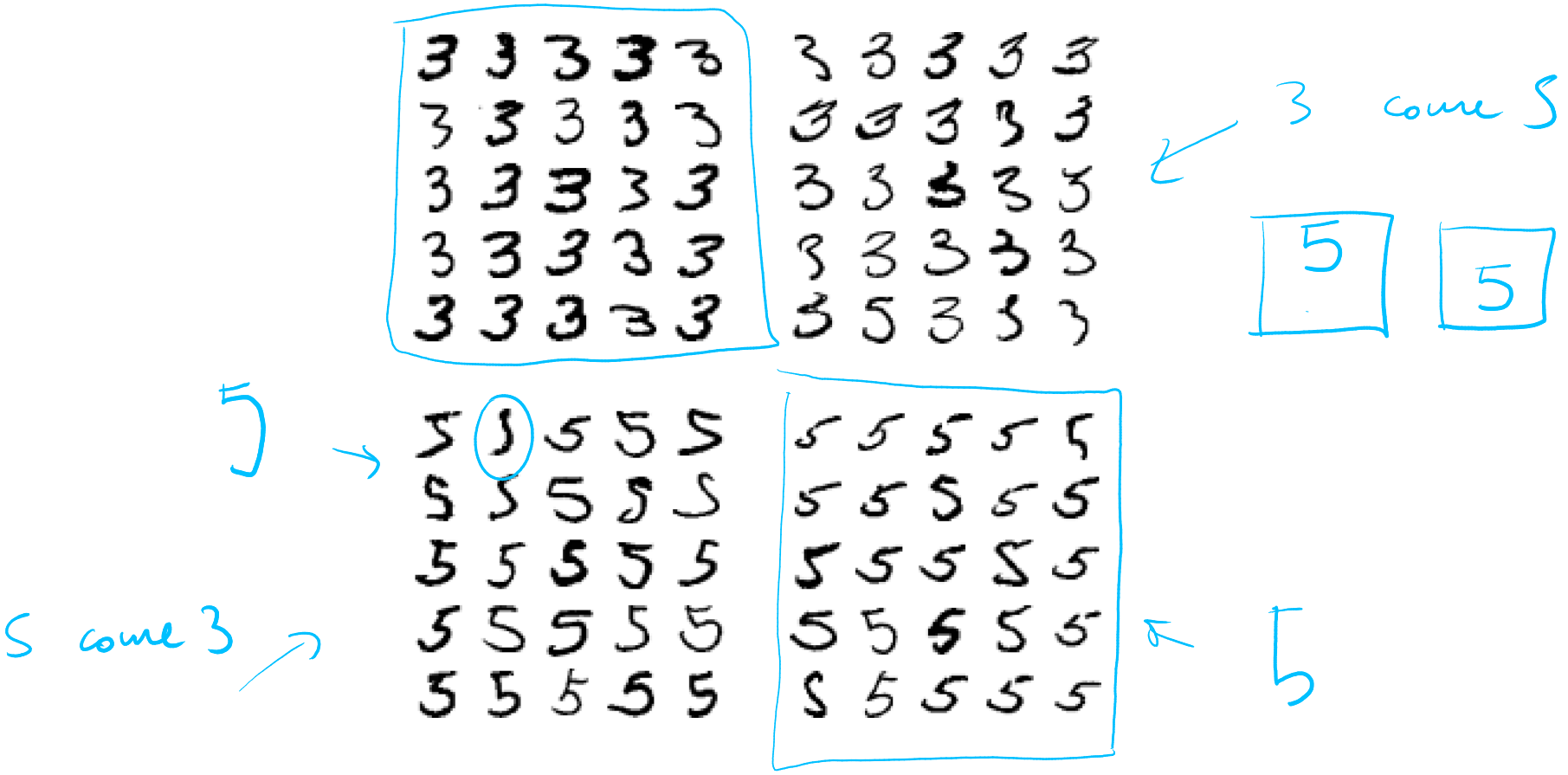
Analizziamo la matrice di confusione per capire quali classi vengono confuse con quali altre (**nota**: la diagonale è stata azzerata)



- Molte cifre (ad es., tanti 5) vengono facilmente confuse con degli 8
- I veri 8 vengono per lo più classificati correttamente
- Sembra utile aggiungere esempi che sembrano 8 ma non lo sono

Analisi degli errori

Analizziamo errori individuali per capire perché il classificatore fallisce



- Il classificatore sembra troppo sensibile a traslazione e rotazione
- Ciò suggerisce di centrare e "raddrizzare" le immagini

Conclusioni

- Il tempo investito nella diagnosi dell'algoritmo di apprendimento è tempo ben investito
- La diagnosi di bias e varianza è molto utile e può essere semplice
- L'analisi degli errori può fornire altre informazioni utili