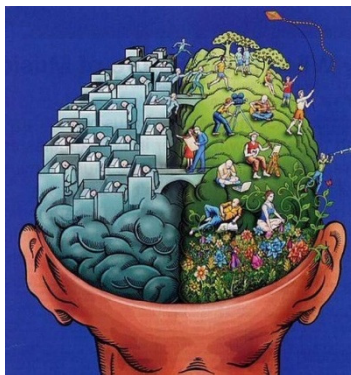




Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Méréstechnika és Információs rendszerek Tanszék



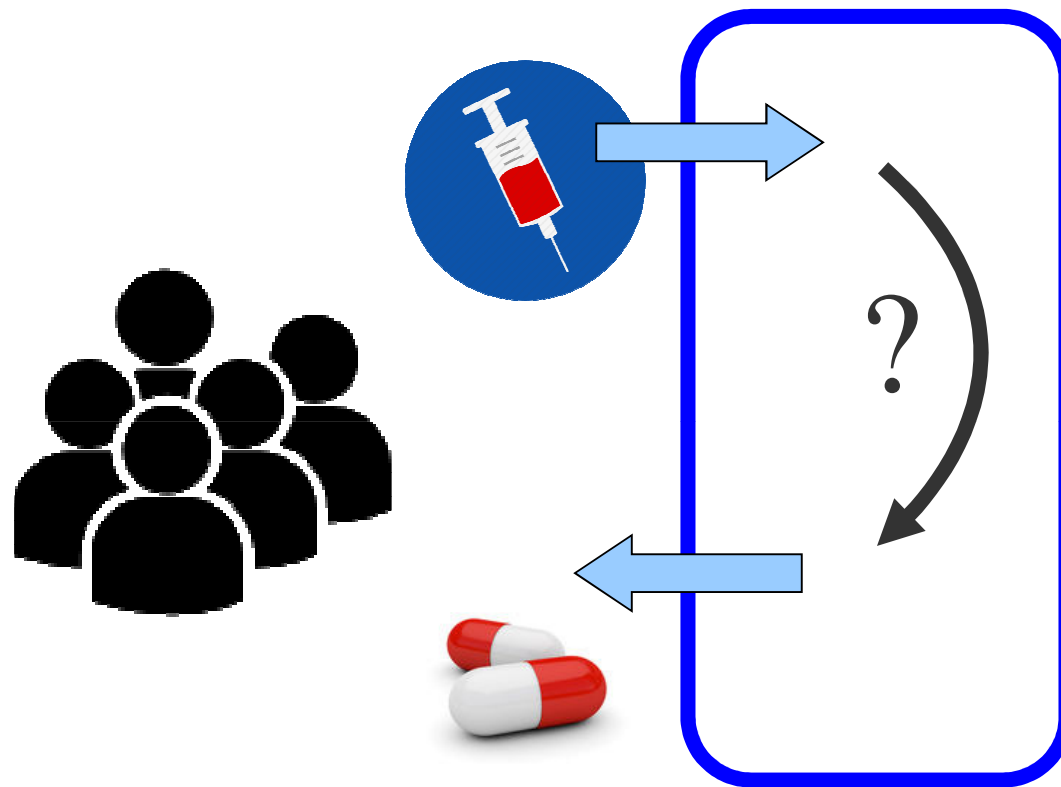
Tanulás, döntés és minősítés

Előadó: Dr. Hullám Gábor

Előadás anyaga: Dr. Dobrowiecki Tadeusz
Dr. Pataki Béla



Az észleléseink alapján térjünk át injekcióról tablettára!
Ez jó döntés?



Jó döntést szeretnénk hozni.

De mi a jó döntés?

- Általában nincs tökéletesen jó döntés, csak az egyik jobb, a másik rosszabb!
- Ahhoz, hogy össze tudjunk hasonlítani két alternatívát (döntési módszert), kell legyen a döntés jóságát jellemző (skalár) mérőszámunk
- **Először a döntések minősítésével, értékelésével foglalkozunk**
- Alapvetően bináris (jó/rossz, igaz/hamis, beteg/egészséges, ártatlan/bűnös) döntéseken mutatjuk be a módszereket

A döntések értékelése: melyik a jó döntés?

Kétértékű függvény $\Rightarrow$ osztályozás = bináris döntés

igazi állapot $f(x)$ tény	feltételezett állapot $h(x)$ hipotézis, döntés	helyzet
paciens beteg $f(x) = I$	felismerjük $h(x) = I$	kezeljük, helyesen tesszünk Valós Pozitív, True Positive TP
paciens egészséges felismerjük $f(x) = H$	$h(x) = H$	nem kezeljük, most is jól teszünk, Valós Negatív, True Negative TN
paciens beteg $f(x) = I$	nem ismerjük fel $h(x) = H$	nem kezeljük, nem járunk el jól, Hamis Negatív, False Negative FN, („elnezett támadás”, <u>2. tip. hiba</u>)
paciens egészséges $f(x) = H$	nem ismerjük fel $h(x) = I$	kezeljük fölöslegesen, nem járunk el jól, Hamis Pozitív, False Positive FP, („hamis riadó”, <u>1. tip. hiba</u>)

true positive rate (TPR)

valódi pozitív arány, érzékenység
(hit rate, recall, sensitivity)

$$\text{TPR} = \text{TP}/P = \text{TP} / (\text{TP}+\text{FN})$$

true negative rate (TNR)

valódi negatív arány, specificitás
(specificity)

$$\text{TNR} = \text{TN}/N = \text{TN} / (\text{TN}+\text{FP})$$

false positive rate (FPR)

hamis pozitív arány
(false alarm rate, fall-out)

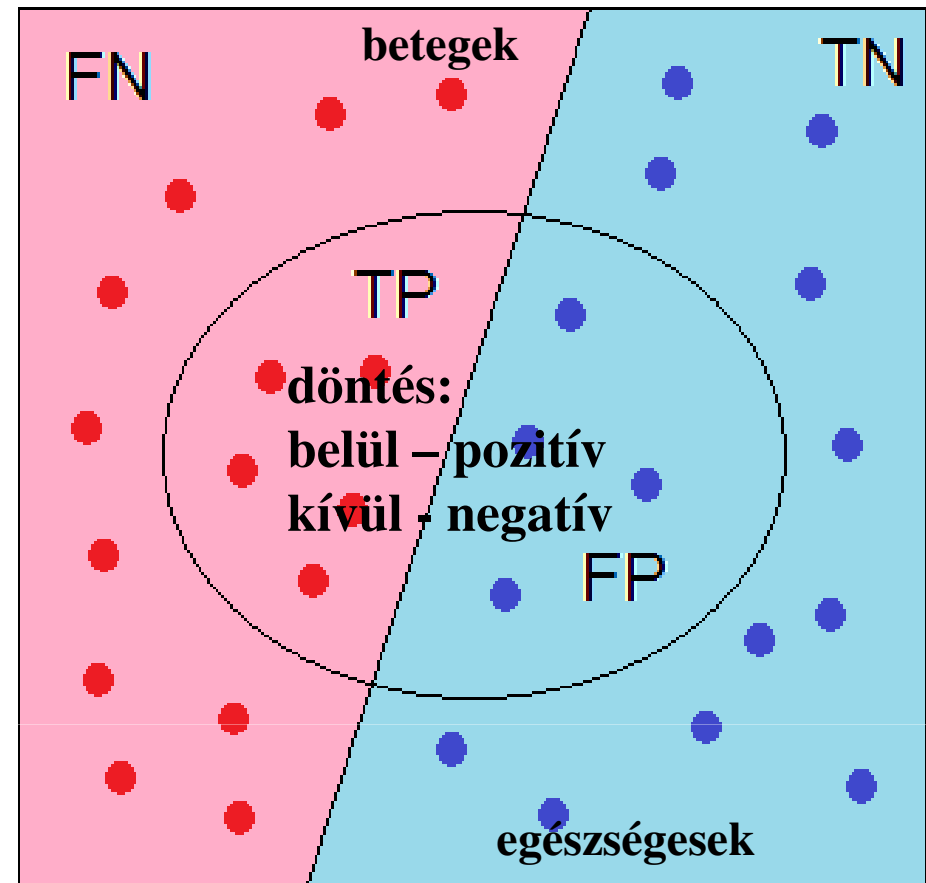
$$\text{FPR} = \text{FP}/N = \text{FP} / (\text{FP}+\text{TN})$$

és sok egyéb más mérőszám ...

Az ábrán vázolt esetben:

Döntéseink: TP = 5, TN = 11,
FP = 4, FN = 10

Tények: P = 15, N = 15



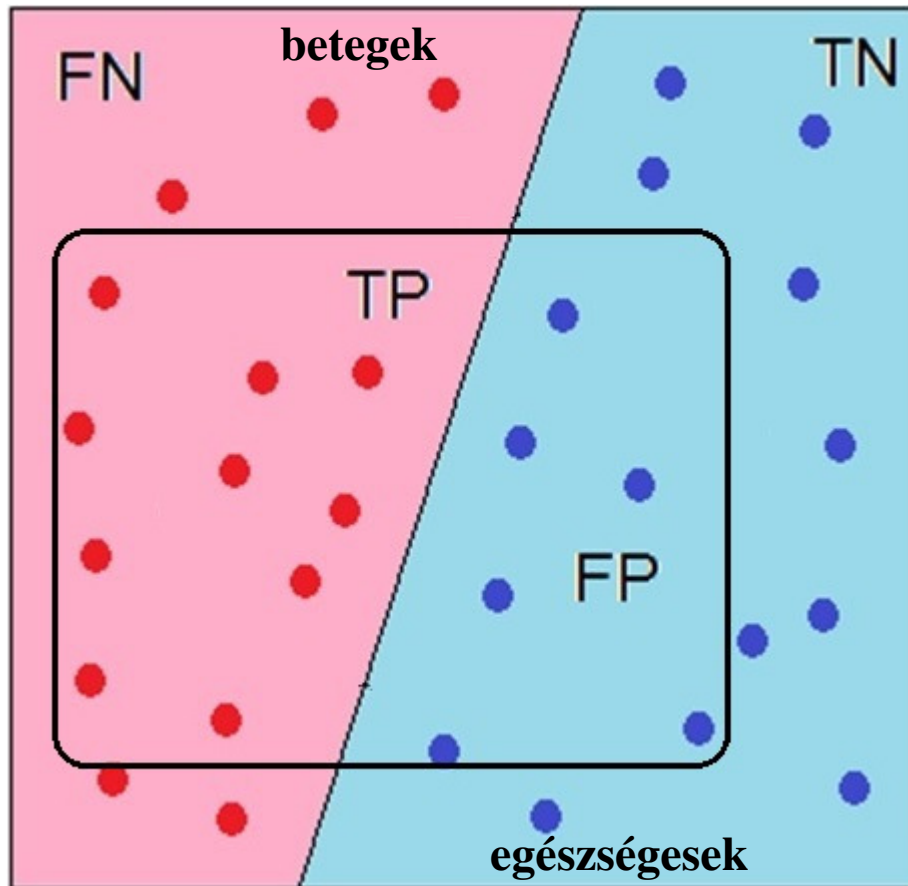
$$\text{TPR} = \text{TP} / (\text{TP}+\text{FN}) = 5/15 = .33$$

$$\text{FPR} = \text{FP} / (\text{FP}+\text{TN}) = 4/15 = .26$$

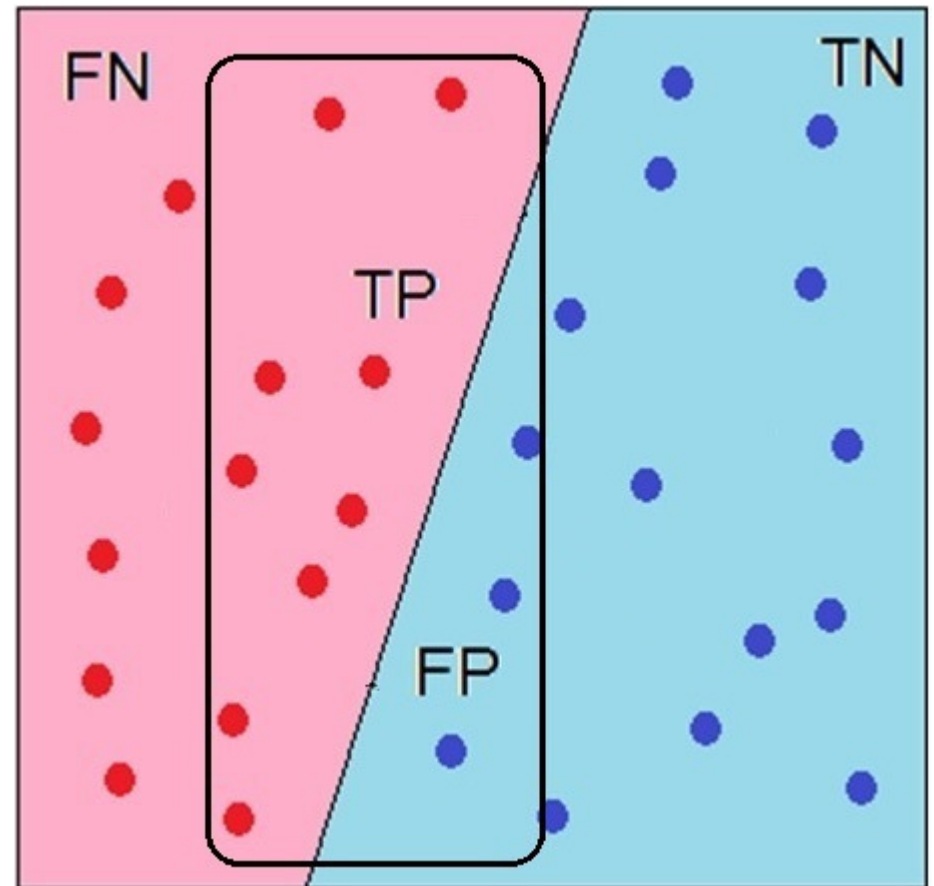
$$\text{ACC} = (\text{TP}+\text{TN})/(\text{P}+\text{N}) = 1/2 = .5$$

Néhány más javaslatra is kipróbáltuk...

Melyik jobb?

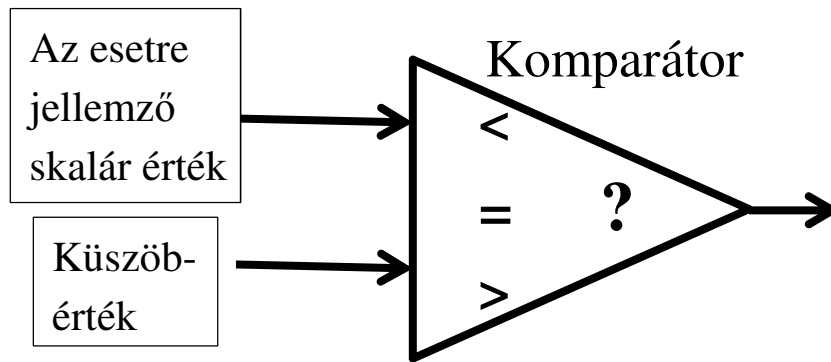


TP = 10, TN = 9, FP = 6, FN = 5



TP = 9, TN = 12, FP = 3, FN = 6

A döntésünk modellje

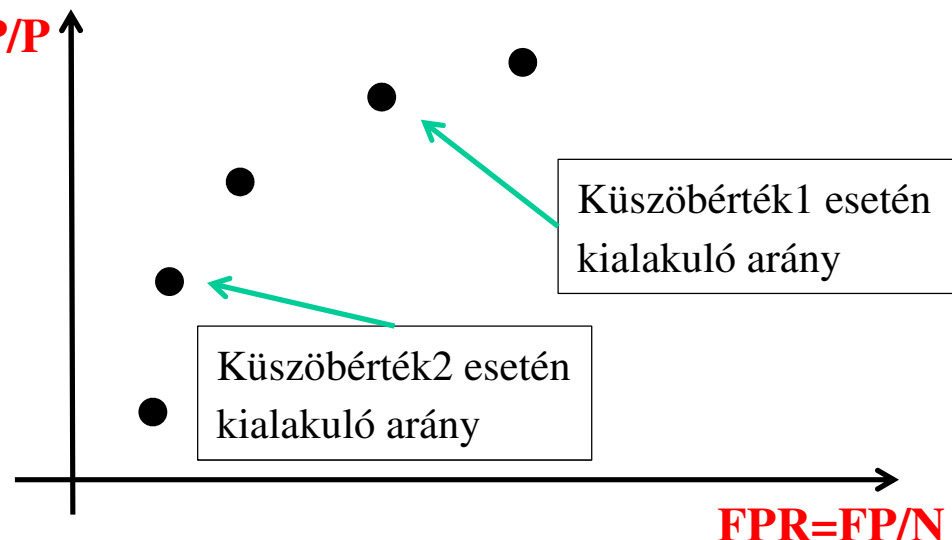
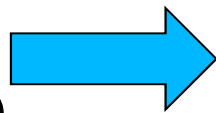


például (lehetne fordítva is):
ha $>$, akkor kimenet=1
pozitív esetnek vesszük
ha $\leq$, akkor kimenet= 0
negatív esetnek vesszük

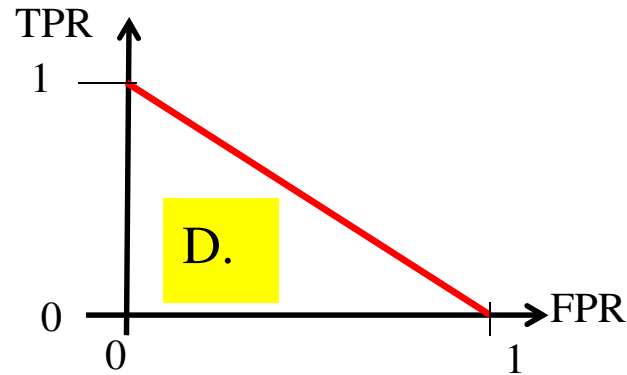
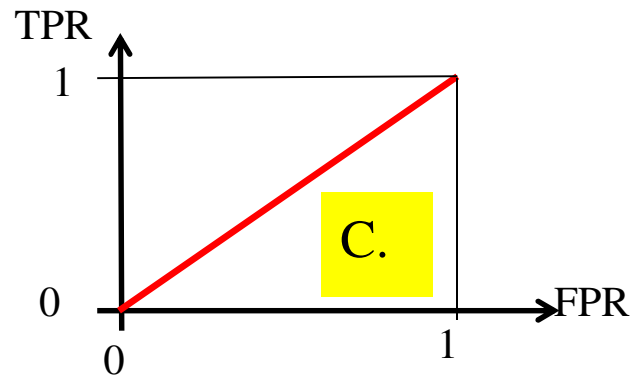
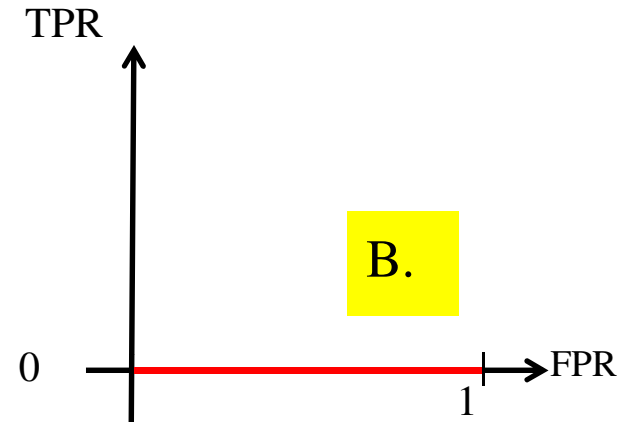
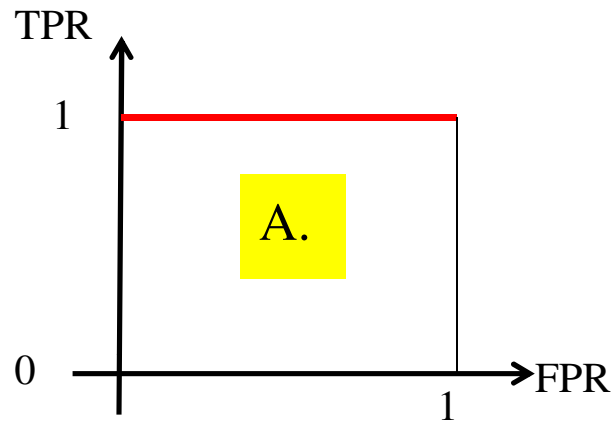
Példa:

Ha a mért testhőmérséklet 38°C küszöbnél nagyobb, akkor láz (betegség), ha kisebb vagy egyenlő, akkor nem lázas (egészséges).

Ez a ROC görbe
(Receiver Operating
Characteristic curve)

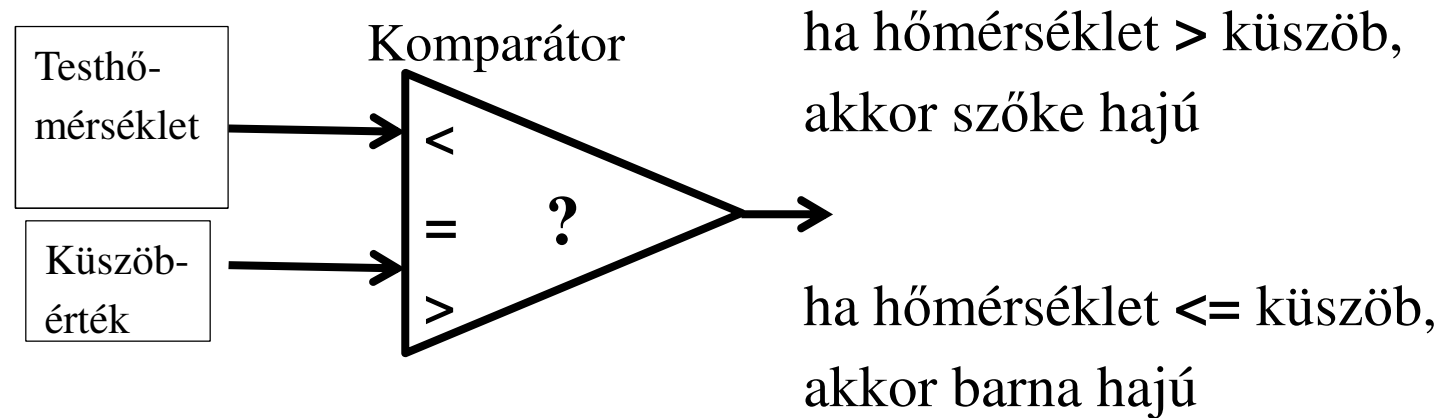


Ha érdektelen (irreleváns) paraméter alapján döntünk, akkor nagyszámú mintán melyik ROC görbe alakul ki?



Gyk. az ábrákon piros vonallal jelöltük a ROC görbét

Mi van, ha egy érdektelen (irreleváns) paraméterre alapozzuk a döntésünket?



Megvizsgáltunk 6396 embert, köztük 2460 volt szőke, a többi barna.

Testhőm. [°C]	35,0... 36,0	36,0... 37,0	37,0... 38,0	38,0... 39,0	39,0... 40,0	40,0... 41,0	41,0... 42,0	42,0... 43,0	43,0... 44,0
SZŐKE	5	1000	800	600	40	10	5	0	0
BARNA	8	1600	1280	960	64	16	8	0	0

küszöb1

küszöb2

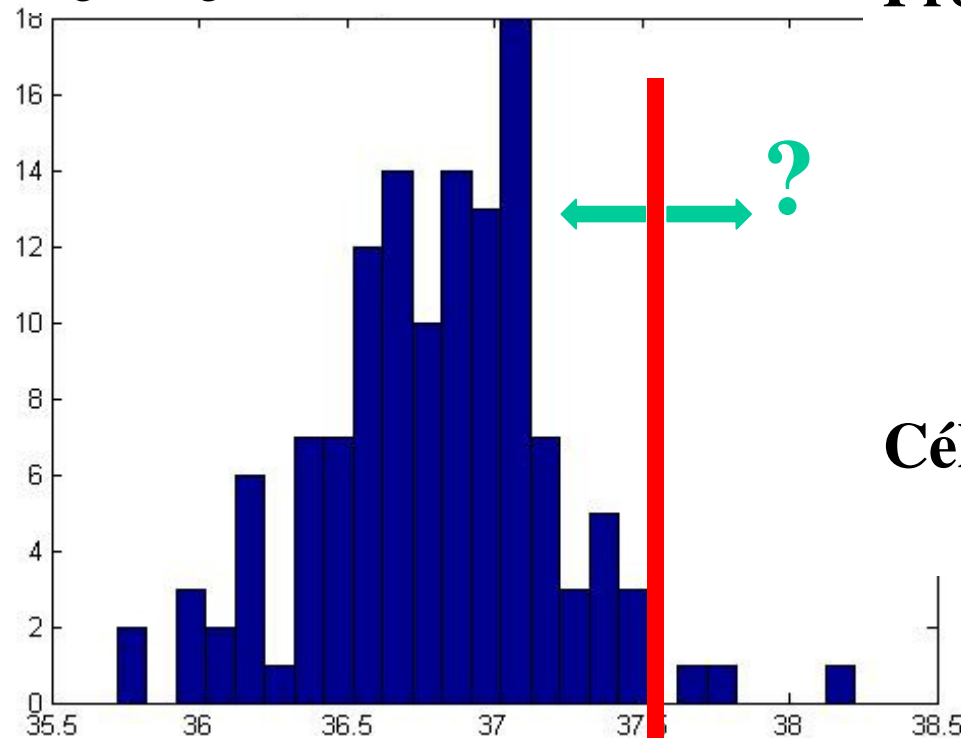
• • • •

küszöb9

küszöb10

Milyen ROC görbe alakul ki?

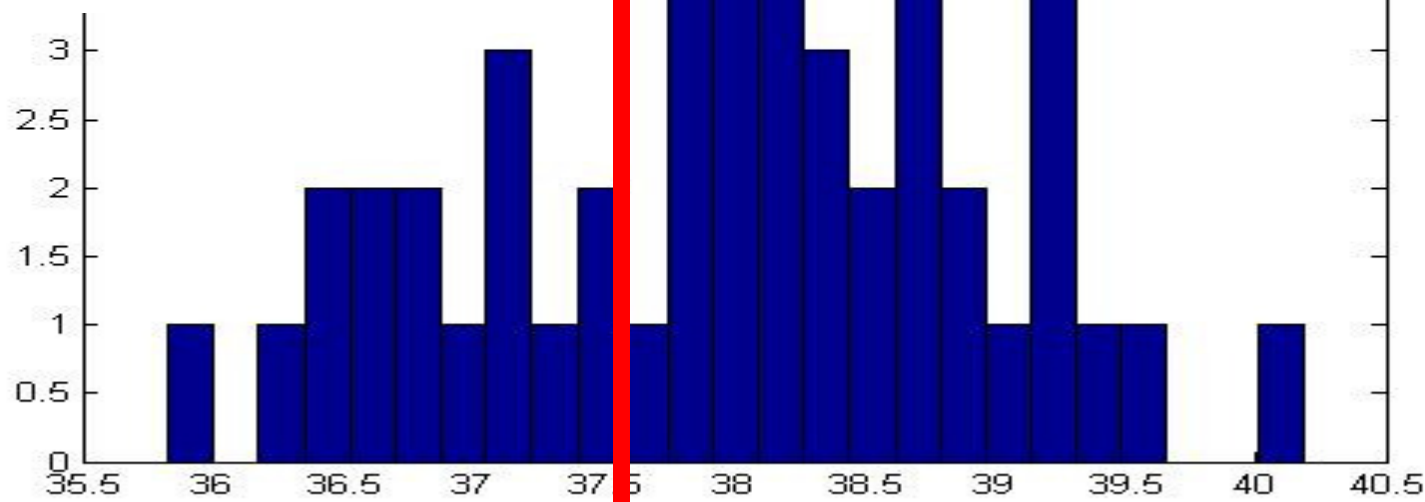
Egészséges emberek testhőmérséklete



Probléma: döntést kell hoznunk, egy numerikus paraméter értéke alapján arról, hogy milyen esettel állunk szemben. (pl. testhőmérséklet alapján, hogy egészséges vagy beteg?)

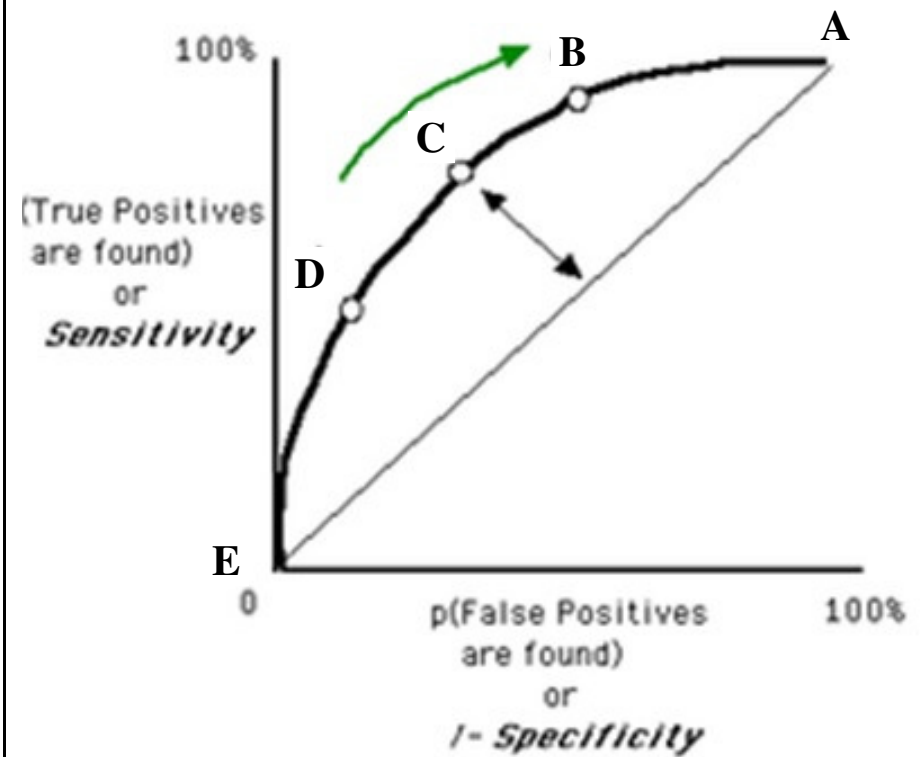
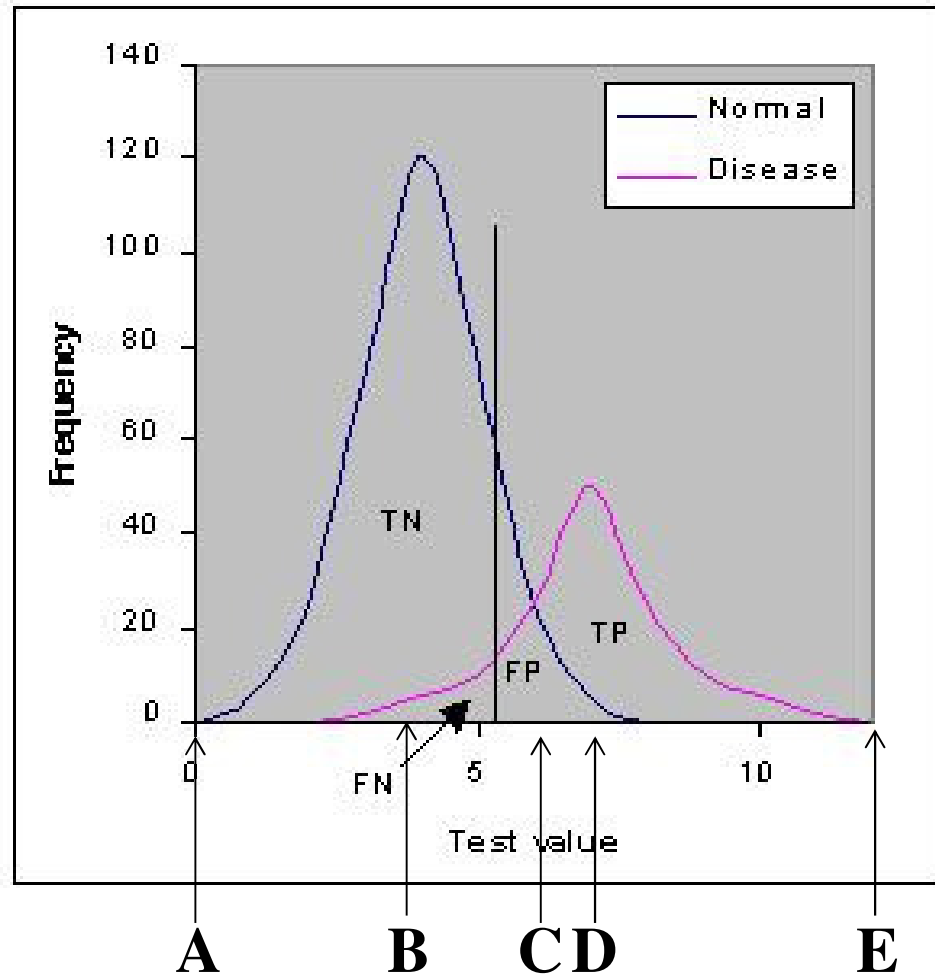
Cél: rájönni, mi a teszt (optimális) küszöb értéke.

Beteg emberek testhőmérséklete



ROC: Vevő működési karakterisztika

Receiver Operating Characteristic



A küszöb fölött betegnek tekintjük, alatta egészségesnek

Hiba (confusion) mátrix

true positive rate (**TPR**)

$$\text{TPR} = \text{TP}/P = \text{TP} / (\text{TP} + \text{FN})$$

false positive rate (**FPR**)

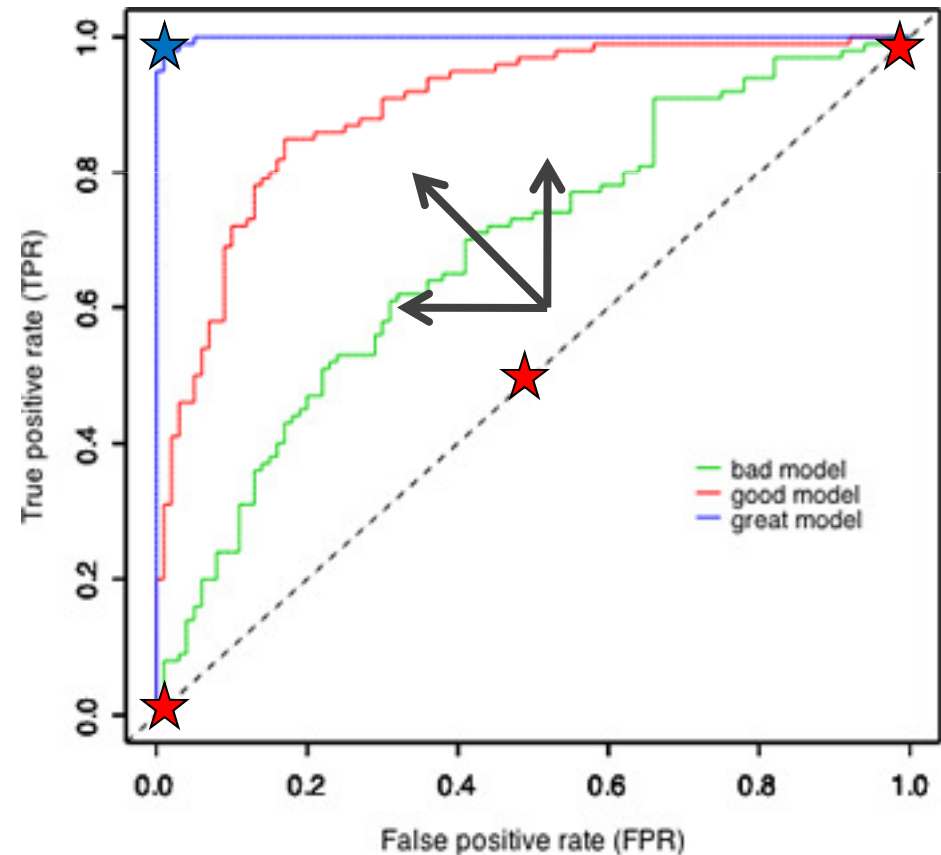
$$\text{FPR} = \text{FP}/N = \text{FP} / (\text{FP} + \text{TN})$$

ROC: Vevő működési
karakterisztika

**Receiver Operating
Characteristic (curve)**

AUC: Görbe alatti terület
Area Under Curve

Döntés	Tények	
	Beteg	Egész- séges
Beteg	TP	FP
Egész- séges	FN	TN



Mi a helyzet, ha a tévedéseknek különböző a költsége?

1. típusú hiba hamis negatív (FN)

- azt hisszük egészséges (H_0), pedig beteg (T_1)
- azt hisszük barát pedig ellenség

költség: C_{01} (későn vesszük észre a bajt,
bonyolult műtét vagy kezelés kell, azt hittük barát,
pedig ellenség és lebombázza a hidat/gyárat)

2. típusú hiba hamis pozitív (FP)

- azt hisszük beteg (H_1), pedig egészséges (T_0)
- azt hisszük ellenség pedig barát

költség: C_{10} (feleslegesen kezeljük vagy vizsgáljuk az
egészségest, a baráti gépet lelőjük vagy
vadászrepülőket ezt-azt küldünk rá)

legtöbbször a hamis negatív a rosszabb: $C_{01} \gg C_{10}$

Ráadásul a helyes döntéseknek is van költsége!

valós negatív (TN)

- azt hisszük egészséges (H_0), valóban az (T_0)
- azt hisszük barát, és tényleg

költség: C_{00} vizsgálatot kell végeznünk

- orvosi szűrés, program teszt, katonai radar

valós pozitív (TP)

- azt hisszük beteg (H_1), valóban az (T_1)
- azt hisszük ellenség, és tényleg

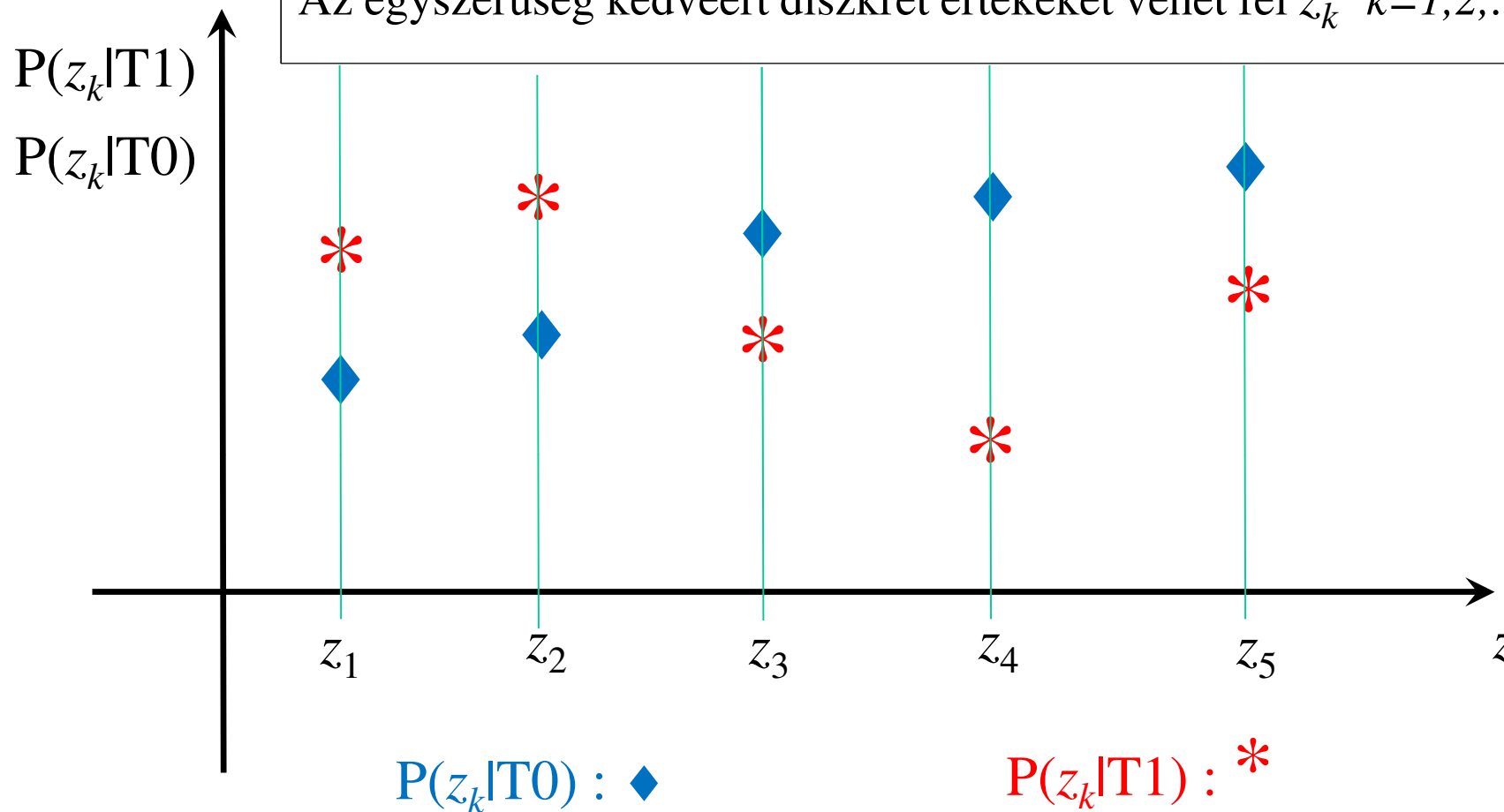
költség: C_{11} vizsgálatot kell végeznünk + kezelünk kell

- orvosi szűrés, program teszt, katonai radar
- + kezelés, légvédelmi rakéta, hibajavítás

tehát négyféle költség befolyásolja a döntést:

C_{00} , C_{11} , C_{01} , C_{10}

Skalár mért vagy származtatott paraméter, ami alapján döntünk : z
 Az egyszerűség kedvéért diszkrét értékeket vehet fel $z_k \quad k=1,2,\dots,K$



Hogyan becsülhetjük meg ezeket az arányokat?

Egy tesztet végzünk (vagy az eddigi adatokból összegyűjtünk egy megfelelően nagy mintát).

Tudnunk kell, hogy milyen arányban produkálják a negatív és pozitív esetek az egyes lehetséges z értékeket.

Ezért tesztelünk N_T esetet, ezek közül N_N tartozik a negatív, N_P a pozitív csoportba ($N_N + N_P = N_T$)

Fontos: a tesztben sokszor nem ugyanaz a negatív és pozitív esetek aránya, mint a teljes népességben (utóbbiak később: P0 és P1).

k	1	2	3	4	5	Σ
z_k	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	
z_k -t produkál az negatív esetek közül	N_{N1} (pl. 1200)	N_{N2} (pl. 3100)	N_{N3} (pl. 4500)	N_{N4} (pl. 2700)	N_{N5} (pl. 1820)	$N_{N1} + N_{N2} + \dots$ $\dots + N_{N5} =$ $= N_N$ ($N_N = 13320$)
$P(z_k T0)$	$\frac{N_{N1}}{N_N} (= \frac{1200}{13320})$	$\frac{N_{N2}}{N_N}$	$\frac{N_{N3}}{N_N}$	$\frac{N_{N4}}{N_N}$	$\frac{N_{N5}}{N_N}$	1
z_k -t produkál a pozitív esetek közül	N_{P1}	N_{P2}	N_{P3}	N_{P4}	N_{P5}	$N_{P1} + N_{P2} + \dots$ $\dots + N_{P5} =$ $= N_P$
$P(z_k T1)$	$\frac{N_{P1}}{N_P}$	$\frac{N_{P2}}{N_P}$	$\frac{N_{P3}}{N_P}$	$\frac{N_{P4}}{N_P}$	$\frac{N_{P5}}{N_P}$	1

Ha a populáció N elemű, és ebből a negatívak aránya $P_0 = \frac{N_0}{N}$,
akkor a negatív esetek száma $N_0 = P_0 \cdot N$.

Az N_0 negatív esetből z_k értéket produkál $N_0 \cdot P(z_k|T0)$ eset.

A pozitív esetek aránya $P_1 = \frac{N_1}{N}$, akkor a pozitív esetek száma
 $N_1 = P_1 \cdot N$.

Az N_1 pozitív esetből z_k értéket produkál $N_1 \cdot P(z_k|T1)$ eset.

Ha úgy döntünk, hogy z_k esetén pozitívnak véleményezzük az ismeretlen esetet, akkor a költségünk:

$$\begin{aligned} K1 &= C_{10} \cdot N_0 \cdot P(z_k|T0) + C_{11} \cdot N_1 \cdot P(z_k|T1) = \\ &= C_{10} \cdot P_0 \cdot N \cdot P(z_k|T0) + C_{11} \cdot P_1 \cdot N \cdot P(z_k|T1) \end{aligned}$$

Ha úgy döntünk, hogy z_k esetén negatívnak véleményezzük az ismeretlen esetet, akkor a költségünk:

$$\begin{aligned} K2 &= C_{00} \cdot N_0 \cdot P(z_k|T0) + C_{01} \cdot N_1 \cdot P(z_k|T1) = \\ &= C_{00} \cdot P_0 \cdot N \cdot P(z_k|T0) + C_{01} \cdot P_1 \cdot N \cdot P(z_k|T1) \end{aligned}$$

A kérdés tehát az, hogy melyik esetben kisebb a költség?

Ha $K_1 < K_2$ azaz

$$C_{10} \cdot P_0 \cdot N \cdot P(z_k|T0) + C_{11} \cdot P_1 \cdot N \cdot P(z_k|T1) < C_{00} \cdot P_0 \cdot N \cdot P(z_k|T0) + C_{01} \cdot P_1 \cdot N \cdot P(z_k|T1)$$

átrendezve:

$$(C_{10} - C_{00}) \cdot P_0 \cdot N \cdot P(z_k|T0) < (C_{01} - C_{01}) \cdot P_1 \cdot N \cdot P(z_k|T1)$$

egyszerűsítve:

$$(C_{10} - C_{00}) \cdot P_0 \cdot P(z_k|T0) < (C_{01} - C_{01}) \cdot P_1 \cdot P(z_k|T1)$$

akkor minden ilyen esetet (z_k -t produkál) **pozitívnak** veszünk.

Ha $K_1 > K_2$, akkor minden ilyen esetet (z_k -t produkál) **negatívnak** érdemes tekinteni.

**A döntésünk nagy mértékben azon múlik, hogy jól
becsüljük-e meg az egyes költségeket!!!**

**Ha C_{01} nagy, ettől félünk, akkor egész más alakul ki,
mint ha C_{10} -tól félünk, azt vesszük nagynak.**

Például a jog: attól félünk jobban , hogy egy ártatlant elítélnek, vagy attól, hogy egy bűnös megússza (esetleg később újra elköveti)?

Például a terrorista kérdés: attól félünk, hogy valahogy besurran egy terrorista, vagy attól, hogy jogtalanul vádolunk valakit?

Például az egészségügy: attól félünk-e jobban, hogy valakinek nem vesszük észre a betegségét, vagy attól, hogy feleslegesen ijesztgetjük, visszarendeljük vizsgálatra?

A következőkben olyan módszereket vizsgálunk, amikor minták, **mintapéldák alapján akarjuk kialakítani a döntési rendszerünket.**

Nagyon gyakran a számítógép tanulása azt jelenti, hogy van egy csomó mintapéldánk, és ez hordozza az információt. Nincsenek előre kialakított szabályaink a feladatra, csak a mintáink. Persze ilyenkor is valamilyen struktúrában igyekszünk felhasználni a minták hordozta tudást.

Tehát a módszerünk – tehát az, hogy hogyan használjuk fel a mintákat – bizonyos mértékben problémafüggetlen.

A hétköznapi életben nagyon gyakori a minta alapján való tanulás, a klasszikus számítógépes megoldásokban a humán fejlesztő szabályokat alkotott, és ezeket programozta be.

Összefoglalva: hogyan lehet egy döntést (ágensfüggvényt) megvalósítani? A következőkben a (2)-vel foglalkozunk

(1) Analitikus tervezés:

Begyűjteni az analitikus (fizikai, kémiai stb. összefüggésekből felépített) modelleket az adott problémára.

Megtervezni analitikusan a konkrét mechanizmust, és azt algoritmusként implementálni.

(2) **Megtervezni a tanulás mechanizmusát, és azt algoritmusként implementálni.**

Majd alkalmazásával megtanulni vele a minták alapján a döntés tényleges mechanizmusát, és azt algoritmusként implementálni.

Tanulás alapvető fajtái:

felügyelt tanulás egy komponensnek mind a bemenetét, mind a kimenetét észlelni tudjuk (bemeneti minta + kívánt válasz)

megerősítéses tanulás az ágens az általa végrehajtott tevékenység csak bizonyos értékelését kapja meg, esetleg nem is minden lépésben (jutalom, büntetés, **megerősítés**)

felügyelet nélküli tanulás semmilyen információ sem áll rendelkezésünkre a helyes kimenetről (az észlelések közötti összefüggések tanulása)

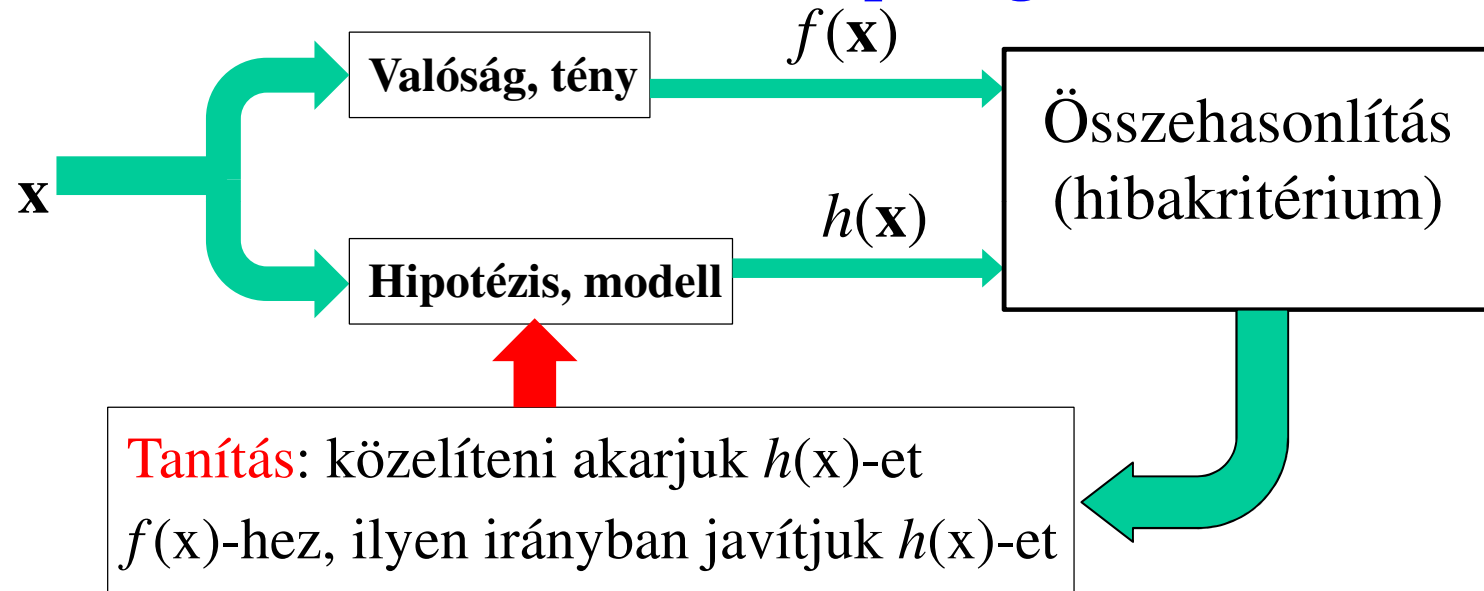
Felügyelt tanulás (pl. induktív következtetés):

tanulási példa: $(\mathbf{x}, f(\mathbf{x}))$ adatpár, ahol $f(\mathbf{x})$ ismeretlen

tanulás célja: $f(\mathbf{x})$ értelmes közelítése egy $h(\mathbf{x})$ hipotézissel

$h(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}$ – ismert példák

$h(\mathbf{x}') \cong f(\mathbf{x}')$, $\mathbf{x}'$ – a tanulás közben még nem látott
eset (**általánosító képesség**)



Feladat: az ismeretlen f -re vonatkozó példák egy halmaza alapján (*tanítóhalmaz*), adjon meg egy olyan h függvényt (*hipotézist*), amely tulajdonságaiban jól közelíti az f -et (amit *teszthalmazon* verifikálunk).

Kifejezőképesség és hatékonyság

A legfontosabb döntés a tanuló ágens tervezője számára:
mi legyen a kívánt függvény (és a hipotézisek) **reprezentációja**?

Kompromisszum: (cél: legyen tömör és jól általánosító)
a **kifejezőképesség** és a **hatékonyság** között.

Kifejezőképesség: a kívánt függvény jól (egyáltalán)
ábrázolható-e.

Hatékonyság: a tanulási probléma jól kezelhető lesz-e egy adott
reprezentáció választása esetén.
(tanulási algoritmus tár-, és időkomplexitása)

Összefoglaló táblázat – különböző szokásos paraméterek

true positive (TP)

eqv. with hit

true negative (TN)

eqv. with correct rejection

false positive (FP)

eqv. with false alarm, Type I error

false negative (FN)

eqv. with miss, Type II error

sensitivity or true positive rate (TPR)

eqv. with hit rate, recall

$$TPR = \frac{TP}{P} = \frac{TP}{TP + FN}$$

specificity (SPC) or true negative rate (TNR)

$$SPC = \frac{TN}{N} = \frac{TN}{FP + TN}$$

precision or positive predictive value (PPV)

$$PPV = \frac{TP}{TP + FP}$$

negative predictive value (NPV)

$$NPV = \frac{TN}{TN + FN}$$

fall-out or false positive rate (FPR)

$$FPR = \frac{FP}{N} = \frac{FP}{FP + TN} = 1 - SPC$$

false discovery rate (FDR)

$$FDR = \frac{FP}{FP + TP} = 1 - PPV$$

miss rate or false negative rate (FNR)

$$FNR = \frac{FN}{P} = \frac{FN}{FN + TP} = 1 - TPR$$

accuracy (ACC)

$$ACC = \frac{TP + TN}{P + N}$$

F1 score

is the harmonic mean of precision and sensitivity

$$F1 = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$