Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Семинар 1. Вводный. Кросс-валидация, дилемма смещения-разброса

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем

06 октября 2020 г.







• Организационные вопросы



- Организационные вопросы
- 2 Обзор семинарских занятий



- Организационные вопросы
- 2 Обзор семинарских занятий
- Окользящий контроль



- Организационные вопросы
- Обзор семинарских занятий
- Окользящий контроль
- Дилемма смещения-разброса





SHARE

- Данный курс является частью программы **SHARE**
 - SHARE = School of Huawei Advanced Research Education
 - SHARE = Школа опережающего научного образования Хуавэй
 - e-mail: share@intsys.msu.ru
 - Канал SHARE: https://t.me/joinchat/AAAAAE_r4XKzEDaUKy1FwA





• Оценки за курс будут выставляться в соответствии с данными о посещении и набранными баллами за выполнение домашних заданий.



- Оценки за курс будут выставляться в соответствии с данными о посещении и набранными баллами за выполнение домашних заданий.
- В ходе курса будут предложены домашние задания трёх типов:
 - теоретические
 - практические
 - соревнования

- Оценки за курс будут выставляться в соответствии с данными о посещении и набранными баллами за выполнение домашних заданий.
- В ходе курса будут предложены домашние задания трёх типов:
 - теоретические
 - практические
 - соревнования
- В конце семестра состоится экзамен, на котором при желании можно будет повысить свою оценку



- Оценки за курс будут выставляться в соответствии с данными о посещении и набранными баллами за выполнение домашних заданий.
- В ходе курса будут предложены домашние задания трёх типов:
 - теоретические
 - практические
 - соревнования
- В конце семестра состоится экзамен, на котором при желании можно будет повысить свою оценку
- Предварительная шкала оценок:

Оценка	Процент выполненных заданий
Отлично	80 %
Хорошо	60 %
Зачет	40 %





- Оценки за курс будут выставляться в соответствии с данными о посещении и набранными баллами за выполнение домашних заданий.
- В ходе курса будут предложены домашние задания трёх типов:
 - теоретические
 - практические
 - соревнования
- В конце семестра состоится экзамен, на котором при желании можно будет повысить свою оценку
- Предварительная шкала оценок:

Оценка	Процент выполненных заданий
Отлично	80 %
Хорошо	60 %
Зачет	40 %

За посещение каждого занятия балл увеличивается примерно на 1%.



Полезные ресурсы

- Страница курса: https://github.com/mlcoursemm/ml2020autumn
- Главный ресурс по курсам "Введение в компьютерный интеллект": https://github.com/mlcoursemm
- Телеграмм-канал: https://t.me/joinchat/AAAAAEUmx5cJLOdLXsOt8g
- Группа обсуждения: https://t.me/joinchat/B2iAGkx8IrWpQdM3LL-H-w
- Почта курса: mlcoursemm@gmail.com
 - Именно сюда нужно будет посылать свои домашние задания!





Что будет в этом курсе [еще раз]

Теоретическая часть

- Постановка задач машинного обучения. Тестирование и метрики качества
 - Precision / Recall, TPR / FPR, ROC, AUC, Cross-Validation, . . .
- Методы классификации и оптимизации
 - SVM, Random Forest, Decision Tree, Stochastic Gradient Descent, . . .
- Методы восстановления регрессии
 - Linear Regression, Elastic Net, Ridge Regression, LASSO, . . .
- Композиции алгоритмов
 - Bootstrapping, Bagging, Boosting, AdaBoost, GBoost, . . .





Что будет в этом курсе [еще раз]

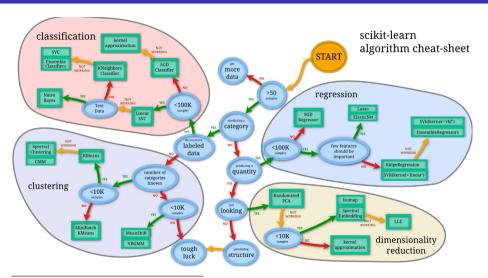
Теоретическая часть

- Постановка задач машинного обучения. Тестирование и метрики качества
 - Precision / Recall, TPR / FPR, ROC, AUC, Cross-Validation, . . .
- Методы классификации и оптимизации
 - SVM, Random Forest, Decision Tree, Stochastic Gradient Descent, ...
- Методы восстановления регрессии
 - Linear Regression, Elastic Net, Ridge Regression, LASSO, . . .
- Композиции алгоритмов
 - Bootstrapping, Bagging, Boosting, AdaBoost, GBoost, . . .

Практическая часть

- Обработка и анализ данных на python
 - Scikit-Learn, Numpy, Pandas, ...
- Соревнования по машинному обучению

Дорожная карта Scikit-Learn¹



¹https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/



- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
 - Самый базовый алгоритм **классификации** выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
 - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.

- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
 - Самый базовый алгоритм **классификации** выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
 - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.
- Алгоритмы кластеризации k-средних (k-means clusterization)
 - Базовый метод обучения **без учителя**: входной неразмеченный массив примеров необходимо разбить на классы (кластеры)
 - Различается по начальной инициализации алгоритма, методам подсчета центроида классов, работе с выбросами и т.д.

- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
 - Самый базовый алгоритм **классификации** выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
 - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.
- Алгоритмы кластеризации k-средних (k-means clusterization)
 - Базовый метод обучения **без учителя**: входной неразмеченный массив примеров необходимо разбить на классы (кластеры)
 - Различается по начальной инициализации алгоритма, методам подсчета центроида классов, работе с выбросами и т.д.
- Регрессия и оценка качества
 - Рассматриваются базовые методы линейной **регрессии** для восстановления целевой зависимости, а также критерий оценки качества этого восстановления
 - Различаются по наличию аналитического решения, видам регуляризации и т.д.





- Метрики качества классификаторов
 - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
 - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.

- Метрики качества классификаторов
 - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
 - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.
- Построение машины опорных векторов
 - Support Vector Machine (SVM) один из наиболее устойчивых и распространенных классификаторов в классическом машинном обучении
 - Будет подробно разобран пример построения такого классификатора аналитически

- Метрики качества классификаторов
 - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
 - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.
- Построение машины опорных векторов
 - Support Vector Machine (SVM) один из наиболее устойчивых и распространенных классификаторов в классическом машинном обучении
 - Будет подробно разобран пример построения такого классификатора аналитически
- Работа с пропущенными значениями и выбор признаков
 - Зачастую в реальной жизни не все признаки и не у всех объектов известны. Также порой не известно заранее, какие признаки важны, а какие наоборот мусорные
 - Будут рассмотрены различные методы заполнения пропущенных значений на основе статистик (среднее, минимум или максимум и т.д.), а также способы оценки и выборанаиболее важных признаков

- Регрессия на основе опорных векторов
 - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
 - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения

- Регрессия на основе опорных векторов
 - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
 - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения
- Ансамбли
 - Ансамблирование основный способ "дожатия" последних процентов на тесте в соревнованиях по машинному обучению, а также создания более устойчивых систем, в которых ошибки разных моделей будут нивелироваться
 - Будет дан обзор методов ансамблирования в scikit-learn



- Регрессия на основе опорных векторов
 - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
 - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения
- Ансамбли
 - Ансамблирование основный способ "дожатия" последних процентов на тесте в соревнованиях по машинному обучению, а также создания более устойчивых систем, в которых ошибки разных моделей будут нивелироваться
 - Будет дан обзор методов ансамблирования в scikit-learn
- Разбор домашних заданий курса
 - На последнем (-их) занятии (-ях) будем разбирать домашние задания
 - Также будут предложены современные научные статьи для разбора по желанию



Придумываем модель и пространство гиперпараметров



²Image source: https://scikit-learn.org/

- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное



- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
- Обучаем модель



- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
- Обучаем модель
- Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения



- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
- Обучаем модель
- Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
- Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами



²Image source: https://scikit-learn.org/

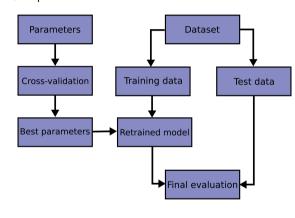
- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
- Обучаем модель
- Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
- Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами
- Проверяем на тесте!



²Image source: https://scikit-learn.org/

- Придумываем модель и пространство гиперпараметров
- Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
- Обучаем модель
- Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
- Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами
- Проверяем на тесте!

Общая схема 2 :







²Image source: https://scikit-learn.org/

Кросс-валидация: hold-out

• Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества



Кросс-валидация: hold-out

- Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Простейшая кросс-валидация это контроль на отложенном множестве (hold-out),
 при котором происходит однократное разделение множества

Кросс-валидация: hold-out

- Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Простейшая кросс-валидация это контроль на отложенном множестве (hold-out),
 при котором происходит однократное разделение множества
- И то, и другое можно сделать одной процедурой

Train Validation

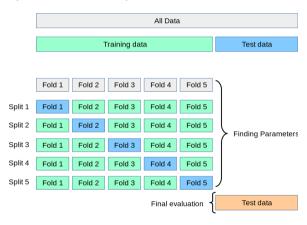


Кросс-валидация: scikit-learn

- Для начала разобъем общий массив данных на обучающее и тестовое подножества
- Это делается с помощью функции sklearn.model_selection.train_test_split():

Кросс-валидация: k-fold валидация

Контроль по k блокам (k-fold валидация)³:



³Image source: https://scikit-learn.org/

- Теперь посмотрим на k-fold кросс-валидацию
- Это делается с помощью функций sklearn.model_selection.cross_val_score() и cross_val_predict():

```
from sklearn import svm
from sklearn model_selection import cross_val_score

clf = svm.SVC(kernel='linear', C=1)
scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=5)
# scores = [1., 1., 1., 0.94444444]
```

- ullet Параметр cv это число блоков k
- Функция sklearn.model_selection.cross_val_predict() выдает также значения на валидации для каждого примера из каждого тестового блока (заметим, что каждый пример входит ровно в один тестовый блок)

06 октября 2020 г.

- В заключение темы кросс-валидации рассмотрим в scikit-learn специальные итераторы, которые разбивают исходное множество согласно разным правилам:
 - Разбиение множества согласно k-fold валидации: sklearn.model_selection.KFold()

```
from sklearn.model_selection import KFold

X = ["a", "b", "c", "d"]
kf = KFold(n_splits=2)
for train, test in kf.split(X):
    print("%s_y%s" % (train, test))
# out: [2 3] [0 1]
# out: [0 1] [2 3]
```

- В заключение темы кросс-валидации рассмотрим в scikit-learn специальные итераторы, которые разбивают исходное множество согласно разным правилам:
 - Разбиение множества согласно k-fold валидации: sklearn.model_selection.KFold()

```
from sklearn.model_selection import KFold

X = ["a", "b", "c", "d"]
kf = KFold(n_splits=2)
for train, test in kf.split(X):
    print("%s_y%s" % (train, test))
# out: [2 3] [0 1]
# out: [0 1] [2 3]
```

 Разбиение множества согласно leave-one-out валидации: sklearn.model_selection.LeaveOneOut()

```
from sklearn.model_selection import LeaveOneOut
loo = LeaveOneOut()
for train, test in loo.split(X):
    print("%s_%s" % (train, test))
# out: [1 2 3] [0]
# out: [0 2 3] [1]
# out: [0 1 3] [2]
# out: [0 1 2] [3]
```



• Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: sklearn.model_selection.RepeatedKFold()

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)
for train, test in rkf.split(X):
    print("%s_%s" % (train, test))
# out (repeat 1): [1 2] [0 3]
# out (repeat 1): [0 3] [1 2]
# out (repeat 2): [0 1] [2 3]
# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```



⁴https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

• Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: sklearn.model_selection.RepeatedKFold()

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)

for train, test in rkf.split(X):
    print("%s_%s" % (train, test))

# out (repeat 1): [1 2] [0 3]

# out (repeat 1): [0 3] [1 2]

# out (repeat 2): [0 1] [2 3]

# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```

• Параметры в примерах: *n_splits* — количество блоков (*cv*), *n_repeats* — количество повторений



• Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: sklearn.model_selection.RepeatedKFold()

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)
for train, test in rkf.split(X):
    print("%s_%s" % (train, test))
# out (repeat 1): [1 2] [0 3]
# out (repeat 1): [0 3] [1 2]
# out (repeat 2): [0 1] [2 3]
# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```

- Параметры в примерах: n_splits количество блоков (cv), n_repeats количество повторений
- Остальные примеры работы с процедурой кросс-валидации можно посмотреть на сайте scikit-learn⁴

⁴https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

Настройка гиперпараметров

• Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества



Настройка гиперпараметров

- Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Также умеем подразбивать обучающее подмножество для проведения процедуры валидации и даже замерять качество при этой процедуре



Настройка гиперпараметров

- Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Также умеем подразбивать обучающее подмножество для проведения процедуры валидации и даже замерять качество при этой процедуре
- Но главная цель подобрать оптимальный набор гиперпараметров!



 B scikit-learn есть два важных класса для этого: sklearn.model_selection.GridSearchCV и sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV

- B scikit-learn есть два важных класса для этого: sklearn.model_selection.GridSearchCV и sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV
- GridSearchCV проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров

- B scikit-learn есть два важных класса для этого: sklearn.model_selection.GridSearchCV и sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV
- GridSearchCV проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров
- RandomizedSearchCV генерирует гиперпараметры случайно (согласно их заданным распределениям)





- B scikit-learn есть два важных класса для этого: sklearn.model_selection.GridSearchCV и sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV
- GridSearchCV проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров
- RandomizedSearchCV генерирует гиперпараметры случайно (согласно их заданным распределениям)
- Лучшие найденные параметры будут находиться в поле best _params _
- Точность на кросс-валидации для лучших гиперпараметров будет находиться в поле best _ score _
- Точность на тесте для лучших гиперпараметров считается через метод score()



Настройка гиперпараметров: перебор по сетке

- Paccмотрим класс sklearn.model_selection.GridSearchCV
- Для перебора по сетке нужно задать полный диапазон поиска по каждому из гиперпараметров (либо оставить используемые по умолчанию)



Настройка гиперпараметров: случайный перебор

- Для случайного перебора нужно задать **распределение** каждого из гиперпараметров (либо оставить используемые по умолчанию), количество случайных попыток задается через параметр n_iter конструктора RandomizedSearchCV
- Распределения можно использовать из пакета scipy.stats (например, равномерное, нормальное, лог-равномерное и т.п.)

```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV from scipy.stats import loguniform

param_dist = {'C': loguniform(0.1, 1000), 'gamma': loguniform(0.0001, 1.0)} svc = svm.SVC() clf = RandomizedSearchCV(svc, param_dist, cv=5, random_state=123456, refit=True) # Refit an estimator using the best found parameters on the whole dataset clf.fit(X_train, y_train) # Run CV grid search clf.score(X_test, y_test) # Test on the best parameters # score can be different - in my experiments from 0.9 to 0.96666
```



Настройка гиперпараметров: сравнение методов перебора

• Cpaвним GridSearchCV и RandomizedSearchCV на решетке (количество генераций гиперпараметров) размера примерно 100

• Как видно, разницы особой нет — и если заранее не нужно проверять конкретные значения гиперпараметров, то лучше ограничиться случайным поиском



Дилемма смещения-разброса

Дилемма

Пусть $y=y(x)=f(x)+\varepsilon$ — целевая зависимость, где f(x) — детерминированная функция, $\varepsilon\sim N(0,\sigma^2)$ и a(x) — алгоритм машинного обучения.

Если arepsilon и a — независимые, $Darepsilon=\sigma^2$, то разложение квадрата ошибки будет иметь вид

$$E(y - a)^2 = \sigma^2 + variance(a) + bias^2(f, a)$$







Как будем проверять?

• В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена

- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)





- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)
- Дисперсия шума будет постоянной

- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)
- Дисперсия шума будет постоянной
- Как результат, получим достаточно неплохое приближение, а также:

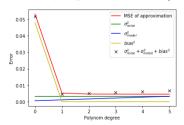
- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)
- Дисперсия шума будет постоянной
- Как результат, получим достаточно неплохое приближение, а также:
 - При увеличении сложности (=степени) смещение уменьшается (лучше приближение)





- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)
- Дисперсия шума будет постоянной
- Как результат, получим достаточно неплохое приближение, а также:
 - При увеличении сложности (=степени) смещение уменьшается (лучше приближение)
 - При увеличении сложности разброс увеличивается (приближение неустойчиво)

- В качестве сложности модели будем рассматривать степень аппроксимирующего многочлена
- Смещение и разброс алгоритма (многочлена) будем считать по различным вариантам обучения (будем по-разному добавлять шум в обучающие данные)
- Дисперсия шума будет постоянной
- Как результат, получим достаточно неплохое приближение, а также:
 - При увеличении сложности (=степени) смещение уменьшается (лучше приближение)
 - При увеличении сложности разброс увеличивается (приближение неустойчиво)





Спасибо за внимание!



