ТЕХНОСФЕРА

Занятие № 3

# Оценка качества моделей и работа с признаками

Евгений Некрасов

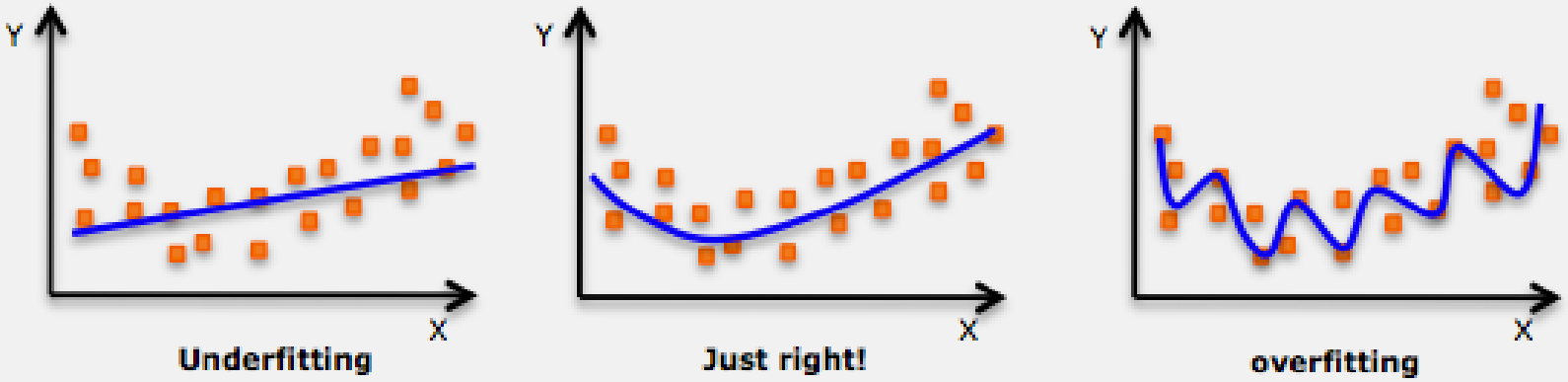
# План занятия

1. Оценка качества моделей
2. Извлечение признаков
3. Преобразование признаков
4. Работа с пропущенными данными
5. Отбор признаков
6. Мастер-класс по работе с гео-данными

# Проблема переобучения

Способы обучиться на наборе данных:

1. Запомнить правильные ответы
2. Найти общие закономерности в предоставленном наборе данных




Для оценки качества модели нельзя использовать те же данные, что и для построения модели.

# Train, Test, Validation

На **Train** обучаем модели-кандидаты

На **Test** оцениваем модели-кандидаты и выбираем лучшую

На **Validation** проверяем, что все работает как ожидалось

- **Validation** никак не используем при построении модели!
- На гиперпараметрах модели тоже можно переобучиться!

# Shuffle & Split

Перемешиваем самплы, делим датасет на две части (**Train** и **Test**) в некоторой пропорции.
На **Train** обучаем модель, на **Test** оцениваем качество.

Особенности:

- Простая реализация
- Разумно использовать когда данных "много"

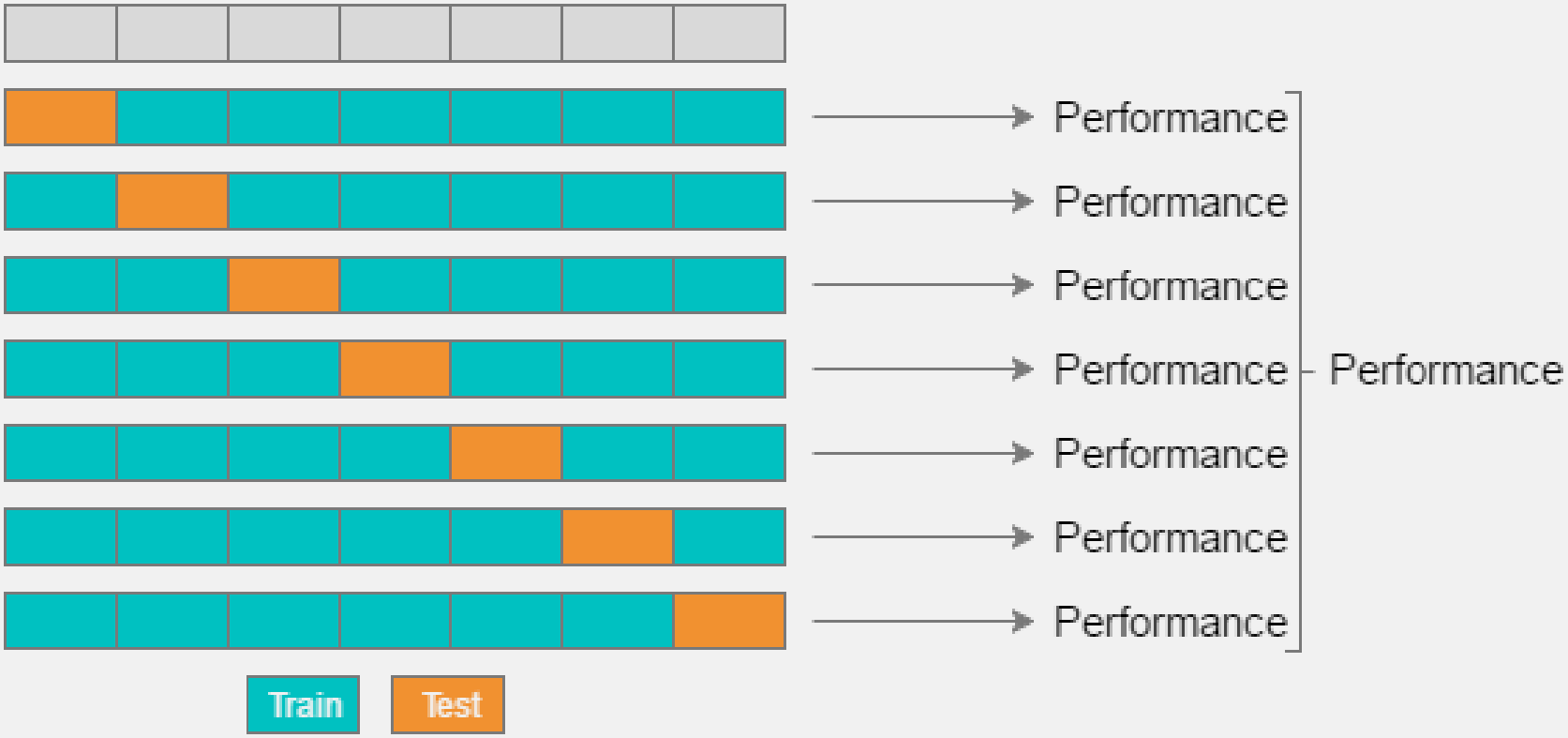
# K-fold

Разбиваем датасет на **K** равных частей, затем строим **K** моделей где в качестве **Test** берем одну из частей, а все остальные используем как **Train**. На **Train** обучаем модель, на **Test** оцениваем качество.

Особенности:

- Используем все данные как для построения моделей, так и для оценки качества
- Один из наиболее популярных методов оценки качества моделей

# K-fold


Performance
Performance
Performance
Performance
Performance
Performance
Performance
Performance
Train
Test

# Leave One Out

Экстремальный случай **K-fold**, когда **K** равно числу самплов в наборе данных.

Особенности:

- Модель на датасете без одного самплa практически идентична модели на полном датасете
- Может быть эффективно посчитан для некоторых видов моделей

# Повторные разбиения

**K-fold** или **Shuffle & Split**, повторенный **N** раз с различными разбиениями.

Особенности:

- В N раз выше вычислительная сложность
- Эффективны когда данных "мало" или данные "шумные"

# Стратифицированные разбиения

**Стратифицированные разбиения** - это такие разбиения, которые сохраняют определенные свойства исходной выборки.

Свойствами могут быть:

- Распределение целевой переменной
- Распределения некоторых признаков

# Стратифицированные разбиения

**Плюсы:**

- Могут обеспечить большую точность, чем простой случайный выбор
- Позволяют избежать "непредставительной" выборки (например отсутствие какого-либо класса объектов в разбиении)

**Минусы:**

- Сложнее в реализации

# Групповые разбиения

Иногда в наборе данных самплы разбиты на **группы**.

Например:

- Фотографии гистологических срезов одной и той же опухоли **группу**
- Продукция из одной партии составляет группу **группу**

Игнорирование **групп** приводит к некорректной оценке качества модели!

# Групповые разбиения

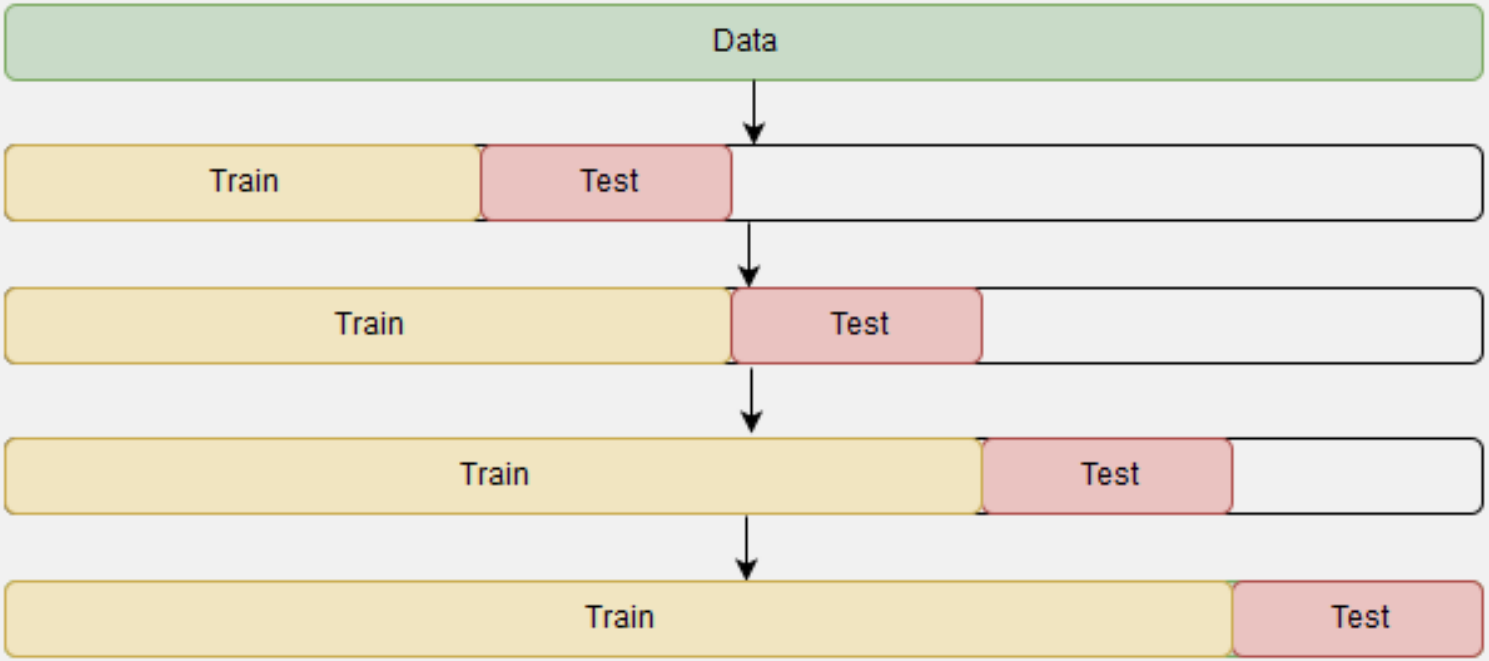
**Групповые K-fold** или **Shuffle & Split** - это такие разбиения при которых все самплы одной группы попадают в один и то же фолд или сплит.

Особенности:

- Позволяют корректно работать с данными в которых есть группы

# Разбиение временных рядов

**Разбиение временных рядов** следует проводить по времени события.



# Общие рекомендации

Выбор схемы оценки качества – это баланс вычислительной сложности и точности оценки

Схемы оценки моделей:

1. Shuffle & Split
2. K-fold K=2-4
3. K-fold K=5-10
4. Repeated K-fold K=5-10

Как правило 3x5-fold работает лучше чем 1x15-fold

# Извлечение признаков

**Сампл** (**пример**) - это вектор чисел.

**Объект** - представлен набором данных.

**Извлечение признаков** - представление реального или цифрового объекта в виде вектора чисел.

# Извлечение признаков

Данные бывают:

1. Числовые
2. Дата и время
3. Геоданные (latitude, longitude)
4. Временные ряды
5. Текстовые данные
6. Графические изображения
7. Звук
8. Видео

# Геоданные

Что можно извлечь:

1. Что находится по заданной координате
2. Расстояния до особых объектов

# Дата и время

Что можно извлечь:

1. Абсолютное время
2. Периодичность (час, день, месяц ...)
3. Временной интервал до особого события

# Временные ряды

Что можно извлечь:

1. Среднее значение за период
2. Стандартное отклонение за период
3. Тренд за период
4. Количество пиков за период

# Признаки

Признаки бывают:

- **Количественные**
- **Порядковые**
- **Категориальные**
- **Бинарные**

# Извлечение признаков

| | |
|---|---|
| Год выпуска | **2011** |
| Пробег | **98 000 км** |
| Кузов | Внедорожник 5 дв. |
| Цвет | Белый |
| Двигатель | 6.2 л / 409 л.с. / бензин |
| Коробка | Автоматическая |
| Привод | Полный |
| Руль | Левый |
| Состояние | Не требует ремонта |
| Владельцы | 3 владельца |
| ПТС | Оригинал |
| Владение | 9 месяцев |
| Таможня | Растаможен |
| VIN | XWFS47EF*C0****62 |
| Автокод | Без ограничений |

Характеристики модели в каталоге

# Зачем преобразовывать признаки?

1. Чтобы конкретный алгоритм машинного обучения их правильно интерпретировал
2. Чтобы конкретный алгоритм машинного обучения эффективно находил взаимосвязи
3. Чтобы внести априорные знания о наборе данных или свойствах признаков

# Стандартизация

Для каждого признака в наборе вычитаем среднее и делим на стандартное отклонение.

Применяется к **количественным**, **порядковым** и **бинарным** признакам

Актуально для:

Линейные модели

Метод ближайших соседей

# Масштабирование

Значения каждого признака в наборе приводят к диапазону [0,1].

Применяется к **количественным**, **порядковым** и **бинарным** признакам

Актуально для:

Линейные модели

Метод ближайших соседей

# Монотонные преобразования

Применение монотонного преобразования к признаку (например: логарифмирование, возведение в степень)

Применяется к **количественным** и **порядковым** признакам

Актуально для:

Линейные модели

Метод ближайших соседей

# Линеаризация (регрессия)

Применяем нелинейное преобразование к одному или более признакам чтобы получить новый признак, линейно зависящий от целевой переменной (например: физические законы).

Применяется к **количественным** признакам

Актуально для:

Линейные модели

# Бинаризация

Область значений **количественного** признака делим на N участков и представляем в виде N бинарных признаков.

Применяется к **количественным** и **порядковым** признакам

Актуально для:

Линейные модели

# Полиномиальные признаки

Заменяем исходный набор признаков полиномом от исходных признаков.

$$(x_1,\ x_2) \to (x_1,\ x_2,\ x_1^2,\ x_2^2,\ x_1 x_2)$$

Применяется к **количественным**, **порядковым** и **бинарным** признакам

Актуально для:

Линейные модели

Метод ближайших соседей

Решающие деревья

# One hot encoding

Представление признака с N категорий как N бинарных признаков.

Применяется к **категориальным** и **порядковым** признакам

Актуально для:

Линейные модели

Метод ближайших соседей

Некоторых типов решающих деревьев

# Задача

Алгоритм: k ближайших соседей с евклидовым расстоянием

Признаки:

1. категория кинотеатра [1..43]
2. день недели [1..7]
3. час суток [0..24]
4. цена билета [100..1000]

Целевая переменная: заполненность зала в %

Что делать?

# Работа с пропущенными данными

Простые решения:

- Некоторые алгоритмы поддерживают работу с пропущенными данными "из коробки".
- Закодировать пропущенные данные особым значением (0, -999 и т.п.).
- Закодировать пропущенные данные типичным значением (среднее, медиана, наиболее частое значение).

# Работа с пропущенными данными

Более сложные решения:

- Для временных рядов можно брать соседнее значение соседей.
- Можно использовать модель для заполнения пропущенных данных (например алгоритм k ближайших соседей).

# Отбор признаков, зачем?

- Меньше признаков - выше производительность.
- Меньше признаков - проще их сбор и преобразование.
- Снижение количества признаков может приводить как к снижению так и к росту точности модели.

Каждый признак - это сигнал + шум

# Статистический подход

- Выбрасываем признаки, значение которых константно на тренировочном наборе данных (всем или большей части)
- Выбрасываем признаки, которые слабо статистически связаны с целевой переменной (например: корреляция)

# Проблема статистической связи

| Признак 1 | Признак 2 | Целевая переменная |
|---|---|---|
| 1 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 1 |
| 1 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 |
| 0 | 0 | 0 |

# Отбор признаков по важности для модели

Смотрим на какие признаки модель опирается при принятии решений.

- Веса при признаках для линейной модели
- Как часто происходят сплиты по признакам в Random Forest
- Нулевые коэффициенты в l1 регуляризованной линейной модели

# Последовательный набор признаков

Пусть дано M основных и N дополнительных признаков.

1. Из N дополнительных признаков по очереди добавляем каждый к основному набору из M признаков и таким образом получаем N новых наборов признаков.
2. Оцениваем качество модели на каждом из N наборов признаков.
3. Выбираем набор с наилучшей точностью.
4. Переходим на шаг 1 (опционально если точность улучшилась).

# Последовательный отброс признаков

Пусть N - количество признаков

1. Из полного набора признаков по очереди выбрасываем каждый и таким образом получаем N новых наборов признаков.
2. Оцениваем качество модели на каждом из N наборов признаков.
3. Выбираем набор с наилучшей точностью.
4. Переходим на шаг 1 (опционально если точность улучшилась).

# Метод "Permutation Importance"

1. Делим выборку на train и test
2. Обучаем модель на train
3. Выполняем предсказание на test, измеряем качество и записываем его как базовый скор
4. Для каждого признака в test выполняем перемешивание значений в колонке и выполняем предсказание, важность признака оцениваем как полученный скор минус базовый скор

ТЕХНОСФЕРА

# Мастер-класс по работе с геоданными

Павел Логачев

# Работа с гео данными

- Сервисы такси
- Нахождение оптимального расположения для открытия ритейл точки
- Оценка стоимости жилья
- Сегментирование аудиторий для рекламы
- Офлайн реклама
- Дорожная сеть
- Метеорологические модели

# Работа с гео данными

Источники данных

- Open Street Maps / Yandex maps
- Росреестр
- Cian / avito.ru

Представление

- Latitude, longitude
- Метрические координаты от определенной точки

Методы ускоряющие расчет

- k-d tree
- Geohash
- Uber h3

# Агрегация

- Нахождение объектов в радиусе
- Расстояния до n ближайших
- Средние свойства
- Свойства с весом в зависимости от расстояния

Метрики расстояния

- Евклидово (L2)
- Городских кварталов (L1)
- Пешего и автомобильного маршрута

# Инструменты

- sklearn.neighbors, scipy.spatial
- Geopandas
- Shapely
- PostGis

Средства визуализации

- Matplotlib + geotiler
- Folium (OSM Leaflet)
- Kepler.gl
- MapBox
- Superset

# Домашнее задание №#3

Визуализировать свою школу на карте на фоне других школ города

Датасет школ:

https://www.kaggle.com/trolukovich/russian-schools-geodata

**Срок сдачи**

*22 октября 2019*

ТЕХНОСФЕРА

# Спасибо за внимание!

Евгений Некрасов, Павел Логачев

e.nekrasov@corp.mail.ru

p.logachev@corp.mail.ru