Кейс стади 1

Задача классификации. Поиск причины дефекта в металле. Тесты на согласие: поиск распределения. Проблема мультиколлинеарности. Проблема несбалансированности классов. Пример решения задачи классификации с помощью RandomForest. Метрики классификации: precision, recall, F1. Принцип минимальных компонент, PCA. Кросс-валидация. ROC-кривая.

Даниил Корбут
Специалист по Анализу Данных

Даниил Корбут
DL Researcher
Insilico Medicine, Inc

Окончил бакалавриат ФИВТ МФТИ (Анализ данных) в 2018г
Учусь на 2-м курсе магистратуры ФИВТ МФТИ
Работал в Statsbot и Яндекс. Алиса.
Сейчас в Insilico Medicine, Inc, занимаюсь генерацией активных молекул и исследованиями старения с помощью DL.

Классическое Обучение

Данные заранее категоризированы или численные

Данные никак не размечены

С учителем

Предсказать категорию

Предсказать значение

Классификация

«Разложи носки по цвету»

Регрессия

«Разложи галстуки по длине»

Без учителя

Разделить по схожести

Найти зависимости

Выявить последовательности

Кластеризация

«Разложи похожие вещи по кучкам»

Ассоциация

«Найди какие вещи я часто ношу вместе»

Уменьшение Размерности (обобщение)

«Собери из вещей лучшие наряды»

https://vas3k.ru/blog/machine_learning/

НЕТОЛОГИЯ

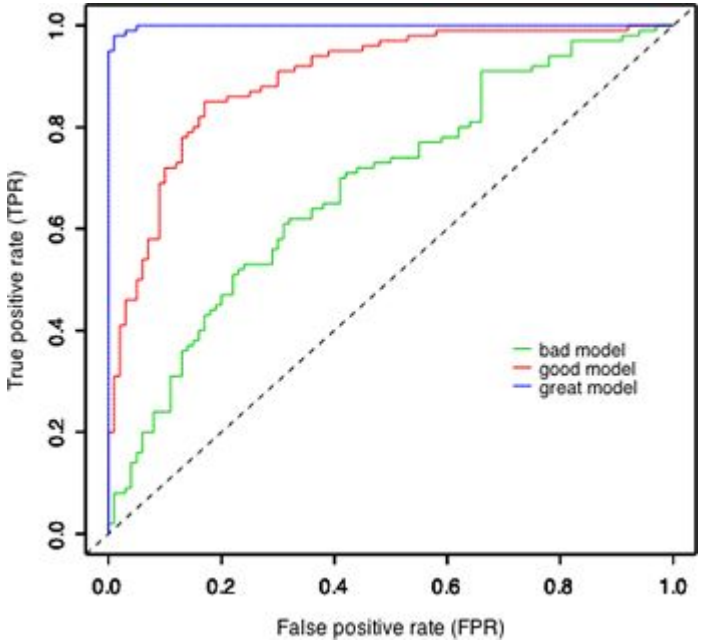
Метрики классификации

		predicted condition		
	total population	prediction positive	prediction negative	Sensitivity
true condition	condition positive	True Positive (TP)	False Negative (FN) (Type II error)	**Recall =** $\frac{\sum TP}{\sum \text{condition positive}}$
	condition negative	False Positive (FP) (Type I error)	True Negative (TN)	Specificity = ∑TN / ∑condition negative
	Accuracy = $\frac{\sum TP + \sum TN}{\sum \text{total population}}$	**Precision=** $\frac{\sum TP}{\sum \text{prediction positive}}$		**F1 Score =** $\frac{2}{\frac{1}{\text{Recall}} + \frac{1}{\text{Precision}}}$

https://shuzhanfan.github.io/2018/02/model-evaluation-metrics/

Метрики классификации

Roc-AUC



predicted → / real ↓	*Class_pos*	*Class_neg*
Class_pos	TP	FN
Class_neg	FP	TN

$$\text{TPR (sensitivity)} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}}$$

$$\text{FPR (1-specificity)} = \frac{\text{FP}}{\text{TN} + \text{FP}}$$

Log-Loss

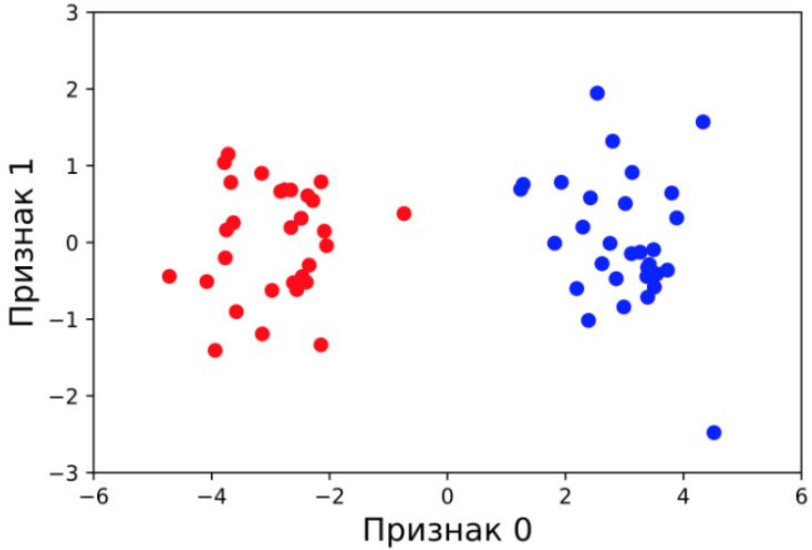
$$-(y \log(p) + (1 - y) \log(1 - p))$$

Давать ли кредит?

Дерево Решений

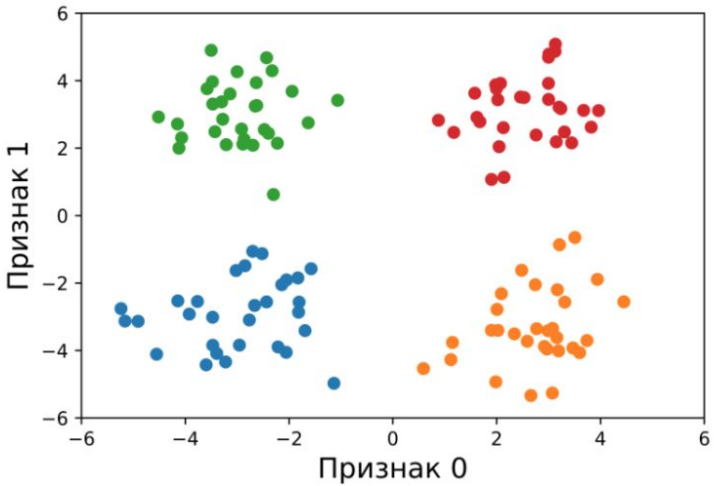
https://vas3k.ru/blog/machine_learning/

Решающие деревья



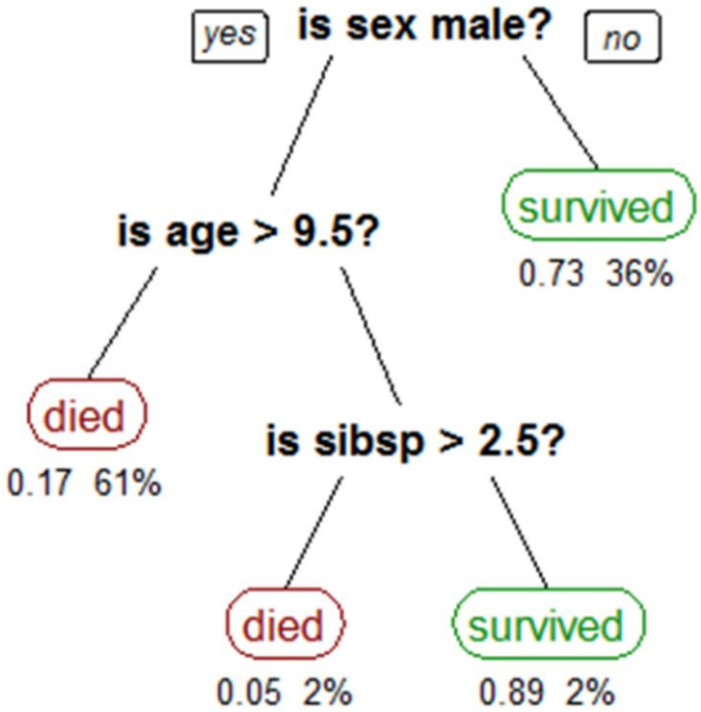

```
def classify(X):
    if X[0] < 0:
        return "red"
    else:
        return "blue"
```

Решающие деревья

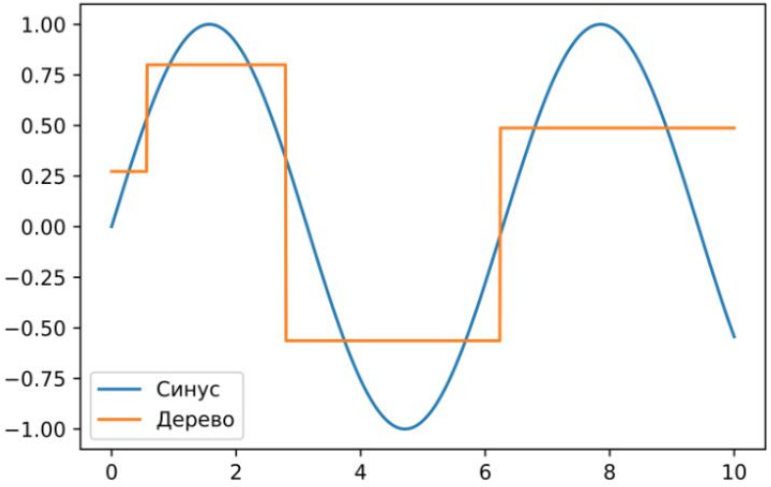


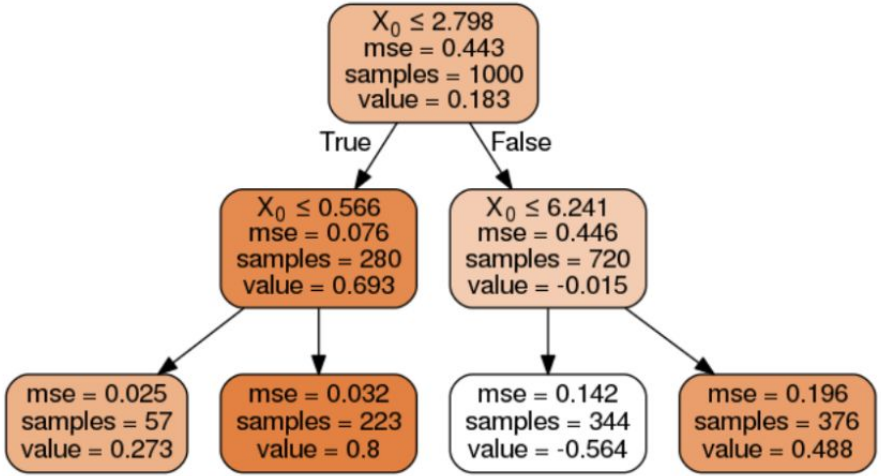

```
def classify(X):
    if X[0] < 0:
        if X[1] < 0:
            return "blue"
        else:
            return "green"
    else:
        if X[1] > 0:
            return "red"
        else:
            return "orange"
```

Решающие деревья

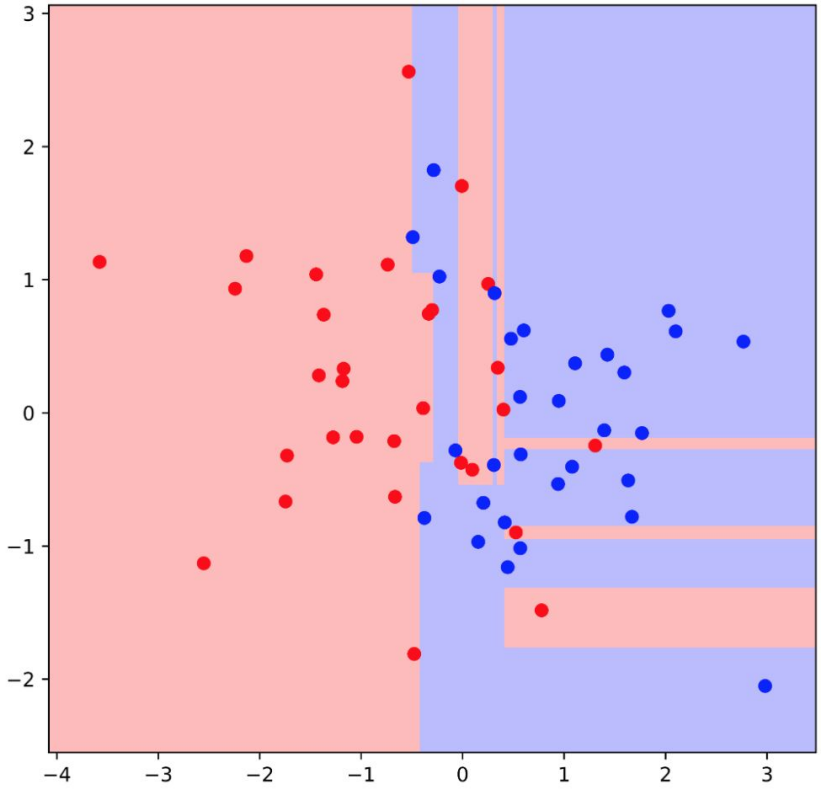


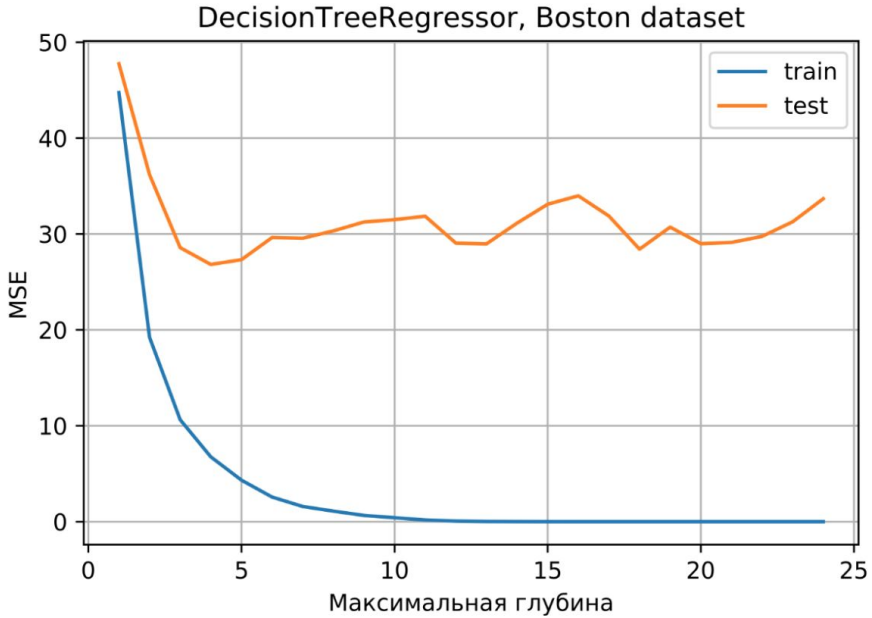
Решающие деревья





Решающие деревья





Решающие деревья

Индекс неоднородности - величина, оценивающая неоднородность выборки

Для задачи регрессии

$$\text{MSE: } H(Y) = \frac{1}{|Y|}\sum_{i=1}^{|Y|}(y_i - \overline{y})^2$$

$$\overline{y} = \frac{1}{|Y|}\sum_{i=1}^{|Y|} y_i$$

Решающие деревья

Для классификации (P_i - доля класса i в X, L - число классов):

- Энтропия: $H(X) = -\sum_{i=1}^{L} P_i \log P_i$
- Джини: $H(X) = \sum_{i=1}^{L} P_i(1 - P_i)$
- Misclassification: $H(X) = 1 - \max_{1..L} P_i$

Замечание: нужно считать, что $P_i log(P_i) = 0$ при $P_i = 0$

Решающие деревья

Уменьшение среднего индекса неоднородности при разбиении: $I(Q, f, v) = H(Q) - \frac{|L|}{|Q|} H(L) - \frac{|R|}{|Q|} H(R)$

Q - выборка, f - признак, v - порог, L и R - соответсвующие им разбиения выборки Q на две части.

- Будем строить дерево от корня (стартовая вершина) к листьям (вершины, из которых некуда идти)
- В начале в стартовой вершине лежит вся выборка

Решающие деревья

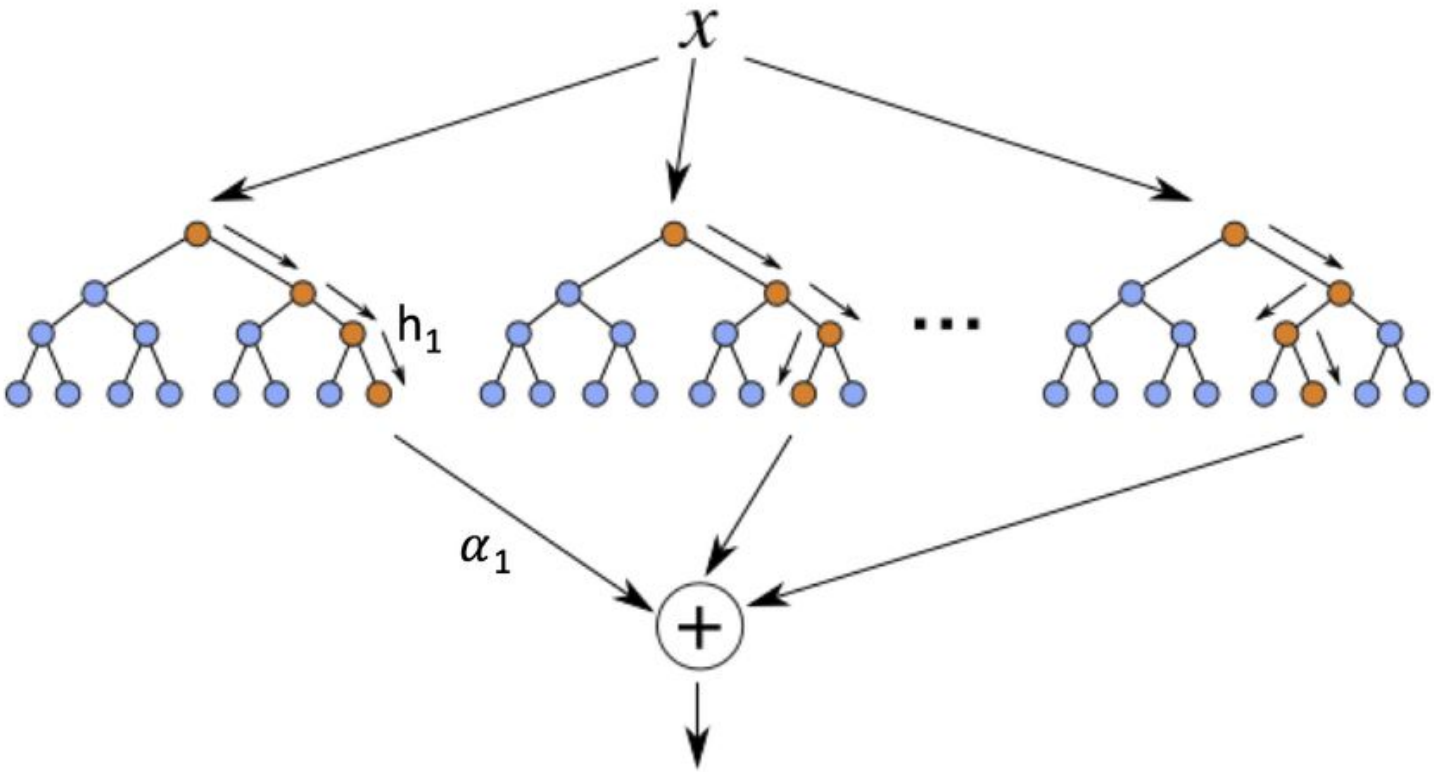
- Если в текущей вершине выполнен критерий останова - ничего не делаем в этой вершине.
- Выбрать f и v так, чтобы $I(Q, f, v)$ было максимально, например, перебрав все признаки и пороги.
- Разделим данную выборку на L и R согласно выбранным f и v, создадим двух потомков текущей вершиы и положим в них L и R соответственно.
- Повторим для каждой дочерней вершины.

Решающие деревья

Таким образом, конкретный метод построения решающего дерева определяется:

1. Видом предикатов в вершинах
2. Критерием информативности
3. Критерием останова
4. Методом обработки пропущенных значений
5. Методом стрижки
6. Работой с категориальными признаками: можно создавать по потомку для каждого значения категориального признака, а можно кодировать средним значением переменной среди элементов данного класса

Ансамбли деревьев



https://www.vaishalilambe.com/blog/data-science-algorithms-random-forest

Ансамбли деревьев

Bootstrap:
Пусть дана выборка X из n объектов. Выберем несколько раз, например n, равновероятно случайный объект из выборки X (выбор с повторениями). Выборку составленную из этих объектов назовём bootstrap-выборкой.

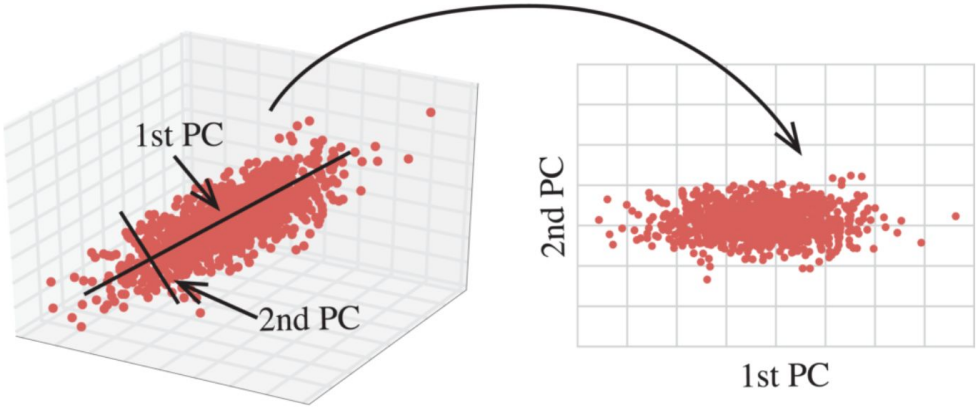
Пример:
Из [1,2,3] могут получиться выборки [1,2,2], [3,1,2], [3,3,2] и тд

Ансамбли деревьев

Получили итоговый алгоритм для построения **случайного леса (Random Forest)** с k деревьями:

- Сгенерируем k bootstrap-подвыборок исходного датасета
- Обучим на каждой выборке своё дерево, но при построении дерева в каждом узле при поиске лучшего разбиения признака используем не все, а m случайных признаков, и ищем разбиение только по ним (m=n^0.5 для классификации, m=n/3 для регрессии)
- Ответ всего алгоритма - класс, за который проголосовало наибольшее количество кандидатов либо среднее значение для классификации и регрессии соответственно

Dimensionality Reduction: PCA

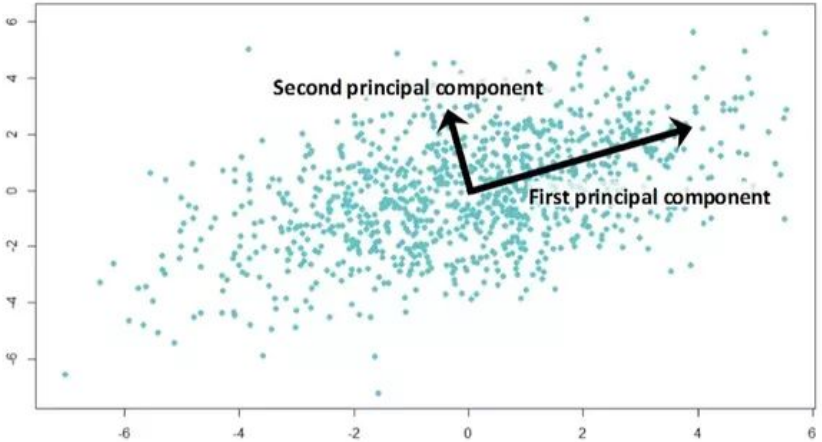


Один из основных способов уменьшить размерность данных, потеряв наименьшее количество информации.

https://habr.com/ru/post/304214/

Dimensionality Reduction: PCA

1) Вычисляем матрицу ковариаций признаков
2) Находим собственные вектора матрицы ковариаций
3) Первые k векторов соответствующих k максимальным собственным значениям - компоненты нашего разложения

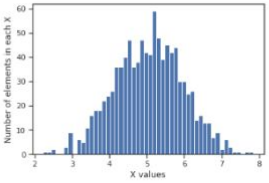


https://medium.com/@sadatnazrul/the-dos-and-donts-of-principal-component-analysis-7c2e9dc8cc48

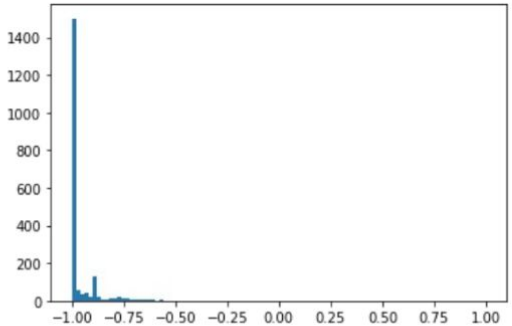
Плюсы: возможность регуляции получаемой размерности (добавлении компонент по одной в зависимости от объяснённой дисперсии); скорость алгоритма; интерпретация

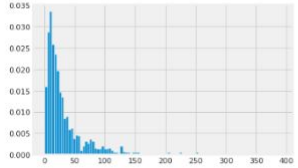
Минусы: линейность, предположение об ортогональности

Тест на согласие: какое это распределение?

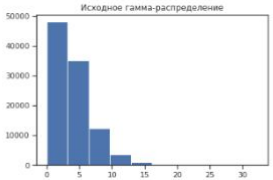


нормальное

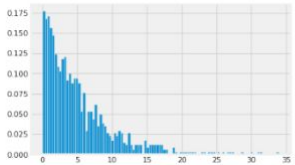




экспоненциальное



гамма

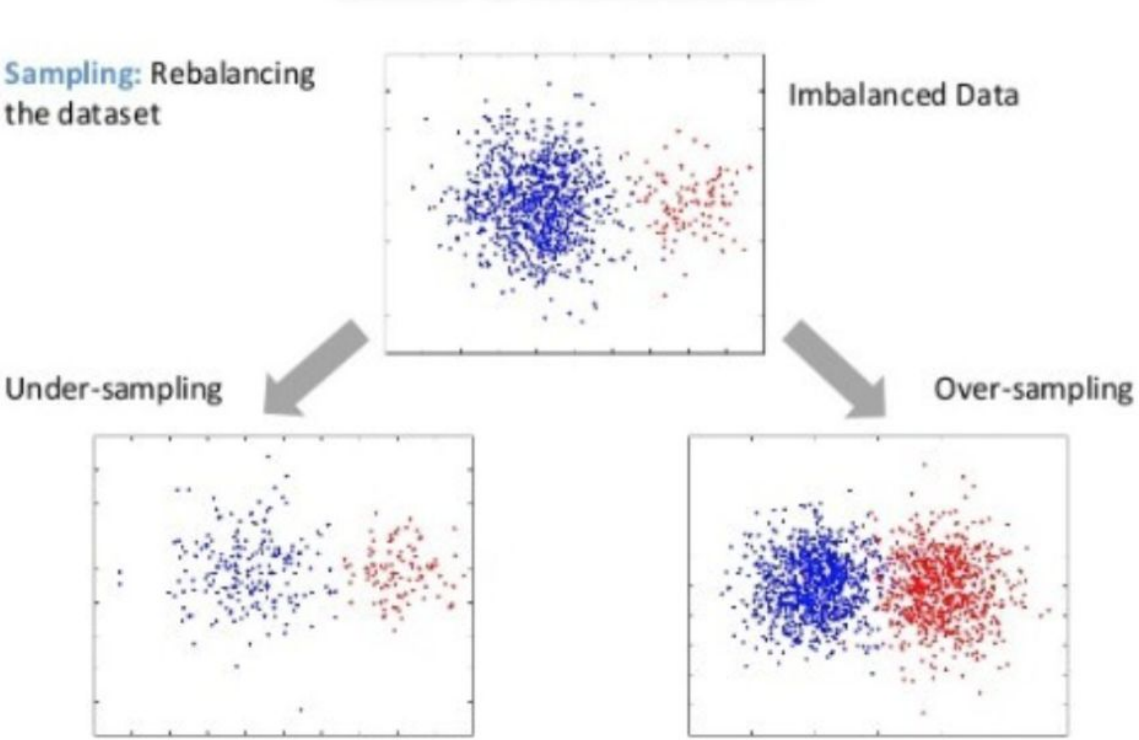


экспоненциальное

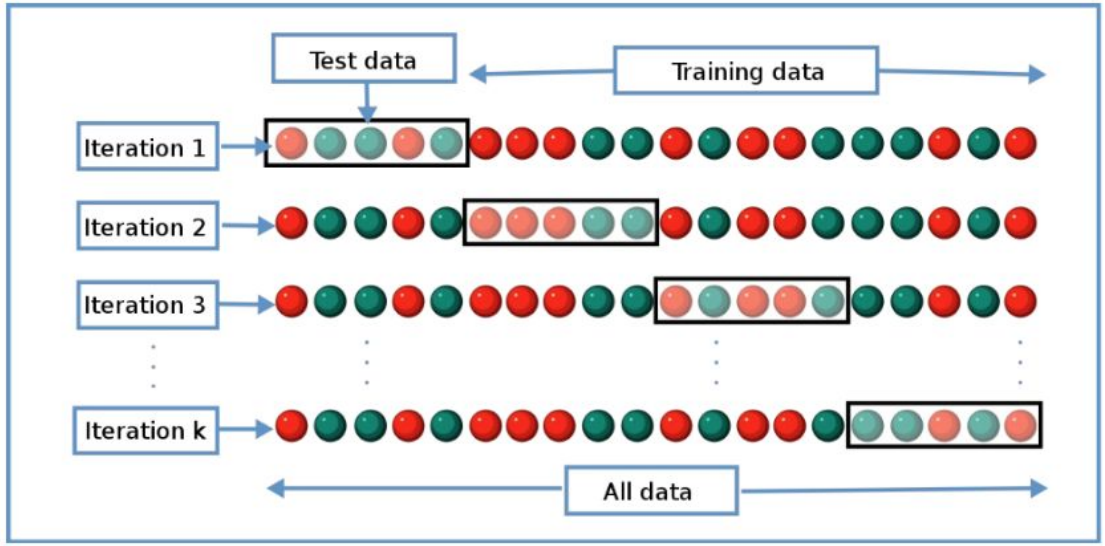
https://mc.ai/15-statistical-hypothesis-tests-in-python-cheat-sheet/

НЕТОЛОГИЯ

Проблема несбалансированности классов



Кросс-валидация



Оцениваем модель на нескольких тестовых данных

Спасибо за внимание!