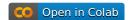
Klasyfikacja niezbalansowana, klasyfikatory zespołowe i wyjaśnialna Al

Wykorzystanie Google Colab



Ładowanie i eksploracja danych

Na tym laboratorium wykorzystamy zbiór danych Polish companies bankruptcy. Dotyczy on klasyfikacji, na podstawie danych z raportów finansowych, czy firma zbankrutuje w ciągu najbliższych kilku lat. Jest to zadanie szczególnie istotne dla banków, funduszy inwestycyjnych, firm ubezpieczeniowych itp., które z tego powodu zatrudniają licznie data scientistów. Zbiór zawiera 64 cechy, obliczone przez ekonomistów, którzy stworzyli ten zbiór, są one opisane na podlinkowanej wcześniej stronie. Dotyczą one zysków, posiadanych zasobów oraz długów firm.

Ściągnij i rozpakuj dane (Data Folder -> data.zip) do katalogu data obok tego notebooka. Znajduje się tam 5 plików w formacie .arff, wykorzystywanym głównie przez oprogramowanie Weka. Jest to program do "klikania" ML w interfejsie graficznym, jakiś czas temu popularny wśród mniej technicznych data scientistów. W Pythonie ładuje się je za pomocą bibliotek SciPy i Pandas.

W dalszej części laboratorium wykorzystamy plik 3year.arff, w którym na podstawie finansowych firmy po 3 latach monitorowania chcemy przewidywać, czy firma zbankrutuje w ciągu najbliższych 3 lat. Jest to dość realistyczny horyzont czasowy.

```
import os
from scipy.io import arff
import pandas as pd

data = arff.loadarff(os.path.join("data", "3year.arff"))
X = pd.DataFrame(data[0])
```

Przyjrzyjmy się teraz naszym danym.

X.head()

Attr1 Attr8 \	Attr2	Attr3	Attr4	Attr5	Attr6	Attr7
0 0.174190	0.41299	0.14371	1.3480	-28.9820	0.60383	0.219460
1.1225 1 0.146240	0.46038	0.28230	1.6294	2.5952	0.00000	0.171850
1.1721 2 0.000595	0.22612	0.48839	3.1599	84.8740	0.19114	0.004572
2.9881 3 0.024526	0.43236	0.27546	1.7833	-10.1050	0.56944	0.024526

```
1.3057
            0.41504 0.34231 1.9279 -58.2740 0.00000
4 0.188290
                                                            0.233580
1.4094
    Attr9
            Attr10
                            Attr56
                                       Attr57
                                                Attr58
                                                           Attr59
                                                                   Attr60
\
   1.1961
           0.46359
                          0.163960
                                     0.375740
                                               0.83604
                                                         0.000007
                                                                   9.7145
                     . . .
   1.6018
                          0.027516
1
           0.53962
                     . . .
                                     0.271000
                                               0.90108
                                                         0.000000
                                                                   5.9882
2
   1.0077
           0.67566
                          0.007639
                                     0.000881
                                               0.99236
                                                         0.000000
                                                                   6.7742
3
   1.0509
           0.56453
                          0.048398
                                     0.043445
                                               0.95160
                                                         0.142980
                     . . .
                                                                   4.2286
   1.3393
           0.58496
                          0.176480
                                     0.321880
                                               0.82635
                                                         0.073039
                                                                   2.5912
                     . . .
            Attr62
                                      class
   Attr61
                     Attr63
                             Attr64
            84.291
   6.2813
                     4.3303
                             4.0341
                                       b'0'
0
1
  4.1103
           102.190
                     3.5716
                             5.9500
                                       b'0'
2
   3.7922
            64.846
                     5.6287
                             4.4581
                                       b'0'
                                       b'0'
3
   5.0528
            98.783
                     3.6950
                             3.4844
  7.0756
           100.540
                                       b'0'
                     3.6303
                             4.6375
[5 rows x 65 columns]
X.dtypes
          float64
Attr1
Attr2
          float64
Attr3
          float64
Attr4
          float64
Attr5
          float64
Attr61
          float64
Attr62
          float64
Attr63
          float64
          float64
Attr64
           object
class
Length: 65, dtype: object
X.describe()
                             Attr2
                                            Attr3
              Attr1
                                                           Attr4
Attr5
       10503.000000
                      10503.000000
                                     10503.000000
count
                                                   10485.000000
1.047800e+04
mean
           0.052844
                          0.619911
                                         0.095490
                                                        9.980499 -
1.347662e+03
                          6.427041
std
           0.647797
                                         6.420056
                                                      523.691951
```

mi 1.259 5.2 509 1.5	1.185806e+05 min -17.6920 1.190300e+07	900 0.	000000 -	479.730000	0.002080 -	
	25% 0.0006	586 O.	253955	0.017461	1.040100 -	
	5.207075e+01 50% 0.0430	934 0.	464140	0.198560	1.605600	
	1.579300e+00 75% 0.1238	305 0.	689330	0.419545	2.959500	
	5.608400e+01 nax 52.6520	900 480.	730000	17.708000	53433.000000	
	6.854400e+05					
	Attr10 \	tr6	Attr7	Attr8	Attr9	
	count 10503.0000	000 10503.	000000 10	0489.000000	10500.000000	
		159 0.	065624	19.140113	1.819254	
	0.366093 std 6.9700	625 0.	651152	717.756745	7.581659	
	6.428603 min -508.1200	900 -17.	692000	-2.081800	-1.215700 -	
	479.730000 25% 0.0000	900 0.	002118	0.431270	1.011275	
	0.297340 50% 0.0000		050945	1.111000	1.199000	
	0.515500					
	75% 0.0725 0.725635		142275	2.857100		
	max 45.5330 11.837000	900 52.	652000 53	3432.000000	740.440000	
	mean 6.638 std 5.989 min7.513	0300e+04 1 03549e+03 0196e+04 03800e+05 -	-0.53008 55.97860 5691.70000	00 10503.000 32 -0.014 08 18.684 00 -1667.300	190.201224 1900 -198.690000	\
	50% 8.822 75% 4.348	2100e+01 2900e+02 3900e+03 9500e+06	0.00513 0.05176 0.13001 293.15006	55 0.106 LO 0.271	0.953060 310 0.995927	
	Attı	r59	Attr60	Attr61	Attr62	
	Attr63 \ count 10503.0000	900 9.9110	00e+03 10	0486.000000	1.046000e+04	
	10485.000000 mean 1.4293	319 5.7133	63e+02	13.935361	1.355370e+02	
	9.095149 std 77.2732	270 3.7159	67e+04	83.704103	2.599116e+04	
	31.419096 min -172.0700	000 0.0000	00e+00	-6.590300 -	2.336500e+06 -	-

```
0.000156
           0.000000 5.533150e+00
                                       4.486075 4.073700e+01
25%
3.062800
50%
           0.002976 9.952100e+00
                                       6.677300 7.066400e+01
5.139200
75%
           0.240320
                     2.093600e+01
                                      10.587500
                                                1.182200e+02
8.882600
        7617.300000
                     3.660200e+06
                                    4470.400000 1.073500e+06
max
1974.500000
             Attr64
count 10275.000000
          35.766800
mean
std
         428.298315
min
          -0.000102
25%
           2.023350
50%
           4.059300
75%
           9.682750
       21499.000000
max
```

[8 rows x 64 columns]

DataFrame zawiera 64 atrybuty numeryczne o zróżnicowanych rozkładach wartości oraz kolumnę "class" typu bytes z klasami 0 i 1.

Zadanie 1 (0.25 punktu)

Wyodrębnij klasy jako osobną zmienną typu pd. Series. Dokonaj konwersji typu na liczby całkowite.

```
y = pd.Series(X.pop('class')).astype(int)
```

Wiemy, że mamy do czynienia z klasyfikacją binarną - klasa 0 to brak bankructwa, klasa 1 to bankructwo w ciągu najbliższych 3 lat. Przyjrzyjmy się dokładniej naszym danym.

Zadanie 2 (0.5 punktu)

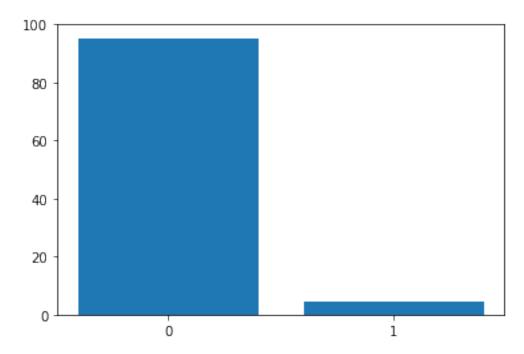
Narysuj wykres słupkowy (bar plot) częstotliwości obu klas w całym zbiorze. Upewnij się, że na osi X są numery lub nazwy klas, a oś Y ma wartości w procentach.

Dodatkowo wypisz częstotliwość każdej klasy w procentach.

```
import matplotlib.pyplot as plt
bankrupt_count = y.sum()
not_bankrupt_count = y.size - bankrupt_count
nbc_percent = not_bankrupt_count / (bankrupt_count +
not_bankrupt_count) * 100
bc_percent = bankrupt_count / (bankrupt_count + not_bankrupt_count) *
100
plt.bar(['0', '1'], [nbc percent, bc percent])
```

print(f"Bankrupt percentage {bc_percent}%\nNot bankrupt percentage
{nbc percent}")

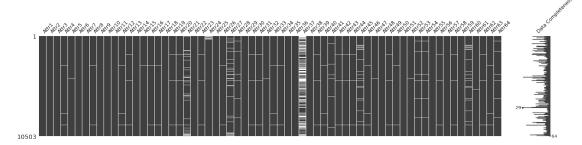
Bankrupt percentage 4.712939160239932% Not bankrupt percentage 95.28706083976007



Jak widać, klasa pozytywna jest w znacznej mniejszości, stanowi poniżej 5% zbioru. Taki problem nazywamy **klasyfikacją niezbalansowaną (imbalanced classification)**. Mamy tu **klasę dominującą (majority class)** oraz **klasę mniejszościową (minority class)**. Pechowo prawie zawsze interesuje nas ta druga, bo klasa większościowa jest trywialna. Przykładowo, 99% badanych jest zdrowych, a 1% ma niewykryty nowotwór - z oczywistych przyczyn chcemy wykrywać właśnie sytuację rzadką (problem diagnozy jako klasyfikacji jest zasadniczo zawsze niezbalansowany). W dalszej części laboratorium poznamy szereg konsekwencji tego zjawiska i metody na radzenie sobie z nim.

Mamy sporo cech, wszystkie numeryczne. Ciekawe, czy mają wartości brakujące, a jeśli tak, to ile. Można to policzyć, ale wykres jest często czytelniejszy. Pomoże nam tu biblioteka missingno. Zaznacza ona w każdej kolumnie wartości brakujące przeciwnym kolorem.

```
import missingno as msno
msno.matrix(X, labels=True, figsize=(30, 6))
<AxesSubplot:>
```



Jak widać, cecha 37 ma bardzo dużo wartości brakujących, podczas gdy pozostałe cechy mają raczej niewielką ich liczbę. W takiej sytuacji najlepiej usunąć tę cechę, a pozostałe wartości brakujące **uzupełnić / imputować (impute)**. Typowo wykorzystuje się do tego wartość średnią lub medianę z danej kolumny. Ale uwaga - imputacji dokonuje się dopiero po podziale na zbiór treningowy i testowy! W przeciwnym wypadku wykorzystywalibyśmy dane ze zbioru testowego, co sztucznie zawyżyłoby wyniki. Jest to błąd metodologiczny - **wyciek danych (data leakage)**.

Zadanie 3 (0.25 punktu)

Usuń kolumnę "Attr37" ze zbioru danych.

X.pop('Attr37')

0	12314	0.00000	
1		NaN	
2		NaN	
3		3.96240	
4		4.54900	
10498		1.14150	
10499		0.41299	
10500		0.93568	
10501		NaN	
10502		4.34600	
N	^++ ^ 7	الماكية مناما	10

Name: Attr37, Length: 10503, dtype: float64

Podział na zbiór treningowy i testowy to pierwszy moment, kiedy niezbalansowanie danych nam przeszkadza. Jeżeli zrobimy to czysto losowo, to są spore szanse, że w zbiorze testowym będzie tylko klasa negatywna - w końcu jest jej aż >95%. Dlatego wykorzystuje się **próbkowanie ze stratyfikacją (stratified sampling)**, dzięki któremu proporcje klas w zbiorze przed podziałem oraz obu zbiorach po podziałe są takie same.

Zadanie 4 (0.5 punktu)

Dokonaj podziału zbioru na treningowy i testowy w proporcjach 80%-20%, ze stratyfikacją, wykorzystując funkcję train_test_split ze Scikit-learn'a. Przemieszaj zbiór (shuffle), ale pamiętaj o uwzględnieniu stałego random_state, aby wyniki były reprodukowalne (reproducible). Zwróć uwagę, że w Scikit-learn'ie argument stratify oczekuje wektora klas.

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
test_size=0.2, random_state=0, shuffle=True, stratify=y)
```

Zadanie 5 (0.5 punktu)

Uzupełnij wartości brakujące średnią wartością cechy. Użyj do tego klasy SimpleImputer. Pamiętaj, aby obliczyć wartość średnią na zbiorze treningowym (.fit()), a przetransformować później oba zbiory (X train, X test).

```
from sklearn.impute import SimpleImputer
imp_mean = SimpleImputer(strategy='mean')
imp_mean.fit(X_train)
X_train = imp_mean.transform(X_train)
X_test = imp_mean.transform(X_test)
```

Prosta klasyfikacja

Zanim przejdzie się do modeli bardziej złożonych, trzeba najpierw wypróbować coś prostego, żeby mieć punkt odniesienia. Tworzy się dlatego **modele bazowe (baselines)**.

W naszym przypadku będzie to **drzewo decyzyjne** (**decision tree**). Jest to drzewo binarne z decyzjami if-else, prowadzącymi do klasyfikacji danego przykładu w liściu. Każdy podział w drzewie to pytanie postaci "Czy wartość cechy X jest większa lub równa Y?". Trening takiego drzewa to prosty algorytm zachłanny, bardzo przypomina budowę zwykłego drzewa binarnego. W każdym węźle wykonujemy:

- 1. Sprawdź po kolei wszystkie możliwe punkty podziału, czyli każdą (unikalną) wartość każdej cechy, po kolei.
- 2. Dla każdego przypadku podziel zbiór na 2 kawałki: niespełniający warunku (lewe dziecko) i spełniający warunek (prawe dziecko).
- 3. Oblicz jakość podziału według pewnej wybranej funkcji jakości. Im lepiej nasz if/else rozdziela klasy od siebie (im "czystsze" są węzły-dzieci), tym wyższa jakość. Innymi słowy, chcemy, żeby do jednego dziecka poszła jedna klasa, a do drugiego druga.
- 4. Wybierz podział o najwyższej jakości.

Taki algorytm wykonuje się rekurencyjnie, aż otrzymamy węzeł czysty (pure leaf), czyli taki, w którym są przykłady z tylko jednej klasy. Typowo wykorzystywaną funkcją jakości (kryterium podziału) jest entropia Shannona - im niższa entropia, tym bardziej jednolite są klasy w węźle (czyli wybieramy podział o najniższej entropii).

Powyższe wytłumaczenie algorytmu jest oczywiście nieformalne i dość skrótowe. Doskonałe tłumaczenie, z interaktywnymi wizualizacjami, dostępne jest tutaj. W formie filmów - tutaj oraz tutaj. Dla drzew do regresji - ten film.

Warto zauważyć, że taka konstrukcja prowadzi zawsze do overfittingu. Otrzymanie liści czystych oznacza, że mamy 100% dokładności na zbiorze treningowym, czyli perfekcyjnie

przeuczony klasyfikator. W związku z tym nasze predykcje mają bardzo niski bias, ale bardzo dużą wariancję. Pomimo tego drzewa potrafią dać bardzo przyzwoite wyniki, a w celu ich poprawy można je regularyzować, aby mieć mniej "rozrośnięte" drzewo. Film dla zainteresowanych.

W tym wypadku AI to naprawdę tylko zbiór if ow ;)

Zadanie 6 (0.5 punktu)

Wytrenuj klasyfikator drzewa decyzyjnego (klasa DecisionTreeClassifier). Użyj entropii jako kryterium podziału. Pamiętaj o użyciu stałego random state.

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
dtc = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', random_state=0)
dtc.fit(X_train, y_train)
```

```
DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', random state=0)
```

Teraz musimy sprawdzić jakość naszego baseline'u. Tu kolejny problem z klasyfikacją niezbalansowaną - zwykła celność (accuracy) na pewno nie zadziała! Typowo wykorzystuje się AUC, nazywane też AUROC (Area Under Receiver Operating Characteristic), bo metryka ta "widzi" i uwzględnia niezbalansowanie klas. Wymaga ona przekazania prawdopodobieństwa klasy pozytywnej, a nie tylko binarnej decyzji.

Bardzo dobre i bardziej szczegółowe wytłumaczenie, z interktywnymi wizualizacjami, można znaleć tutaj. Dla preferujących filmy - tutaj.

Użyj do tego metody .predict_proba(), która w kolejnych kolumnach zwraca prawdopodobieństwa poszczególnych klas (nas interesuje kolumna 1).

Zadanie 7 (0.5 punktu)

Oblicz i wypisz AUROC na zbiorze testowym dla drzewa decyzyjnego (funkcja roc_auc_score). Skomentuj wynik - czy jest to twoim zdaniem dużo czy mało? Weź pod uwagę możliwy zakres wartości tej metryki.

```
from sklearn.metrics import roc_auc_score
roc_auc_score(y_test, dtc.predict_proba(X_test)[:, 1])
```

0.7266899766899767

Komentarz Metryka ta daje wartości z zakresu 0-1. Wartość wynosząca 0.5 oznacza, że nasz model daje wyniki porównywalne z losową klasyfikacją. W tym wypadku dla danych testowych dostaliśmy wynik na poziomie 0.72, co oznacza że nasz model działa całkiem dobrze, aczkolwiek warto spróbować dalej zwiększyć tą wartość poprawieniem modelu.

Uczenie zespołowe, bagging, lasy losowe

Bardzo często wiele klasyfikatorów działających razem daje lepsze wyniki niż pojedynczy klasyfikator. Takie podejście nazywa się **uczeniem zespołowym (ensemble learning)**.

Istnieje wiele różnych podejść do tworzenia takich klasyfikatorów złożonych (ensemble classifiers).

Podstawową metodą jest bagging:

- 1. Wylosuj N (np. 100, 500, ...) próbek boostrapowych (boostrap sample) ze zbioru treningowego. Próbka boostrapowa to po prostu losowanie ze zwracaniem, gdzie dla wejściowego zbioru z M wierszami losujemy M próbek. Będą tam powtórzenia, średnio nawet 1/3, ale się tym nie przejmujemy.
- 2. Wytrenuj klasyfikator bazowy (base classifier) na każdej z próbek boostrapowych.
- 3. Stwórz klasyfikator złożony poprzez uśrednienie predykcji każdego z klasyfikatorów bazowych.

Typowo klasyfikatory bazowe są bardzo proste, żeby można było szybko wytrenować ich dużą liczbę. Prawie zawsze używa się do tego drzew decyzyjnych. Dla klasyfikacji uśrednienie wyników polega na głosowaniu - dla nowej próbki każdy klasyfikator bazowy ją klasyfikuje, sumuje się głosy na każdą klasę i zwraca najbardziej popularną decyzję.

Taki sposób ensemblingu zmniejsza wariancję klasyfikatora. Intuicyjnie, skoro coś uśredniamy, to siłą rzeczy będzie mniej rozrzucone, bo dużo ciężej będzie osiągnąć jakąś skrajność. Redukuje to też overfitting.

Lasy losowe (Random Forests) to ulepszenie baggingu. Zaobserwowano, że pomimo losowania próbek boostrapowych, w baggingu poszczególne drzewa są do siebie bardzo podobne (są skorelowane), używają podobnych cech ze zbioru. My natomiast chcemy zróżnicowania, żeby mieć niski bias - redukcją wariancji zajmuje się uśrednianie. Dlatego używa się metody losowej podprzestrzeni (random subspace method) - przy każdym podziale drzewa losuje się tylko pewien podzbiór cech, których możemy użyć do tego podziału. Typowo jest to pierwiastek kwadratowy z ogólnej liczby cech.

Zarówno bagging, jak i lasy losowe mają dodatkowo bardzo przyjemną własność - są mało czułe na hiperparametry, szczególnie na liczbę drzew. W praktyce wystarczy ustawić 500 czy 1000 drzew i będzie dobrze działać. Dalsze dostrajanie hiperparametrów może jeszcze trochę poprawić wyniki, ale nie tak bardzo, jak przy innych klasyfikatorach. Jest to zatem doskonały wybór domyślny, kiedy nie wiemy, jakiego klasyfikatora użyć.

Dodatkowo jest to problem **embarassingly parallel** - drzewa można trenować w 100% równolegle, dzięki czemu jest to dodatkowo wydajna obliczeniowo metoda.

Głębsze wytłumaczenie, z interaktywnymi wizualizacjami, można znaleźć tutaj. Dobrze tłumaczy je też ta seria filmów.

Zadanie 8 (0.5 punktu)

Wytrenuj klasyfikator Random Forest (klasa RandomForestClassifier). Użyj 500 drzew i entropii jako kryterium podziału. Pamiętaj, aby ustawić stały random_state. Dla przyspieszenia ustaw n jobs=-1 (użyje tylu procesów, ile masz dostępnych rdzeni

procesora). Następnie sprawdź jego jakość na zbiorze testowym. Skomentuj wynik w odniesieniu do baseline'u.

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rfc = RandomForestClassifier(n_estimators=500, criterion='entropy',
random_state=0, n_jobs=-1).fit(X_train, y_train)
roc_auc_score(y_test, rfc.predict_proba(X_test)[:, 1])
```

0.8994111948657404

Komentarz W porównaniu do naszego baseline'u wynik jest zdecydowanie lepszy. Pokazuje to że użycie lasu losowego rzeczywiście poprawiło klasyfikację względem pierwotnego modelu.

Wynik ten możemy jednak jeszcze ulepszyć!

Oversampling, SMOTE

W przypadku zbiorów niezbalansowanych można dokonać **balansowania (balancing)** zbioru. Są tutaj 2 metody:

- undersampling: usunięcie przykładów z klasy dominującej
- **oversampling**: wygenerowanie dodatkowych przykładów z klasy mniejszościowej

Undersampling działa dobrze, kiedy niezbalansowanie jest niewielkie, a zbiór jest duży (możemy sobie pozwolić na usunięcie jego części). Oversampling typowo daje lepsze wyniki, istnieją dla niego bardzo efektywne algorytmy. W przypadku bardzo dużego niezbalansowania można zrobić oba.

Typowym algorytmem oversamplingu jest **SMOTE** (**Synthetic Minority Oversampling Technique**). Działa on następująco:

- 1. Idź po kolei po przykładach z klasy mniejszościowej
- 2. Znajdź k najbliższych przykładów dla próbki, typowo k=5
- 3. Wylosuj tylu sąsiadów, ile trzeba do oversamplingu, np. jeżeli chcemy zwiększyć klasę mniejszościową 3 razy (o 200%), to wylosuj 2 z 5 sąsiadów
- 4. Dla każdego z wylosowanych sąsiadów wylosuj punkt na linii prostej między próbką a tym sąsiadem. Dodaj ten punkt jako nową próbkę do zbioru

Taka technika generuje przykłady bardzo podobne do prawdziwych, więc nie zaburza zbioru, a jednocześnie pomaga klasyfikatorom, bo "zagęszcza" przestrzeń, w której znajduje się klasa pozytywna.

Algorytm SMOTE, jego warianty i inne algorytmy dla problemów niezbalansowanych implementuje biblioteka Imbalanced-learn.

Zadanie 9 (1 punkt)

Użyj SMOTE do zbalansowania zbioru treningowego (nie używa się go na zbiorze testowym!) (klasa SMOTE). Wytrenuj drzewo decyzyjne oraz las losowy na zbalansowanym zbiorze, użyj tych samych argumentów co wcześniej. Pamiętaj o użyciu wszędzie stałego random state i n jobs=-1. Skomentuj wynik.

```
from imblearn.over_sampling import SMOTE
sm = SMOTE(random_state=0, n_jobs=-1)
X_os, y_os = sm.fit_resample(X_train, y_train)
dtc = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy',
random_state=0).fit(X_os, y_os)
print("SMOTE decision tree AUC score:", roc_auc_score(y_test,
dtc.predict_proba(X_test)[:, 1]))

rfc = RandomForestClassifier(n_estimators=500, criterion='entropy',
random_state=0, n_jobs=-1).fit(X_os, y_os)
print("SMOTE random forest AUC score:", roc_auc_score(y_test,
rfc.predict_proba(X_test)[:, 1]))

SMOTE decision tree AUC score: 0.70995670995671
SMOTE random forest AUC score: 0.9047644274917003
```

Komentarz W tym przypadku dodatkowe zastosowanie algorytmu SMOTE spowodowało nieznaczne pogorszenie wyniku dla drzewa decyzyjnego i nieznaczną poprawę dla lasu losowego. Różnice te są jednak tak niewielkie, że ciężko stwierdzić wpływ zastosowaniu SMOTE względem poprzednich pomiarów.

W dalszej części laboratorium używaj zbioru po zastosowaniu SMOTE do treningu klasyfikatorów.s

Dostrajanie (tuning) hiperparametrów

Lasy losowe są stosunkowo mało czułe na dobór hiperparametrów - i dobrze, bo mają ich dość dużo. Można zawsze jednak spróbować to zrobić, a w szczególności najważniejszy jest parametr max_features, oznaczający, ile cech losować przy każdym podziale drzewa. Typowo sprawdza się wartości z zakresu [0.1, 0.5].

W kwestii szybkości, kiedy dostrajamy hiperparametry, to mniej oczywiste jest, jakiego n_j obs użyć. Z jednej strony klasyfikator może być trenowany na wielu procesach, a z drugiej można trenować wiele klasyfikatorów na różnych zestawach hiperparametrów równolegle. Jeżeli nasz klasyfikator bardzo dobrze się uwspółbieżnia (jak Random Forest), to można dać mu nawet wszystkie rdzenie, a za to wypróbowywać kolejne zestawy hiperparametrów sekwencyjnie. Warto ustawić parametr verbose na 2 lub więcej, żeby dostać logi podczas długiego treningu i mierzyć czas wykonania. W praktyce ustawia się to metodą prób i błędów.

Zadanie 10 (1 punkt)

Wykorzystaj grid search z cross validation z 5 foldami, aby dobrać wartość max_features (klasa GridSearchCV). Wypróbuj wartości [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5]

Pamiętaj, żeby jako estymatora przekazanego do grid search'a użyć instancji Random Forest, która ma już ustawione random_state i n_j obs. Wybierz model o najwyższym AUROC - jako scoring przekaż "roc_auc".

Skomentuj wynik. Czy warto było poświęcić czas i zasoby na tę procedurę?

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
hyper_params = [{"max_features": [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5]}]
rfc = RandomForestClassifier(random_state=0, n_jobs=-1, verbose=0)
model_cv = GridSearchCV(rfc, param_grid=hyper_params,
scoring="roc_auc").fit(X_os, y_os)
print("Best max_features:", model_cv.best_params_['max_features'])

rfc = RandomForestClassifier(random_state=0, n_jobs=-1,
max_features=model_cv.best_params_['max_features'])
rfc.fit(X_os, y_os)
print("AUC score for optimal max_features:", roc_auc_score(y_test,
rfc.predict_proba(X_test)[:, 1]))

Best max_features: 0.2
AUC score for optimal max_features: 0.9047366774639501
```

Komentarz W porównaniu do poprzedniej implementacji modelu wykorzystującego las losowy i SMOTE'a 'zoptymalizowany' model z pomocą grid searcha nie dał lepszych wyników. Może to wynikać z faktu, że lasy losowe są mało czułe na hiperparametry.

W praktycznych zastosowaniach data scientist wedle własnego uznana, doświadczenia, dostępnego czasu i zasobów wybiera, czy dostrajać hiperparametry i w jak szerokim zakresie. Dla Random Forest na szczęście często może nie być znaczącej potrzeby, i za to go lubimy:)

Zadanie 11 (0.25 punktu)

Sprawdź, jaka była optymalna wartość max_features. Jest to atrybut wytrenowanego GridSearchCV.

```
model_cv.best_params_
{'max_features': 0.2}
```

Random Forest - podsumowanie

- 1. Model oparty o uczenie zespołowe
- 2. Kluczowe elementy:
 - bagging: uczenie wielu klasyfikatorów na próbkach boostrapowych
 - metoda losowej podprzestrzeni: losujemy podzbiór cech do każdego podziału drzewa
 - uśredniamy głosy klasyfikatorów
- 3. Dość odporny na overfitting, zmniejsza wariancję błędu dzięki uśrednianiu
- 4. Mało czuły na hiperparametry

5. Przeciętnie bardzo dobre wyniki, doskonały wybór domyślny przy wybieraniu algorytmu klasyfikacji

Boosting

Drugą bardzo ważną grupą algorytmów ensemblingu jest **boosting**, też oparty o drzewa decyzyjne. O ile Random Forest trenował wszystkie klasyfikatory bazowe równolegle i je uśredniał, o tyle boosting robi to sekwencyjnie. Drzewa te uczą się na całym zbiorze, nie na próbkach boostrapowych. Idea jest następująca: trenujemy drzewo decyzyjne, radzi sobie przeciętnie i popełnia błędy na częsci przykładów treningowych. Dokładamy kolejne, ale znające błędy swojego poprzednika, dzięki czemu może to uwzględnić i je poprawić. W związku z tym "boostuje" się dzięki wiedzy od poprzednika. Dokładamy kolejne drzewa zgodnie z tą samą zasadą.

Jak uczyć się na błędach poprzednika? Jest to pewna **funkcja kosztu** (błędu), którą chcemy zminimalizować. Zakłada się jakąś jej konkretną postać, np. squared error dla regresji, albo logistic loss dla klasyfikacji. Później wykorzystuje się spadek wzdłuż gradientu (gradient descent), aby nauczyć się, w jakim kierunku powinny optymalizować kolejne drzewa, żeby zminimalizować błędy poprzednika. Jest to konkretnie **gradient boosting**, absolutnie najpopularniejsza forma boostingu, i jeden z najpopularniejszych i osiągających najlepsze wyniki algorytmów ML.

Tyle co do intuicji. Ogólny algorytm gradient boostingu jest trochę bardziej skomplikowany. Bardzo dobrze i krok po kroku tłumaczy go ta seria filmów na YT. Szczególnie ważne implementacje gradient boostingu to **XGBoost (Extreme Gradient Boosting)** oraz **LightGBM (Light Gradient Boosting Machine)**. XGBoost był prawdziwym przełomem w ML, uzyskując doskonałe wyniki i bardzo dobrze się skalując - był wykorzystany w CERNie do wykrywania cząstki Higgsa w zbiorze z pomiarów LHC mającym 10 milionów próbek. Jego implementacja jest dość złożona, ale dobrze tłumaczy ją inna seria filmików na YT.

Obecnie najczęściej wykorzystuje się LightGBM. Został stworzony przez Microsoft na podstawie doświadczeń z XGBoostem. Został jeszcze bardziej ulepszony i przyspieszony, ale różnice są głównie implementacyjne. Różnice dobrze tłumaczy ta prezentacja z konferencji PyData oraz prezentacja Microsoftu. Dla zainteresowanych - praktyczne aspekty LightGBM.

Zadanie 12 (0.75 punktu)

Wytrenuj klasyfikator LightGBM (klasa LGBMClassifier), sprawdź jego AUROC na zbiorze testowym. Pamiętaj o random_state i n_jobs. Skomentuj wynik w odniesieniu do wcześniejszych algorytmów.

```
from lightgbm import LGBMClassifier
lgbmc = LGBMClassifier(random_state=0, n_jobs=-1).fit(X_os, y_os)
roc_auc_score(y_test, lgbmc.predict_proba(X_test)[:, 1])
```

0.9433748070111706

Komentarz Klasyfikator LGBM z AUC score na poziomie powyżej 0.94 jest już obserwowalnie lepszym wynikiem od wyników wszystkich poprzednich modeli. Sam w sobie jest to też bardzo wysoki wynik.

Boosting dzięki uczeniu na poprzednich drzewach redukuje nie tylko wariancję, ale też bias w błędzie, dzięki czemu może w wielu przypadkach osiągnąć lepsze rezultaty od lasu losowego. Do tego dzięki znakomitej implementacji LightGBM jest szybszy.

Boosting jest jednak o wiele bardziej czuły na hiperparametry niż Random Forest. W szczególności bardzo łatwo go przeuczyć, a większość hiperparametrów, których jest dużo, wiąże się z regularyzacją modelu. To, że teraz poszło nam lepiej z domyślnymi, jest rzadkim przypadkiem.

W związku z tym, że przestrzeń hiperparametrów jest duża, przeszukanie wszystkich kombinacji nie wchodzi w grę. Zamiast tego można wylosować zadaną liczbę zestawów hiperparametrów i tylko je sprawdzić - chociaż im więcej, tym lepsze wyniki powinniśmy dostać. Służy do tego RandomizedSearchCV. Co więcej, klasa ta potrafi próbkować rozkłady prawdopodobieństwa, a nie tylko sztywne listy wartości, co jest bardzo przydatne przy parametrach ciągłych.

Hiperparametry LightGBMa są dobrze opisane w oficjalnej dokumentacji: wersja krótsza i wersja dłuższa. Jest ich dużo, więc nie będziemy ich tutaj omawiać. Jeżeli chodzi o ich dostrajanie w praktyce, to przydatny jest oficjalny guide oraz dyskusje na Kaggle.

Zadanie 13 (1 punkt)

Zaimplementuj random search dla LightGBMa (klasa RandomizedSearchCV). Użyj tylu prób, na ile pozwalają twoje zasoby obliczeniowe, ale przynajmniej 30. Przeszukaj przestrzeń hiperparametrów:

```
param_grid = {
    "n_estimators": [400, 500, 600],
    "learning_rate": [0.05, 0.1, 0.2],
    "num_leaves": [31, 48, 64],
    "colsample_bytree": [0.8, 0.9, 1.0],
    "subsample": [0.8, 0.9, 1.0],
}
```

Na koniec wypisz znalezione optymalne hiperparametry.

Pamiętaj o ustawieniu random_state i n_jobs, oraz ewentualnie verbose dla śledzenia przebiegu. Skomentuj wynik, szczególnie w odniesieniu do LightGBMa bez dostrajania hiperparametrów.

```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
param_grid = {
    "n_estimators": [400, 500, 600],
    "learning_rate": [0.05, 0.1, 0.2],
    "num_leaves": [31, 48, 64],
```

```
"colsample bytree": [0.8, 0.9, 1.0],
    "subsample": [0.8, 0.9, 1.0],
lgbm = LGBMClassifier(random state=0, n jobs=-1)
clf = RandomizedSearchCV(lgbm, param grid, random state=0,
n iter=30).fit(X os, y os)
clf.best params
{'subsample': 0.8,
 'num leaves': 31,
 'n estimators': 400,
 'learning rate': 0.2,
 'colsample bytree': 0.9}
lgbm opt = LGBMClassifier(random state=0, n jobs=-1,
                      subsample=0.8, num_leaves=31,
                      n estimators=400, learning rate=0.2,
colsample bytree=0.9)
lgbm opt.fit(X os, y os)
roc auc score(y test, lgbm opt.predict proba(X test)[:, 1])
0.9464676737404011
```

Komentarz LGBM z dostrojonymi parametrami daje wyniki na najwyższym poziomie spośród dotychczasowych modeli. Jest on satysfakcjonujący, jednak różnica między wynikami modelu z dostrojonymi hiperparametrami a niedostrojonymi jest na tyle mała, że koszt obliczenia optymalnych parametrów może okazać się być ważniejszym aspektem niż optymalizacja.

Powyżej sprawdziliśmy tylko jedną metrykę. Może jednak nowe hiperparametry wpłynęły też na inne metryki, być może nawet w bardziej znaczący sposób?

Zadanie 14 (0.75 punktu)

Wypisz raporty z klasyfikacji (funkcja classification_report), dla modelu LightGBM bez i z dostrajaniem hiperparametrów. Skomentuj różnicę precyzji (precision) i czułości (recall) między tymi modelami. Czy jest to pożądane zjawisko?

```
from sklearn.metrics import classification report
print("LGBM without optimization")
print(classification report(y test, lgbmc.predict(X test)))
print("LGBM optimized")
print(classification report(y test, lgbm opt.predict(X test)))
LGBM without optimization
              precision
                           recall f1-score
                                               support
           0
                   0.98
                             0.98
                                        0.98
                                                  2002
           1
                   0.60
                             0.60
                                        0.60
                                                    99
                                        0.96
                                                  2101
    accuracy
```

macro avg weighted avg	0.79 0.96	0.79 0.96	0.79 0.96	2101 2101	
LGBM optimized					
	precision	recall	f1-score	support	
0	0.98	0.99	0.98	2002	
1	0.76	0.52	0.61	99	
accuracy			0.97	2101	
macro avg	0.87	0.75	0.80	2101	
weighted avg	0.97	0.97	0.97	2101	

Komentarz Dla klasy 0 zarówno precision jak i recall były na wysokim poziomie. W przypadku klasy 1 - czyli wskazującej na bankructwo - po optymalizacji znacznie wzrosła precyzja, jednak odbyło się to kosztem czułości. W sytuacji takiej jak ta, kiedy szczególnie zależy nam aby wyłapać wszystkie możliwe firmy które mogą zbankrutować, nie jest to pożądane zjawisko. Blisko połowa firm które zbankrutują zostałyby sklasyfikowane jako niezagrożone bankructwem (co przykładową firmę ubezpieczeniową narazi na znaczne straty).

Boosting - podsumowanie

- 1. Model oparty o uczenie zespołowe
- 2. Kolejne modele są dodawane sekwencyjnie i uczą się na błędach poprzedników
- 3. Nauka typowo jest oparta o minimalizację funkcji kosztu (błędu), z użyciem spadku wzdłuż gradientu
- 4. Wiodący model klasyfikacji dla danych tabelarycznych, z 2 głównymi implementacjami: XGBoost i LightGBM
- 5. Liczne hiperparametry, wymagające odpowiednich metod dostrajania

Wyjaśnialna Al

W ostatnich latach zaczęto zwracać coraz większą uwagę na wpływ sztucznej inteligencji na społeczeństwo, a na niektórych czołowych konferencjach ML nawet obowiązkowa jest sekcja "Social impact" w artykułach naukowych. Typowo im lepszy model, tym bardziej złożony, a najpopularniejsze modele boostingu są z natury skomplikowane. Kiedy mają podejmować krytyczne decyzje, to musimy wiedzieć, czemu predykcja jest taka, a nie inna. Jest to poddziedzina uczenia maszynowego - **wyjaśnialna AI (explainable AI, XAI)**.

W szczególności interesująca jest tutaj **lokalna interpretowalność (local interpretability)** - zrozumienie, czemu dla konkretnej próbki model klasyfikuje ją tak, a nie inaczej. Chcemy uzyskać wiedzę, jakie wartości cech tej próbki miały najmniejszy / największy wpływ na taką decyzję. Dodatkowo trzeba wziąć pod uwagę interakcje między cechami, oraz samą charakterystykę modelu i to, jak wykorzystuje on te cechy. Jak widać, problem jest trudny.

Najpopularniejszym podejściem jest tutaj **SHAP (SHapley Additive exPlanations)**, metoda oparta o kooperatywną teorię gier. Traktuje się cechy modelu jak zbiór graczy, podzielonych na dwie drużyny (koalicje): jedna chce zaklasyfikować próbkę jako negatywną, a druga jako pozytywną. O ostatecznej decyzji decyduje model, który wykorzystuje te wartości cech. Powstaje pytanie - w jakim stopniu wartości cech przyczyniły się do wyniku swojej drużyny? Można to obliczyć jako wartości Shapleya (Shapley values), które dla modeli ML oblicza algorytm SHAP. Ma on bardzo znaczące, udowodnione matematycznie zalety, a dodatkowo posiada wyjątkowo efektywną implementację dla modeli drzewiastych oraz dobre wizualizacje.

Bardzo intuicyjnie, na prostym przykładzie, SHAPa wyjaśnia pierwsza część tego artykułu. Dobrze i dość szczegółówo SHAPa wyjaśnia jego autor w tym filmie.

TreeExplainer służy do interpretacji modeli drzewiastych. Dostaje on, tak jak inne explainery SHAPa: model, dane treningowe, oraz rodzaj problemu (model output). W uproszczeniu jest to "raw" dla regresji albo "probability" dla klasyfikacji.

Wypełnij w komórce poniżej odpowiednie zmienne

import shap
shap.initjs()

feature names = ["net profit / total assets", "total liabilities / total assets", "working capital / total assets", "current assets / short-term liabilities", "[(cash + short-term securities + receivables - short-term liabilities) / (operating expenses - depreciation)] * 365", "retained earnings / total assets", "EBIT / total assets", "book value of equity / total liabilities", "sales / total assets", "equity / total assets", "(gross profit + extraordinary items + financial expenses) / total assets", "gross profit / short-term liabilities", "(gross profit + depreciation) / sales", "(gross profit + interest) / total assets", "(total liabilities * 365) / (gross profit + depreciation)", "(gross profit + depreciation) / total liabilities", "total assets / total liabilities", "gross profit / total assets", "gross profit / sales", "(inventory * 365) / sales", "sales (n) / sales (n-1)", "profit on operating activities / total assets", "net profit / sales", "gross profit (in 3 years) / total assets", "(equity - share capital) / total assets", "(net profit + depreciation) / total liabilities", "profit on operating activities / financial expenses", "working capital / fixed assets", "logarithm of
total assets", "(total liabilities - cash) / sales", "(gross profit + interest) / sales", "(current liabilities * 365) / cost of products sold", "operating expenses / short-term liabilities", "operating expenses / total liabilities", "profit on sales / total assets",
"total sales / total assets", "constant capital / total assets", "profit on sales / sales", "(current assets - inventory - receivables) / short-term liabilities", "total liabilities / ((profit on operating activities + depreciation) * (12/365))", "profit on operating activities / sales", "rotation receivables + inventory turnover in

```
days", "(receivables * 365) / sales", "net profit / inventory",
"(current assets - inventory) / short-term liabilities", "(inventory * 365) / cost of products sold", "EBITDA (profit on operating activities - depreciation) / total assets", "EBITDA (profit on operating
activities - depreciation) / sales", "current assets / total liabilities", "short-term liabilities / total assets", "(short-term
liabilities * 365) / cost of products sold)", "equity / fixed assets",
"constant capital / fixed assets", "working capital", "(sales - cost
of products sold) / sales", "(current assets - inventory - short-term
liabilities) / (sales - gross profit - depreciation)", "total costs /
total sales", "long-term liabilities / equity", "sales / inventory",
"sales / receivables", "(short-term liabilities * 365) / sales",
"sales / short-term liabilities", "sales / fixed assets"]
explainer = shap.TreeExplainer(
    model=lgbm opt, # variable with trained, tuned LightGBM model
    data=X os, # variable with training data X, after resampling
with SMOTE
    model output="probability"
)
<IPython.core.display.HTML object>
Teraz obliczymy wartości Shapleya dla wybranego przykładu ze zbioru testowego i
narysujemy force plot. W tej wizualizacji bezpośrednio pokazujemy wielkość wpływu
poszczególnych cech oraz ich wartości, a także to, w która strone pchaja predykcje.
shap values = explainer.shap values(X test[0])
shap.force plot(
    base value=explainer.expected value,
    shap values=shap values,
    features=X_test[0],
    feature names=feature names
)
<shap.plots. force.AdditiveForceVisualizer at 0x1fd5b017340>
Zadanie 15 (0.5 punktu)
Dokonaj wyjaśnienia kolejnych 2 próbek z klasy pozytywnej i 2 z klasy negatywnej. Czy
jakieś cechy są wyraźnie dominujące?
pos ind = []
neg ind = []
for i in range(y test.size):
    if y_test.iloc[i] == 0:
         neg ind.append(i)
    else:
         pos ind.append(i)
```

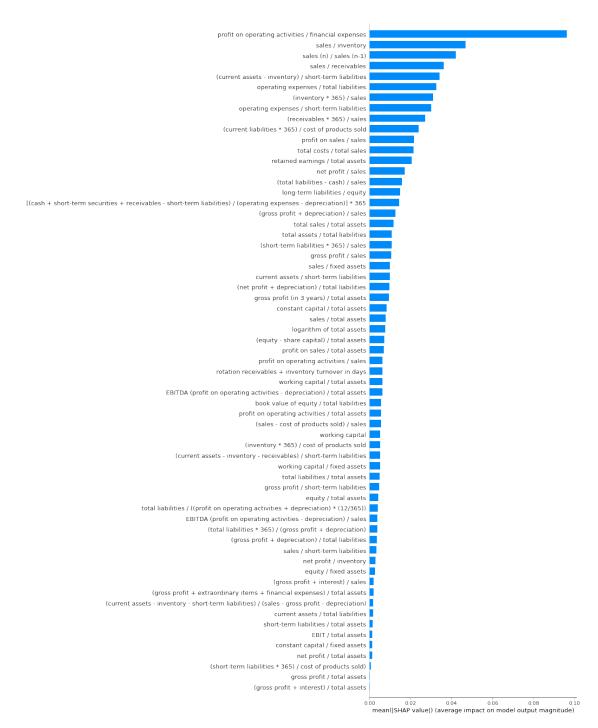
pos ind = pos ind[:2]



Komentarz Jak widać w przypadku każdego z wykresów jednym z kluczowych elementów jest atrybut 'profit on operating activities / financial expenses'.

SHAP pozwala też na obliczenie **ważności cech (feature importances)**, czyli ogólnej wagi poszczególnych cech w całym zbiorze. Robi się to bardzo prosto - po prostu uśrednia się wartość bezwzględną Shapley value dla każdej cechy i przykładu ze zbioru treningowego.

Nasz zbiór po resamplingu jest dość duży, więc może to chwilę zająć. Jeżeli będzie trwało za długo, to użyj np. połowy danych.



Taka informacja jest cenna, bo dzięki temu lepiej wiemy, co robi model. Jest to ważne z kilku powodów:

- 1. Wymogi prawne wdrażanie algorytmów w ekonomii, prawie etc. ma coraz częściej konkretne wymagania prawne co do wyjaśnialności predykcji
- 2. Dodatkowa wiedza dla użytkowników często dodatkowe obserwacje co do próbek są ciekawe same w sobie i dają wiedzę użytkownikowi (często posiadającemu

- specjalistyczną wiedzę z dziedziny), czasem nawet bardziej niż sam model predykcyjny
- 3. Analiza modelu dodatkowa wiedza o wewnętrznym działaniu algorytmu pozwala go lepiej zrozumieć i np. dokonać lepszego wyboru cech

Wyjaśnialna AI - podsumowanie

- 1. Problem zrozumienia, jak wnioskuje model i czemu podejmuje dane decyzje
- 2. Ważne zarówno z perspektywy data scientist'a, jak i użytkowników systemu
- 3. Można wyjaśniać model lokalnie (konkretne predykcje) lub globalnie (wpływ poszczególnych cech)
- 4. Wiodąca metoda interpretacji to SHAP, oparta o kooperacyjną teorię gier

Pytania kontrolne (1.5 punktu)

- 1. Podaj inny przykład sytuacji klasyfikacji niezbalansowanej. Medyczna klasyfikacja (chory / zdrowy), czy w danym miejscu wystąpi pożar/susza/powódź.
- 2. Czy klasyfikacja niezbalansowana tyczy się tylko klasyfikacji binarnej? Nie tylko. Możemy wśród 3 możliwych klas mieć 1 lub 2 dominujące.
- 3. Załóżmy, że mamy stosunkowo duży zbiór danych. Co zrobiłbyś / zrobiłabyś z cechą, która ma:
- a) 1% wartości brakujących, pozostałe cechy mają wszystkie wartości albo też ok.
 1% braków Pominął wiersze z brakującymi wartościami jeśli jest ich mało.
 Ewentualnie stworzyć model do przewidywania brakujących wartości.
- b) 10% wartości brakujących i ma rozkład normalny Przyjął średnią wartość, ponieważ rozkład normalny szybko zanika poza średnią.
- c) 10% wartości brakujących i ma rozkład skośny Przyjął dominantę (wartość centralną) w brakujących miejscach.
- d) 50% wartości brakujących Nie uwzględniał takiej cechy.
- Czy twoim zdaniem w regresji też możemy mieć problem niezbalansowania, tzn. regresję niezbalansowaną? Nie ma powodu dla którego taki problem miałby nie występować w regresji.
- 2. Czy masz pomysł, jak można by sobie poradzić z wartością brakującą w zmiennej kategorycznej (dyskretna, skończona, bez uporządkowania)? Jednym ze sposobów mogłaby być regresja logistyczna korzystająca z wartości których nie brakuje.
- 3. Drzewo decyzyjne o mniejszej maksymalnej głębokości jest słabiej, czy silniej zregularyzowane? Większa głębokość maksymalna może wiązać się z przeuczeniem. Przeuczenie eliminuje regularyzacja. W związku z tym mniejsza maksymalna głębokość typowo będzie wiązała się z większą regularyzacją.
- 4. Podaj 3 różnice między baggingiem (Random Forest) a boostingiem.

- bagging może być wykonywany równolegle, boosting sekwencyjnie
- w baggingu klasyfikatory nie zależą od siebie bezpośrednio. Boosting do skonstruowania kolejnego klasyfikatora wykorzystuje poprzednie
- bagging nie wykorzystuje całego zbioru danych do trenowania każdego klasyfikatora. Boosting używa całego zbioru do każdego klasyfikatora.
- 1. Jak można by użyć informacji o globalnej ważności cech?
- nadać wagi poszczególnym cechom
- nie korzystać z cech o marginalnym znaczeniu (przyspieszając uczenie modelu)

Zadanie dla chetnych

Dokonaj selekcji cech, usuwając 20% najsłabszych cech. Może się tu przydać klasa SelectPercentile. Czy Random Forest i LightGBM (bez dostrajania hiperparametrów, dla uproszczenia) wytrenowane bez najsłabszych cech dają lepszy wynik (AUROC lub innej metryki)?

Wykorzystaj po 1 algorytmie z 3 grup algorytmów selekcji cech:

- 1. Filter methods mierzymy ważność każdej cechy niezależnie, za pomocą pewnej miary (typowo ze statystyki lub teorii informacji), a potem odrzucamy (filtrujemy) te o najniższej ważności. Są to np. chi2 i mutual_info_classif z pakietu sklearn.feature_selection.
- 2. Embedded methods klasyfikator sam zwraca ważność cech, jest jego wbudowaną cechą (stąd nazwa). Jest to w szczególności właściwość wszystkich zespołowych klasyfikatorów drzewiastych. Mają po wytrenowaniu atrybut feature_importances_.
- 3. Wrapper methods algorytmy wykorzystujące w środku używany model (stąd nazwa), mierzące ważność cech za pomocą ich wpływu na jakość klasyfikatora. Jest to np. recursive feature elimination (klasa RFE). W tym algorytmie trenujemy klasyfikator na wszystkich cechach, wyrzucamy najsłabszą, trenujemy znowu i tak dalej.

Typowo metody filter są najszybsze, ale dają najsłabszy wynik, natomiast metody wrapper są najwolniejsze i dają najlepszy wynik. Metody embedded są gdzieś pośrodku.

Dla zainteresowanych, inne znane i bardzo dobre algorytmy:

- Relief (filter method) oraz warianty, szczególnie ReliefF, SURF i MultiSURF (biblioteka ReBATE): Wikipedia, artykuł "Benchmarking Relief-Based Feature Selection Methods"
- Boruta (wrapper method), stworzony na Uniwersytecie Warszawskim, łączący Random Forest oraz testy statystyczne (biblioteka boruta py): link 1, link 2