Решение задачи классификации.

Лукьяненко Иван Андреевич, Б05-906

Студент МФТИ ФПМИ 2 курс

Собеседование на кафедру ИАД.

Постановка задачи.

- **Задача:** классификация;
- **Данные:** синтетическая выборка и https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Breast+Cancer;
- **Используемые модели:** логистическая регрессия, нейронная сеть, градиентный бустинг;
- **Структурные параметры:** состав признаков, структура модели, количество параметров модели;
- **Критерии качества:** ROC AUC, PR кривая, сложность модели (ввести опеределение).

Данные: описание

- Выборка: https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Breast+Cancer
- Количество обьектов: 286 штук.
- Распределение по меткам класса: 201 обьект принадлежит к одному классу, 85 к другому.
- Количество признаков: 9 признаков.

Стоит отметить, что все признаки категориальные, либо порядковые.

Данные: предобработка

Кодирование категориальных признаков с помощью:

- One-Hot-Encoding
  Вместо одного признака создаются n признаков, когда исходный признак для обьекта был равен i-ому уникальному значению, i-ый признак из новосозданных равен 1, остальные n-1 новосозданных признаков заполняются нулями.
- Ordinal-Encoding
  Нумеруем уникальные значения признака, и отображаем значение признаков в отрезок $[1; n]$

Данные: предобработка категориальных признаков

Всего имеем 5 категориальных признаков:
menopause, node-caps, breast, breast-quad, irradiat.
Данные категориальные признаки мы будем кодировать с помощью One-Hot-Encoding.
Корреляция признаков: breast и breast-quad.

Данные: предобработка порядковые признаки

Всего имеем 4 порядковых признака:
age, tumor-size, inv-nodes, deg-malig.
Данные категориальные признаки мы будем кодировать с помощью Ordinal-encoding
Сохранение порядка.

Сравнение моделей:

Будем сравнивать модели:

- Логистическая регрессия
- Градиентный бустинг
- Нейронная сеть

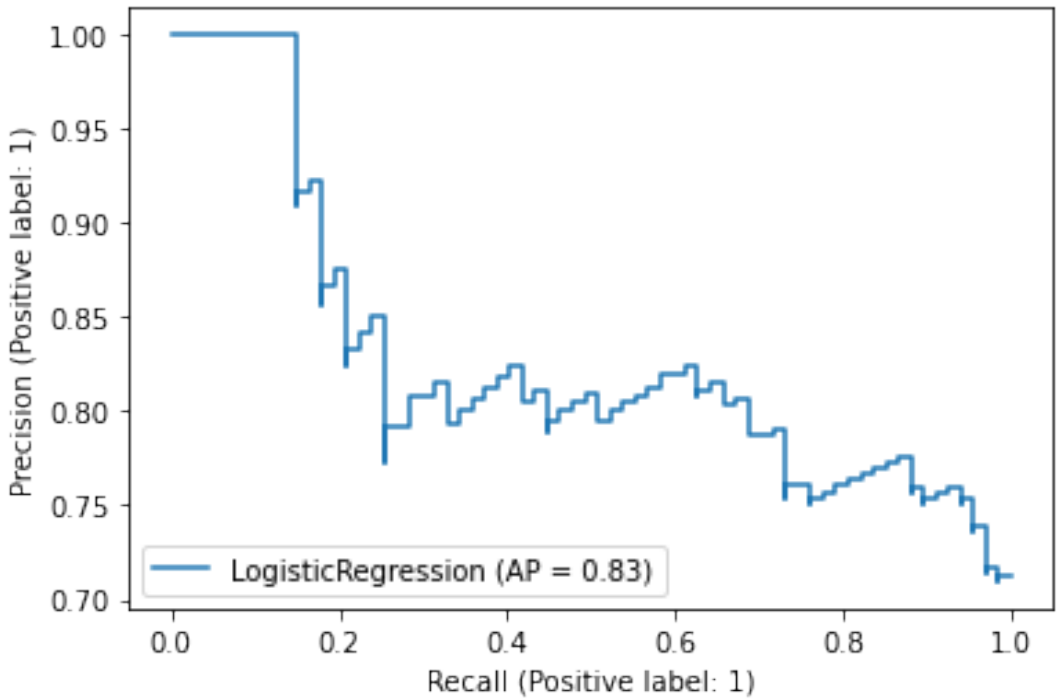
Сравнение моделей: логистическая регрессия

- Логистическая регрессия

Случай бинарной классификации. Метки класса $Y = \{-1, 1\}$
Поиск вектора параметров w, такого что функция $a(x, w) : X \to Y$,
где X - пространство признаков.
Функция потерь: $Q(w) = \sum_{i=1}^{m} \ln(1 + \exp(-y_i \langle x_i; w \rangle)) \to \min$
Вычисление вероятности принадлежности классу: $\mathbb{P}(y|x) = \sigma(y_i \langle x_i, w \rangle)$

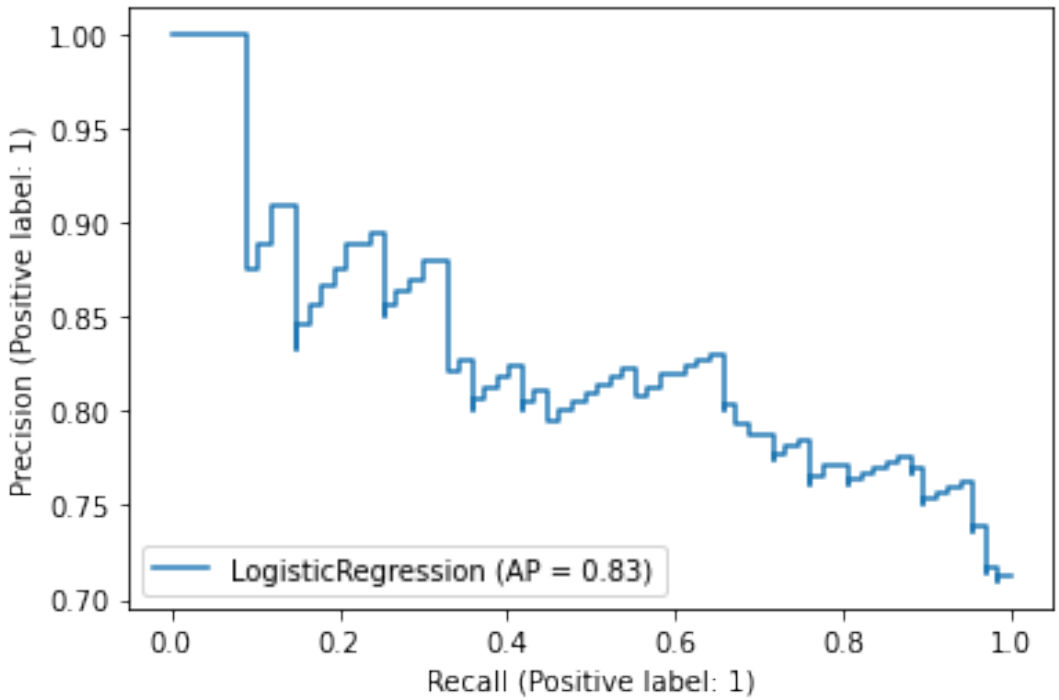
Сравнение моделей: логистическая регрессия

Метрики качества при l2 - регуляризации:
ROC-AUC score: 0.636727078891258
PR-Curve:



Сравнение моделей: логистическая регрессия

Метрики качества при l1 - регуляризации:
ROC-AUC score: 0.6292643923240938
PR-Curve:



Сравнение моделей: градиентный бустинг

- Градиентный бустинг.

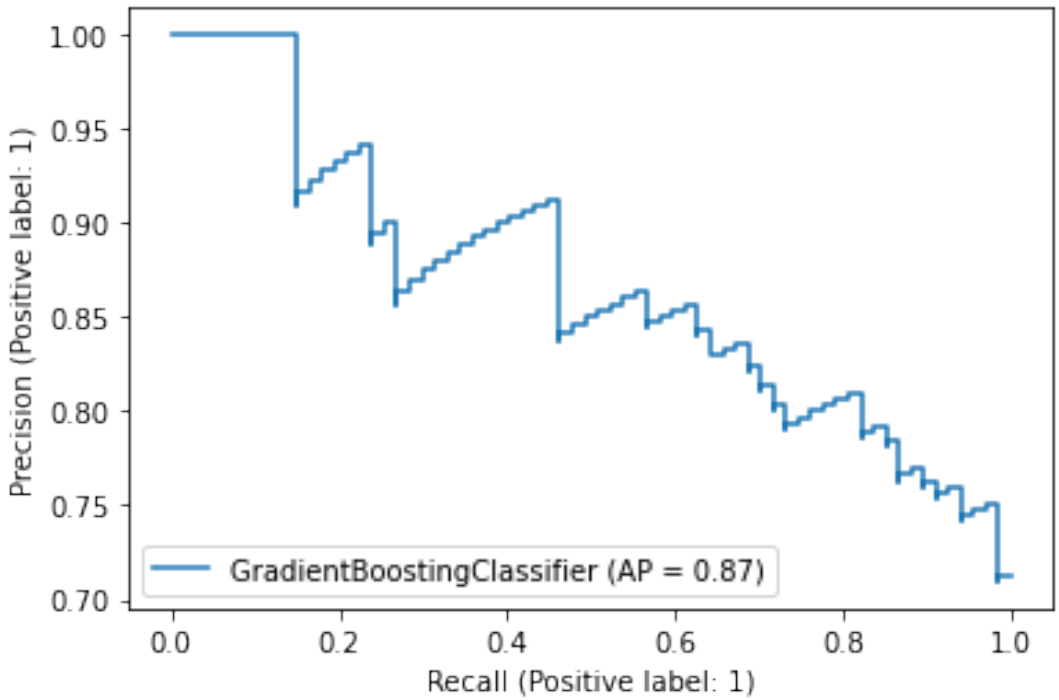
Ансамблевый алгоритм из нескольких базовых алгоритмов.

$$a_N = \sum_{n=1}^{N} b_n(x)$$

Каждый i-ый алгоритм корректирует ошибки предыдущих i-1 алгоритмов.

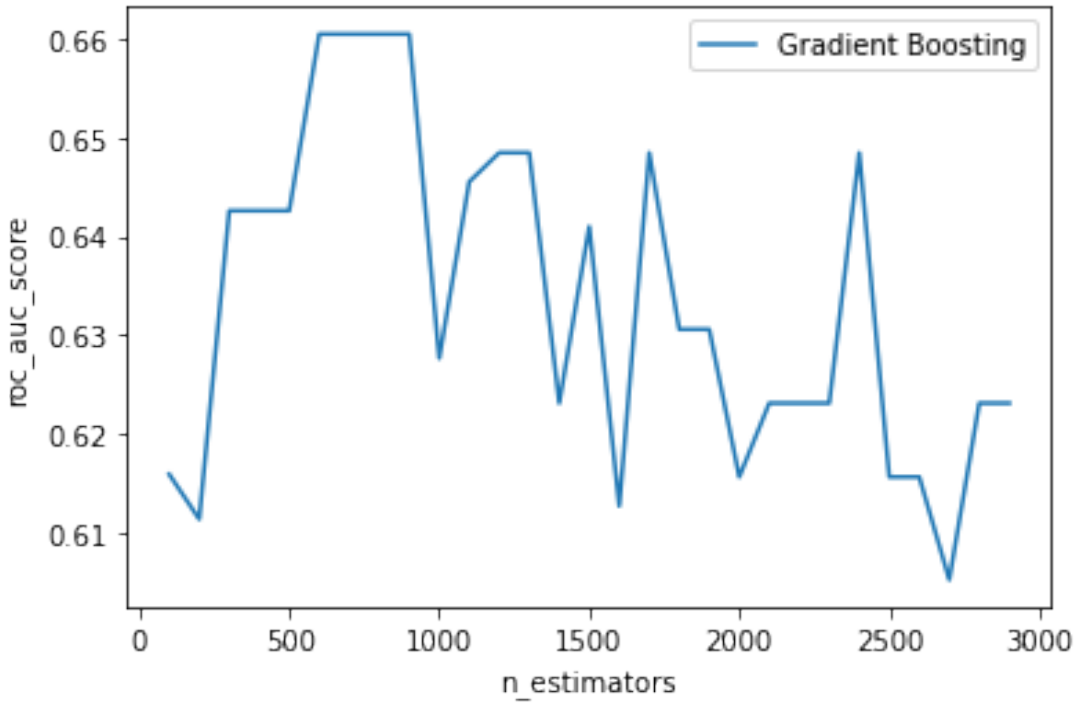
Сравнение моделей: градиентный бустинг

Метрики качества при 900 базовых алгоритмов и learning_rate = 0.01:
ROC-AUC score: 0.6708422174840085
PR-curve:



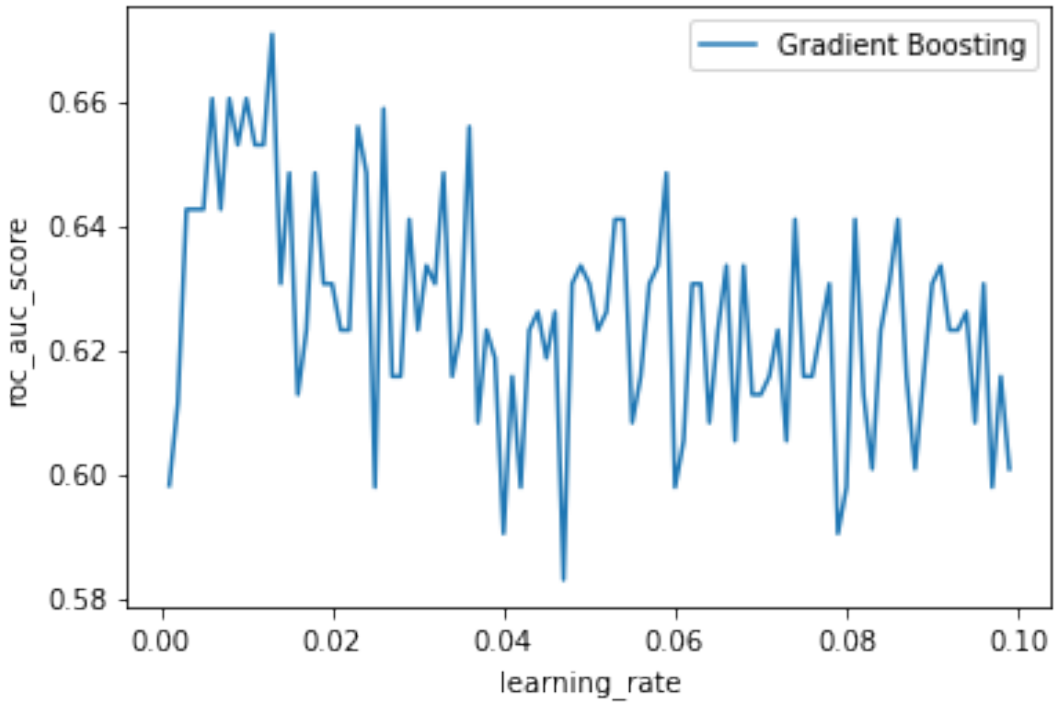
Сравнение моделей: градиентный бустинг

Зависимость roc_auc_score от количества базовых алгоритмов.



Сравнение моделей: градиентный бустинг

Зависимость roc_auc_score от показателя learning_rate.



Сравнение моделей: нейроннная сеть

- Нейронная сеть

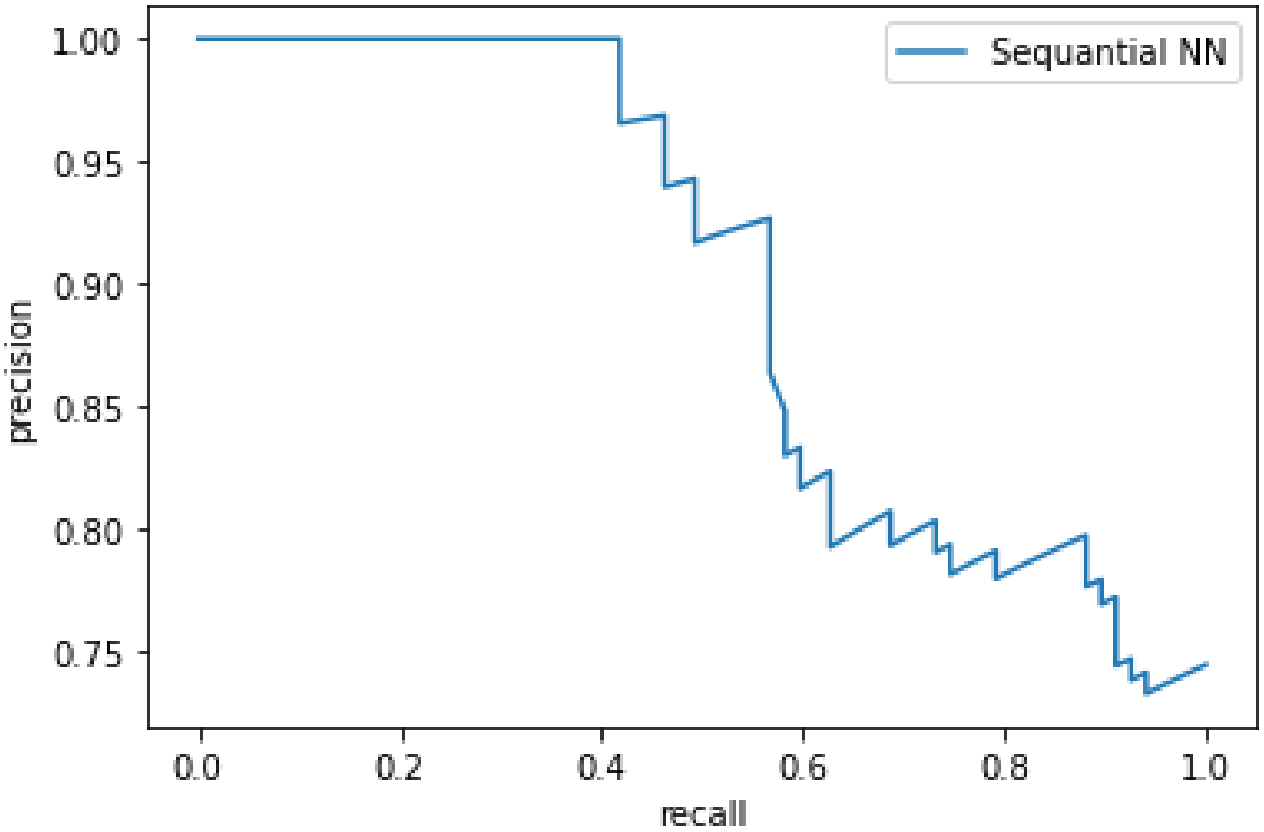
В данной задаче мы будем рассматривать **нейронную сеть прямого расространения** или **многослойный перцептрон**.
Цель сети прямого распотранения - апроксимировать некоторую функцию f^*
В нашей задаче $y = f^*(x)$ целевая функция отображает вход **x** в метку класса y.

Сравнение моделей: нейроннная сеть

Модель с параметрами:
Количество слоев: 8, количество параметров в каждом по 18, в выходном слое 1
2-ой и выходной слой с сигмоидальной функцией активации, остальные с линейными.
optimizer: sgd;
loss: mse;
Лучший показатель AUC-ROC: 0.7513326226012793
Accuracy score: 0.7684210526315789

Сравнение моделей: нейроннная сеть

PR-curve:



Сравнение моделей: сложность моделей

Определение

Сложность модели - это интепретируемость модели; показатель, того насколько легко модель подается понимаю.

Ранжировать рассматриваемые в задаче модели можно следующим образом(чем ниже, тем сложнее):

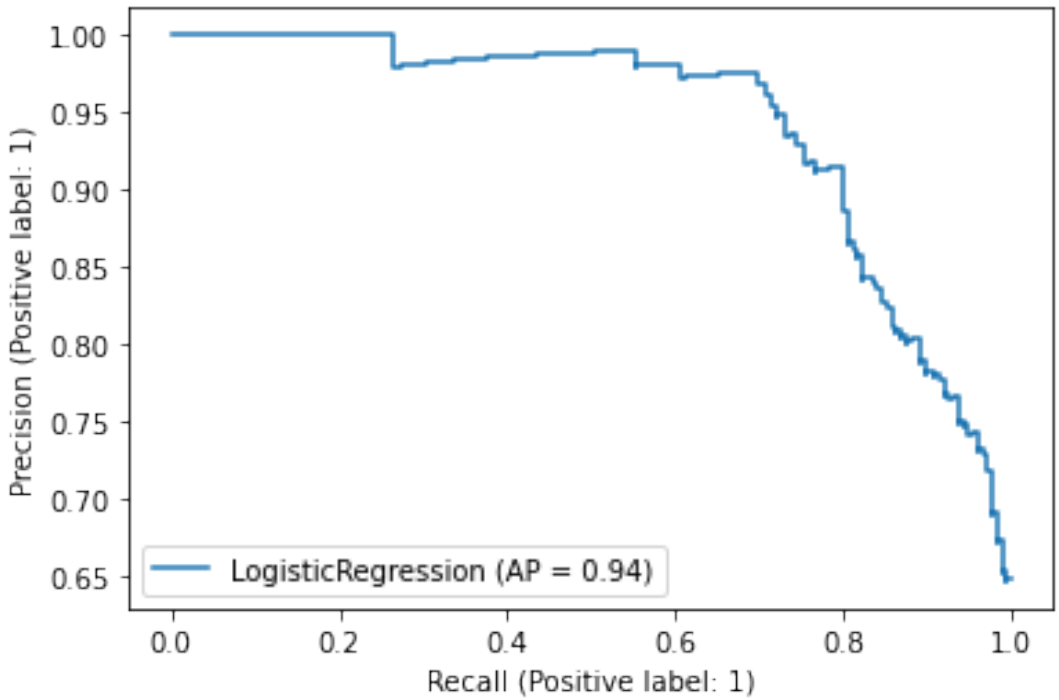
- Логистическая регрессия
- Градиентный бустинг
- Нейронная сеть

Сравнение моделей: синтетическая выборка

В качестве синтетической выборки был выбран датасет сгенерированный с помощью sklearn.datasets.make_classification.
В данной выборке все признаки числовые, принимают значения чисел с плавающей точкой.
Согласно документации признаки уже нормализированы, и не нужно проводить нормализацию на этапе предобработки.

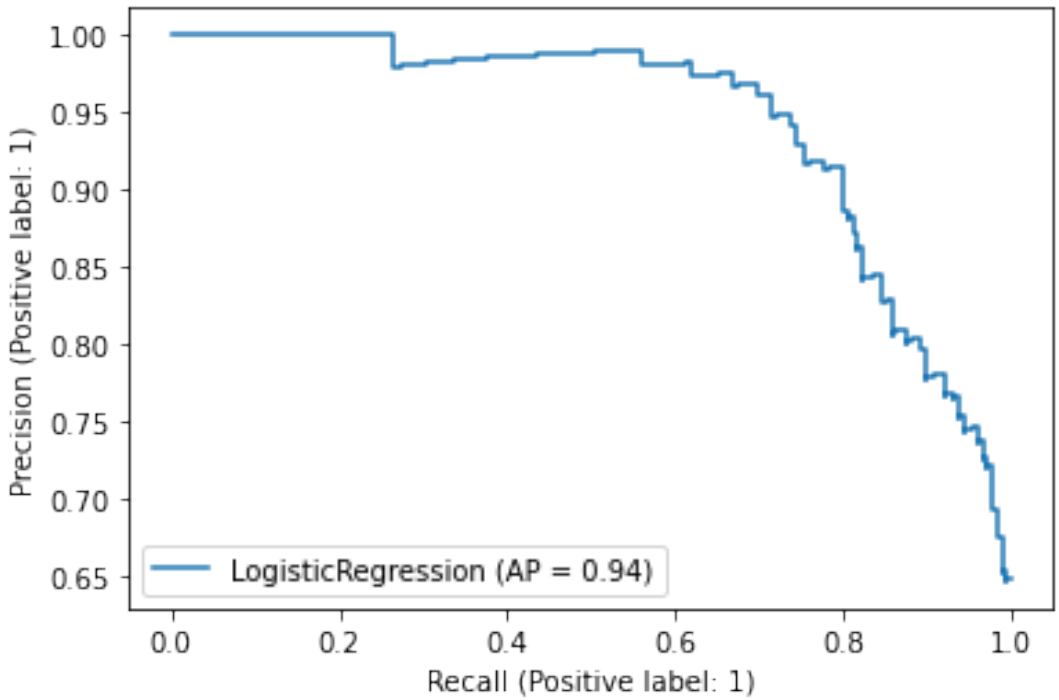
Сравнение моделей: синтетическая выборка

Метрики качества логистической регрессии при l2 - регуляризации:
ROC-AUC score: 0.8340092165898618
PR-Curve:



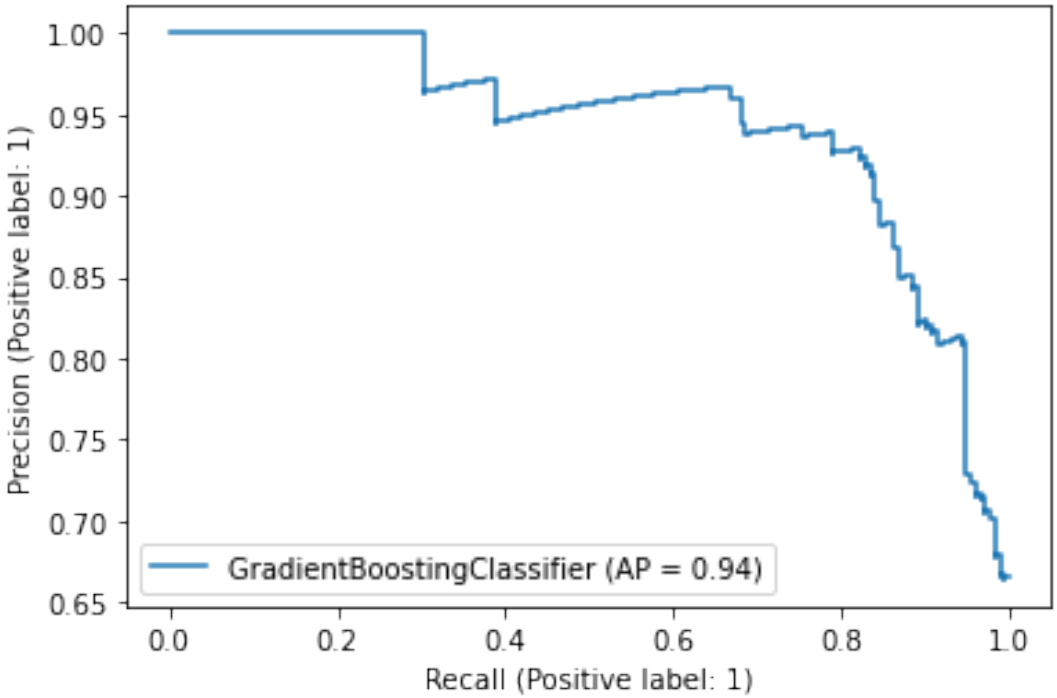
Сравнение моделей: синтетическая выборка

Метрики качества логистической регрессии при l1 - регуляризации:
ROC-AUC score: 0.8340092165898618
PR-Curve:



Сравнение моделей: синтетическая выборка

Метрики качества градиентного бустинга при 1000 базовых алгоритмов и learning_rate = 0.01:
ROC-AUC score: 0.8504147465437788
PR-curve:

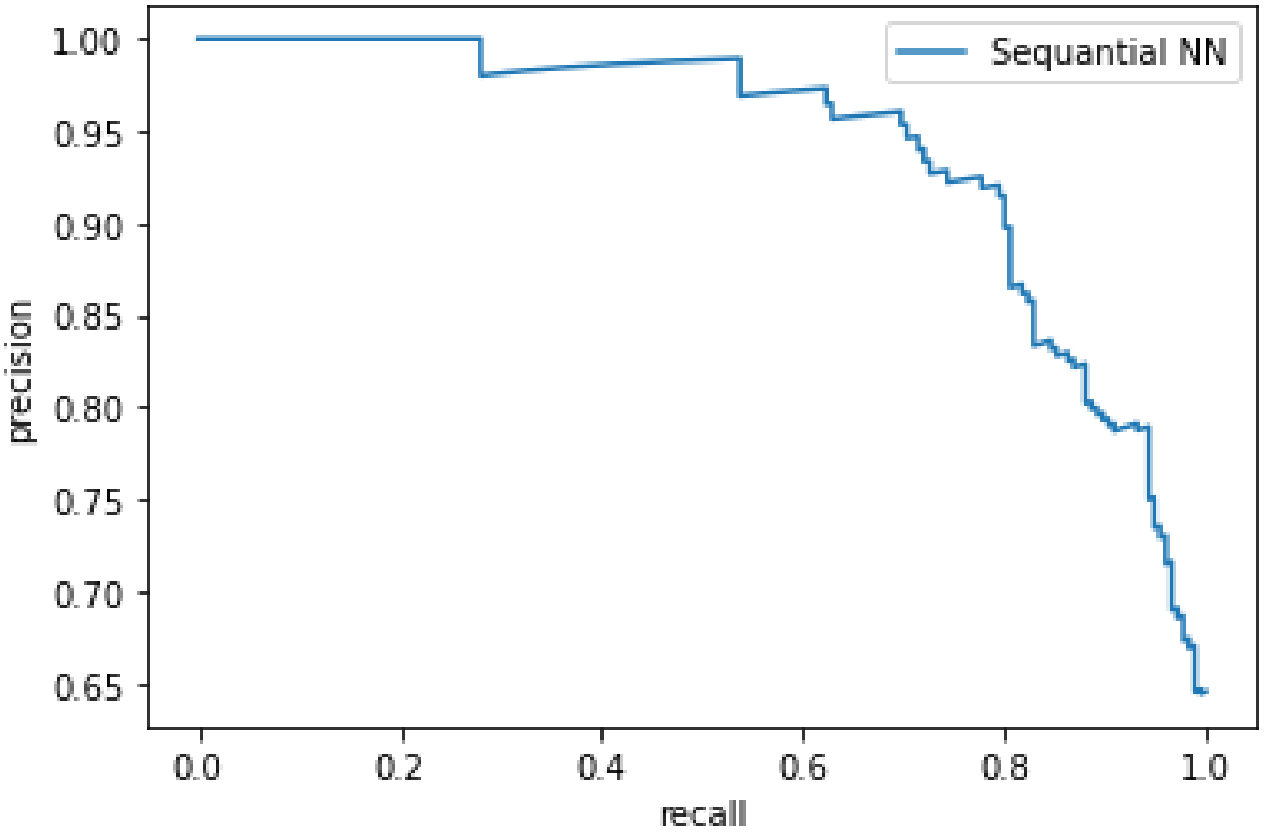


Сравнение моделей: синтетическая выборка

Модель с параметрами:
Количество слоев: 8, количество параметров в каждом по 20, в выходном слое 1
2-ой и выходной слой с сигмоидальной функцией активации, остальные с линейными.
optimizer: sgd;
loss: mse;
Лучший показатель AUC-ROC: 0.928589861751152

Сравнение моделей: синтетическая выборка

PR-curve:



Выводы

В ходе экспериментов с данными и параметрами моделей можно сделать следующие выводы:

- Нейронная сеть показала лучшее качество на реальных данных и синтетических.
- На обоих выборках оправдана сложность модели, в том смысле, что более сложные модели показывают лучше качество, чем более простые.