

notebook_empty

November 28, 2022

1 Klasyfikacja niezbalansowana, klasyfikatory zespołowe i wyjaśnialna AI

1.1 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.

```
[28]: 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.

```
[29]: X.head()
```

```
[29]:
```

	Attr1	Attr2	Attr3	Attr4	Attr5	Attr6	Attr7	Attr8	\
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	
4	0.188290	0.41504	0.34231	1.9279	-58.2740	0.00000	0.233580	1.4094	

	Attr9	Attr10	...	Attr56	Attr57	Attr58	Attr59	Attr60	\
0	1.1961	0.46359	...	0.163960	0.375740	0.83604	0.000007	9.7145	
1	1.6018	0.53962	...	0.027516	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	
4	1.3393	0.58496	...	0.176480	0.321880	0.82635	0.073039	2.5912	

	Attr61	Attr62	Attr63	Attr64	class
0	6.2813	84.291	4.3303	4.0341	b'0'
1	4.1103	102.190	3.5716	5.9500	b'0'
2	3.7922	64.846	5.6287	4.4581	b'0'
3	5.0528	98.783	3.6950	3.4844	b'0'
4	7.0756	100.540	3.6303	4.6375	b'0'

[5 rows x 65 columns]

[30]: X.dtypes

```
[30]: Attr1      float64
Attr2      float64
Attr3      float64
Attr4      float64
Attr5      float64
...
Attr61     float64
Attr62     float64
Attr63     float64
Attr64     float64
class      object
Length: 65, dtype: object
```

[31]: X.describe()

```
[31]:
```

	Attr1	Attr2	Attr3	Attr4	Attr5	\
count	10503.000000	10503.000000	10503.000000	10485.000000	1.047800e+04	
mean	0.052844	0.619911	0.095490	9.980499	-1.347662e+03	
std	0.647797	6.427041	6.420056	523.691951	1.185806e+05	
min	-17.692000	0.000000	-479.730000	0.002080	-1.190300e+07	
25%	0.000686	0.253955	0.017461	1.040100	-5.207075e+01	
50%	0.043034	0.464140	0.198560	1.605600	1.579300e+00	
75%	0.123805	0.689330	0.419545	2.959500	5.608400e+01	
max	52.652000	480.730000	17.708000	53433.000000	6.854400e+05	

	Attr6	Attr7	Attr8	Attr9	Attr10	\
count	10503.000000	10503.000000	10489.000000	10500.000000	10503.000000	
mean	-0.121159	0.065624	19.140113	1.819254	0.366093	
std	6.970625	0.651152	717.756745	7.581659	6.428603	

min	-508.120000	-17.692000	-2.081800	-1.215700	-479.730000
25%	0.000000	0.002118	0.431270	1.011275	0.297340
50%	0.000000	0.050945	1.111000	1.199000	0.515500
75%	0.072584	0.142275	2.857100	2.059100	0.725635
max	45.533000	52.652000	53432.000000	740.440000	11.837000

	...	Attr55	Attr56	Attr57	Attr58	\
count	...	1.050300e+04	10460.000000	10503.000000	10474.000000	
mean	...	6.638549e+03	-0.530082	-0.014817	3.848794	
std	...	5.989196e+04	55.978608	18.684047	190.201224	
min	...	-7.513800e+05	-5691.700000	-1667.300000	-198.690000	
25%	...	1.462100e+01	0.005137	0.006796	0.875560	
50%	...	8.822900e+02	0.051765	0.106880	0.953060	
75%	...	4.348900e+03	0.130010	0.271310	0.995927	
max	...	3.380500e+06	293.150000	552.640000	18118.000000	

		Attr59	Attr60	Attr61	Attr62	Attr63	\
count	10503.000000	9.911000e+03	10486.000000	1.046000e+04	10485.000000		
mean	1.429319	5.713363e+02	13.935361	1.355370e+02	9.095149		
std	77.273270	3.715967e+04	83.704103	2.599116e+04	31.419096		
min	-172.070000	0.000000e+00	-6.590300	-2.336500e+06	-0.000156		
25%	0.000000	5.533150e+00	4.486075	4.073700e+01	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		
max	7617.300000	3.660200e+06	4470.400000	1.073500e+06	1974.500000		

	Attr64
count	10275.000000
mean	35.766800
std	428.298315
min	-0.000102
25%	2.023350
50%	4.059300
75%	9.682750
max	21499.000000

[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.

```
[32]: Y = X["class"].astype(int)
      X = X.drop(columns="class")
```

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.

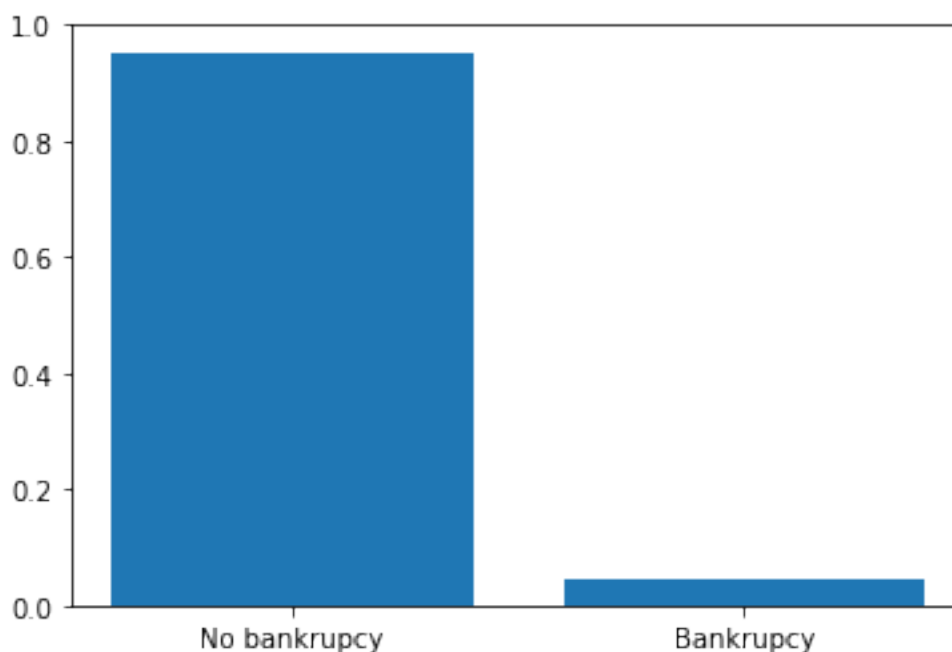
Dodatkowo wypisz częstotliwość każdej klasy w procentach.

```
[33]: import matplotlib.pyplot as plt

counts = Y.value_counts(normalize=True)
plt.bar(['No bankrupcy', 'Bankrupcy'], counts)
print(f'No bankrupcy: {counts[0] * 100:.2f}%')
print(f'Bankrupcy: {counts[1] * 100:.2f}%')
```

No bankrupcy: 95.29%

Bankrupcy: 4.71%



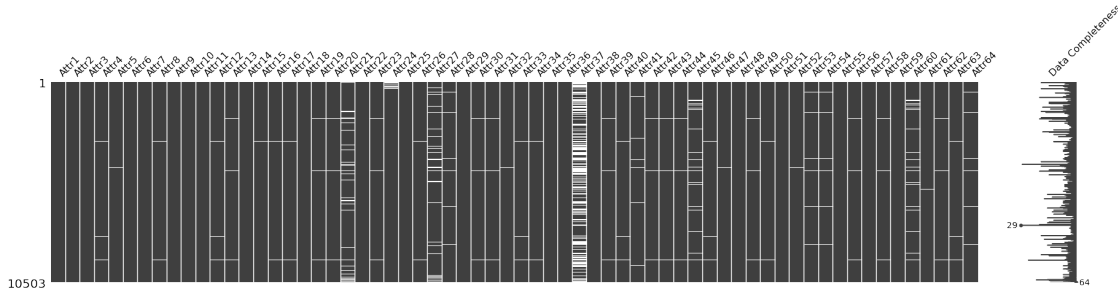
Jak widać, klasa pozytywna jest w znacznej mniejszości, stanowi poniżej 5% zbioru. Taki problem nazywamy **klasyfikacją niezbalansowaną (imbalanced classification)**. Mamy tu **klasę dominującą (majority class)** oraz **klasę mniejszościową (minority class)**. Pechowo prawie zawsze interesuje nas ta 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.

```
[34]: import missingno as msno

msno.matrix(X, labels=True, figsize=(30, 6))
```

[34]: <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.

```
[35]: X = X.drop(columns="Attr37")
```

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 **próbkiowanie ze stratyfikacją (stratified sampling)**, dzięki któremu proporcje klas w zbiorze przed podziałem oraz obu zbiorach po podziale 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.

```
[37]: from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(
```

```
X, Y, stratify=Y, test_size=.2, shuffle=True, random_state=0
)
```

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`).

```
[38]: from sklearn.impute import SimpleImputer
import numpy as np

imp = SimpleImputer(missing_values=np.nan, strategy='mean') # 'mean' is a
    ↪ default strategy
imp = imp.fit(X_train)
X_train[:] = imp.transform(X_train)
X_test[:] = imp.transform(X_test)
```

1.2 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. Doskonale 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’ów ;)

Zadanie 6 (0.5 punktu)

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

```
[40]: from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier

dtc = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', random_state=0)
dtc = dtc.fit(X_train, Y_train)
```

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 znaleźć [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.

```
[42]: from sklearn.metrics import roc_auc_score

roc_auc_score(Y_test, dtc.predict_proba(X_test)[: , 1])
```

[42]: 0.7266899766899767

Komentarz: Metryka AUROC przyjmuje wartości z zakresu od 0 do 1, gdzie 0 oznacza, że wszystkie predykcje modelu są błędne, a 1, że wszystkie predykcje modelu są prawidłowe. Im wyższa wartość AUROC score, tym klasyfikator daje więcej prawidłowych rezultatów. Otrzymany wynik nie jest zły i oznacza, że w większości przypadków klasyfikator dokona prawidłowej klasyfikacji. Nie jest to też bardzo dobry wynik.

1.3 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 bootstrapowych (bootstrap sample) ze zbioru treningowego. Próbką bootstrapowa 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 bootstrapowych. 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 ciężiej będzie osiągnąć jakąś skrajność. Redukuje to też overfitting.

Lasy losowe (Random Forests) to ulepszenie baggingu. Zaobserwowano, że pomimo losowania próbek bootstrapowych, 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 **embarrassingly 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` (użyj tylu procesów, ile masz dostępnych rdzeni procesora). Następnie sprawdź jego jakość na zbiorze testowym. Skomentuj wynik w odniesieniu do baseline'u.

```
[43]: from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
      from sklearn.metrics import roc_auc_score

      rfc = RandomForestClassifier(500, criterion='entropy', random_state=0,
      ↪n_jobs=-1)
      rfc = rfc.fit(X_train, Y_train)

      roc_auc_score(Y_test, rfc.predict_proba(X_test)[: , 1])
```

[43]: 0.8994111948657404

Komentarz: Wynik jest już dużo lepszy niż w poprzednim przypadku, w którym wykorzystaliśmy klasyfikator `DecisionTreeClassifier`. Wynik, wynoszący blisko 0.9, jest dobrym wynikiem.

Wynik ten możemy jednak jeszcze ulepszyć!

1.4 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.

```
[44]: from imblearn.over_sampling import SMOTE

sm = SMOTE(random_state=0, n_jobs=-1)
X_train_resampled, Y_train_resampled = sm.fit_resample(X_train, Y_train)
```

```
[45]: dtc = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', random_state=0)
dtc = dtc.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)

roc_auc_score(Y_test, dtc.predict_proba(X_test)[: , 1])
```

```
[45]: 0.70995670995671
```

```
[46]: rfc = RandomForestClassifier(500, criterion='entropy', random_state=0,
    ↪n_jobs=-1)
rfc = rfc.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)

roc_auc_score(Y_test, rfc.predict_proba(X_test)[: , 1])
```

```
[46]: 0.9047644274917003
```

Komentarz: Dla drzewa decyzyjnego otrzymaliśmy wynik trochę gorszy niż przed oversamplingiem, natomiast, dla lasu losowego, wynik się w niewielkim stopniu poprawił. Gorszy wynik, w przypadku, gdy korzystamy z drzewa decyzyjnego, może być skutkiem przetrenowania modelu.

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

1.5 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_jobs` 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_jobs`. Wybierz model o najwyższym AUROC - jako `scoring` przekaz "roc_auc".

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

```
[51]: from sklearn.model_selection import KFold, GridSearchCV

folds = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=0)
hyper_params = [{ 'max_features': [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5] }]

model_cv = GridSearchCV(
    estimator=rfc,
    param_grid=hyper_params,
    cv=folds,
    scoring="roc_auc",
    verbose=3,
    return_train_score=True
)

model_cv.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)
```

Fitting 5 folds for each of 5 candidates, totalling 25 fits
[CV 1/5] END max_features=0.1;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=3.8s

[CV 2/5] END max_features=0.1;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=3.7s
 [CV 3/5] END max_features=0.1;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=4.0s
 [CV 4/5] END max_features=0.1;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=3.8s
 [CV 5/5] END max_features=0.1;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=3.7s
 [CV 1/5] END max_features=0.2;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=6.4s
 [CV 2/5] END max_features=0.2;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=6.4s
 [CV 3/5] END max_features=0.2;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=6.4s
 [CV 4/5] END max_features=0.2;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=6.4s
 [CV 5/5] END max_features=0.2;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=6.5s
 [CV 1/5] END max_features=0.3;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=9.0s
 [CV 2/5] END max_features=0.3;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=9.1s
 [CV 3/5] END max_features=0.3;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=9.2s
 [CV 4/5] END max_features=0.3;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=8.9s
 [CV 5/5] END max_features=0.3;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=9.1s
 [CV 1/5] END max_features=0.4;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=12.2s
 [CV 2/5] END max_features=0.4;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=12.1s
 [CV 3/5] END max_features=0.4;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=12.2s
 [CV 4/5] END max_features=0.4;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=12.9s
 [CV 5/5] END max_features=0.4;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=14.8s
 [CV 1/5] END max_features=0.5;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=15.6s
 [CV 2/5] END max_features=0.5;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=16.2s
 [CV 3/5] END max_features=0.5;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=16.1s
 [CV 4/5] END max_features=0.5;; score=(train=1.000, test=0.997) total time=16.2s
 [CV 5/5] END max_features=0.5;; score=(train=1.000, test=0.998) total time=17.4s

```
[51]: GridSearchCV(cv=KFold(n_splits=5, random_state=0, shuffle=True),
                  estimator=RandomForestClassifier(criterion='entropy',
                                                    n_estimators=500, n_jobs=-1,
                                                    random_state=0),
                  param_grid=[{'max_features': [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5]}],
                  return_train_score=True, scoring='roc_auc', verbose=3)
```

```
[52]: model_cv.best_score_
```

```
[52]: 0.9983330729566731
```

Komentarz: Mimo, że obliczenie optymalnych parametrów było czasochłonne, wartość AUROC score uległa znaczącej poprawie.

W praktycznych zastosowaniach data scientist wedle własnego uznania, 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`.

```
[53]: model_cv.best_params_
```

```
[53]: {'max_features': 0.2}
```

Random Forest - podsumowanie

1. Model oparty o uczenie zespołowe
2. Kluczowe elementy:
 - bagging: uczenie wielu klasyfikatorów na próbkach bootstrapowych
 - 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

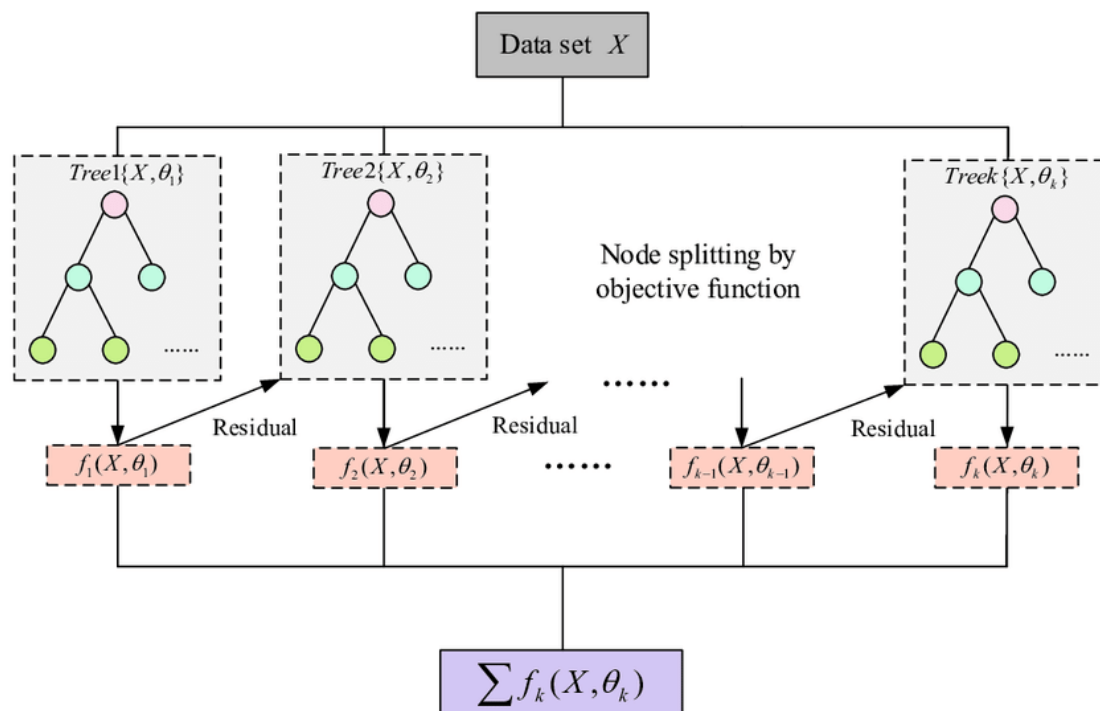
1.6 Boosting

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 bootstrapowych. Idea jest następująca: trenujemy drzewo decyzyjne, radzi sobie przeciętnie i popełnia błędy na części 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.

```
[57]: from lightgbm import LGBMClassifier

lgbm = LGBMClassifier(random_state=0, n_jobs=-1)
lgbm.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)
```

```
roc_auc_score(Y_test, lgbm.predict_proba(X_test)[: , 1])
```

[57]: 0.9433748070111706

Komentarz: Otrzymaliśmy wynik lepszy niż dla klasyfikatora random forest z domyślnymi parametrami, ale gorszy niż dla random forest z optymalnymi parametrami.

Boosting dzięki uczeniu na poprzednich drzewach redukuje nie tylko wariancję, ale też błąd, 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 próbować 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.

[58]: `from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV`

```

folds = KFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=0)
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)
model_rcv = RandomizedSearchCV(
    estimator=lgbm,
    param_distributions=param_grid,
    cv=folds,
    scoring="roc_auc",
    n_iter=30,
    verbose=3,
    random_state=0,
    return_train_score=True
)

model_rcv.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)
print(model_rcv.best_params_)
print(model_rcv.best_score_)

```

Fitting 5 folds for each of 30 candidates, totalling 150 fits

```

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.0s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.4s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.5s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
6.5s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.5s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.8s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.1s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.3s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.3s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

```

7.5s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.8s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.8s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.3s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.1s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.1s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.3s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.8s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.6s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.2s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.4s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.3s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.3s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.6s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
7.7s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=400,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.7s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

7.5s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.0s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.3s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.7s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.9s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.4s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.3s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.1s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.1s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.7s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.4s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.6s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.5s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
7.2s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.1s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.7s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

7.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.9s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.8s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.8s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.0s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.3s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=6.8s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.3s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.9s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.9s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.0s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.8s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.5s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.8s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.8s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

9.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=10.6s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=10.9s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.9s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.3s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.6s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.8s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.6s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.5s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.7s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=7.5s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=8.0s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=19.5s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=18.9s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=19.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

20.2s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=21.4s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=6.2s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=5.8s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=5.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=5.5s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=5.9s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=22.7s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=21.3s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=24.2s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=23.5s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=64, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=18.6s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=11.4s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=13.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=10.7s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=13.4s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

10.9s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.6s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.4s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.3s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.8s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.3s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.5s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
13.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.2s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
13.0s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.4s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.6s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.6s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.5s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

6.9s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.6s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.6s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.1s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.2, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.3s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
7.9s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.4s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.8s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
8.2s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=31, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
8.2s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
13.1s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.7s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
13.3s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.1s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.9, learning_rate=0.1, n_estimators=500,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.4s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
10.0s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400,
num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

9.5s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.8s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=9.9s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=48, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=11.8s

[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=14.6s

[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=14.9s

[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=14.5s

[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=14.4s

[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=600, num_leaves=48, subsample=0.9;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=14.4s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=12.8s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=13.0s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=13.0s

[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=13.3s

[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.05, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=15.5s

[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=8.1s

[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=8.6s

[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400, num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=

```

7.8s
[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.0s
[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=400,
num_leaves=64, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.7s
[CV 1/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
13.3s
[CV 2/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.0s
[CV 3/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.9s
[CV 4/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
12.2s
[CV 5/5] END colsample_bytree=0.8, learning_rate=0.05, n_estimators=500,
num_leaves=48, subsample=0.8;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
11.5s
[CV 1/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.7s
[CV 2/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
8.1s
[CV 3/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.9s
[CV 4/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=0.999) total time=
6.6s
[CV 5/5] END colsample_bytree=1.0, learning_rate=0.2, n_estimators=600,
num_leaves=31, subsample=1.0;; score=(train=1.000, test=1.000) total time=
6.5s
{'subsample': 1.0, 'num_leaves': 31, 'n_estimators': 500, 'learning_rate': 0.1,
'colsample_bytree': 1.0}
0.9997031438042683

```

Komentarz: Uzyskany z wykorzystaniem powyższej metody wynik jest jeszcze lepszy od wyniku, jaki otrzymaliśmy dla klasyfikatora random forest z optymalnymi parametrami (czyli poprzedniego najlepszego wyniku). Okupione jest to zauważalnie dłuższym czasem obliczeń.

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?

```
[72]: from sklearn.metrics import classification_report
```

```
lgbm_tuned = LGBMClassifier(
    random_state=0,
    n_jobs=-1,
    n_estimators=500,
    learning_rate=0.1,
    num_leaves=31,
    colsample_bytree=1,
    subsample=1
)
```

```
[73]: # Previous LGBM model (without optimized parameters)
lgbm.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)
print("Previous LGBM model report:")
print(classification_report(Y_test, lgbm.predict(X_test)))
```

Previous LGBM model report:

	precision	recall	f1-score	support
0	0.98	0.98	0.98	2002
1	0.60	0.60	0.60	99
accuracy			0.96	2101
macro avg	0.79	0.79	0.79	2101
weighted avg	0.96	0.96	0.96	2101

```
[74]: # Tuned LGBM model (with optimized parameters)
lgbm_tuned.fit(X_train_resampled, Y_train_resampled)
print("Tuned LGBM model report:")
print(classification_report(Y_test, lgbm_tuned.predict(X_test)))
```

Tuned LGBM model report:

	precision	recall	f1-score	support
0	0.98	0.99	0.98	2002
1	0.76	0.55	0.64	99
accuracy			0.97	2101
macro avg	0.87	0.77	0.81	2101
weighted avg	0.97	0.97	0.97	2101

Komentarz: > *precision* - odsetek prawidłowo zaklasyfikowanych pozytywnych predykcji w sto-

sunku do liczby wszystkich pozytywnych predykcji

recall - odsetek prawidłowo zaklasyfikowanych pozytywnych predykcji w stosunku do rzeczywistej liczby pozytywnych przypadków

W przypadku dostrojonego modelu, **precision** ma wyższą wartość, ale **recall** niższą niż dla modelu LGBM bez dostrajania. Oznacza to, że dostrojony model rzadziej się myli, klasyfikując dany przypadek jako pozytywny, jednakże równocześnie rzadziej klasyfikuje dany przypadek jako pozytywny, ponieważ odsetek prawidłowo zaklasyfikowanych pozytywnych przypadków do rzeczywistej liczby pozytywnych przypadków spada.

Chcielibyśmy zmaksymalizować obie wartości, ale nie jest to możliwe. To, czy jest to pożądane zjawisko, zależy od tego, co chcemy osiągnąć. Jeżeli klasyfikujemy pacjentów po wykonaniu badań, lepiej jest, żeby model wykrył więcej pozytywnych przypadków, nawet jeżeli często zaklasyfikuje danego pacjenta jako chorego, mimo, że ten jest zdrowy. W takiej sytuacji, lepszy jest model bez dostrajania, ponieważ sumarycznie zaklasyfikował on prawidłowo więcej pozytywnych przypadków w stosunku do rzeczywistej liczby pozytywnych przypadków niż model, który korzysta z dostrajania.

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

1.7 Wyjaśnialna AI

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 szczegółowo 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

```
[75]: %%capture
      !pip install shap

      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_tuned,          # variable with trained, tuned LightGBM model
    data=X_train_resampled,    # variable with training data X, after resampling_
    ↳with SMOTE
    model_output="probability"
)

```

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 którą stronę pchają predykcję.

```
[87]: shap.initjs()

shap_values = explainer.shap_values(X_test.iloc[0])

shap.force_plot(
    base_value=explainer.expected_value,
    shap_values=shap_values,
    features=X_test.iloc[0],
    feature_names=feature_names
)
```

<IPython.core.display.HTML object>

```
[87]: <shap.plots._force.AdditiveForceVisualizer at 0x286dc7c70>
```

Zadanie 15 (0.5 punktu)

Dokonaj wyjaśnienia kolejnych 2 próbek z klasy pozytywnej i 2 z klasy negatywnej. Czy jakieś cechy są wyraźnie dominujące?

```
[100]: features = X_test.values
Y = lgbm_tuned.predict(features)
shap_values = explainer.shap_values(features)

shap_positive = shap_values[Y][:2]
feat_positive = features[Y][:2]
shap_negative = shap_values[~Y][:2]
feat_negative = features[~Y][:2]
```

99%|=====| 2076/2101 [00:39<00:00]

Positive samples

```
[102]: shap.force_plot(
    base_value=explainer.expected_value,
    shap_values=shap_positive[0],
    features=feat_positive[0],
    feature_names=feature_names
)
```

```
[102]: <shap.plots._force.AdditiveForceVisualizer at 0x287f60670>
```

```
[103]: shap.force_plot(
    base_value=explainer.expected_value,
    shap_values=shap_positive[1],
    features=feat_positive[1],
    feature_names=feature_names
)
```

[103]: <shap.plots._force.AdditiveForceVisualizer at 0x287f606d0>

Negative samples

```
[104]: shap.force_plot(
        base_value=explainer.expected_value,
        shap_values=shap_negative[0],
        features=feat_negative[0],
        feature_names=feature_names
    )
```

[104]: <shap.plots._force.AdditiveForceVisualizer at 0x287f60760>

```
[105]: shap.force_plot(
        base_value=explainer.expected_value,
        shap_values=shap_negative[1],
        features=feat_negative[1],
        feature_names=feature_names
    )
```

[105]: <shap.plots._force.AdditiveForceVisualizer at 0x287f60dc0>

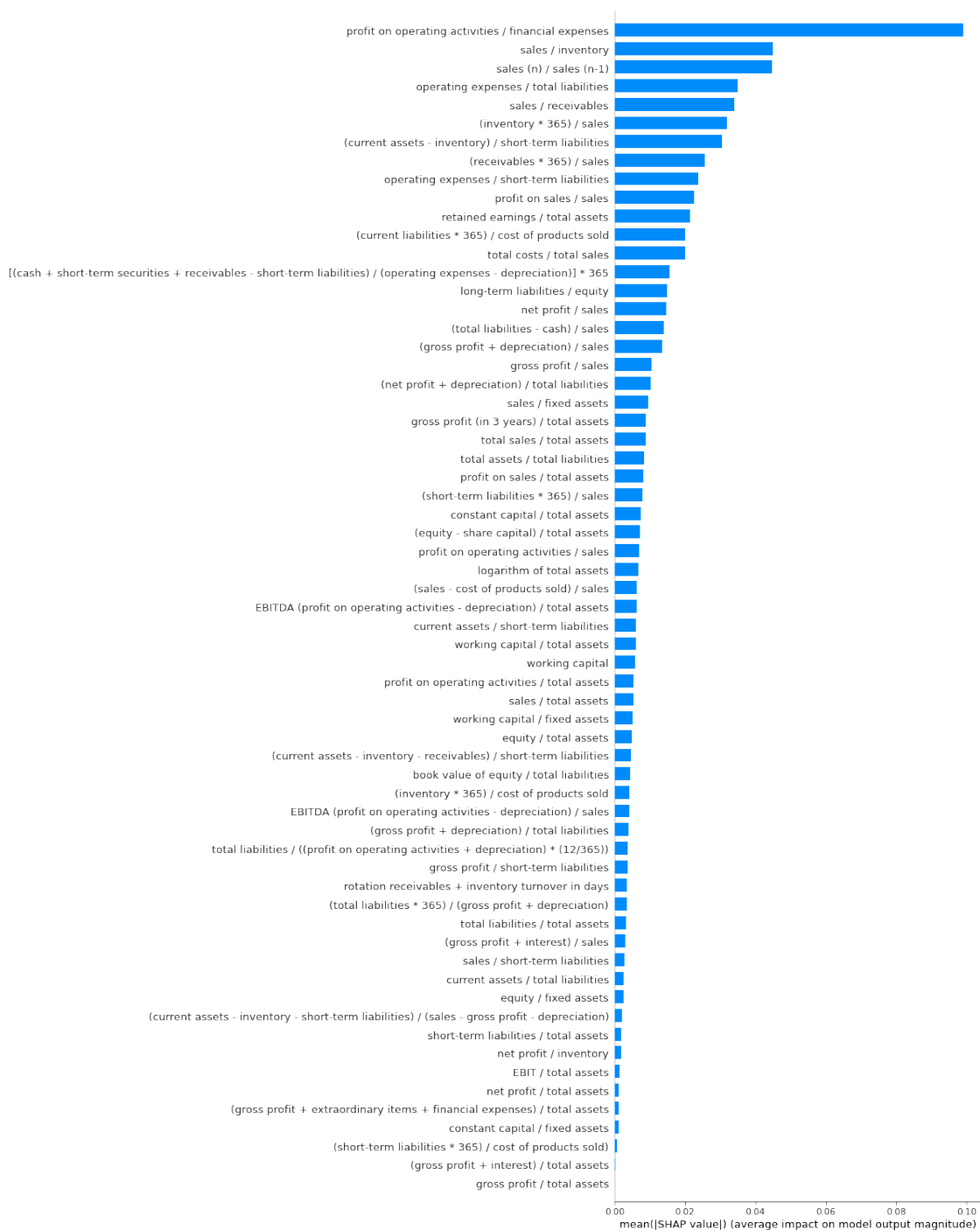
Komentarz: W próbkach pozytywnych dominującym czynnikiem jest `profit on operating activities / financial expenses`, a w próbkach negatywnych dominuje (już w mniej wyraźny sposób) cecha `operating expenses / short-term liabilities`. W ogólności, cechy powiązane z kosztami i sprzedażą są dominujące.

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.

```
[106]: shap.summary_plot(
        shap_values=explainer.shap_values(X_train_resampled),
        features=X_train_resampled,
        feature_names=feature_names,
        max_display=X.shape[1],
        plot_type="bar",
    )
```

100%|=====| 16011/16012 [04:57<00:00]



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

1.8 Pytania kontrolne (1.5 punktu)

1. Podaj inny przykład sytuacji klasyfikacji niezbalansowanej.
2. Czy klasyfikacja niezbalansowana dotyczy się tylko klasyfikacji binarnej?
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
 - b) 10% wartości brakujących i ma rozkład normalny
 - c) 10% wartości brakujących i ma rozkład skośny
 - d) 50% wartości brakujących
4. Czy twoim zdaniem w regresji też możemy mieć problem niezbalansowania, tzn. regresję niezbalansowaną?
5. Czy masz pomysł, jak można by sobie poradzić z wartością brakującą w zmiennej kategorycznej (dyskretna, skończona, bez uporządkowania)?
6. Drzewo decyzyjne o mniejszej maksymalnej głębokości jest słabiej, czy silniej zregulowane?
7. Podaj 3 różnice między baggingiem (Random Forest) a boostingiem.
8. Jak można by użyć informacji o globalnej ważności cech?

1.8.1 Odpowiedzi

1. Bank, przewidujący, czy klient spłaci kredyt, czy nie - większość klientów spłaca kredyt (grupa klientów, spłacających kredyt jest znacznie większa od grupy klientów, którzy nie są w stanie spłacić kredytu),
2. Nie tylko. Zazwyczaj niezrównoważone zadania klasyfikacyjne to zadania klasyfikacji binarnej, w których większość przykładów w zbiorze danych treningowych należy do klasy normalnej, a niewielka część należy do klasy nienormalnej (stąd niezbalansowanie). Nie wyklucza to jednak możliwości wystąpienia niezbalansowania klas podczas klasyfikacji wieloklasowej.
3. a) Jeżeli brakujące wartości pozostałych cech występują w tych samych wierszach, to wiersze z brakującymi wartościami można usunąć. W pozostałych przypadkach, brakujące

wartości najlepiej zastąpić średnią lub medianą pozostałych wartości danej cechy (nie powinno to zaburzyć wyniku predykcji, gdyż tylko 1% wartości to wartości brakujące),

- b) Skoro wartości mają rozkład normalny, najlepiej będzie uzupełnić brakujące wartości średnią pozostałych wartości. Wynika to stąd, iż bliżej środka rozkładu znajduje się większość wartości, więc zastępując brakujące wartości wartościami ze środka rozkładu, zastępujemy je najbardziej prawdopodobnymi wartościami tej cechy,
 - c) Ponieważ rozkład nie jest symetryczny, najlepiej wykorzystać medianę. Średnia jest wskaźnikiem bardzo podatnym na wpływ wartości odstających, przez co powoduje uzyskanie nieprawidłowej informacji o danej cesze, jeżeli istnieje choć kilka wartości odstających,
 - d) Najbezpieczniej będzie usunąć dane cechy, ponieważ ich zastąpienie skutkowałoby występowaniem nieprawidłowej wartości cechy w większości przypadków.
4. Tak. Np. może się tak zdarzyć, gdy rozkład danych ma długi ogon.
5. Najłatwiej jest usunąć wiersze lub kolumny z brakującymi wartościami (kolumnę, gdy danej wartości katerycznej brakuje w wielu wierszach, a wiersze, gdy brakuje wartości w niewielu wierszach). Jeżeli brakujące wartości stanowią ok. 10-30% (ani mało, ani dużo), najlepiej jest stworzyć model predykcyjny i wyznaczyć brakujące wartości na podstawie pozostałych, skorelowanych z nimi cech.
6. Drzewo decyzyjne o mniejszej głębokości jest silniej zregularyzowane. Pozwala to uniknąć sytuacji, w której drzewo jest perfekcyjnie dopasowane do danego zbioru danych (jest perfekcyjnie przeuczone).
- 7.
- boosting próbuje dodać nowe modele w miejscu, w którym poprzednie się mylą, poprawiając dokładność predykcji,
 - bagging w wyniku wyznacza średnią, uzyskaną dla N drzew (zwykłą średnią arytmetyczną), a w boostingu obliczana jest średnia ważona, gdzie wyższe wagi mają te drzewa, które osiągnęły lepsze wyniki na zbiorze treningowym,
 - zarówno bagging, jak i boosting, zmniejszają wariancję i zwiększają stabilność predykcji, ale tylko boosting zmniejsza odchylenie. Z drugiej strony, bagging może zmniejszyć problem over-fittingu (przeuczenia modelu), gdy boosting powoduje zwiększenie szansy na przeuczenie modelu.
8. Można wykorzystać tę informację podczas analizy modelu, zwracając uwagę na wyniki predykcji. Można również wykorzystać tę informację podczas procesu przygotowywania danych. Jak dana cecha jest istotna, nie powinniśmy usuwać kolumny, która ją zawiera, nawet, jeżeli brakuje wartości tej cechy w wielu wierszach. W takiej sytuacji lepszym rozwiązaniem może się okazać uzupełnienie brakujących wartości lub usunięcie wszystkich wierszy, w których brakuje danej cechy.

1.9 Zadanie dla chętnych

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](#)