Techniki eksploracji danych

Krzysztof Gajowniczek

Rok akademicki: 2021/2022

Section 1

Teoretyczne podstawy przetwarzania równoległego

- Przetwarzanie dużych ilości danych za pomocą złożonych modeli może być czasochłonne.
- Nowe rodzaje wykrywania oznaczają, że skala gromadzenia danych jest obecnie ogromna, a modelowane wyniki mogą być również duże.
- Jeśli coś zajmuje mniej czasu, jeśli odbywa się poprzez **przetwarzanie równoległe**, dlaczego nie zrobić tego i zaoszczędzić czas?
- Nowoczesne laptopy i komputery PC mają obecnie **procesory wielordzeniowe** z wystarczającą ilością dostępnej pamięci, którą można wykorzystać do szybkiego generowania wyników.

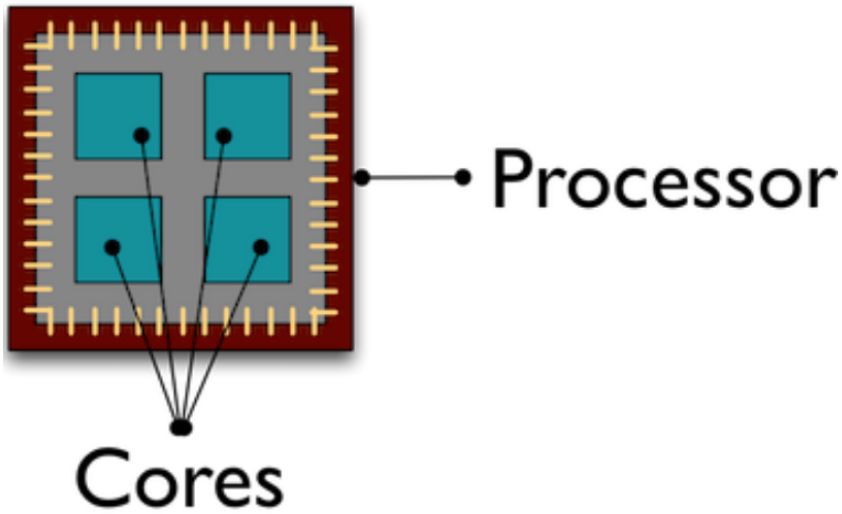
- Zrównoleglenie kodów ma swoje liczne zalety.
- Zamiast czekać kilka minut lub godzin na zakończenie zadania, można podmienić kod, uzyskać dane wyjściowe w ciągu kilku sekund lub minut i jednocześnie sprawić, by było to wydajne.
- Efektywność kodu jest obecnie jedną z najbardziej poszukiwanych umiejętności w branży i niewiele osób jest w stanie z niej korzystać.
- Kiedy już nauczysz się zrównoleglania kodu, będziesz tylko żałować, że nie nauczyłeś się go wcześniej.

- Wiele programów R działa szybko i dobrze na jednym procesorze. Ale czasami obliczenia mogą być:

- **cpu-bound**: zajmuje zbyt dużo czasu procesora.
- **memory-bound**: zajmuje zbyt dużo pamięci.
- **I/O-bound**: odczyt/zapis z dysku zajmuje zbyt dużo czasu.
- **network-bound**: przesyłanie zajmuje zbyt dużo czasu.

- Sercem każdego komputera jest nowoczesny procesor CPU (ang. Central Processing Unit).
- Podczas gdy tradycyjne komputery miały jeden procesor, nowoczesne komputery posiadają wiele procesorów, z których każdy może zawierać wiele rdzeni.
- Te procesory i rdzenie są dostępne do wykonywania obliczeń.

- Komputer z jednym procesorem może nadal mieć 4 rdzenie (quad-core), co pozwala na jednoczesne wykonywanie 4 obliczeń.



Subsection 1

Podejścia do równoległości w R

- R może korzystać z kilku struktur/narzędzi/pakietów, aby umożliwić zrównoleglenie:

- parallel jest prawdopodobnie najbardziej rozwiniętym i najbardziej dojrzałym i opiera się na pracy z pakietem multicore i snow (z których pierwszy został usunięty z CRAN, ponieważ został całkowicie wchłonięty przez parallel), z których drugi może być używane do zrównoleglania obliczeń na jednym lub wielu komputerach.
- foreach umożliwia zrównoleglenie poprzez rozszerzenia foreach pętlifor, pakiet doMC i słowo kluczowe %dopar%. Może korzystać z frameworka multicore, z tymi samymi ograniczeniami systemu operacyjnego wymienionymi powyżej, lub frameworka snow.

Subsection 2

Pakiet parallel

```
library(parallel)
no_cores <- detectCores()
clust <- makeCluster(no_cores)
parLapply(clust,1:3, function(x) c(x^2,x^3))
```

```
## [[1]]
## [1] 1 1
##
## [[2]]
## [1] 4 8
##
## [[3]]
## [1]  9 27
```

```
stopCluster(clust)
```

```
library(parallel)
no_cores <- detectCores()
clust <- makeCluster(no_cores)
base <- 4
clusterExport(clust, "base")
parSapply(clust, 1:5, function(exponent) base^exponent)
```

```
## [1]    4   16   64  256 1024
```

```
stopCluster(clust)
```

Subsection 3

Pakiety doParallel i foreach

```
library(doParallel)
```

```
## Loading required package: foreach
```

```
## Loading required package: iterators
```

```
cl <- makeCluster(2)
registerDoParallel(cl)
foreach(i=1:3) %dopar% sqrt(i)
```

```
## [[1]]
## [1] 1
##
## [[2]]
## [1] 1.414214
##
## [[3]]
```

- Pakiet doParallel umożliwia określenie różnych opcji podczas uruchamiania polecenia foreach, które są obsługiwane przez podstawową funkcję mclapply: "preschedule", "set.seed", "silent" i „cores".

```
mcoptions <- list(preschedule=FALSE, set.seed=FALSE)
foreach(i=1:3, .options.multicore=mcoptions) %dopar% sqrt(i
```

```
## [[1]]
## [1] 1
##
## [[2]]
## [1] 1.414214
##
## [[3]]
## [1] 1.732051
```

Section 2

Wykorzystywana notacja matematyczna

Wyjaśnienie symboli

- n - liczba obserwacji.
- i - iterator obserwacji, $i \in \{1, ..., n\}$.
- y - zmienna celu.
  - dla problemu regresji: $y \in \mathbb{R}$.
  - dla problemu klasyfikacji: $y \in \{1, ..., l, ..., k\}$.
  - y_i - i-ta wartość zmiennej celu.
- $\hat{y}$ - wartość teoretyczna zmiennej celu.
  - dla problemu regresji: $\hat{y} \in \mathbb{R}$.
  - dla problemu klasyfikacji: $\forall l, \hat{y} \in [0, 1], \sum_{l=1}^{k} \hat{y}^{(l)} = 1$.
- x - attrybut, $x \in X$.
- j - iterator attrybutu, $j \in \{1, ..., p\}$.
  - $\boldsymbol{x}^T \in X^{(p)}$.

Section 3

Miary jakości modeli

Subsection 1

Miary dla problemów regresyjnych

Mean absolute error

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i - \hat{y}_i|$$

Mean squared error

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

Mean absolute percentage error

$$MAPE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right|$$

Subsection 2

Miary dla problemów klasyfikacyjnych

- W zależności o wykorzystanej miary, pracować będziemy albo na wektorach prawdopodobieństa:

$$\hat{\boldsymbol{y}}^T = \{\hat{y}^{(1)}, \hat{y}^{(2)}\} = \{0.35, 0.65\}$$

- albo na finalnych etykietach klas, wyznaczanych jako:

$$\hat{y} = \arg\max_l \hat{y}^{(l)} = \{2\}$$

- w niektórych jednak przypadkach dla klasyfikacji binarnej finalna etykieta wyznaczana jest jako:

$$\hat{y} = \arg_{l>t} \hat{y}^{(l)} = \{2\}$$

- etykieta, której prawdopodobieństwo jest większe od pewnego progu t, najczęściej ustawionego na wartość 0.5.

Klasyfikacja binarna

- Klasa pozytywna (P) jest to ta klasa, która nas najbardziej interesuje.
- Najczęściej jest niedoreprezentowana, tj. 5%-95%.

		Przewidywane	
		P (2)	**N (1)**
Prawdziwe	**P (2)**	TP	FN
	—	—	—
	N (1)	FP	TN

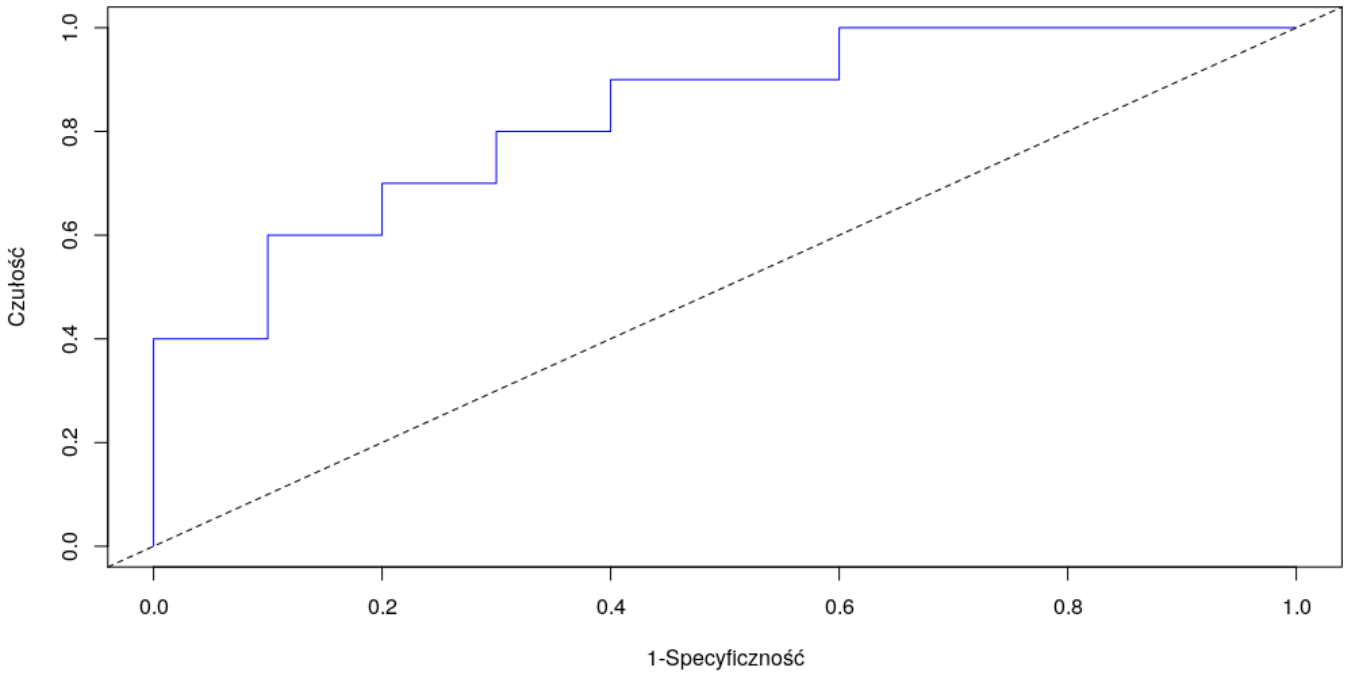
$$Czułość = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$Specyficzność = \frac{TN}{TN + FP}$$

$$Jakość = \frac{TN + TF}{TN + TF + FP + FN}$$

Klasyfikacja binarna

- Krzywa ROC (ang. Receiver Operating Characteristic): graficzna reprezentacja efektywności modelu poprzez wykreślenie miar *Czułości* i *Specyficzności* powstałych z modelu przy zastosowaniu wielu różnych punktów odcięcia t.



Pole pod krzywą ROC

- AUC (ang. Area Under Curve) - wielkość pola pod krzywą ROC mieści się w przedziale $[0; 1]$.

Interpretacja jak pole

$$AUC = \int_0^1 ROC(t)dt$$

Interpretacja jako prawdopodobieństwo

$$AUC = P(\hat{y}^{(2)} > \hat{y}^{(1)})$$

Metody estymacji AUC

- Istnieje kilka różnych sposobów oszacowania tej miary.
- Obserwacje muszą być posortowane nierosnąco względem $\hat{y}^{(2)}$.

Interpretacja jak pole

$$AUC = -\frac{1}{2}\sum_{i=2}^{n}(\text{Czułość}_{i-1}\text{Specyficzność}_i - \text{Czułość}_i\text{Specyficzność}_{i-1})$$

Interpretacja jako prawdopodobieństwo

$$AUC = \frac{R_2 - \frac{n_2(n_2-1)}{2}}{n_2 n_1}$$

gdzie: n_2 - liczba obserwacji z klasy 2, n_1 - liczba obserwacji z klasy 1, R_2 - suma rang obserwacji z klasy 2.

Klasyfikacja wieloklasowa

		Przewidywane				
		1	**2**	...	**l**	...	**k**
Prawdziwe	**1**	T	F	...	F	...	F
	2	F	T	...	F	...	F
	...	...	...	...	...	...	...
	l	F	F	...	T	...	F
	...	...	...	...	...	...	...
	k	F	F	...	F	...	T

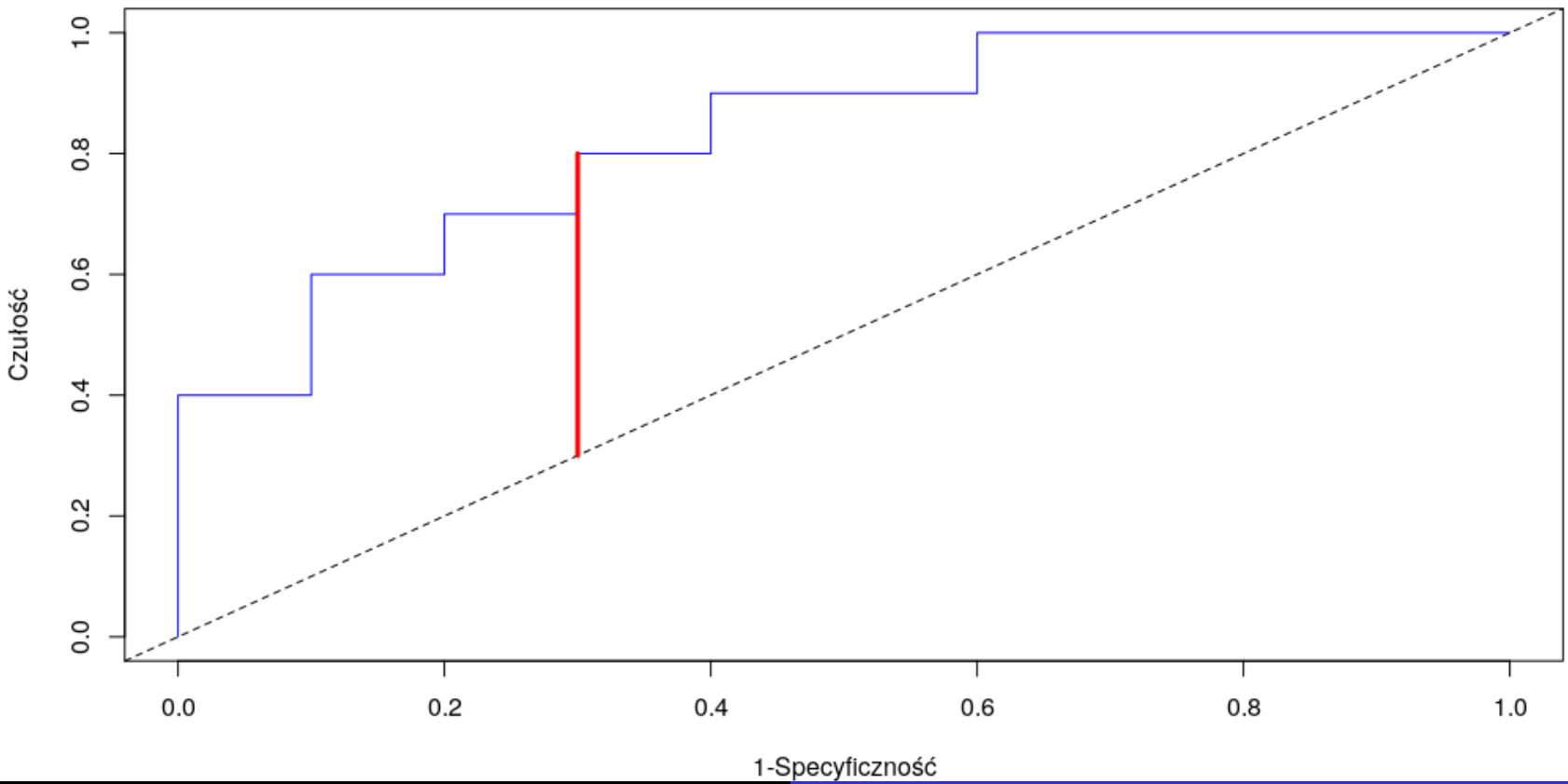
$$Jakość = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I(y_i = \arg\max_{l} \hat{y}_i^{(l)})$$

$$multiAUC = \frac{1}{k(k-1)}\sum_{l,k} AUC_{l,k}$$

Youden index (J)

- Wyznaczenie optymalnej wartości t wyznacza się na podstawie:

$$J = \arg_t \textit{Czułość} + \textit{Specyficzność} - 1$$



Section 4

Sprawdzian krzyżowy

- Sprawdzian krzyżowy (walidacja krzyżowa, kroswalidacja, sprawdzanie krzyżowe) – metoda statystyczna, polegająca na podziale próby statystycznej na podzbiory, a następnie przeprowadzaniu wszelkich analiz na niektórych z nich (zbiór uczący), podczas gdy pozostałe służą do potwierdzenia wiarygodności jej wyników (zbiór testowy, zbiór walidacyjny).

Prosta walidacja

- Najbardziej typowy rodzaj walidacji, w którym próbę dzieli się losowo na rozłączne zbiory:
  - Uczący i testowy najczęsciej w proporacjacj 80%-20% lub 70%-30%.
  - Uczący, walidacyjny i testowy najczęsciej w proporacjach 60%-30%-10%.

k-krotna walidacja

- Oryginalna próba jest dzielona na k podzbiorów, gdzie każdy z nich bierze się jako zbiór testowy, a pozostałe razem jako zbiór uczący. Analiza jest więc wykonywana k razy. K rezultatów jest następnie uśrednianych (lub łączonych w inny sposób) w celu uzyskania jednego wyniku.
  - Proporcja zbiorów wynosi (1-1/k)%-(1/k)%, np. dla $k = 4$, 75%-25%; $k = 10$, 90%-10%.

Kroswalidacja stratyfikowana

- Nie jest to w zasadzie osobna odmiana kroswalidacji, a odnosi się do wszystkich jej rodzajów wymienionych powyżej.
- Kroswalidacja stratyfikowana (ang. stratified cross-validation) polega na takim podziale obiektów pomiędzy zbiór uczący i zbiór testowy, aby zachowane były oryginalne proporcje pomiędzy klasami decyzyjnymi.
- Zastosowanie kroswalidacji stratyfikowanej jest szczególnie ważne w przypadku, gdy w oryginalnym zbiorze danych występują znaczne dysproporcje w liczebności przykładów należących do poszczególnych klas decyzyjnych.

Section 5

Optymalizacja parametrów

- Modele uczenia maszynowego są sparametryzowane, aby ich zachowanie można było dostroić do danego problemu.
- Modele mogą mieć wiele parametrów, a znalezienie najlepszej kombinacji parametrów może być traktowane jako problem wyszukiwania.
- Proces ten nazywany jest optymalizacją hiperparametrów, gdzie parametry algorytmu są określane jako hiperparametry, podczas gdy współczynniki znalezione przez sam algorytm uczenia maszynowego są określane jako parametry.
- Optymalizacja wskazuje na poszukiwawczy charakter problemu.
- Określając ten proces jako problem wyszukiwania, można użyć różnych strategii wyszukiwania, aby znaleźć dobry i niezawodny parametr lub zestaw parametrów dla algorytmu dla danego problemu.

Dostrajanie parametrów poprzez przeszukiwanie siatki (ang. grid search)

- Przeszukiwanie siatki to podejście do strojenia parametrów, które metodycznie buduje i ocenia model dla każdej kombinacji parametrów algorytmu określonych w siatce.

Losowe dostrajanie parametrów (ang. random search)

- Wyszukiwanie losowe to podejście do dostrajania parametrów, które będzie próbkować parametry algorytmu z losowego rozkładu jednostajny) dla ustalonej liczby iteracji.
- Model jest konstruowany i oceniany dla każdej kombinacji wybranych parametrów.

Section 6

Literatura

- *Multicore Data Science with 'R' and Python*
- *Beyond Single-Core R* by Jonoathan Dursi (also see *GitHub repo for slide source*)
- *The venerable Parallel 'R'* by McCallum and Weston (a bit dated on the tooling, but conceptually solid)
- *http://www.bytemining.com/2010/08/taking-r-to-the-limit-part-ii-large-datasets-in-r/*
- Adler, D., Nenadic, O., Zucchini, W., & Glaser, C. (2007). *The "ff" package: Handling Large Data Sets in 'R' with Memory Mapped Pages of Binary Flat Files*. Institute for Statistics and Econometrics.
- Emerson, J. W., & Kane, M. J. (2009). *The 'R' Package bigmemory: Supporting Efficient Computation and Concurrent Programming with Large Data Sets*. Journal of Statistical Software, 10.