**Тезисы главы 3 «Машинного обучения без учителя»**

**Два вида машинного обучения без учителя**: неконтролируемые преобразования, алгоритмы кластеризации.

**Неконтролируемые преобразования**

Применение неконтролируемых преобразований:

1. Сокращение размерности;
2. Поиск компонент из которых состоят данные (выделение тем из коллекций текстовых документов).

Алгоритмы машинного обучения без учителя часто используются:

1. в разведочных целях, когда специалист хочет лучше изучить сами данные
2. они служат этапом предварительной обработки данных для алгоритмов машинного обучения с учителем

Одним из самых простых и наиболее широко используемых алгоритмов не контролируемого обучения является **анализ главных компонентов** (principal component analysis, **PCA**).

*Анализ главных компонент (PCA) используется для* ***сокращения размерности*** *и* ***выделение признаков***.

Работа алгоритма **PCA** основана на вращение данных, а затем удаление направлений, объясняющих незначительную дисперсию данных. Важно отметить, что РСА является методом машинного обучения без учителя и не использует какой-либо информации о классах при поиске поворота. Он просто анализирует корреляционные связи в данных. Корреляционная связь говорит о взаимосвязанности данных параметров.

Для **сокращения размерности** до 2-х измерений, используют PCA c первыми двумя главными компонентами. Идея, лежащая в основе выделения признаков, заключается в поиске нового представления данных, которое в отличие от исходного лучше подходит для анализа.

**Выделение признаков** методом «**Собственных лиц**» заключается в использовании алгоритма PCA как преобразования способом поворота данных с последующим удалением компонент («выбеливание»), имеющих **низкую дисперсию**.

**Факторизация неотрицательных матриц (NMF)** – еще один алгоритм машинного обучения без учителя, цель которого – выделить полезные характеристики. Он работает так же, как PCA, а также его можно использовать для уменьшения размерности.

Факторизация — это операция разложения объекта (число, матрица) на его простые составляющие.

**t-SNE** -- ещё один алгоритм неконтролируемого преобразования – это множественное обучение. Существует класс алгоритмов визуализации, называемых алгоритмами множественного обучения (manifold learning algorithms), которые используют гораздо более сложные графические представления данных и позволяют получить визуализации лучшего качества. Особенно полезным является алгоритм t-SNE.

Алгоритмы множественного обучения в основном направлены на визуализацию и поэтому редко используются для получения более двух новых характеристик. Некоторые из них, в том числе t-SNE, создают новое представление обучающих данных, но при этом не осуществляют преобразования новых данных. Это означает, что данные алгоритмы **нельзя применить к тестовому набору**, они могут преобразовать лишь те данные, на которых они были обучены. Множественное обучение может использоваться для разведочного анализа данных, но редко используется в тех случаях, когда конечной целью является применение модели машинного обучения с учителем. Идея, лежащая в основе алгоритма t-SNE, заключается в том, чтобы найти двумерное представление данных, сохраняющее расстояния между точками наилучшим образом. t-SNE начинает свою работу со случайного двумерного представления каждой точки данных, а затем пытается сблизить точки, которые в пространстве исходных признаков находятся близко друг к другу, и отдаляет друг от друга точки, которые находятся далеко друг от друга. При этом t-SNE уделяет большее внимание сохранению расстояний между точками, близко расположенными друг к другу. Иными словами, он пытается сохранить информацию, указывающую на то, какие точки являются соседями друг другу.

Имейте в виду, что этот метод не использует информацию о метках классов: он является полностью неконтролируемым. Тем не менее он может найти двумерное представление данных, которое четко разграничивает классы, используя лишь информацию о расстояниях между точками данных в исходном пространстве.

**Кластеризация**

**Кластеризация k-средних** – один из самых простых и наиболее часто используемых алгоритмов кластеризации. Сначала выбирается число кластеров k. После выбора значения k алгоритм k-средних отбирает точки, которые будут представлять центры кластеров (cluster centers). Затем для каждой точки данных вычисляется его евклидово расстояние до каждого центра кластера. Каждая точка назначается ближайшему центру кластера. Алгоритм вычисляет центроиды (centroids) – центры тяжести кластеров. Каждый центроид – это вектор, элементы которого представляют собой средние значения характеристик, вычисленные по всем точкам кластера. Центр кластера смещается в его центроид. Точки заново назначаются ближайшему центру кластера. Этапы изменения центров кластеров и переназначения точек итеративно повторяются до тех пор, пока границы кластеров и расположение центроидов не перестанут изменяться, т.е. на каждой итерации в каждый кластер будут попадать одни и те же точки данных.

**Недостатки алгоритма** **k-средних.**

Каждый кластер определяется исключительно его центром, это означает, что каждый кластер имеет выпуклую форму. В результате этого алгоритм k-средних может описать относительно простые формы. Кроме того, алгоритм k-средних предполагает, что все кластеры в определенном смысле имеют одинаковый «диаметр», он всегда проводит границу между кластерами так, чтобы она проходила точно посередине между центрами кластеров.

Кроме того, алгоритм k-средних плохо работает, когда кластеры имеют более сложную форму. Например, случай двух кластеров в форме полумесяцев.

**Алгомеративная кластеризация** (agglomerative clustering) относится к семейству алгоритмов кластеризации, в основе которых лежат одинаковые принципы: алгоритм начинает свою работу с того, что каждую точку данных заносит в свой собственный кластер и по мере выполнения объединяет два наиболее схожих между собой кластера до тех пор, пока не будет удовлетворен определенный критерий остановки.

Критерий остановки, реализованный в scikit-learn – это количество кластеров, поэтому схожие между собой кластеры объединяются до тех пор, пока не останется заданное число кластеров. Есть несколько критериев связи (linkage), которые задают точный способ измерения «наиболее схожего кластера». В основе этих критериев лежит расстояние между двумя существующими кластерами.

Изначально количество кластеров равно количеству точек данных. Затем на каждом шаге объединяются два ближайших друг к другу кластера.

Из-за своего способа работы алгоритм агломеративной кластеризации **не может вычислить прогнозы для новых точек** данных. Поэтому алгоритм агломеративной кластеризации не имеет метода predict.

**Иерархическая кластеризация.**

Результатом агломеративной кластеризации является иерархическая кластеризация (hierarchical clustering). Кластеризация выполняется итеративно, и каждая точка совершает путь от отдельной точки-кластера до участника итогового кластера. На каждом промежуточном шаге происходит кластеризация данных (с разным количеством кластеров).

К сожалению, алгоритм агломеративной кластеризации по-прежнему не в состоянии обработать сложные данные типа набора two\_moons. Чего нельзя сказать о DBSCAN

**DBSCAN** – плотностный алгоритм кластеризации пространственных данных с присутствием шума.

Основные преимущества алгоритма DBSCAN заключаются в том, что пользователю *не нужно заранее задавать количество кластеров*, алгоритм может выделить кластеры сложной формы и способен определить точки, которые не принадлежат какому-либо кластеру. DBSCAN работает немного медленнее, чем алгоритм агломеративной кластеризации и алгоритм k-средних, но также может масштабироваться на относительно большие наборы данных.

DBSCAN определяет точки, расположенные в «густонаселенных» областях пространства характеристик, когда многие точки данных расположены близко друг к другу. Эти области называются плотными (dense) областями пространства характеристик. Идея алгоритма DBSCAN заключается в том, что *кластеры образуют плотные области данных, которые отделены друг от друга относительно пустыми областями*.

Параметр **eps** чуть более важен, поскольку он определяет, что подразумевается под «близостью» точек друг к другу. Очень маленькое значение eps будет означать отсутствие ядерных точек и может привести к тому, что все точки будут помечены как шумовые. Очень большое значение eps приведет к тому, что все точки сформируют один кластер.

Значение **min\_samples** главным образом определяет, будут ли точки, расположенные в менее плотных областях, помечены как выбросы или как кластеры. Если увеличить значение min\_samples, все, что могло бы стать кластером с количеством точек, не превышающим min\_samples, будет помечено как шум. Поэтому значение min\_samples задает минимальный размер кластера.

Несмотря на то, что в алгоритме **DBSCAN** не нужно явно указывать количество кластеров, значение eps неявно задает количество выделяемых кластеров. Иногда подобрать оптимальное значение eps становится проще после масштабирования данных с помощью StandardScaler или MinMaxScaler, так как использование этих методов масштабирования гарантирует, что все характеристики будут иметь одинаковый масштаб.

**Тезисы главы 4 «Типы данных и конструирование признаков»**

Все признаки делятся на **непрерывные** и **категорийные**. Непрерывные признаки представлены числом с плавающей точкой. Категорийные признаки известны как дискретные, поскольку не имеют числовых значений.

Вопрос оптимальной подготовки данных для конкретного прикладного применения известен под названием feature engineering (**конструирование признаков**) и является одной из главных задач для специалистов по машинному обучению, пытающихся решить реальные проблемы.

**Прямое кодирование (дамми-переменные).**

На сегодняшний момент наиболее распространенным способом представления категориальных переменных является прямое кодирование или, если перевести дословно, кодирование с одним горячим состоянием (one-hot-encoding или one-out-of-N encoding). Идея, лежащая в основе прямого кодирования, заключается в том, чтобы заменить категориальную переменную одной или несколькими новыми признаками, которые могут принимать значения 0 и 1. Значения 0 и 1 придают смысл формуле линейной бинарной классификации (а также всем остальным моделям в scikit-learn) и с помощью дамми-переменных мы можем выразить любое количество категорий, вводя по одному новому признаку для каждой категории.

Существует два способа выполнить прямое кодирование категориальных переменных, используя либо **pandas**, либо **scikit-learn**. На момент написания книги использование pandas выглядело немного проще.

При работе с данными, которые были введены людьми (например, пользователями на сайте), получить фиксированный набор категорий невозможно, наличие различных вариантов написания слов может потребовать предварительной обработки.

*Хороший способ проверить содержимое столбца – воспользоваться функцией* **value\_counts** для пандасовского типа данных Series (каждый столбец DataFrame является структурой Series), чтобы посмотреть, что представляют из себя уникальные значения и как часто они встречаются:

In[3]:

print(data.gender.value\_counts())

Out[3]:

Male 21790

Female 10771

Name: gender, dtype: int64

Библиотека **pandas** предлагает очень простой способ кодирования данных с помощью функции **get\_dummies**. Функция **get\_dummies** автоматически преобразует все столбцы, которые содержат объектные типы (например, строки) или являются категориальными данными

data\_dummies = pd.get\_dummies(data) .values

или

features = data\_dummies.ix[:, 'age':'occupation\_ Transport-moving'] .values

Категориальные признаки часто кодируются с помощью целых чисел. Тот факт, что для кодировки используются числа, вовсе не означает, что они должны обрабатываться как непрерывные признаки.

Функция **get\_dummies** в **pandas** обрабатывает все числа как непрерывные значения и не будет создавать дамми-переменные для них. Чтобы обойти эту проблему, вы можете либо воспользоваться OneHotEncoder в scikit-learn (указав, какие переменные являются непрерывными, а какие – дискретными), либо преобразовать столбцы с числами, содержащиеся в дата-фрейме, в строки либо явно указать параметр **colum** в функции **get\_dummies**.

data\_dummies = pd.get\_dummies(data, columns=['spec', 'fin'])

**Биннинг и дискретизация для линейных моделей и деревьев.**

Оптимальный способ представления данных зависит не только от содержательного смысла данных, но и от вида используемой модели. Линейные модели и модели на основе дерева (например, деревья решений, градиентный бустинг деревьев решений и случайный лес), представляющие собой две большие и наиболее часто используемые группы методов, сильно отличаются друг от друга с точки зрения обработки признаков различных типов.

Одним из способов повысить прогнозную силу линейных моделей при работе с непрерывными данными является **биннинг** характеристик (binning), также известный как дискретизация (discretization), который *разбивает исходный признак на несколько категорий*.

Для этого мы используем функцию **np.linspace**, создаем 11 элементов, которые дадут 10 категорий – интервалов, ограниченных двумя границами.

Функция **np.linspace** возвращает равномерно распределенные числа за указанный интервал.

bins = np.linspace(-3, 3, 11)

Out[12]:

категории: [-3. -2.4 -1.8 -1.2 -0.6 0. 0.6 1.2 1.8 2.4 3. ]

Далее мы записываем для каждой точки данных категорию, в которую она попадает. Это можно легко вычислить с помощью функции **np.digitize**:

Функция **np.digitize** возвращает индексы интервалов, которым принадлежит каждое значение во входном массиве

which\_bin = np.digitize(X, bins=bins)

Out[13]:

Точки данных:

[[-0.753]

[ 2.704]

[ 1.392]

[ 0.592]

[-2.064]]

Категории для точек данных:

[[ 4]

[10]

[ 8]

[ 6]

[ 2]]

То, что мы сделали здесь, называется ***преобразованием непрерывного входного признака набора данных в категориальный признак***. С помощью категориального признака мы задаем категорию для каждой точки данных.

Чтобы запустить модель **scikit-learn** на этих данных, мы выполним прямое кодирование этого дискретного признака с помощью функции **OneHotEncoder** из модуля **preprocessing**. Функция **OneHotEncoder** выполняет ту же самую кодировку, что и **pandas.get\_dummies**, хотя в настоящее время она работает только с категориальными переменными, которые принимают целочисленные значения

from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder

bins = np.linspace(-3, 3, 11)

which\_bin = np.digitize(X, bins=bins)

encoder = OneHotEncoder(sparse=False)

encoder.fit(which\_bin)

X\_binned = encoder.transform(which\_bin)

print(X\_binned[:5])

Out[14]:

[[ 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]

[ 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1.]

[ 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0.]

[ 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0.]

[ 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]]

In[15]:

print("форма массива X\_binned: {}".format(X\_binned.shape))

Out[15]:

форма массива X\_binned: (100, 10)

Сравнив модели, обученные до и после биннинга переменных, мы видим, что *линейная модель стала теперь гораздо более гибкой*, потому что теперь оно присваивает различные значения категориям, в то время как модель дерева решений стала существенно менее гибкой. В целом *биннинг признаков не дает положительного эффекта для моделей на основе дерева*, поскольку эти модели **сами** могут научится разбивать данные по любому значению.

Если есть веские причины использовать линейную модель для конкретного набора данных (например, он имеет большой объем и является многомерным), но некоторые признаки имеют нелинейные взаимосвязи с зависимой переменной – биннинг может быть отличным способом увеличить прогнозную силу модели.

***Использование биннинга – это способ увеличения пространства входных признаков.***

**Взаимодействия и полиномы.**

Еще один способ обогатить пространство признаков, в частности, для линейных моделей, заключается в добавлении **взаимодействий признаков** (interaction features) и **полиномиальных признаков** (polynomial features). Конструирование признаков подобного рода получило распространение в статистическом моделировании, а также широко используется во многих практических сферах применения машинного обучения.

Известно, что линейные модели могут вычислить не только значения сдвига, но и значения наклона. Один из способов **добавить наклон в линейную модель**, построенную на основе категоризированных данных, заключается в том, чтобы добавить обратно исходный признак.

Функция **np.hstack** объединяет данные по второй оси

bins = np.linspace(-3, 3, 11)

which\_bin = np.digitize(X, bins=bins)

encoder = OneHotEncoder(sparse=False).fit(which\_bin)

X\_binned = encoder.transform(which\_bin)

X\_combined = np.hstack([X, X\_binned])

print(X\_combined.shape)

Out[17]:

(100, 11)

Вычисленный наклон направлен вниз и он является общим для всех категорий, так как у нас имеется толька один признак по оси x с одним коэффициентом. Поскольку наличие одного наклона для всех категорий не очень сильно поможет с точки зрения моделирования, мы бы хотели вычислить **для каждой категории свой собственный наклон**! Мы можем добиться этого, добавив взаимодействие или произведение признаков, указывающее категорию точки данных и ее расположение на оси х. Данный признак является произведением индикатора категории и исходной переменной

X\_product = np.hstack([X\_binned, X \* X\_binned])

print(X\_product.shape)

Out[19]:

(100, 20)

Теперь набор данных содержит 20 признаков. Теперь каждая категория имеет свое собственное значение сдвига и свое собственное значение наклона.

*Еще один способ увеличения пространства входных признаков заключается в* *использовании полиномов (polynomials) исходных признаков*. Для признака х мы рассмотрим х \*\* 2, х \*\* 3, х \*\* 4 и так далее. Данную операцию можно выполнить с помощью **PolynomialFeatures** модуля preprocessing:

from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures

# задаем степень полинома 10:

# значение по умолчанию "include\_bias=True" добавляет признак-константу 1

poly = PolynomialFeatures(degree=10, include\_bias=False)

poly.fit(X)

X\_poly = poly.transform(X)

Элементы массива X:

[[-0.753]

[ 2.704]

[ 1.392]

[ 0.592]

[-2.064]]

форма массива X\_poly: (100, 10)

Элементы массива X\_poly:

[[ -0.753 0.567 -0.427 0.321 -0.242 0.182 -0.137 0.103 -0.078 0.058]

[ 2.704 7.313 19.777 53.482 144.632 391.125 1057.714 2860.360 7735.232 20918.278]

[ 1.392 1.938 2.697 3.754 5.226 7.274 10.125 14.094 19.618 27.307]

[ 0.592 0.350 0.207 0.123 0.073 0.043 0.025 0.015 0.009 0.005]

[ -2.064 4.260 -8.791 18.144 -37.448 77.289 -159.516 329.222 -679.478 1402.367]]

Вы можете понять содержательный смысл этих признаков, вызвав метод **get\_feature\_names**, который выведет название каждого признака:

print("Имена полиномиальных признаков:\n{}".format(poly.get\_feature\_names()))

Имена полиномиальных признаков:

['x0', 'x0^2', 'x0^3', 'x0^4', 'x0^5', 'x0^6', 'x0^7', 'x0^8', 'x0^9', 'x0^10']

*Используя более сложную модель, модель ядерного SVM, мы можем получить такой же сложный прогноз*, как в случае полиномиальной регрессии, не прибегая к явному преобразованию признаков.

**Автоматический отбор признаков.**

Добавление новых признаков делает модели более сложными и поэтому увеличивает вероятность переобучения. Добавляя новые признаки или работая с высокоразмерными наборами данных, неплохо бы уменьшить количество признаков и оставить только наиболее полезные из них. Это позволит получить более простые модели с лучшей обобщающей способностью. Однако как узнать, насколько полезен каждый признак? *Существуют три основные стратегии*: **одномерные статистики** (univariate statistics), **отбор на основе модели** (model-based selection) и **итеративный отбор** (iterative selection).

*Все эти методы относятся методам машинного обучения с учителем, то есть для подгонки модели им требуется зависимая переменная*.

1. **Одномерные статистики**

С помощью одномерных статистик мы *определяем наличие статистически значимой взаимосвязи между каждым признаком и зависимой переменной*. Затем отбираем признаки, сильнее всего связанные с зависимой переменной (имеющие уровень значимости, не превышающий заданного порогового значения. Ключевым свойством этих тестов является то, что они являются одномерными, то есть они рассматривают каждую характеристику по отдельности.

Отбор признаков в scikit-learn, производится обычно либо **f\_classif** (по умолчанию) для классификации или **f\_regression** для регрессии, а также метод исключения признаков, основанный на р-значениях, вычисленных в ходе теста. Все методы исключения параметров используют пороговое значение. Методы отличаются способами вычисления этого порогового значения, самым простым из которых являются **SelectKB**, выбирающий фиксированное число k признаков, и **SelectPercentile**, выбирающий фиксированный процент признаков.

from sklearn.feature\_selection import SelectPercentile

# используем f\_classif (по умолчанию)

# и SelectPercentile, чтобы выбрать 50% признаков

select = SelectPercentile(percentile=50)

select.fit(X\_train, y\_train)

# преобразовываем обучающий набор

X\_train\_selected = select.transform(X\_train)

# преобразовываем тестовые данные

X\_test\_selected = select.transform(X\_test)

Выяснить, какие функции были отобраны, воспользовавшись методом **get\_support**, который возвращает булевы значения для каждого признака.

mask = select.get\_support()

print(mask)

1. **Отбор признаков на основе модели**

Отбор признаков на основе модели использует модель машинного обучения с учителем, чтобы вычислить важность каждого признака, и оставляет только самые важные из них. Модель машинного обучения с учителем, которая используется для отбора признаков, не должна использоваться для построения итоговой модели. Модель, применяющаяся для отбора признаков, требует вычисления

В отличие от одномерного отбора отбор на основе модели рассматривает все признаки сразу и поэтому может обнаружить взаимодействия (если модель способна выявить их). Чтобы применить отбор на основе модели, мы должны воспользоваться модификатором **SelectFromModel**

from sklearn.feature\_selection import SelectFromModel

from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

select = SelectFromModel(

RandomForestClassifier(n\_estimators=100, random\_state=42), threshold="median")

Класс **SelectFromModel** отбирает все признаки, у которых показатель важности (заданный моделью машинного обучения с учителем) превышает установленное пороговое значение. В данном случае, порог равен **медиане**.

select.fit(X\_train, y\_train)

X\_train\_l1 = select.transform(X\_train)

X\_test\_l1 = select.transform(X\_test)

1. **Итеративный отбор признаков**

В итеративном отборе признаков строится последовательность моделей с различным количеством признаков. *Существует два основных метода*. **Первый метод** начинается шага, когда в модель включена лишь одна константа (входных признаков нет) и затем добавляет признак за признаком до тех пор, пока не будет достигнут критерий остановки. **Второй метод** начинается с шага, когда все признаки включены в модель, и затем начинает удалять признак за признаком, пока не будет достигнут критерий остановки.

Одним из таких методов является **метод рекурсивного исключения признаков** (recursive feature elimination, **RFE**), который начинается с включения всех признаков, строит модель и исключает наименее важный признак с точки зрения модели. Затем строится новая модель с использованием всех признаков, кроме исключенного, и так далее.

from sklearn.feature\_selection import RFE

select = RFE(RandomForestClassifier(n\_estimators=100, random\_state=42),

n\_features\_to\_select=40)

select.fit(X\_train, y\_train)

X\_train\_rfe= select.transform(X\_train)

X\_test\_rfe= select.transform(X\_test)

**Тезисы главы 5 «Оценка и улучшение качества подели»**

*Рассматриваемые темы:*

1. *Перекрестная проверка*
2. *Решетчатый поиск*
3. *Метрики для оценки алгоритмов машинного обучения*
4. *Использование метрик для оценки отбора моделей*

*Описываемые библиотеки и функции:*