Введение в анализ данных

Лекция 1. Введение в дисциплину

Как перевести часы в минуты?



Как перевести часы в минуты?

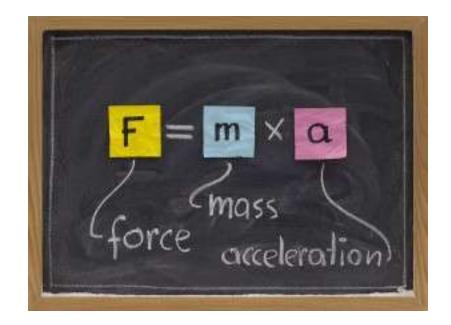
- х часы
- f(x) = 60x преобразование в минуты, функция

Какая сила приложена к телу?

- Известны масса тела m и его ускорение a
- \bullet Чему равна сила F?

Какая сила приложена к телу?

- Известны масса тела m и его ускорение a
- \bullet Чему равна сила F?
- Второй закон Ньютона: F = ma



Как предсказать погоду?



Уравнения Навье-Стокса

$$\begin{split} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + Re \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial y} + Re \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial z} + Re \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right), \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial z} + Re \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right), \end{split}$$

Уравнения Навье-Стокса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial x}{\partial x} + Re\left(\frac{\partial u}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial z^2}\right),$$

$$rac{\partial v}{\partial t} + u rac{\partial v}{\partial x} + v rac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{2}$$
 Позволяют найти скорость воздуха и давление в любой точке

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} +$$
 Очень тяжело решать

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

- Какой эмоциональный окрас имеет текст?
- Варианты: позитивный, нейтральный, негативный
- Применение: автоматический анализ отзывов от пользователей

«Большое спасибо! Сюдя по всему, это как раз то, чего не хватает всем зарубежным курсам по Machine Learning и Knowledge Discovery. Это теория, математика, объяснение того, как оно устроено "в кишках".»

Какой окрас?

«Я вижу очень большой минус, что курс будет на готовой библиотеке sci-kit. Курс от Andrew лучше тем, что ученик сам пишет алгоритм и видит изнутри, как он работает.»

Какой окрас?

- х текст на русском языке
- f(x) его окрас (принимает значения -1, 0, 1)
- Можно ли выписать формулу для f(x)?

- На входе вовсе не числа
- Точная зависимость может не существовать

Больше сложных задач!

- Какой будет спрос на товар в следующем месяце?
- Сколько денег заработает магазин за год?
- Вернет ли клиент кредит?
- Заболеет ли пациент раком?
- Сдаст ли студент следующую сессию?
- На фотографии гуманитарий или технарь?
- Кто выиграет битву в онлайн-игре?

Больше сложных задач!

- Везде очень сложные неявные зависимости
- Нельзя выразить их формулой
- Но есть некоторое число примеров
 - Тексты с известным окрасом
- Будем приближать зависимости, используя примеры

Машинное обучение

 это про то, как восстановить сложные зависимости по конечному числу примеров

Организационное

Про план курса

- Введение
- Метод k ближайших соседей
- Математика для анализа данных
- Линейные методы
- Решающие деревья и случайные леса
- Кластеризация
- Рекомендательные системы
- ...

Про литературу

- Курсы ПМИ ФКН:
 - http://wiki.cs.hse.ru/Машинное_обучение_1
 - http://wiki.cs.hse.ru/Машинное_обучение_2
- Онлайн-курсы:
 - https://www.coursera.org/learn/machine-learning
 - https://www.coursera.org/learn/introduction-machine-learning
 - https://coursera.org/specializations/machine-learning-data-analysis
 - https://www.coursera.org/specializations/machine-learning-from-statisticsto-neural-networks
 - https://www.coursera.org/specializations/maths-for-data-analysis

Математический анализ

- Производные
- Частные производные
- Градиент

Линейная алгебра

- Векторы и матрицы
- Нормы, метрики, скалярное произведение
- Умножение матриц
- Обращение матриц
- Собственные числа и собственные векторы

Теория вероятностей и статистика

• Можно и обойтись

Но если не лень разбираться:

- Основные дискретные и непрерывные распределения
- Математическое ожидание, дисперсия, моменты
- Ковариация и корреляция

Писать код на Python

- Это всегда больно, нужны время и практика, чтобы привыкнуть
- Семинаристы и ассистенты помогут!

Что будет потом?

- Основы глубинного обучения
 - Общие принципы работы и обучения нейронных сетей
 - Свёрточные нейронные сети
 - Задачи компьютерного зрения
 - Нейронные сети для последовательностей
- Прикладные задачи анализа данных
 - Задачи NLP
 - Работа со звуком
 - Генеративные модели
 - Рекомендательные системы
 - Временные ряды
 - Основы DevOps

Основные термины

Пример задачи

- Сеть ресторанов
- Хотим открыть еще один
- Несколько вариантов размещения
- Какой из вариантов принесет максимальную прибыль?

* см. kaggle.com, TFI Restaurant Revenue Prediction

Обозначения

- *x* объект, sample для чего хотим делать предсказания
 - Конкретное расположение ресторана
- Х пространство всех возможных объектов
 - Все возможные расположения ресторанов
- y ответ, целевая переменная, target что предсказываем
 - Прибыль в течение первого года работы
- \mathbb{Y} пространство ответов все возможные значения ответа
 - Все вещественные числа

Обучающая выборка

- Мы ничего не понимаем в экономике
- Зато имеем много объектов с известными ответами
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ обучающая выборка
- ℓ размер выборки

Признаки

- Объекты абстрактные сущности
- Компьютеры работают только с числами
- Признаки, факторы, features числовые характеристики объектов
- d количество признаков
- $x = (x_1, ..., x_d)$ признаковое описание

Признаки

- Про демографию:
 - Средний возраст жителей ближайших кварталов
 - Динамика количества жителей
- Про недвижимость:
 - Средняя стоимость квадратного метра жилья поблизости
 - Количество школ, банков, магазинов, заправок
 - Расстояние до ближайшего конкурента
- Про дороги:
 - Среднее количество машин, проезжающих мимо за день

Алгоритм

- a(x) алгоритм, модель функция, предсказывающая ответ для любого объекта
- Отображает 🛚 в 🖺
- Линейная модель: $a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$
- Например:

$$a(x) = 1.000.000 + 100.000 * (расстояние до конкурента) $-100.000 * (расстояние до метро)$$$

Функция потерь

- Не все алгоритмы полезны
- a(x) = 0 не принесет никакой выгоды
- Функция потерь мера корректности ответа алгоритма
- Предсказали \$10000 прибыли, на самом деле \$5000 хорошо или плохо?
- Квадратичное отклонение: $(a(x) y)^2$

Функционал ошибки

- Функционал ошибки, метрика качества мера качества работы алгоритма на выборке
- Среднеквадратичная ошибка (Mean Squared Error, MSE):

$$\frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

• Чем меньше, тем лучше

Функционал ошибки

- Должен соответствовать бизнес-требованиям
- Одна из самых важных составляющих анализа данных

Обучение алгоритма

- Есть обучающая выборка и функционал ошибки
- ullet Семейство алгоритмов ${\mathcal A}$
 - Из чего выбираем алгоритм
 - Пример: все линейные модели
 - $\mathcal{A} = \{ w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d \mid w_0, w_1, \dots, w_d \in \mathbb{R} \}$
- Обучение: поиск оптимального алгоритма с точки зрения функционала ошибки

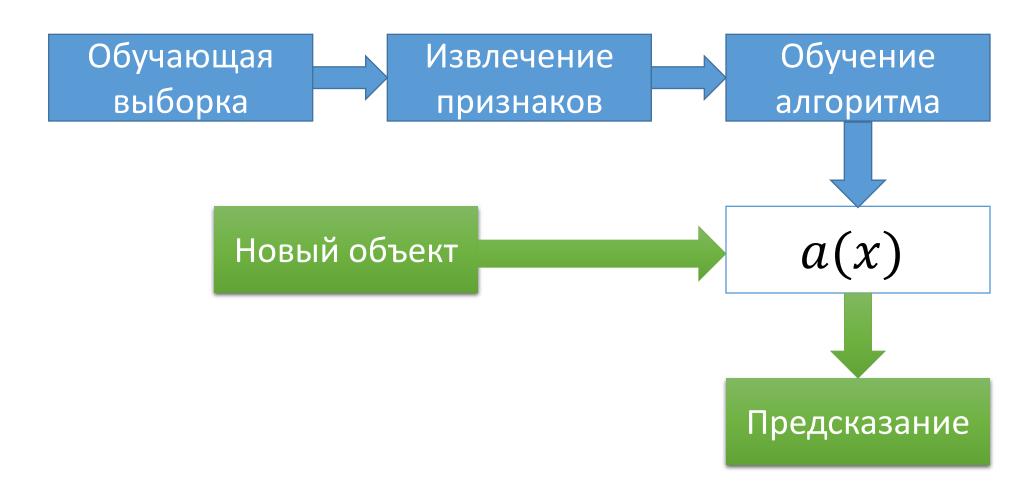
$$a(x) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$$

Машинное обучение

• Не все задачи имеют такую формулировку!

- Обучение без учителя
- Обучение с подкреплением
- И т.д.

Машинное обучение



Что нужно знать

- 1. Как сформулировать задачу?
- 2. Какие признаки использовать?
- 3. Откуда взять обучающую выборку?
- 4. Как подготовить обучающую выборке?
- 5. Как выбрать метрику качества?
- 6. Как обучить алгоритм?
- 7. Как оценить качество алгоритма?
- 8. Как потом внедрить алгоритм и поддерживать его?

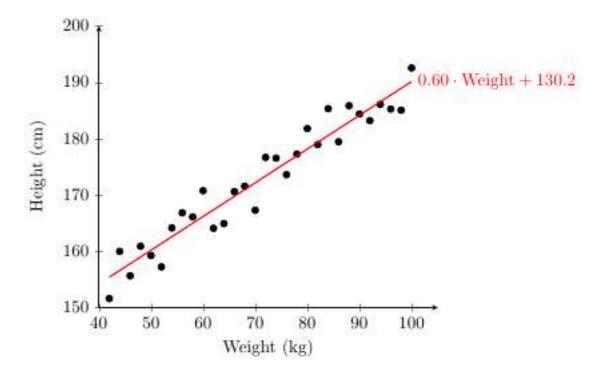
Напоминание

- \mathbb{X} пространство объектов, \mathbb{Y} пространство ответов
- $x = (x^1, ..., x^d)$ признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ обучающая выборка
- a(x) алгоритм, модель
- Q(a, X) функционал ошибки алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$

Типы ответов

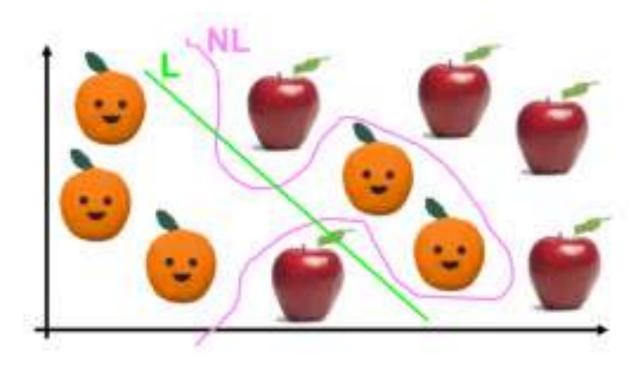
Регрессия

- Вещественные ответы: $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$
- (вещественные числа числа с любой дробной частью)
- Пример: предсказание роста по весу



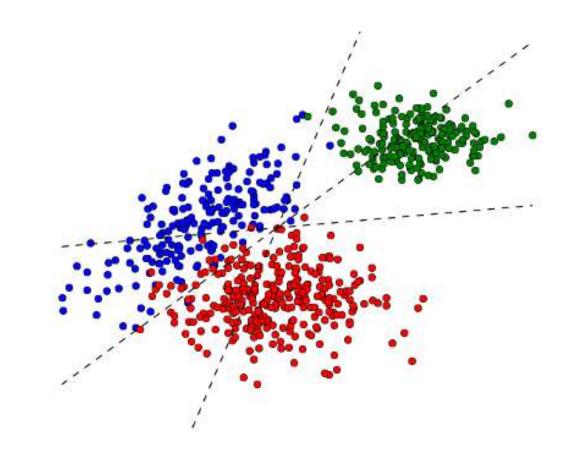
Классификация

- Конечное число ответов: $|\mathbb{Y}| < \infty$
- Бинарная классификация: $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$



Классификация

• Многоклассовая классификация: $\mathbb{Y} = \{1, 2, ..., K\}$



Классификация

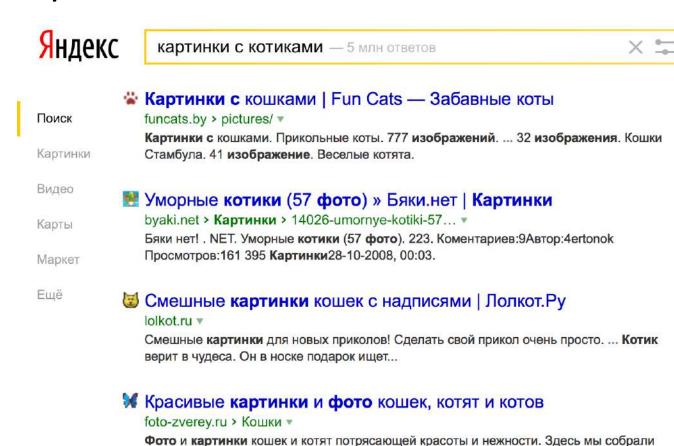
- Классификация с пересекающимися классами: $\mathbb{Y} = \{0,1\}^K$
 - (multi-label classification)
- Ответ набор из К нулей и единиц
- i-й элемент ответа принадлежит ли объект i-му классу

- Какие темы присутствуют в статье?
- (математика, биология, экономика)

Ранжирование

- Набор документов d_1 , ..., d_n
- Запрос *q*
- Задача: отсортировать документы по релевантности запросу
- a(q,d) оценка релевантности

Ранжирование



такие изображения, которые всегда вызывают море положительных эмоций...

7fon.ru > Чёрные обои и картинки > Обои котята •

Картинки Котята с 1 по 15. **Обои** для рабочего стола Котята. ... Скачать **Картинки** Котята на рабочий стол бесплатно.

Найти

Кластеризация

- ¥ отсутствует
- Нужно найти группы похожих объектов
- Сколько таких групп?
- Как измерить качество?

• Пример: сегментация пользователей мобильного оператора

Типы признаков

Типы признаков

• D_{j} — множество значений признака

Бинарные признаки

- $D_i = \{0, 1\}$
- Доход клиента выше среднего по городу?
- Цвет фрукта зеленый?

Вещественные признаки

- $D_j = \mathbb{R}$
- Возраст
- Площадь квартиры
- Количество звонков в колл-центр

Категориальные признаки

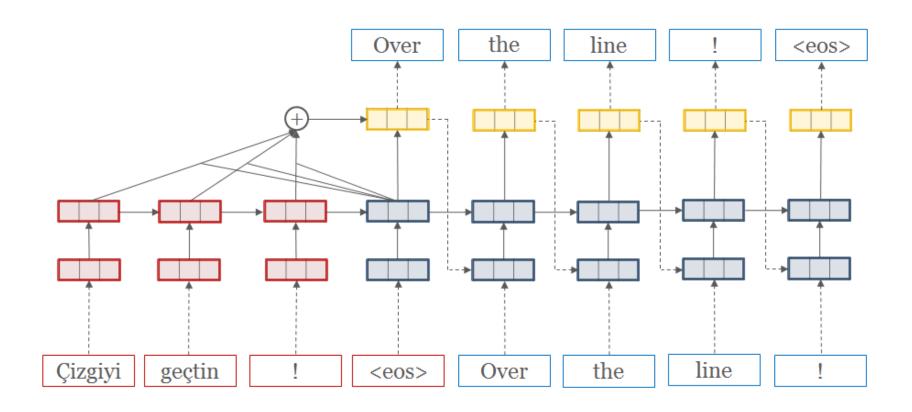
- D_i неупорядоченное множество
- Цвет глаз
- Город
- Образование (может быть упорядоченным)
- Очень трудны в обращении

Порядковые признаки

- D_j упорядоченное множество
- Воинское звание
- Роль в фильме (первого плана, второго плана, массовка)
- Тип населенного пункта

Зачем это нужно?

Машинный перевод

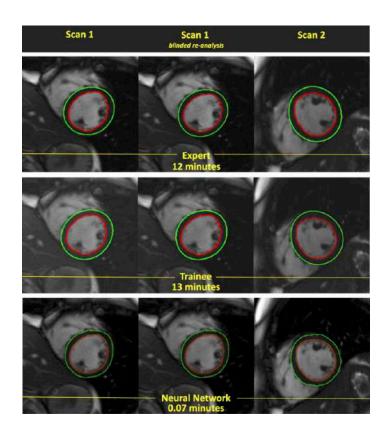


Генерация текста

- GPT-3 от OpenAl
- https://arxiv.org/abs/2005.14165
- https://talktotransformer.com

Биоинформатика и медицина

- Поиск связей между ДНК и заболеваниями (23andme и другие)
- Таргетные лекарства
- Анализ медицинских снимков



Сельское хозяйство

- Робототехника
- Мониторинг посевов и почвы
- Прогнозирование болезней и урожайности



Рекомендательные системы

- Полки рекомендаций на Amazon генерируют 35% от всех покупок
- Рекомендации на основе машинного обучения и анализа больших объёмов данных



Зачем это нужно?

- Это круто
 - Сложные задачи
 - Движение к искусственному интеллекту
- Это полезно
 - Извлечение прибыли из данных
 - Data-driven companies

Как можно заниматься анализом данных?

Data scientist

- Работа с данными
- Знание инструментов и методов
- Опыт решения задач

• Менеджер

- Понимание, как работает машинное обучение
- Понимание узких мест, оценивание сроков

• Заказчик

- Метрики качества
- Требования к данным
- Ограничения современных подходов

Сравнение объектов и метрики

Числовые данные

Сколько раз в день вызывает такси	Средние расходы на такси в день	Как часто вызывал комфорт	Возраст	Согласился повысить категорию?
2	400	0.3	29	да
0.3	80	0	28	нет

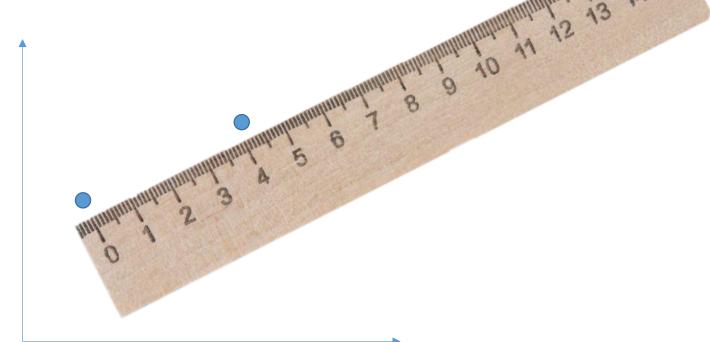
Числовые данные

- Каждый объект описывается набором из d чисел **вектором**
- Если x вектор, то x_i его i-я координата
- Если x_i вектор, то x_{ij} его j-я координата

Числовые данные

• Каждый объект описывается набором из d чисел — **вектором**

• Что, если d = 2?



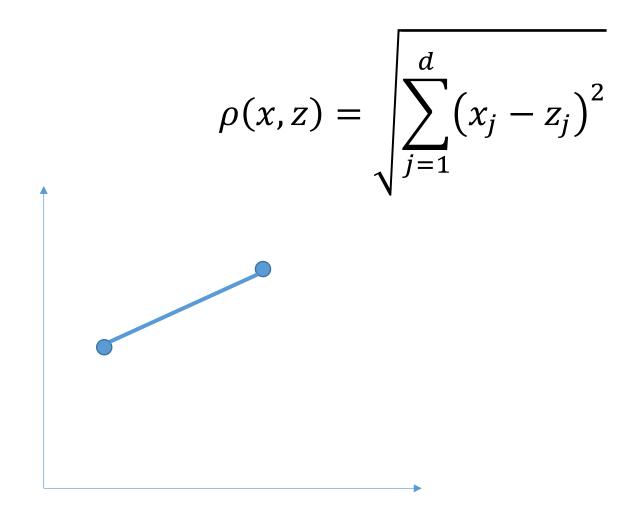
Метрика

Метрика — обобщение расстояния на многомерные пространства

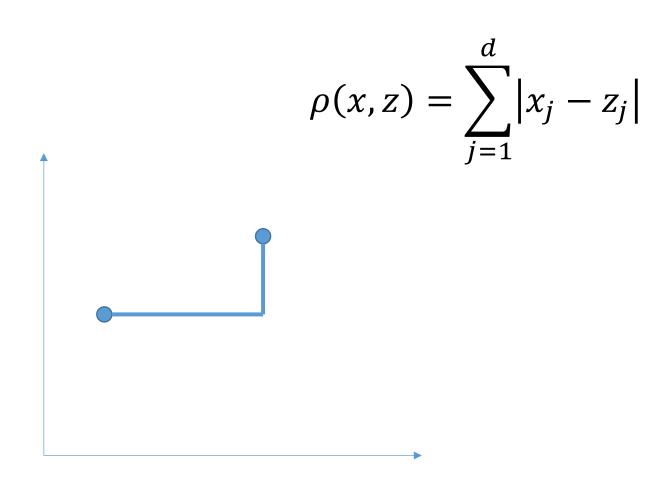
Метрика — это функция ρ с двумя аргументами, удовлетворяющая трём требованиям:

- ho(x,z)=0 тогда и только тогда, когда x=z
- $\rho(x,z) = \rho(z,x)$
- $\rho(x,z) \le \rho(x,v) + \rho(v,z)$ неравенство треугольника

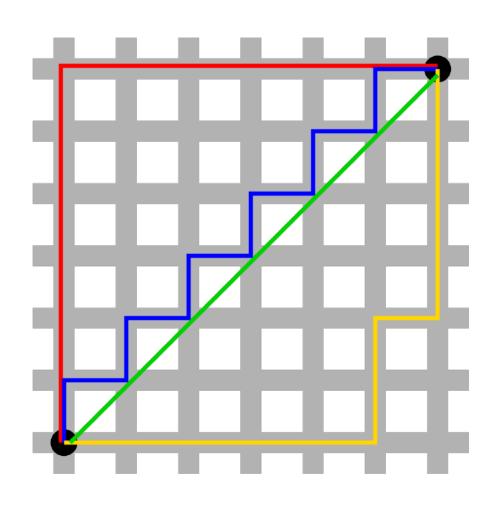
Евклидова метрика



Манхэттенская метрика



Сравнение



Обобщение

$$\rho(x,z) = \sqrt{\sum_{j=1}^{d} (x_j - z_j)^p}$$

- Метрика Минковского
- Можно подбирать p под конкретную задачу

Категориальные данные

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет

Считающая метрика

• Простейшая метрика: подсчёт различий

$$\rho(x,z) = \sum_{j=1}^{d} [x_j \neq z_j]$$

Что ещё?

- Текстовые данные чуть-чуть изучим в курсе, подробно потом
- Изображения потом

Измерение ошибки модели

Вопросы

- Как сравнить две модели?
- Как подобрать k и метрику?

Функция потерь для классификации

• Частый выбор — бинарная функция потерь

$$L(y,a) = [a \neq y]$$

• Функционал ошибки — доля ошибок (error rate)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

• Нередко измеряют долю верных ответов (accuracy):

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

Функция потерь для классификации

ВАЖНО

Accuracy — не точность!

a(x)	у
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

a(x)	у
-1	-1
+1	+1
-1	-1
+1	-1
+1	+1

Доля ошибок: 0.2

Доля верных ответов: 0.8

$$Q(a,X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

Решаем задачу выявления редкого заболевания

- 950 здоровых (y = +1)
- 50 больных (y = -1)

Модель: a(x) = +1

Доля ошибок: 0.05

$$Q(a,X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Всегда смотрите на баланс классов!
- Доля верных ответов не обязательно меняется от 0.5 до 1 для разумных моделей

Как выбрать k?

Обучающая выборка

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет
Комфорт	Строгино	Карта	да

Применяем модель:

Эконом Таганская Карта ?

Как выбрать k?

Обучающая выборка

На каком классе чаще всего ездит	Ближайшее к дому метро	Способ оплаты	Согласился повысить категорию?
Эконом	Таганская	Карта	да
Комфорт	Юго-Западная	Наличные	нет
Комфорт	Строгино	Карта	да

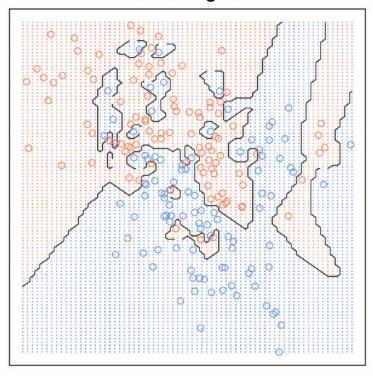
Применяем модель:

Эконом Таганская К	Карта да
--------------------	----------

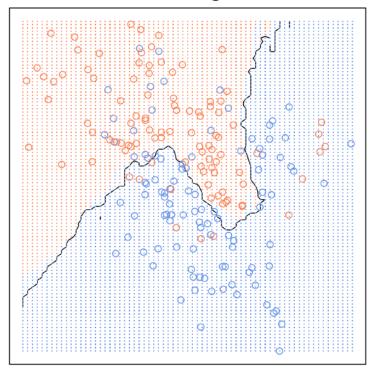
С точки зрения качества на обучающей выборке лучший выбор $oldsymbol{k}=\mathbf{1}$

Как выбрать k?

1-nearest neighbours



20-nearest neighbours



https://kevinzakka.github.io/2016/07/13/k-nearest-neighbor/

Гиперпараметры

- Нельзя подбирать k по обучающей выборке **гиперпараметр**
- Нужно использовать дополнительные данные

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Как готовиться к экзамену?

Заучить все примеры с занятий

Разобраться в предмете и усвоить алгоритмы решения задач

Переобучение (overfitting)

Обобщение (generalization)

Хорошее качество на обучении Низкое качество на новых данных

Хорошее качество на обучении Хорошее качество на новых данных

Отложенная выборка

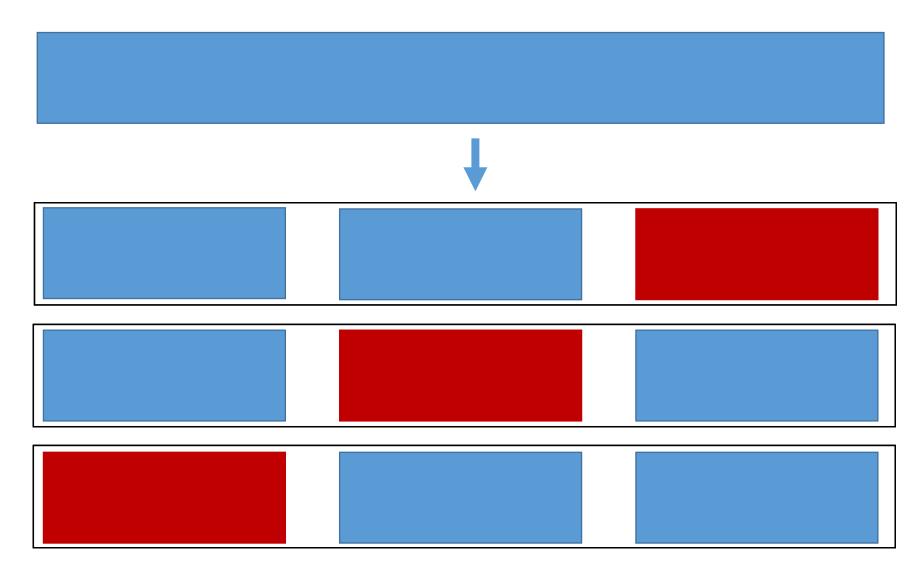


Отложенная выборка



- Слишком большое обучение тестовая выборка нерепрезентативна
- Слишком большой тест модель не сможет обучиться
- Обычно: 70/30, 80/20

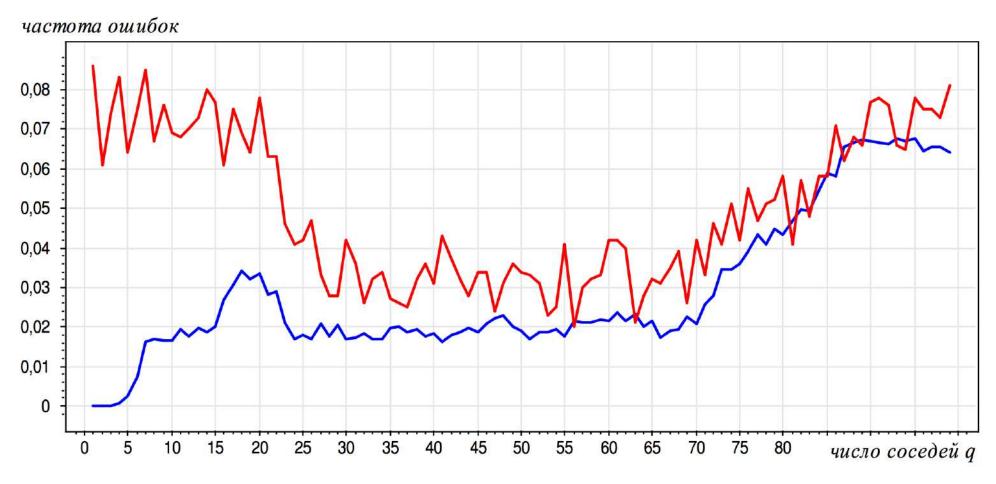
Кросс-валидация



Кросс-валидация

- Надёжнее отложенной выборки, но медленнее
- Параметр количество разбиений n (фолдов, folds)
- Хороший, но медленный вариант $n=\ell$ (leave-one-out)
- Обычно: n=3 или n=5 или n=10

Подбор числа соседей



Чуть больше терминов

• После подбора всех гиперпараметров стоит проверить на совсем новых данных, что модель работает

- Обучающая выборка построение модели
- Валидационная выборка подбор гиперпараметров модели
- Тестовая выборка финальная оценка качества модели