Тестовое задание

Дмитрий Донецков (ddonetskov@gmail.com)

11 июля 2019 г.

Содержание

1. Теоретическая задача №1

Вопрос:

> Можно ли использовать ковариацию двух признаков для анализа зависимостей между ними?

Ковариация двух признаков или, более корректно, двух случайных переменных показывает насколько сильно они меняются *совместно*, она может принимать значения от $-\infty$ до $+\infty$ Если посмотреть на логику формулы вычисления эмпирического значения ковариации двух случайных переменных X и Y, то можно увидеть, что это сумма таких произведений, что каждое произведение получается тем больше, чем более "синхронно"два признака отклоняются от своих средних значений:

$$\text{Теоретическая ковариация: } cov(X,Y) = \mathbb{E}(X - \mathbb{E}\,X)(Y - \mathbb{E}\,Y) \tag{1}$$

$$\text{Выборочная ковариация: } cov(X,Y) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \tag{2}$$

Таким образом, более высокие значения ковариации получаются при более "синхронных"колебаниях переменных, что несёт информацию об их связи, об их зависимости между собой. Но! данную информацию тяжело интерпретировать, особенно тяжело её использовать для сравнения силы зависимости между парами разных признаков, например, между двумя парами признаков: рост и вес человека, размер обуви и вес человека. При сравнении этих двух признаков на основе значений ковариаций невозможно ответить на вопрос, что сильнее связано с весом человека. Данное затруднение исходит из того, что в ковариации содержится размерность исходных признаков, она не свободна от природы измерения самих признаков, которая может быть разной. Поэтому, для сравнения силы связи между признаками используют нормализованное значение ковариации - корреляцию, которая уже свободна от размерностей, и принимает своё значение на интервале от -1 до 1 вне зависимости от того, множество каких значений могут иметь сами признаки.

Дополнение: Ковариацию теоретически можно использовать для анализа зависимостей признаков, если не меняется размерность исследуемых признаков, но это крайне неудобно на практике, поэтому, как правило, для сравнений используют корреляцию.

Что можно добавить в материал:

- таблицу сравнения свойств ковариации и корреляции,
- пояснения, почему ковариация всё равно остаётся очень важным понятием (например, для ковариационных матриц).

2. Теоретическая задача №2

Вопрос:

> Ваш подчинённый обучил модель и получил качество классификации 99%. Какие бы вопросы про данные и про модель вы бы задали, чтобы убедиться, что модель полезная? Можно считать, что программных багов нет.

Качество классификации в 99% выглядит очень хорошим. Естественно, точная интерпретация такой оценки зависит от используемой метрики. Если из контекста задачи неясно какая метрика была использована, то следует задать вопрос об этом вплоть до просьбы показать формулу или фрагмент кода, при помощи которой/которого производилось вычисление метрики. Далее, для ухода от рассмотрения специфики различных метрик (prediction, recall, AUC и т.п.), предположим, что идёт речь о доле объектов с верно распознанными классами для них (accuracy).

Итак, качество классификации в 99% выглядит настолько хорошим, что стоит перепроверить, что полученная модель не является слишком специфичной, что потом её будет нецелесообразно использовать на практике. Другими словами, что нет случая переобучения, смещения оценки, при котором модель будет малоценной для новых объектов. Для такой проверки можно задать следующие вопросы:

1. Как распределены объекты по классам? Как удостоверились, что классификатор действительно работает (выдаёт разные значения)? Здесь, необходимо понять, что нет крайне выраженного дисбаланса, когда, например, подавляющее большинство объектов относится к одному классу, а сам классификатор всегда выдаёт значение только одного класса. Другими словами, стоит провести проверку насколько полученная модель лучше dumb-модели. Также, стоит отметить, что в этом случае, несмотря на высокое качество классификации, такое решение "в лоб"может иметь высокую стоимость для оставшегося 1% случаев, делая модель экономически неэффективной.

2. Каким образом была проведена оценка модели? Здесь, необходимо понять, что оба множества объектов, используемые для построения модели (тренировки) и её последующей оценки (тестирования), были взяты таким образом, что каждое множество достаточно хорошо представляет собой множество всех возможных объектов (генеральную совокупность). Можно подсказать, про техники train/test split, k-fold cross-validation.

Что можно добавить в материал:

- пояснения по тому, что метрика accuracy - неполна, есть разные метрики оценки качества классификатора: precision, recall, F_1 score и т.п.; некоторые из них специфичны, а другие - были сконструированы, как общие.

3. Практическая задача

Задание:

> Напишите функцию one_hot_encode(), которая принимает на вход объект pandas.DataFrame и название столбца, и выполняет one-hot-кодирование этого столбца. Гарантируется, что переданный столбец категориальный. Функция должна возвращать новую таблицу (pandas.DataFrame), в которой отсутствует старый столбец, а новые добавлены в конец. Использовать готовые функции для решения этой задачи (например, pandas.get_dummies()) не разрешается.

Код функции и её тесты оформлены в виде Jupyter-ноутбука и доступны для просмотра по ссылке https://nbviewer.jupyter.org/github/ddonetskov/misc/blob/master/yp_ds/one_hot_encoding.ipynb#.

❗ Примечание: реализованная функция не покрывает всех возможных практических случаев, а именно:

- если есть пропущенные данные в указанном столбце, то функция возвращает исключение `NotImplementedError`, т.к. логика обработки пропущенных значений может разнится в зависимости от задачи,
- кодирование выполняется для всех значений в столбце, никакое значение не удаляется, что может порождать проблему с коллинеарностью для соответствующих моделей (например, для линейной регрессии).

4. Урок

Тема урока:

> Что делает функция pandas.concat()? В каких случаях её используют?

В библиотеке pandas есть функция concat. Её название - это сокращение от английского concatenate, что означает "соединять, сцеплять". Действительно, данная функция используется для соединения двух и более дата фреймов в один. Соединение можно производить как по столбцам и тогда получаемый дата фрейм будет состоять из исходных дата фреймов, "поставленных"друг на друга (Рис. 1a), так и по строкам (индексам) и тогда получаемый дата фрейм будет состоять из исходных, "пристыкованных"боком друг к другу (Рис. 1b). При этом, в получаемом дата фрейме могут быть совершенно новые элементы, порождённые несоответствием размеров исходных дата фреймов. Данным элементам будет присвоено NaN-значение.

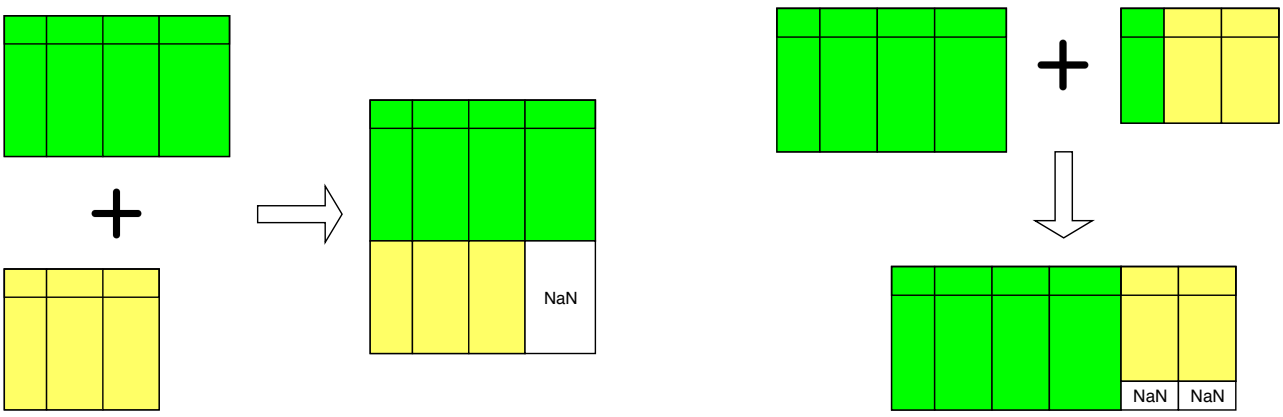
Рассмотрим на примере оба этих случая. В качестве набора данных будем использовать датасет World Happiness Report для 2015-2017 (доступен по ссылке https://www.kaggle.com/unsdsn/world-happiness).

Допустим, вы - исследователь счастья на планете и решили включить в свой анализ и данные предоставленные ООН за несколько лет. Затруднение в том, что на каждый год приходится свой собственный файл, а вам хочется иметь данные в едином дата фрейме. Функция concat поможет здесь. Например, следующим образом можно объединить данные за 2015 и 2016 годы в один итоговый дата фрейм `whr`:

```
whr_2015 = pd.read_csv('data/2015.csv', sep=',')
whr_2016 = pd.read_csv('data/2016.csv', sep=',')

whr_2015['year'] = 2015
whr_2016['year'] = 2016

whr = pd.concat([whr_2015, whr_2016], axis=0, sort=False)
```



(a) соединение по столбцам (b) соединение по индексу

Рис. 1: Соединение двух дата фреймов

Полный код с пояснениями размещён по ссылке https://nbviewer.jupyter.org/github/ddonetskov/misc/blob/master/yp_ds/pandas_concat.ipynb, см. раздел 'Vertical Concatenation'. Обратите внимание!, что те столбцы, которые присутствуют не во всех соединяемых дата фреймах по умолчанию всё равно попадут в итоговый дата фрейм, а элементы, для которых данный столбец ранее не существовал, получат NaN-значения. Таким образом, функция concat придерживается принципа максимального сохранения данных при объединении. ✪ Задание: а) найдите такие столбцы для приведённого примера, б) добавьте в пример и файл 2017.csv (сложность объединения его с данными по другим двум годам состоит в том, что для него столбцы получили другие именования).

Приведённый выше пример можно продолжить для случая объединения по индексу. Например, вы решили остановится на анализе только 2017 года, но хотели бы дополнить данные статистикой по странам. Тогда, можно воспользоваться датасетом по ссылке https://www.kaggle.com/fernandol/countries-of-the-world и присоединить его данные к данным World Happiness Report для 2017 года. См. полный код в разделе 'Horizontal Concatenation'. ✪ Задание: изучите опцию `ignore_index` в документации, попробуйте выполнить объединение дата фреймов при `ignore_index=True`, почему итоговый результат получится другим?

```
whr_2017 = pd.read_csv('data/2017.csv', sep=',')
countries = pd.read_csv('data/countries of the world.csv', sep=',')

# removing spaces around the country names so as to match them with the names
    ↪ in whr_2017 later
countries['Country'] = countries['Country'].str.strip()

# setting the index which will be used to combine two data frame 'horizontally'
whr_2017 = whr_2017.set_index('Country')
countries = countries.set_index('Country')

whr_2017_ext = pd.concat([whr_2017, countries], axis=1, sort=False,
    ↪ ignore_index=False, join='inner')
```

❗ Примечания:

1. При объединении необходимо отслеживать, что имена общих колонок или значения индекса общих строк - совпадают, иначе полученный результат будет выглядеть, как объединение объектов без общих колонок или значений индекса.

2. Функция concat также может использоваться и для Series.

3. Функция concat может использоваться для объединения произвольного количества дата фреймов, не только двух, но и трех, четырех и т.д.

4. Для объединения двух датафреймов по индексу можно использовать функции join и merge класса pandas.DataFrame. Они могут быть более удобными в силу своей специализации.

5. Упражнение (кейс)

Тема:

> Классификация для несбалансированных классов. Ошибки первого и второго рода, ROC-кривая, AUC-ROC.

Разбираемый случай должен быть сконструирован таким образом, чтобы обучающий смог получить понимание, почему а) оценка качества классификатора только по accuracy не является полной, а иногда и проигрышной, б) существуют и другие оценки качества классификатора, включая интегральные. Для этого в качестве бизнес-задачи можно выбрать такую, что для ошибок и первого, и второго рода есть стоимость потерь, а при помощи анализа ROC-кривой следует выбрать наиболее оптимальное, с точки зрения потерь, значение порога срабатывания классификатора.

Например, можно рассмотреть процесс в поликлинике, когда при помощи бинарного классификатора определяют стоит ли отправить пациента на дальнейшую не очень безопасную диагностику. При этом стоимость потерь (иски, компенсации и т.п.) при диагностике здорового пациента (бесполезной диагностики) составляет C_1, а стоимость потерь (иски, компенсации и т.п.) при не отправлении больного пациента (упущенной диагностики) составляет C_2.

Тогда, датасет может быть сконструирован следующим образом:

- объект - это пациент с физиологическими признаками и целевым признаком (не болен/болен),
- бОльшая часть случаев отмечена, как "не болен т.к. допустим заболевание - редкое,
- граница между больными и небольными пациентами - размытая, в том смысле, что бинарный классификатор всегда будет делать ошибки и первого, и второго рода.

Далее, в задании обучающий знакомится с понятиями ошибок, получает представление о том, что accuracy может достигать высоких значений даже при выдачи классификатором всегда "не болен"(константный классификатор), знакомится с recall/precision/FPR, строит ROC-кривую, вычисляет стоимость потерь в зависимости от выбранного порога срабатывания классификатора.

Что можно улучшить. Чтобы пример был запоминающимся, можно сделать его смешным, указав, что речь идёт о хомячках, которые заболевают тем, что в колесе бегут не вперёд, а назад.