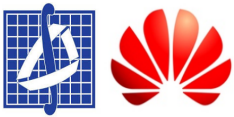
Введение в искусственный интеллект. Машинное обучение

Тема семинара: обзор, кросс-валидация

Бабин Д.Н., Иванов И.Е., Петюшко А.А.

кафедра Математической Теории Интеллектуальных Систем



План семинара

1. Организационные вопросы

План семинара

1. Организационные вопросы
2. Обзор семинарских занятий

План семинара

1. Организационные вопросы
2. Обзор семинарских занятий
3. Скользящий контроль

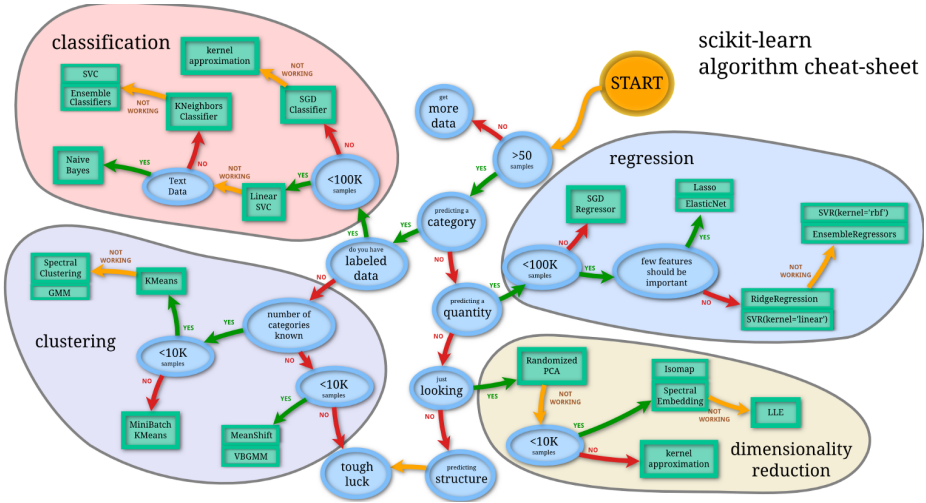
SHARE

- Данный курс является частью программы **SHARE**
  - SHARE = School of Huawei Advanced Research Education
  - SHARE = Школа опережающего научного образования Хуавэй
  - e-mail: `share@intsys.msu.ru`
  - Канал SHARE: `https://t.me/joinchat/AAAAAE_r4XKzEDaUKy1FwA`

Полезные ресурсы

- Страница курса: `https://github.com/mlcoursemm/ml2021autumn`
- Главный ресурс по курсам “Введение в компьютерный интеллект”: `https://github.com/mlcoursemm`
- Телеграмм-канал: `https://t.me/joinchat/AAAAAEUmx5cJLOdLXsOt8g`
- Группа обсуждения: `https://t.me/joinchat/AAAAAEx8IrWw-nYJPo6smQ`
- Почта курса: mlcoursemm@gmail.com
- Телеграмм-бот для посылки домашних заданий @ml2021sharebot

Дорожная карта Scikit-Learn[1]



[1] https://scikit-learn.org/stable/tutorial/machine_learning_map/

Обзор семинаров

- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
  - Самый базовый алгоритм **классификации** — выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
  - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.

Обзор семинаров

- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
  - Самый базовый алгоритм **классификации** — выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
  - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.
- Алгоритмы кластеризации k-средних (k-means clusterization)
  - Базовый метод обучения **без учителя**: входной неразмеченный массив примеров необходимо разбить на классы (кластеры)
  - Различается по начальной инициализации алгоритма, методам подсчета центроида классов, работе с выбросами и т.д.

Обзор семинаров

- Алгоритмы k-ближайших соседей (k-Nearest Neighbor)
  - Самый базовый алгоритм **классификации** — выбор ближайшего элемента из обучающего множества и вывод соответствующего ему класса
  - Различается по количеству ближайших точек (k), используемой метрике близости, наличию ускоренных процедур, методам приближенных вычислений и т.д.
- Алгоритмы кластеризации k-средних (k-means clusterization)
  - Базовый метод обучения **без учителя**: входной неразмеченный массив примеров необходимо разбить на классы (кластеры)
  - Различается по начальной инициализации алгоритма, методам подсчета центроида классов, работе с выбросами и т.д.
- Регрессия и оценка качества
  - Рассматриваются базовые методы линейной **регрессии** для восстановления целевой зависимости, а также критерий оценки качества этого восстановления
  - Различаются по наличию аналитического решения, видам регуляризации и т.д.

Обзор семинаров

- Метрики качества классификаторов
  - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
  - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.

Обзор семинаров

- Метрики качества классификаторов
  - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
  - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.
- Построение машины опорных векторов
  - Support Vector Machine (SVM) — один из наиболее устойчивых и распространенных классификаторов в классическом машинном обучении
  - Будет подробно разобран пример построения такого классификатора аналитически

Обзор семинаров

- Метрики качества классификаторов
  - Будут разобраны основные методики оценки качества как бинарных, так и многоклассовых классификаторов
  - Узнаете, что такое ошибки первого и второго рода, ROC-кривая и площадь под ней (AUC), true/false positive/negative ответы и соответственно их доля (rate), точность и полнота (precision and recall) ответов классификатора. Будет примерно указано, какую метрику и где лучше использовать и т.д.
- Построение машины опорных векторов
  - Support Vector Machine (SVM) — один из наиболее устойчивых и распространенных классификаторов в классическом машинном обучении
  - Будет подробно разобран пример построения такого классификатора аналитически
- Работа с пропущенными значениями и выбор признаков
  - Зачастую в реальной жизни не все признаки и не у всех объектов известны. Также порой не известно заранее, какие признаки важны, а какие наоборот мусорные
  - Будут рассмотрены различные методы заполнения пропущенных значений на основе статистик (среднее, минимум или максимум и т.д.), а также способы оценки и выбора наиболее важных признаков

Обзор семинаров

- Регрессия на основе опорных векторов
  - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
  - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения

Обзор семинаров

- Регрессия на основе опорных векторов
  - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
  - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения
- Ансамбли
  - Ансамблирование — основный способ “дожатия” последних процентов на тесте в соревнованиях по машинному обучению, а также создания более устойчивых систем, в которых ошибки разных моделей будут нивелироваться
  - Будет дан обзор методов ансамблирования в scikit-learn

Обзор семинаров

- Регрессия на основе опорных векторов
  - Support Vector Regression (SVR) является расширением машины опорных векторов, но для задачи восстановления регрессии
  - Будут рассмотрены аналитическая формулировка и методы решения
- Ансамбли
  - Ансамблирование — основный способ “дожатия” последних процентов на тесте в соревнованиях по машинному обучению, а также создания более устойчивых систем, в которых ошибки разных моделей будут нивелироваться
  - Будет дан обзор методов ансамблирования в scikit-learn
- Разбор домашних заданий курса
  - На последнем (-их) занятии (-ях) будем разбирать домашние задания
  - Также будут предложены современные научные статьи для разбора по желанию

Время для вопросов

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров

[2]Image source: https://scikit-learn.org/

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное

[2] Image source: https://scikit-learn.org/

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
3. Обучаем модель

[2] Image source: `https://scikit-learn.org/`

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
3. Обучаем модель
4. Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения

[2]Image source: `https://scikit-learn.org/`

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
3. Обучаем модель
4. Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
5. Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами

[2] Image source: `https://scikit-learn.org/`

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

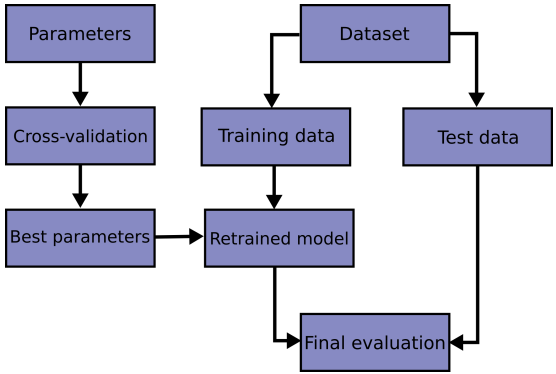
1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
3. Обучаем модель
4. Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
5. Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами
6. Проверяем на тесте!

[2] Image source: `https://scikit-learn.org/`

Кросс-валидация: основные этапы корректного обучения

1. Придумываем модель и пространство гиперпараметров
2. Из исходных данных выделяем тестовое множество, а оставшееся множество делим на обучающее и валидационное
3. Обучаем модель
4. Проводим процедуру кросс-валидации по пространству гиперпараметров и находим оптимальные их значения
5. Обучаем на полном обучающем множестве с подобранными гиперпараметрами
6. Проверяем на тесте!

Общая схема[2]:



[2] Image source: `https://scikit-learn.org/`

Кросс-валидация: hold-out

- Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества

Кросс-валидация: hold-out

- Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Простейшая кросс-валидация — это контроль на отложенном множестве (hold-out), при котором происходит однократное разделение множества

Кросс-валидация: hold-out

- Иногда нужно поделить исходное множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Простейшая кросс-валидация — это контроль на отложенном множестве (hold-out), при котором происходит однократное разделение множества
- И то, и другое можно сделать одной процедурой

Кросс-валидация: scikit-learn

- Для начала разобъем общий массив данных на обучающее и тестовое подножества

Кросс-валидация: scikit-learn

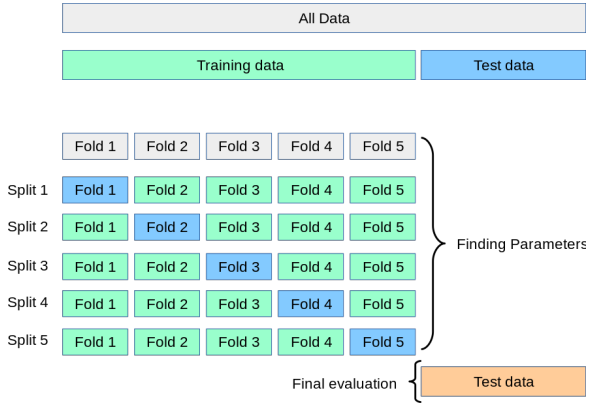
- Для начала разобъем общий массив данных на обучающее и тестовое подножества
- Это делается с помощью функции `sklearn.model_selection.train_test_split()`:

```
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn import datasets

X, y = datasets.load_iris(return_X_y=True) # X.shape = (150, 4), y.shape = (150,)
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.4, random_state
    =0)
# X_train.shape=(90, 4), y_train.shape=(90,), X_test.shape=(60, 4), y_test.shape
    =(60,)
```

Кросс-валидация: k-fold валидация

Контроль по k блокам (k-fold валидация)[3]:



[3]Image source: https://scikit-learn.org/

Кросс-валидация: scikit-learn

- Теперь посмотрим на k-fold кросс-валидацию

Кросс-валидация: scikit-learn

- Теперь посмотрим на k-fold кросс-валидацию
- Это делается с помощью функций `sklearn.model_selection.cross_val_score()` и `cross_val_predict()`:

```
from sklearn import svm
from sklearn.model_selection import cross_val_score

clf = svm.SVC(kernel='linear', C=1)
scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=5)
# scores = [1., 1., 1., 1., 0.94444444]
```

Кросс-валидация: scikit-learn

- Теперь посмотрим на k-fold кросс-валидацию
- Это делается с помощью функций `sklearn.model_selection.cross_val_score()` и `cross_val_predict()`:

```
from sklearn import svm
from sklearn.model_selection import cross_val_score

clf = svm.SVC(kernel='linear', C=1)
scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=5)
# scores = [1., 1., 1., 1., 0.94444444]
```

- Параметр *cv* — это число блоков *k*

Кросс-валидация: scikit-learn

- Теперь посмотрим на k-fold кросс-валидацию
- Это делается с помощью функций `sklearn.model_selection.cross_val_score()` и `cross_val_predict()`:

```
from sklearn import svm
from sklearn.model_selection import cross_val_score

clf = svm.SVC(kernel='linear', C=1)
scores = cross_val_score(clf, X_train, y_train, cv=5)
# scores = [1., 1., 1., 1., 0.94444444]
```

- Параметр *cv* — это число блоков *k*
- Функция `sklearn.model_selection.cross_val_predict()` выдает также значения на валидации для каждого примера из каждого тестового блока (заметим, что каждый пример входит ровно в один тестовый блок)

Кросс-валидация: scikit-learn

- В заключение темы кросс-валидации рассмотрим в scikit-learn специальные итераторы, которые разбивают исходное множество согласно разным правилам:

Кросс-валидация: scikit-learn

- В заключение темы кросс-валидации рассмотрим в scikit-learn специальные итераторы, которые разбивают исходное множество согласно разным правилам:
  - Разбиение множества согласно k-fold валидации: `sklearn.model_selection.KFold()`

```
from sklearn.model_selection import KFold

X = ["a", "b", "c", "d"]
kf = KFold(n_splits=2)
for train, test in kf.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out: [2 3] [0 1]
# out: [0 1] [2 3]
```

Кросс-валидация: scikit-learn

- В заключение темы кросс-валидации рассмотрим в scikit-learn специальные итераторы, которые разбивают исходное множество согласно разным правилам:
  - Разбиение множества согласно k-fold валидации: `sklearn.model_selection.KFold()`

```
from sklearn.model_selection import KFold

X = ["a", "b", "c", "d"]
kf = KFold(n_splits=2)
for train, test in kf.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out: [2 3] [0 1]
# out: [0 1] [2 3]
```

  - Разбиение множества согласно leave-one-out валидации: `sklearn.model_selection.LeaveOneOut()`

```
from sklearn.model_selection import LeaveOneOut

loo = LeaveOneOut()
for train, test in loo.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out: [1 2 3] [0]
# out: [0 2 3] [1]
# out: [0 1 3] [2]
# out: [0 1 2] [3]
```

Кросс-валидация: scikit-learn

- Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: `sklearn.model_selection.RepeatedKFold()`

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)
for train, test in rkf.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out (repeat 1): [1 2] [0 3]
# out (repeat 1): [0 3] [1 2]
# out (repeat 2): [0 1] [2 3]
# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```

[4] https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

Кросс-валидация: scikit-learn

- Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: `sklearn.model_selection.RepeatedKFold()`

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)
for train, test in rkf.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out (repeat 1): [1 2] [0 3]
# out (repeat 1): [0 3] [1 2]
# out (repeat 2): [0 1] [2 3]
# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```

- Параметры в примерах: *n_splits* — количество блоков (*cv*), *n_repeats* — количество повторений

[4] https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

Кросс-валидация: scikit-learn

- Разбиение множества согласно множественной k-fold валидации: `sklearn.model_selection.RepeatedKFold()`

```
from sklearn.model_selection import RepeatedKFold

rkf = RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=123456)
for train, test in rkf.split(X):
    print("%s %s" % (train, test))
# out (repeat 1): [1 2] [0 3]
# out (repeat 1): [0 3] [1 2]
# out (repeat 2): [0 1] [2 3]
# out (repeat 2): [2 3] [0 1]
```

- Параметры в примерах: *n_splits* — количество блоков (*cv*), *n_repeats* — количество повторений
- Остальные примеры работы с процедурой кросс-валидации можно посмотреть на сайте scikit-learn[4]

[4] https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html

Настройка гиперпараметров

- Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества

Настройка гиперпараметров

- Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Также умеем подразбивать обучающее подмножество для проведения процедуры валидации и даже замерять качество при этой процедуре

Настройка гиперпараметров

- Итак, мы умеем разбивать множество примеров на обучающее и тестовое подмножества
- Также умеем подразбивать обучающее подмножество для проведения процедуры валидации и даже замерять качество при этой процедуре
- Но главная цель — подобрать оптимальный набор гиперпараметров!

Настройка гиперпараметров: scikit-learn

- В scikit-learn есть два важных класса для этого: `sklearn.model_selection.GridSearchCV` и `sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV`

Настройка гиперпараметров: scikit-learn

- В scikit-learn есть два важных класса для этого: `sklearn.model_selection.GridSearchCV` и `sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV`
- `GridSearchCV` проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров

Настройка гиперпараметров: scikit-learn

- В scikit-learn есть два важных класса для этого: `sklearn.model_selection.GridSearchCV` и `sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV`
- `GridSearchCV` проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров
- `RandomizedSearchCV` генерирует гиперпараметры случайно (согласно их заданным распределениям)

Настройка гиперпараметров: scikit-learn

- В scikit-learn есть два важных класса для этого: `sklearn.model_selection.GridSearchCV` и `sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV`
- `GridSearchCV` проходит по заранее предопределенному диапазону гиперпараметров
- `RandomizedSearchCV` генерирует гиперпараметры случайно (согласно их заданным распределениям)
- Лучшие найденные параметры будут находиться в поле *best_params_*
- Точность на кросс-валидации для лучших гиперпараметров будет находиться в поле *best_score_*
- Точность на тесте для лучших гиперпараметров считается через метод `score()`

Настройка гиперпараметров: перебор по сетке

- Рассмотрим класс `sklearn.model_selection.GridSearchCV`

Настройка гиперпараметров: перебор по сетке

- Рассмотрим класс `sklearn.model_selection.GridSearchCV`
- Для перебора по сетке нужно задать **полный** диапазон поиска по каждому из гиперпараметров (либо оставить используемые по умолчанию)

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

param_grid = {'C': [0.1, 1, 10, 100, 1000], 'gamma': [1.0, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001],
              'kernel': ['rbf']}
svc = svm.SVC()
clf = GridSearchCV(svc, param_grid, cv=5, refit=True) # Refit an estimator using the
      best found parameters on the whole dataset
clf.fit(X_train, y_train) # Run CV grid search
clf.score(X_test, y_test) # Test on the best parameters
# score = 0.91666666
```

Настройка гиперпараметров: случайный перебор

- Для случайного перебора нужно задать **распределение** каждого из гиперпараметров (либо оставить используемые по умолчанию), количество случайных попыток задается через параметр *n_iter* конструктора `RandomizedSearchCV`

Настройка гиперпараметров: случайный перебор

- Для случайного перебора нужно задать **распределение** каждого из гиперпараметров (либо оставить используемые по умолчанию), количество случайных попыток задается через параметр *n_iter* конструктора `RandomizedSearchCV`
- Распределения можно использовать из пакета `scipy.stats` (например, равномерное, нормальное, лог-равномерное и т.п.)

```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
from scipy.stats import loguniform

param_dist = {'C': loguniform(0.1, 1000), 'gamma': loguniform(0.0001, 1.0)}
svc = svm.SVC()
clf = RandomizedSearchCV(svc, param_dist, cv=5, random_state=123456, refit=True) #
    Refit an estimator using the best found parameters on the whole dataset
clf.fit(X_train, y_train) # Run CV grid search
clf.score(X_test, y_test) # Test on the best parameters
# score can be different - in my experiments from 0.9 to 0.96666
```

Настройка гиперпараметров: сравнение методов перебора

- Сравним `GridSearchCV` и `RandomizedSearchCV` на решетке (количество генераций гиперпараметров) размера примерно 100

```
# GridSearchCV params: {'C': 1, 'gamma': 0.001, 'kernel': 'rbf'}
# GridSearchCV test score: 0.9833333333333333

# RandomizedSearchCV params: {'C': 24.193643927107065, 'gamma':
    0.0006301690253315956, 'kernel': 'rbf'}
# RandomizedSearchCV test score: 0.9888888888888889
```

Настройка гиперпараметров: сравнение методов перебора

- Сравним `GridSearchCV` и `RandomizedSearchCV` на решетке (количество генераций гиперпараметров) размера примерно 100

```
# GridSearchCV params: {'C': 1, 'gamma': 0.001, 'kernel': 'rbf'}
# GridSearchCV test score: 0.9833333333333333

# RandomizedSearchCV params: {'C': 24.193643927107065, 'gamma':
    0.0006301690253315956, 'kernel': 'rbf'}
# RandomizedSearchCV test score: 0.9888888888888889
```

- Как видно, разницы особой нет — и если заранее не нужно проверять **конкретные** значения гиперпараметров, то лучше ограничиться случайным поиском

Время для вопросов

Спасибо за внимание!