Как решать и побеждать в соревнованиях по анализу данных?

Евгений Путин
Университет ИТМО
putin.evgeny@gmail.com

25 мая 2011
Санкт-Петербург

ROUND ONE

FIGHT

Платформы по соревнованиям в анализе данных (DM)

АлгоМост

CodaLab

INNOCentive

CHALEARN

KDDCup

kaggle

DRIVENDATA

Яндекс
интернет-математика

Интернет-математика

topcoder

Challenge.gov

datascience.net

TunedIT

Преимущества Kaggle

- ❖Наиболее раскрученная платформа
- ❖Возможность запускать in-class соревнования
- ❖Крутые соревнования от топовых IT компаний
- ❖Красивый, простой сайт
- ❖Большое количество участников
- ❖Богатый форум
- ❖Датасеты
- ❖Туториалы
- ❖Скрипты
- ❖Поиск работы в Data Science

kaggle

Крутой профайл на kaggle.com отличная строчка в резюме для каждого data scientist-а и не только ☺

Как выглядят соревнования по DM?

otto group

Completed • $10,000 • 3,514 teams

Otto Group Product Classification Challenge

Tue 17 Mar 2015 – Mon 18 May 2015 (19 months ago)

Dashboard

- Home
  - Data
  - Make a submission
- Information
  - Description
  - Evaluation
  - Rules
  - Prizes
  - Timeline
- Forum
- Kernels
  - New Script
  - New Notebook
- Leaderboard
  - Public
  - Private

Private Leaderboard

1. Gilberto Titericz & Stanislav Semenov
2. ¯_(ツ)_/¯
3. i dont know
4. Dmitry & Davut
5. Mikhail Trofimov
6. Optimistically Convergent
7. x2x4x8

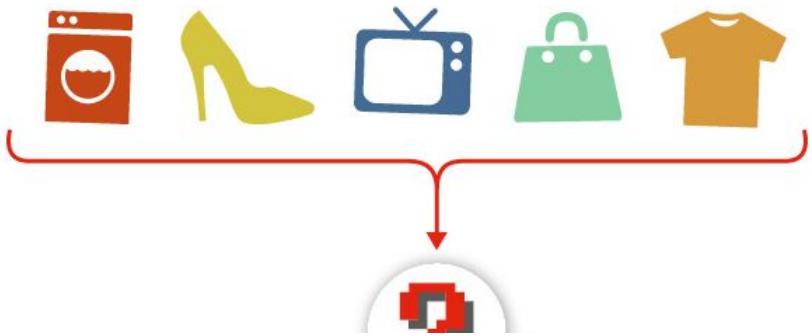
Competition Details » Get the Data » Make a submission

Classify products into the correct category

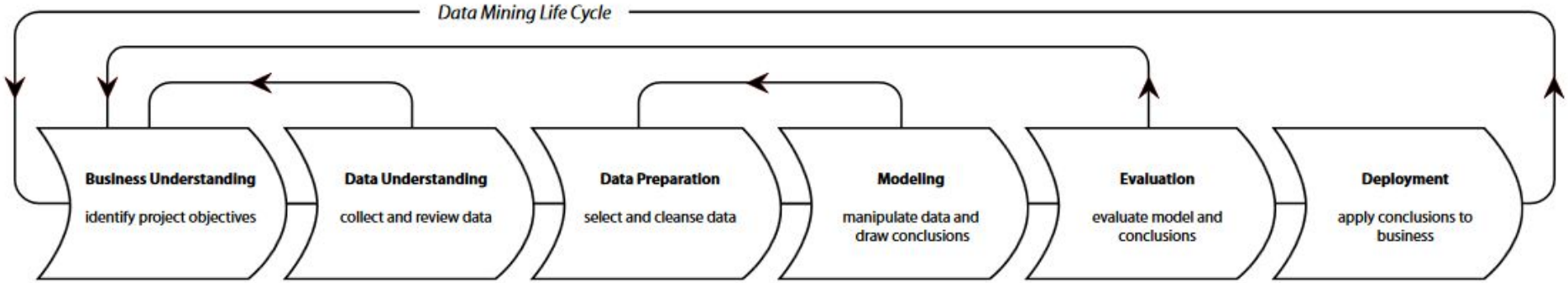
Get started on this competition through Kaggle Scripts

The Otto Group is one of the world's biggest e-commerce companies, with subsidiaries in more than 20 countries, including Crate & Barrel (USA), Otto.de (Germany) and 3 Suisses (France). We are selling millions of products worldwide every day, with several thousand products being added to our product line.

A consistent analysis of the performance of our products is crucial. However, due to our diverse global infrastructure, many identical products get classified differently. Therefore, the quality of our product analysis depends heavily on the ability to accurately cluster similar products. The better the classification, the more insights we can generate about our product range.



Цикл решения задач DM



Determine Business Objectives
Background
Business Objectives
Business Success Criteria
(Log and Report Process)

Assess Situation
Inventory of Resources, Requirements, Assumptions, and Constraints
Risks and Contingencies
Terminology
Costs and Benefits
(Log and Report Process)

Determine Data Mining Goals
Data Mining Goals
Data Mining Success Criteria
(Log and Report Process)

Produce Project Plan
Project Plan
Initial Assessment of Tools and Techniques
(Log and Report Process)

Collect Initial Data
Initial Data Collection Report
(Log and Report Process)

Describe Data
Data Description Report
(Log and Report Process)

Explore Data
Data Exploration Report
(Log and Report Process)

Verify Data Quality
Data Quality Report
(Log and Report Process)

Data Set
Data Set Description
(Log and Report Process)

Select Data
Rationale for Inclusion/ Exclusion
(Log and Report Process)

Clean Data
Data Cleaning Report
(Log and Report Process)

Construct Data
Derived Attributes
Generated Records
(Log and Report Process)

Integrate Data
Merged Data
(Log and Report Process)

Format Data
Reformatted Data
(Log and Report Process)

Select Modeling Technique
Modeling Technique
Modeling Assumptions
(Log and Report Process)

Generate Test Design
Test Design
(Log and Report Process)

Build Model Parameter Settings
Models
Model Description
(Log and Report Process)

Assess Model
Model Assessment
Revised Parameter
(Log and Report Process)

Evaluate Results
Align Assessment of Data Mining Results with Business Success Criteria
(Log and Report Process)

Approved Models
Review Process
Review of Process
(Log and Report Process)

Determine Next Steps
List of Possible Actions
Decision
(Log and Report Process)

Plan Deployment
Deployment Plan
(Log and Report Process)

Plan Monitoring and Maintenance
Monitoring and Maintenance Plan
(Log and Report Process)

Produce Final Report
Final Report
Final Presentation
(Log and Report Process)

Review Project
Experience Documentation
(Log and Report Process)

Понимание задачи

- Определение и формулировании бизнес задачи
- Оценка рисков, затрат, общего профита
- Постановка DM целей
- Определение критериев успешности
- Выработка плана решения задач
- Четкое понимание того что надо предсказать

Понимание данных: Первый шаг

- Сбор данных
- Какие данные есть: сколько примеров, сколько признаков, какие признаки по природе
- Достаточно ли данных для решения задачи, есть ли необходимость собирать дополнительные данные

Понимание данных: Второй шаг

- Описательные статистики

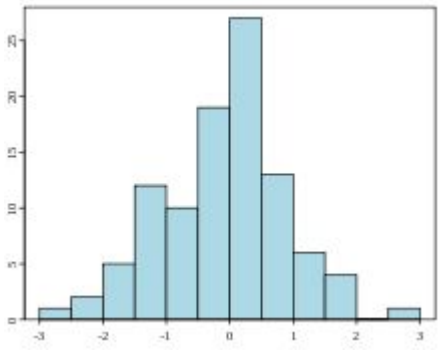
$$\mu_x = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \qquad s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_x)^2}{n-1}}$$

- Корреляция Пирсона

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{m} (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - \bar{y})^2}} = \frac{cov(x,y)}{\sqrt{s_x^2 s_y^2}}$$

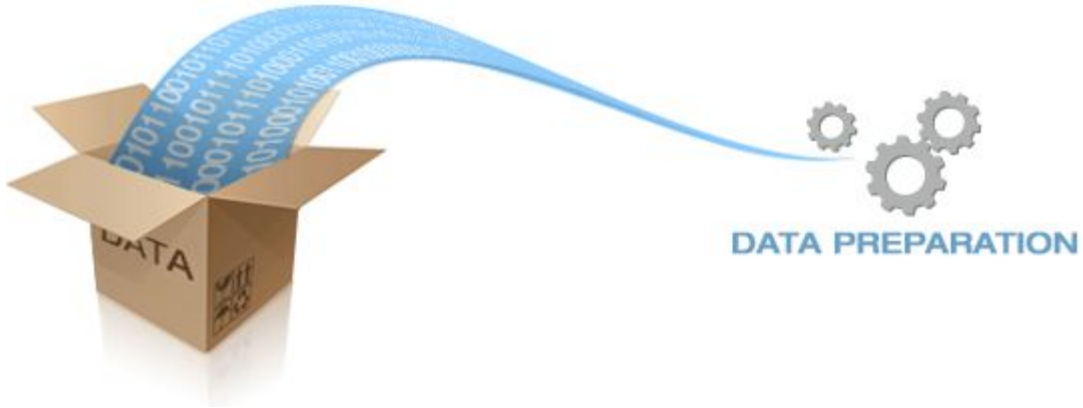
- Проверка статистических гипотез (нормальность, проверку на распределение)
- Исследование распределений: гистограммы признаков, таргетов

$$F = \frac{D_1}{D_2} = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2}$$



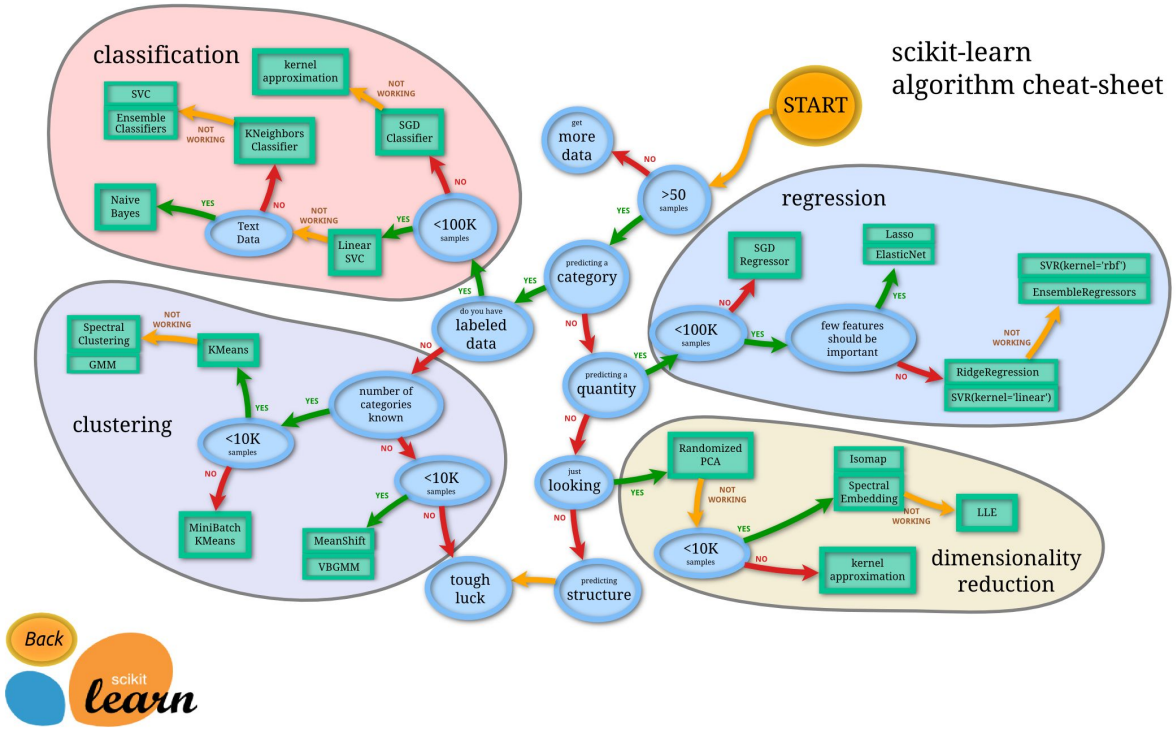
Подготовка данных

- Выбор и интеграция данных
- Форматирование данных
- Предобработка данных: заполнение пропусков, определение выбросов, нормализация данных, т.д.
- Выбор/экстракция признаков, сокращение размерности
- Инженерия признаков
- Разбиение на тренировочное, тестовое множества



Построение моделей

- Выбор подходящих моделей, соответствующих проверяемым гипотезам
- Определение дизайна тестирования
- Обучение моделей с настройкой гиперпараметров
- Контроль overfitting/underfitting



Оценка качества моделей

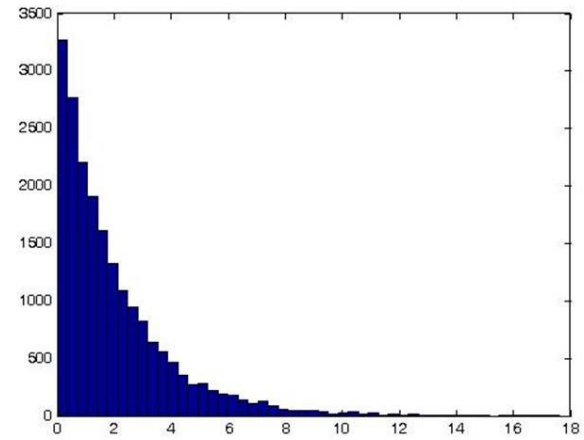
- Анализ эффективности моделей на тестовом множестве: статистические гипотезы, корреляции
- Вычисление метрик оценки качества моделей
- Проверка overfitting/underfitting
- Постпроцессинг
- Достигнут ли желаемый результат?

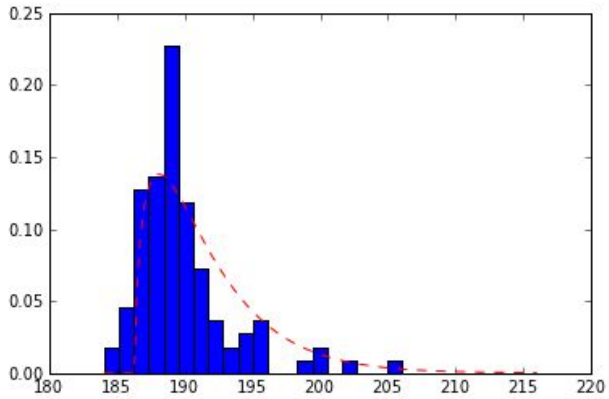
Развертывание системы

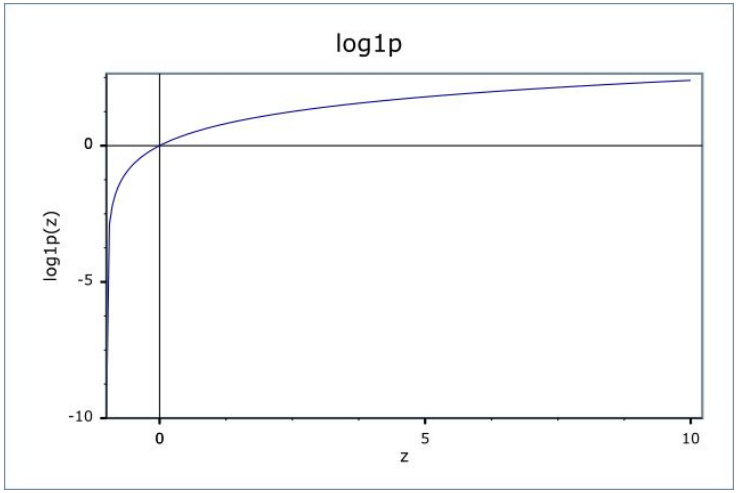
- Финальный отчет по проекту
- Выполнены ли все поставленные DM цели?
- Удовлетворяют ли результаты критерия успешности?

ROUND TWO

Исследование распределений: Линеаризация







Предобработка данных

❖Преобразование категориальных переменных: OneHotEncoder, LabelEncoder

```
>>> from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
>>> enc = OneHotEncoder()
>>> enc.fit([[0, 0, 3], [1, 1, 0], [0, 2, 1], [1, 0, 2]])
OneHotEncoder(categorical_features='all', dtype=<... 'numpy.float64'>,
       handle_unknown='error', n_values='auto', sparse=True)
>>> enc.n_values_
array([2, 3, 4])
>>> enc.feature_indices_
array([0, 2, 5, 9])
>>> enc.transform([[0, 1, 1]]).toarray()
array([[ 1.,  0.,  0.,  1.,  0.,  0.,  1.,  0.,  0.]])
```

```
>>> le = preprocessing.LabelEncoder()
>>> le.fit(["paris", "paris", "tokyo", "amsterdam"])
LabelEncoder()
>>> list(le.classes_)
['amsterdam', 'paris', 'tokyo']
>>> le.transform(["tokyo", "tokyo", "paris"])
array([2, 2, 1]...)
>>> list(le.inverse_transform([2, 2, 1]))
['tokyo', 'tokyo', 'paris']
```

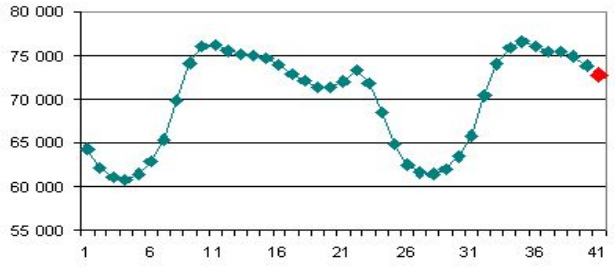
❖Преобразовани time, т.д.

❖Преобразовани

```
>>> from sklearn.feature_extraction import FeatureHasher
>>> h = FeatureHasher(n_features=10)
>>> D = [{'dog': 1, 'cat':2, 'elephant':4},{'dog': 2, 'run': 5}]
>>> f = h.transform(D)
>>> f.toarray()
array([[ 0.,  0., -4., -1.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.,  2.],
       [ 0.,  0.,  0., -2., -5.,  0.,  0.,  0.,  0.,  0.]])
```

Заполнение пропусков

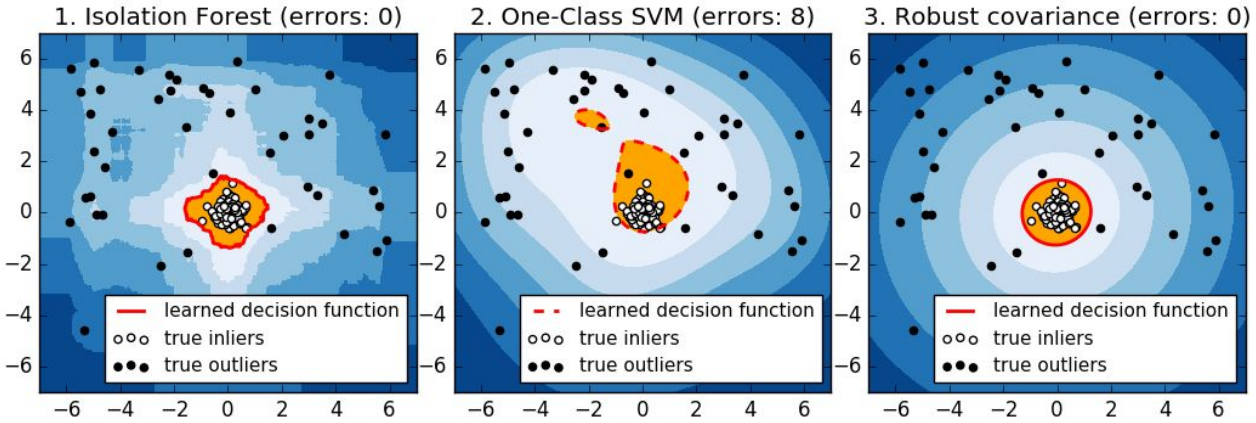
- Заполнение нулями
- Заполнение следующими, предыдущими значениями (pandas.fillna)
- Заполнение средними, модами, медианами (sklearn.preprocessing.Imputer)
- Заполнение с использованием (авто)регрессии/сезонных моделей



- Заполнение с использованием специальных адаптированных алгоритмов: kNN, SVM, т.д.

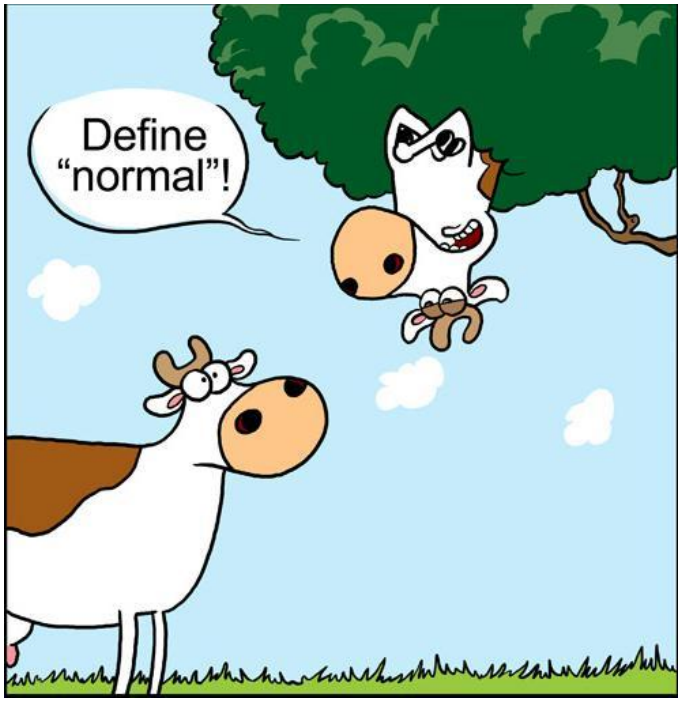
Определение выбросов

- Определение через распределения: по квантилям, перцентилям, по другим правилам пальца
- Определение через визуализацию, использую алгоритмы кластеризации (k-means, affinity propagation, ..), сокращения размерности (PCA, t-SNE, ..)
- Определение через анализ построенных моделей, постпроцессинг
- Определение через специальные адаптированные алгоритмы: OneClassSVM, EllipticEnvelope, IsolationForest



Нормализация данных

- Стандартная нормализация
- Нормализация в 0-1 или в -1, 1(для нейроных сетей)
- Стемминг, лемматизация, TF-IDF и другие методы для текста
- Нормализация для звука
- Вычитание среднего по всем пикселям, нормализация цветов для картинок



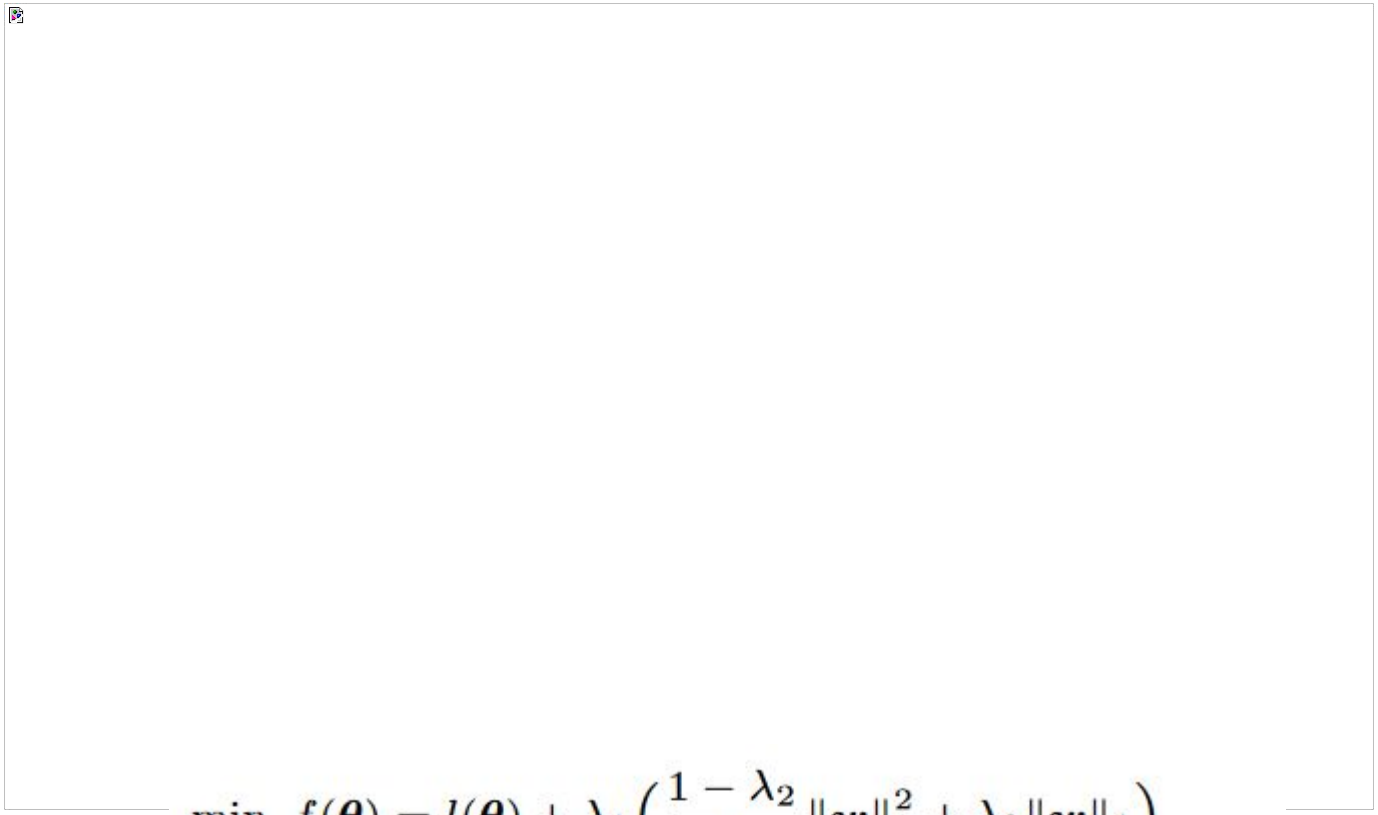
Выбор признаков

- Выбор через model-free методы: scikit-feature
  - Статистики (sklearn.feature_selection.SelectKBest)
  - Корреляции Пирсона, Спирмена
- Выбор через model-based методы:
  - RandomForest (rf.feature_importances_, PFI)
  - Lasso, ElasticNet (lr.coeffs_)
  - NN (DFS, HVS, PFI)
  - RFE (SVM, kNN, т.д.)

Permutation Feature Importance

```
1.  def shuffle(array):
2.      return np.array(sorted(array, key=lambda *args: np.random.random()))
3.
4.  def pfi(model, data, target, metric, bootstrap=10):
5.      perfomance =    metric(target, model.predict(data))
6.      feature_importances = []
7.      for feature in range(num_features):
8.          feature_score = []
9.          clone = np.copy(data)
10.         for step in range(0, bootstrap):
11.             clone[:,feature] = shuffle(clone[:,feature])
12.             pred = model.predict(clone)
13.             feature_score.append(metric(target, pred))
14.         feature_importances.append(perfomance-np.mean(np.array(r2_feature_score)))
15.
16.     return feature_importances
```

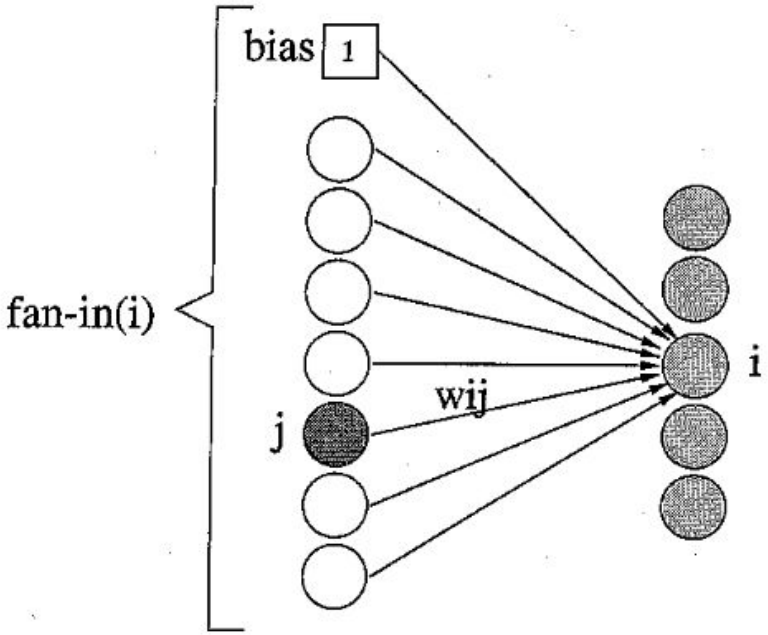
Deep Feature Selection

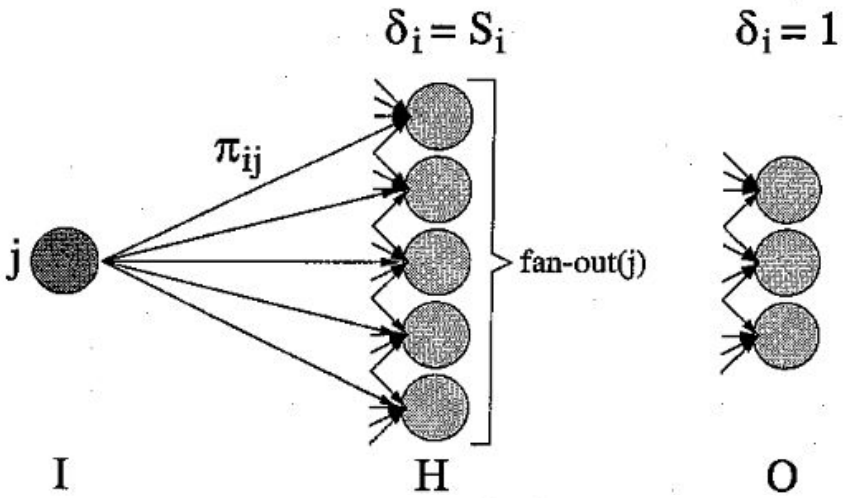


$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \; f(\boldsymbol{\theta}) = l(\boldsymbol{\theta}) + \lambda_1 \Big(\frac{1-\lambda_2}{2} \|\boldsymbol{w}\|_2^2 + \lambda_2 \|\boldsymbol{w}\|_1 \Big)$$
$$+ \alpha_1 \Big(\frac{1-\alpha_2}{2} \sum_{k=1}^{K+1} \|\boldsymbol{W}^{(k)}\|_F^2 + \alpha_2 \sum_{k=1}^{K+1} \|\boldsymbol{W}^{(k)}\|_1 \Big)$$

Li, Yifeng, Chih-Yu Chen, and Wyeth W. Wasserman. "Deep Feature Selection: Theory and Application to Identify Enhancers and Promoters." Journal of Computational Biology 23.5 (2016): 322-336.

Heuristic Variable Selection





$$\pi_{ij} = \frac{|w_{ij}|}{\sum_{k \in \text{fan-in}(i)} |w_{ik}|}$$

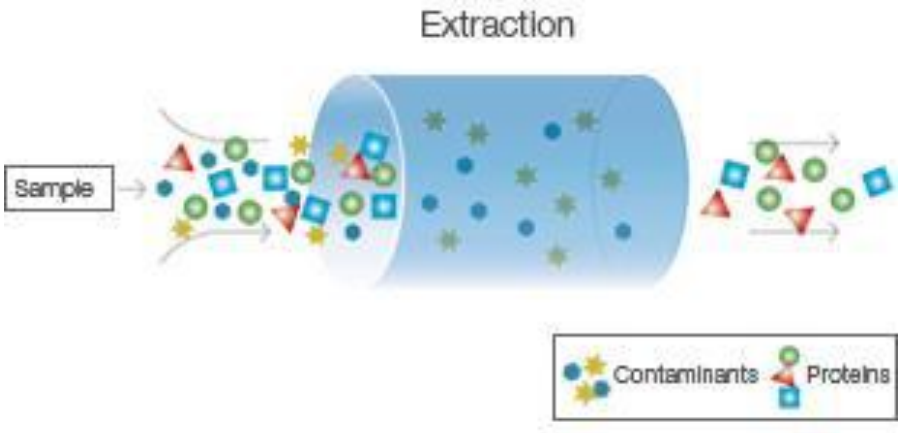
$$S_j = \sum_{i \in \text{fan-out}(j)} \pi_{ij} \delta_i$$

$$\delta_i = \begin{cases} 1 & \text{if unit } i \in O \\ S_i & \text{if unit } i \in H \end{cases}$$

Yacoub, Meziane, and Y. Bennani. "HVS: A heuristic for variable selection in multilayer artificial neural network classifier." Intelligent Engineering Systems Through Artificial Neural Networks, St. Louis, Missouri. Vol. 7. 1997.

Экстракция признаков

- ❖Экстракция через визуальный анализ (handcrafted признаки)
- ❖Экстракция через model-based методы (NN, RandomForest, т.д.)
- ❖Экстракция через автоэнкодеры (AE) (Stacked AE, Denoising AE, т.д.)
- ❖Экстракция через методы сокращения размерности (PCA, kernel PCA, t-SNE)
- ❖Экстракция через методы кластеризации (kNN, AffinityPropagation, DBSCAN, т.д.)

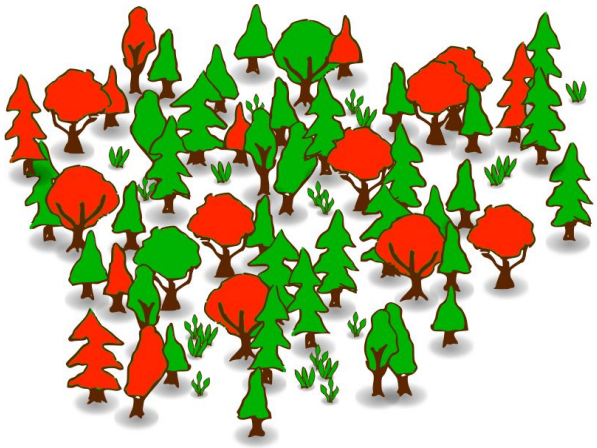


Инженерия признаков

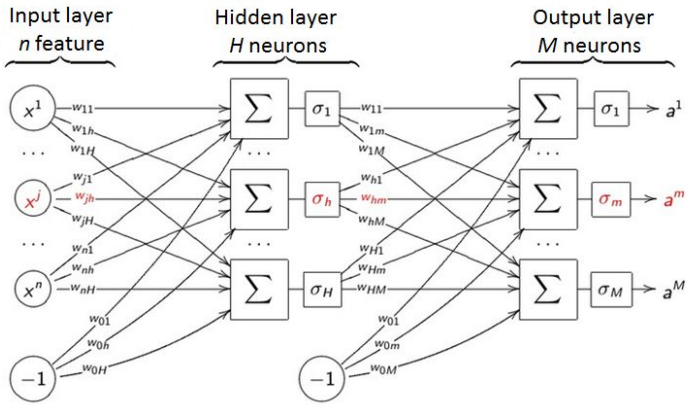
- Простейшие handcrafted признаки: среднее, дисперсия и т.п. по примеру
- Исследование взаимодействия признаков между собой и признаков с таргетами
- Handcrafted признаки, основанные на знании области (формулы, т.д.)
- Введение зависимостей x1*x2, x1^2, sin(x1)*x2, log1p(x1), т.д.
- Handcrafted признаки, основанные на анализе временных рядов (сезонность, т.д.)
- Handcrafted признаки, основанные на правилах (правила переходов, т.д.)
- Handcrafted признаки, основанные на пространственной зависимости примеров (ближайшие соседи, т.д.)

Построение моделей

Simple data

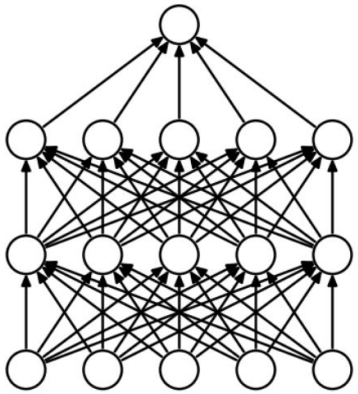


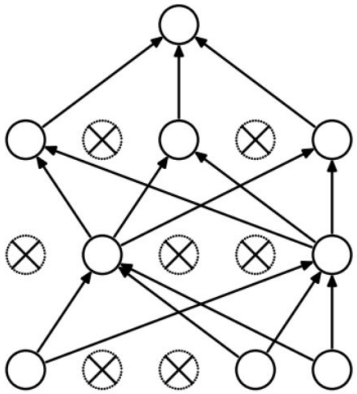
Complex data



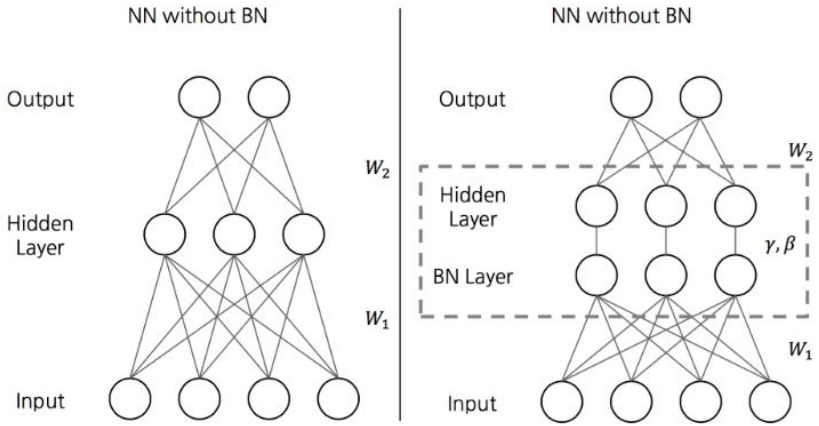
Обучение нейронных сетей

- Использовать методы регуляризации для сетей: Dropout, BatchNormalization, weight decay

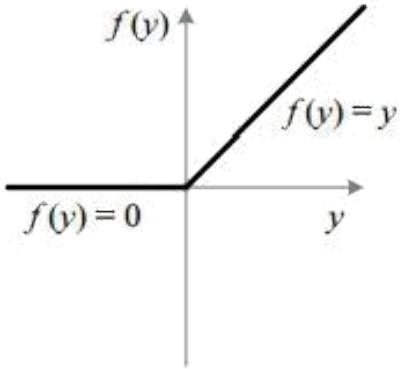




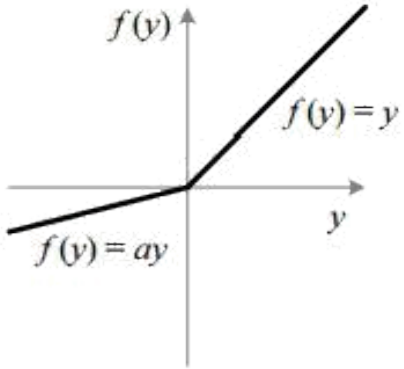
- аци



ReLU

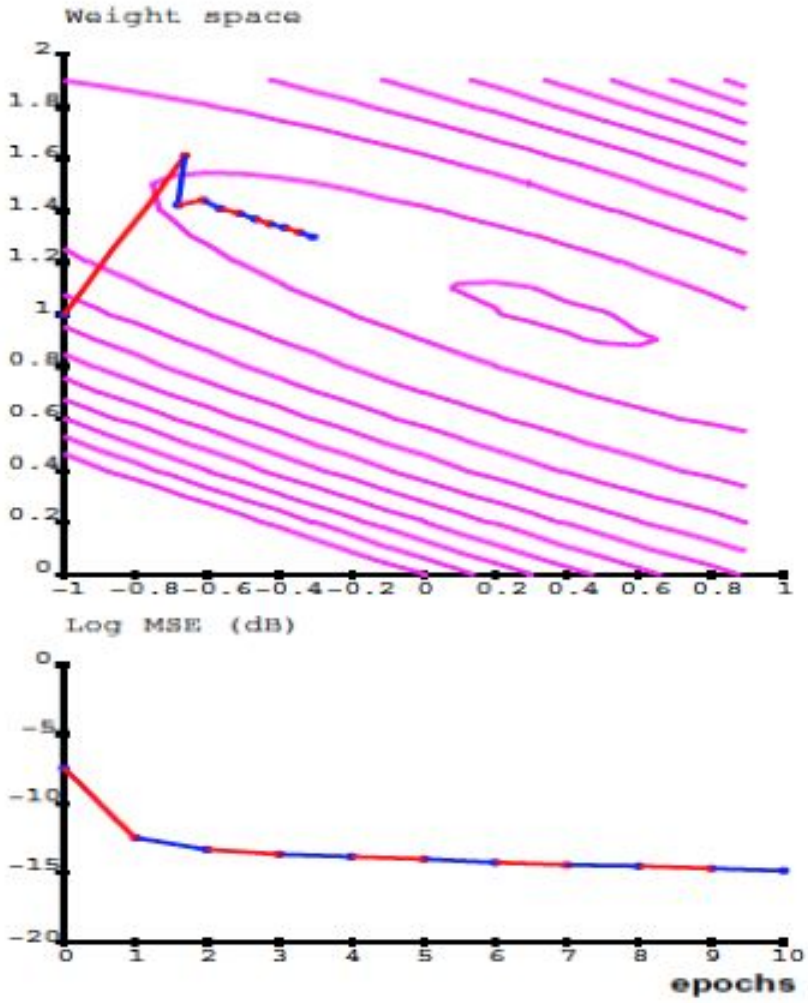


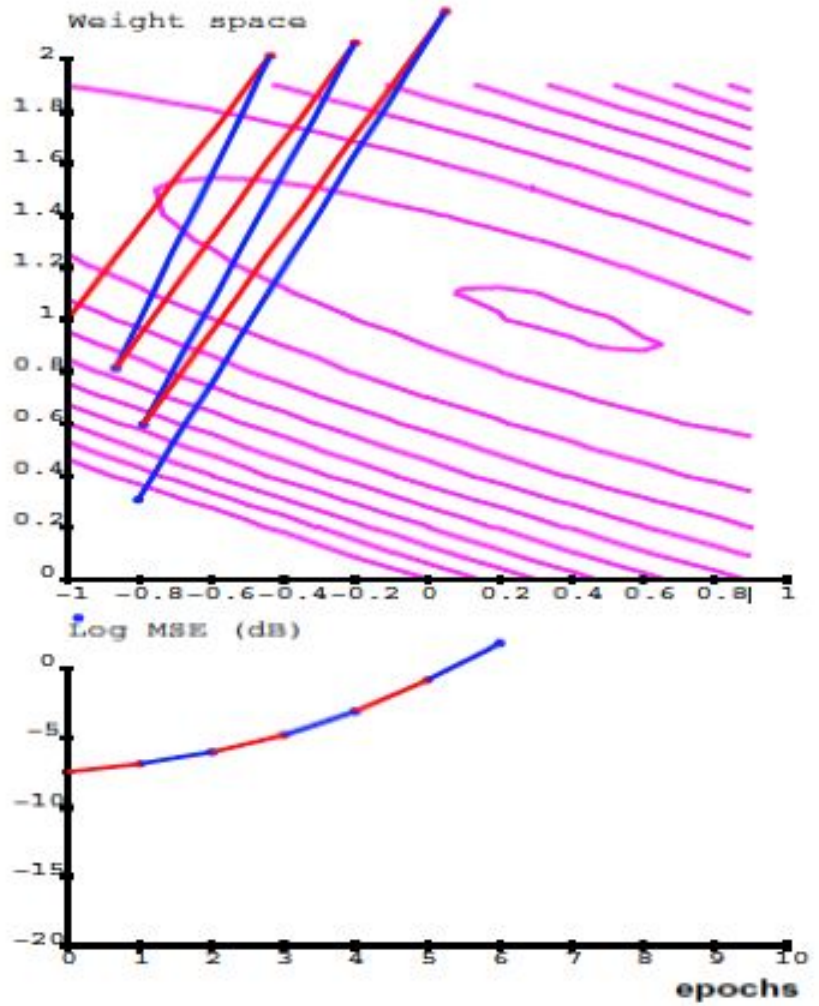
PReLU



Обучение нейронных сетей

Обучение нейронных сетей






TOP SECRET

Модели победители на Kaggle соревнованиях

- Использовать GBM из xgboost, random forest, regularized greedy forest

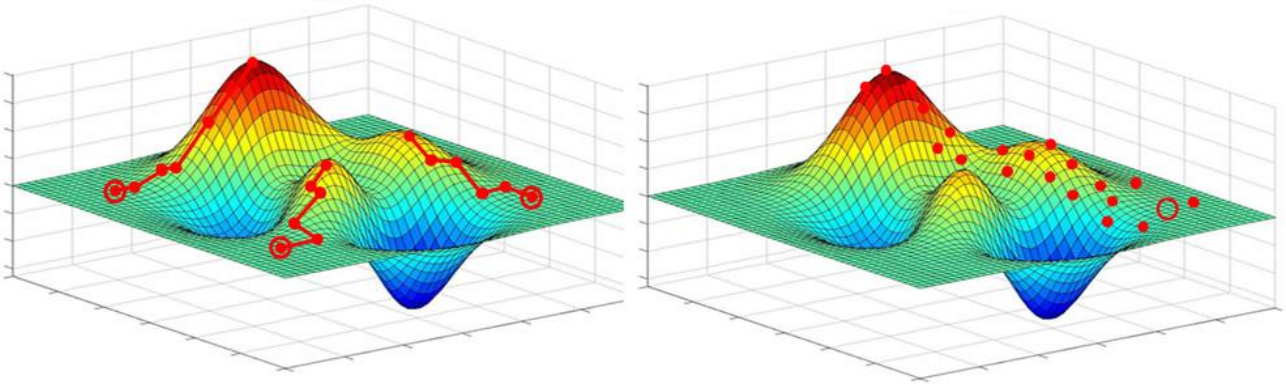
- Использовать NN из Theano (Keras, Lasagne, Blocks) или Tensorflow

Технические Tips & Tricks

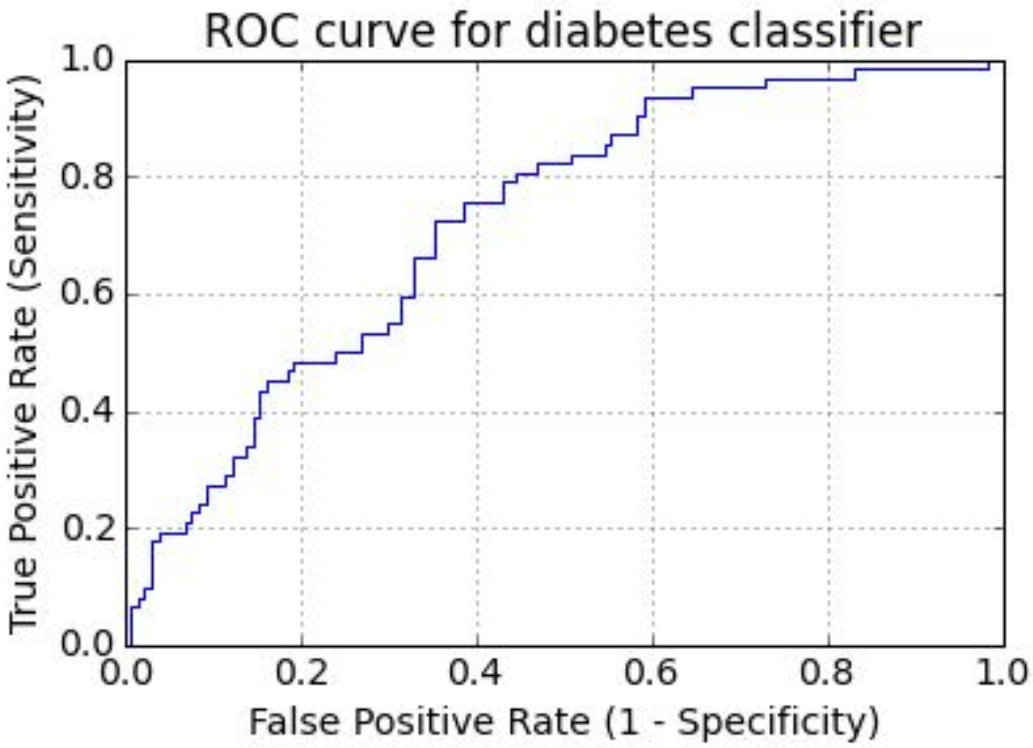
- ❖Делать верную предобработку данных
- ❖Правильно работать с нормализацией/выбросами/пропусками
- ❖Проводить визуальный анализ данных, чтобы лучше понять данные, извлечь высокоуровневые признаки
- ❖Делать сокращение размерности, выбор/экстрацию признаков model-free & model-based методами
- ❖Строить разные модели на разных данных
- ❖Выбрать правильные метрики
- ❖Выбрать верную кроссвалидацию
- ❖Правильно подбирать модель и ее гиперпараметры
- ❖Подбирать оптимальный порог предсказаний
- ❖Делать калибровку вероятностей моделей
- ❖Правильно работать с несбалансированными данными
- ❖Использовать аугментацию данных
- ❖Строить ансамбли моделей, т.е. делать стекинг (Stacking)

Настройка гиперпараметров

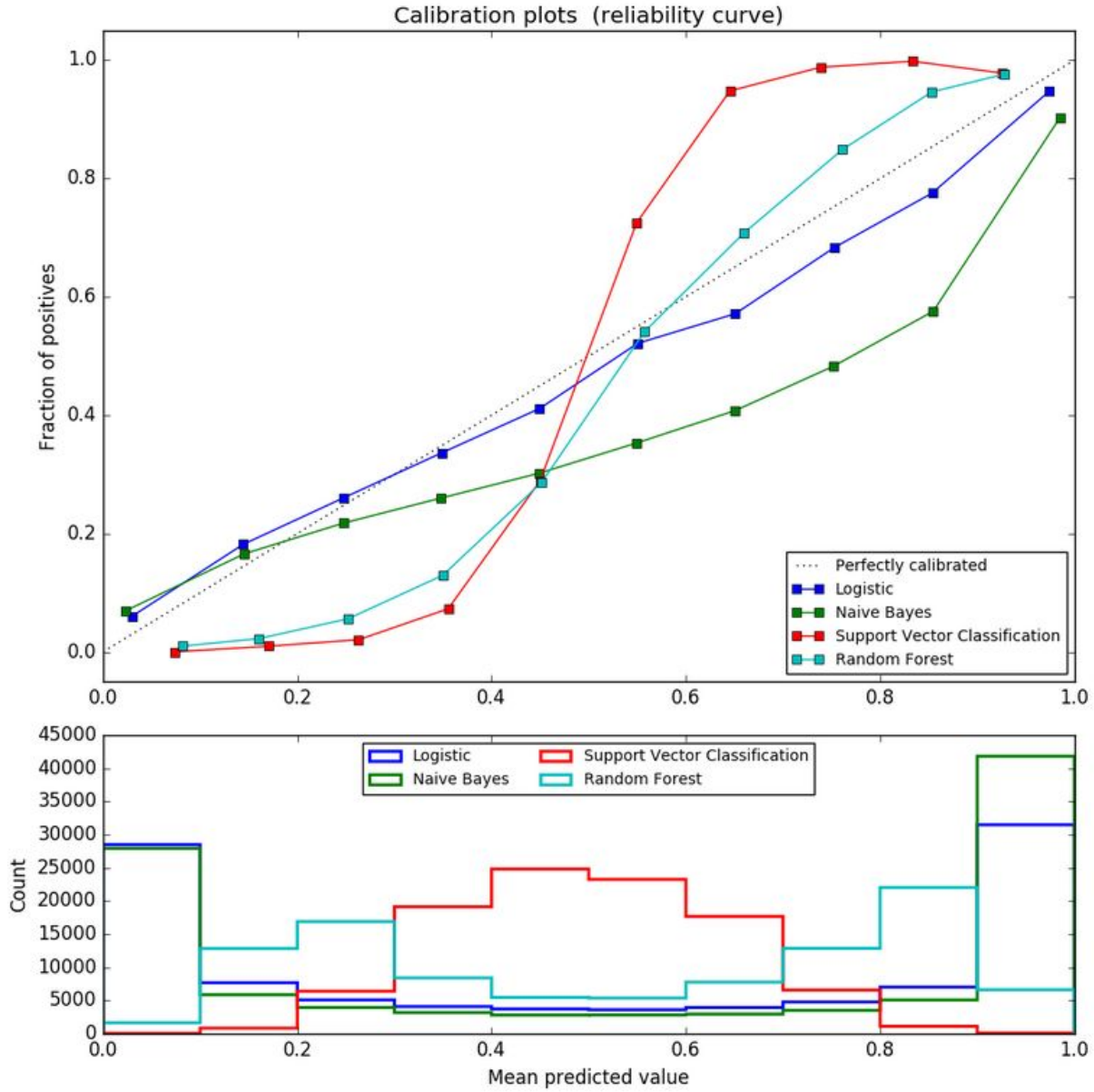
- Найти оптимальное подмножество данных на котором стоит обучаться и настраивать гиперпараметры моделей
- Использовать следующую схему GridSearch, RandomSearch:
  - На первом шаге используем попараметровый grid search для большого количества значений
  - На втором шаге для лучших значений используем обычный GridSearch, RandomSearch
- Использовать методы байесовской оптимизации:
  - baeys_opt для моделей sklearn
  - hyperopt для моделей нейронных сетей на Theano



Оптимальный порог



Калибровка вероятностей



sklearn.calibration.CalibratedClassifierCV

Несбалансированные данные

- Использовать методы балансировки данных: imbalanced-learn
  - Undersampling (SVM, kNN, NN)
  - Oversampling (SVM, kNN, NN)
- Использовать методы генерирующие данные в процессе своего обучения (NN)
- Использовать метрики для несбалансированных данных (F1-score, Matthews correlation cofficient)

Спасибо за внимание!
Вопросы?

Евгений Путин
Университет ИТМО
putin.evgeny@gmail.com

25 мая 2017
Санкт-Петербург