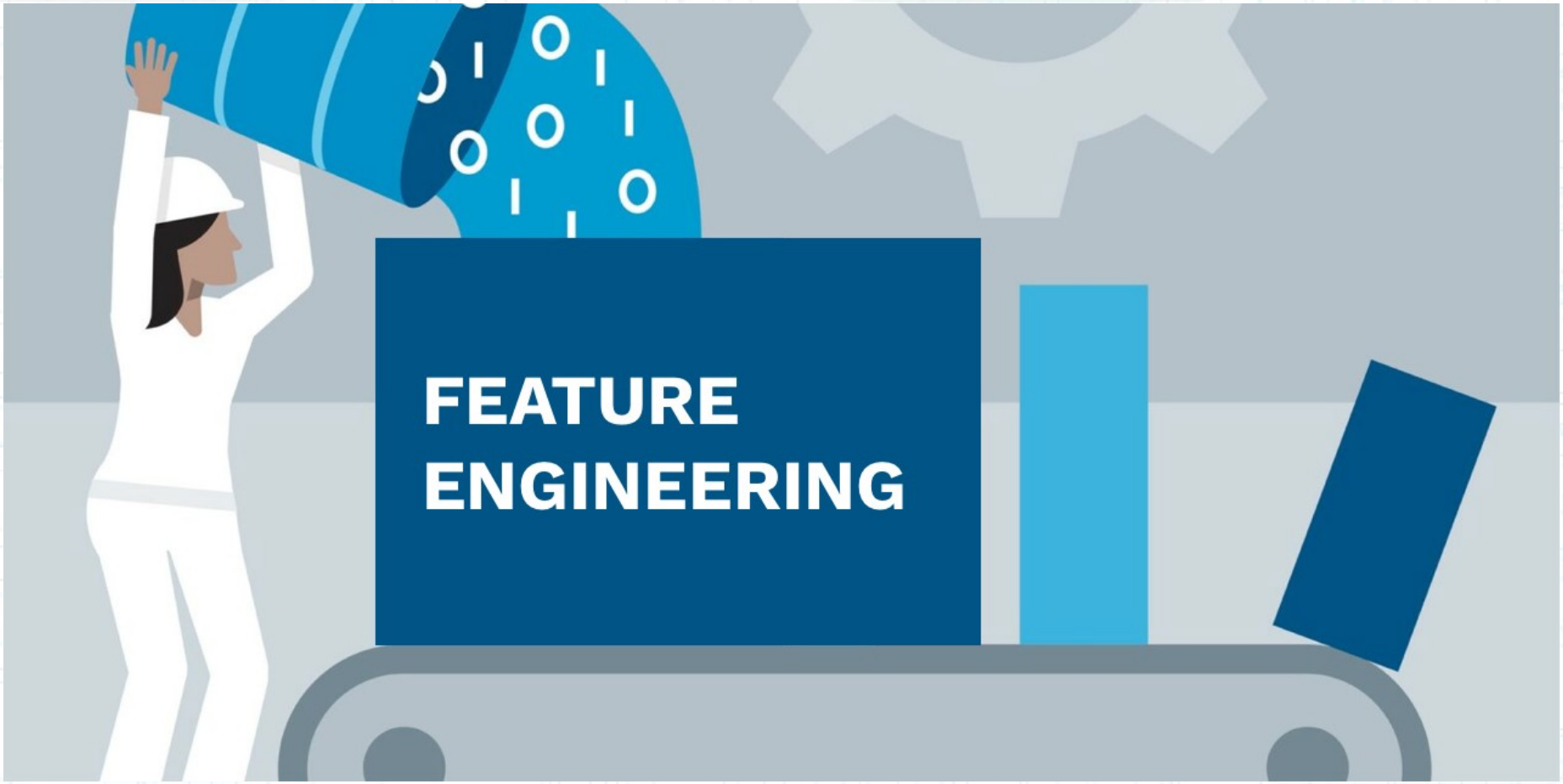
Машинное обучение
Feature engineering



Содержание лекции

- Теория и практические приемы извлечения признаков из данных разного типа (признаки для пар объектов, для групп (покупок), для кусочков временных рядов, для текстов, изображений)
- Трансформации признаков:
  - one-hot
  - дискретизация
  - выделение главных компонент (PCA, PLS)
  - другие embeddings
  - приведение к нормальному виду (для линейной регрессии очень полезно) https://habr.com/ru/articles/578754/
- Важность признаков (в т.ч. взаимная информация)

Дата и время

Дата и время

- День недели
- Месяц
- Время года
- Время суток
- Рабочие/нерабочие дни, праздники
- Рабочие/нерабочие часы
- Кластеризация
- Значения нескольких синусов с разными частотами (используется для позиционного кодирования в трансформерах)

Признаки пар разнородных объектов

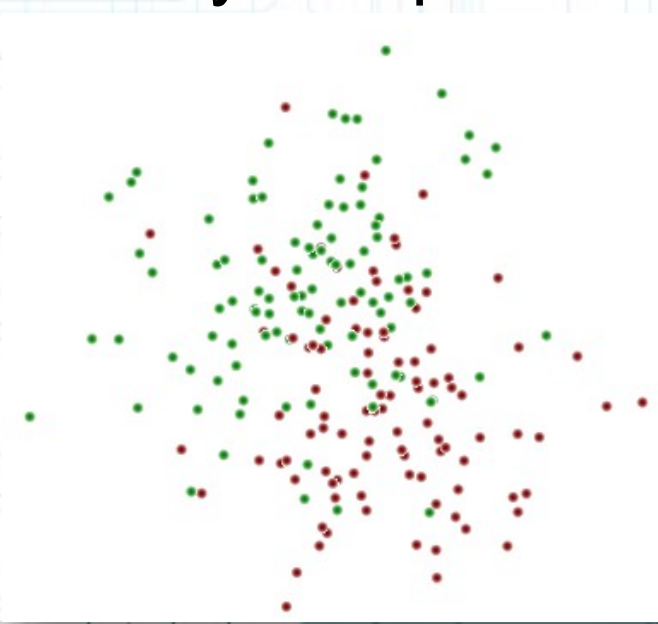
- Распространенный случай: заданы две таблицы, описывающие компоненты пары, с отношением "многие ко многим" и таблица с данными пар. Примеры:
  - (студент, дисциплина)
  - (покупатель, товар)
  - (пользователь, поисковой запрос)
  - (хеш-тег, документ)
  - (турист, гостиница)

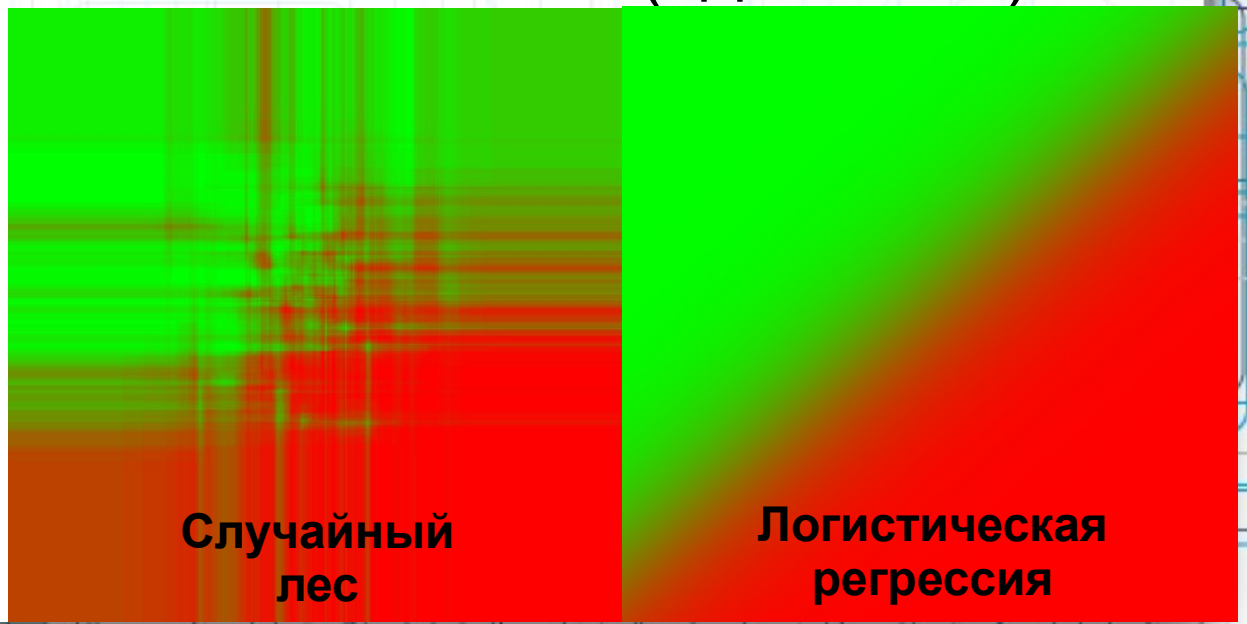
Признаки пар разнородных объектов

- Признаки компонент пары: группировка значений из одной таблицы по ключу другой и применение какой-нибудь операции (+, min, max, mean, exists,...)
- Пример: средний балл студента, средний балл дисциплины (сложность), наличие задолжников у дисциплины, …
- Совместные признаки компонент пары: оценка студента по предмету, отличие оценки от средней для данной дисциплины (или для данного студента)

Признаки пар однородных объектов

- Пример: пара товаров (какой понравится покупателю больше?), пара кандидатов (какой лучше?), пара студентов (кто сдаст экзамен лучше?)
- Методы, основанные на пороговых предикатах (градиентный бустинг деревьев), плохо воспринимают признаки компонент пары. Им нужны разности или отношения (вдобавок!).

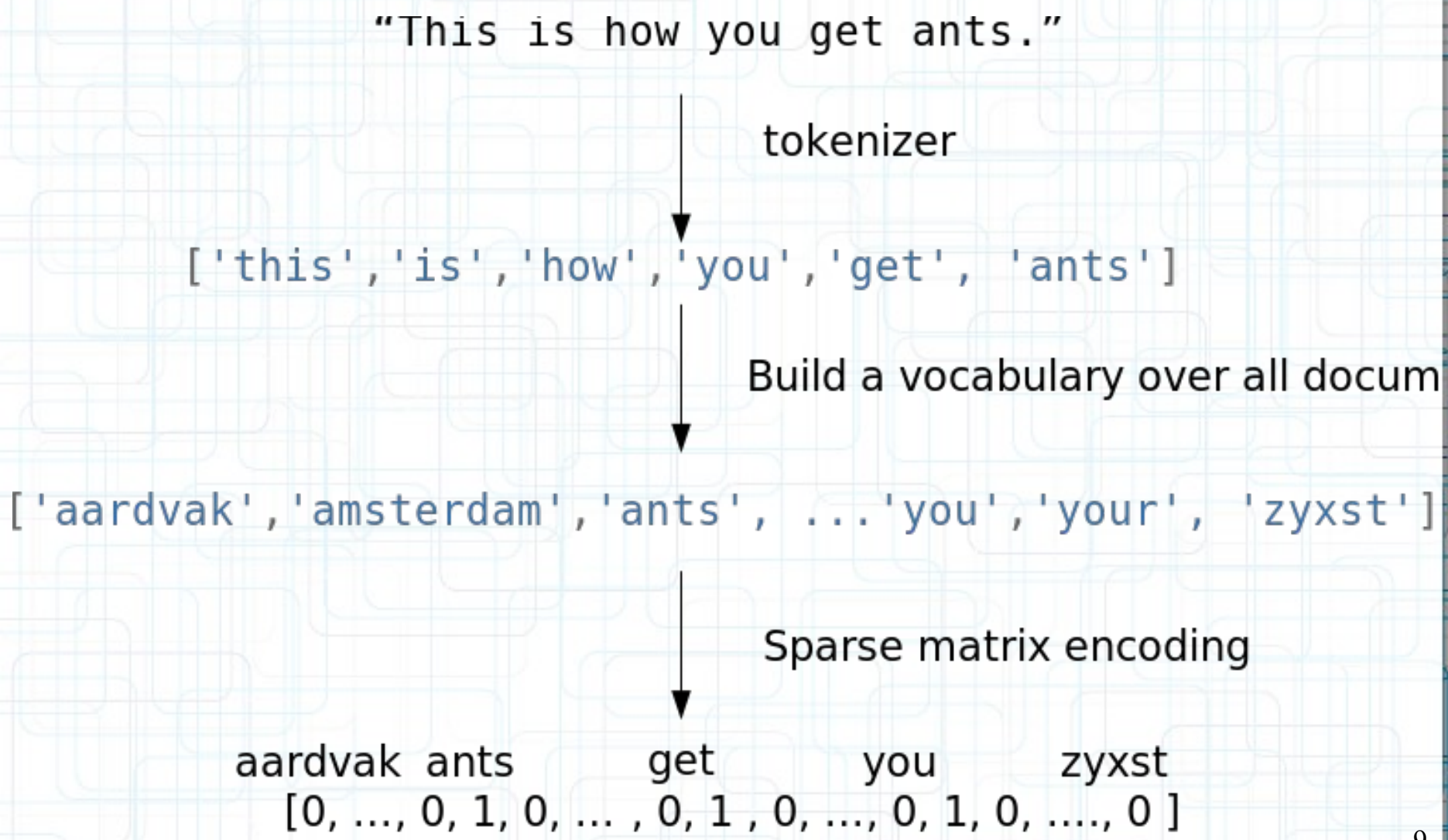




Признаки множеств

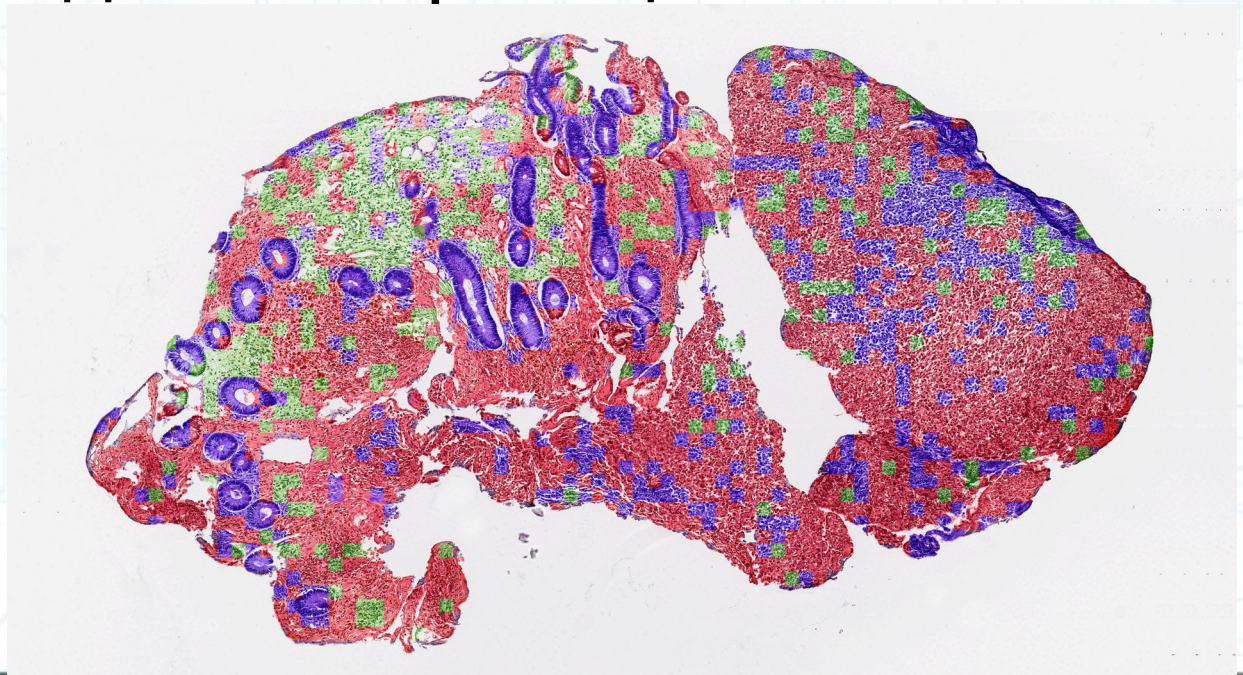
- Метод сумки (Bag of ...): описываем множество вектором, считая для каждого элемента количество его вхождений
- Примеры:
  - тексты – Bag of words
  - события – Bag of events
  - для покупателей – Bag of purchases

Bag of words


“This is how you get ants.”
tokenizer
['this','is','how','you','get', 'ants']
Build a vocabulary over all docum
['aardvak','amsterdam','ants', ...'you','your', 'zyxst']
Sparse matrix encoding
aardvak ants get you zyxst
[0, ..., 0, 1, 0, ... , 0, 1 , 0, ..., 0, 1, 0, ..., 0]

Признаки множеств

- Распространенная проблема: большое количество разнообразных элементов, иногда даже все уникальны
- Пример: задача диагностики типа рака (основана на пропорциях патологий). Каждый кусочек изображения уникален. Выход: кластеризация элементов



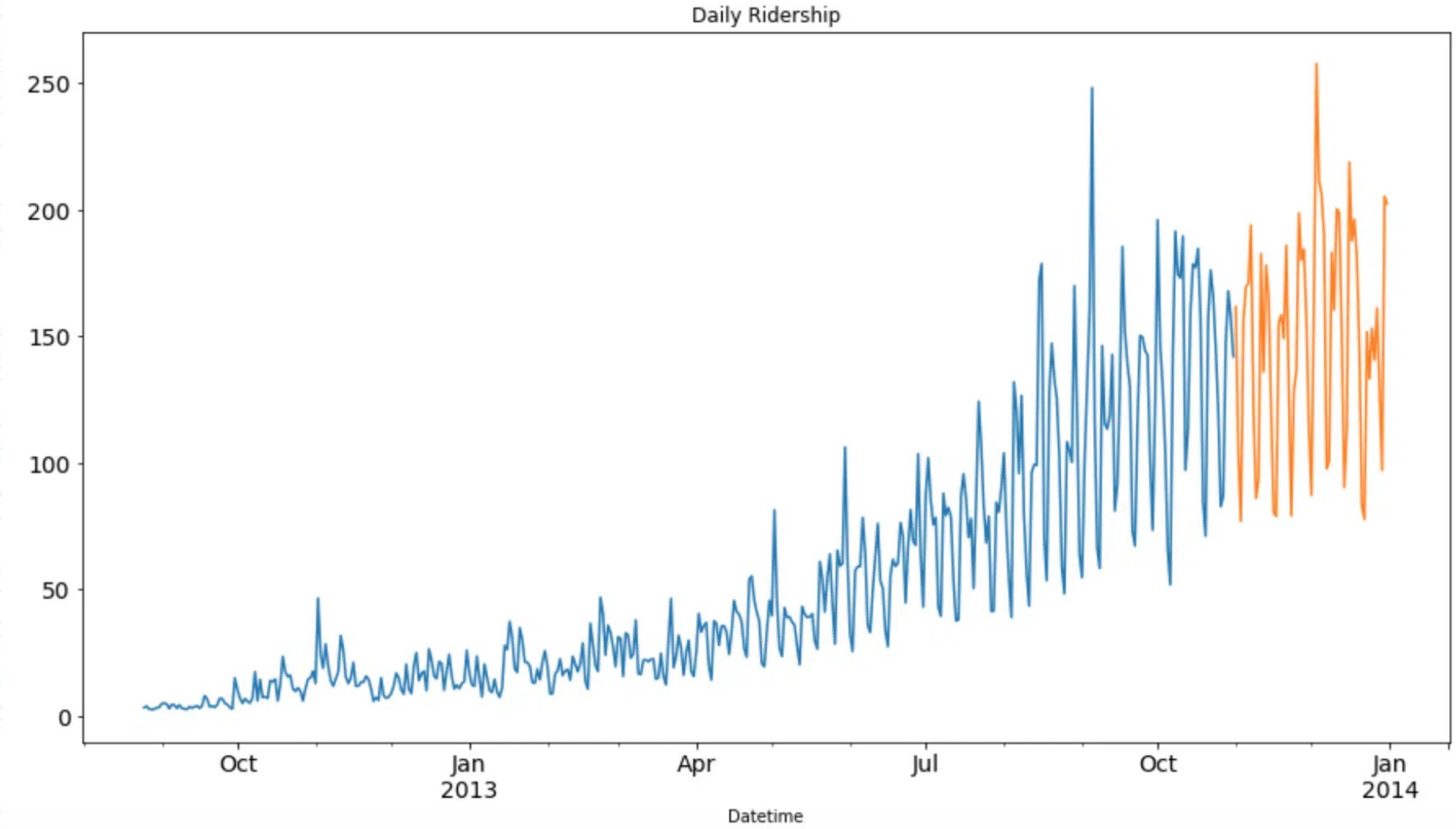
TF-IDF – выделение специфичных элементов

- Элементы, встречающиеся во всех множествах не так важны, как те, которые характеризуют лишь некоторые:
  TF-IDF = TF*IDF

$$\mathrm{TF} = \frac{n_i}{\sum_k n_k} \qquad \mathrm{IDF} = \log \frac{|D|}{|(d_i \supset t_i)|}$$

  - n_i – число вхождений i-того элемента во множество
  - $|d_i \supset t_i|$ - число множеств с элементом t_i
  - $|D|$ - количество множеств
- Пример: вычислите TF-IDF слова "нейросеть" в сообщении на форуме мехмата, если автор употребил его 2 раза в своем посте из 50 слов, а в общем на форуме оно встречается в 400 сообщениях из 10000

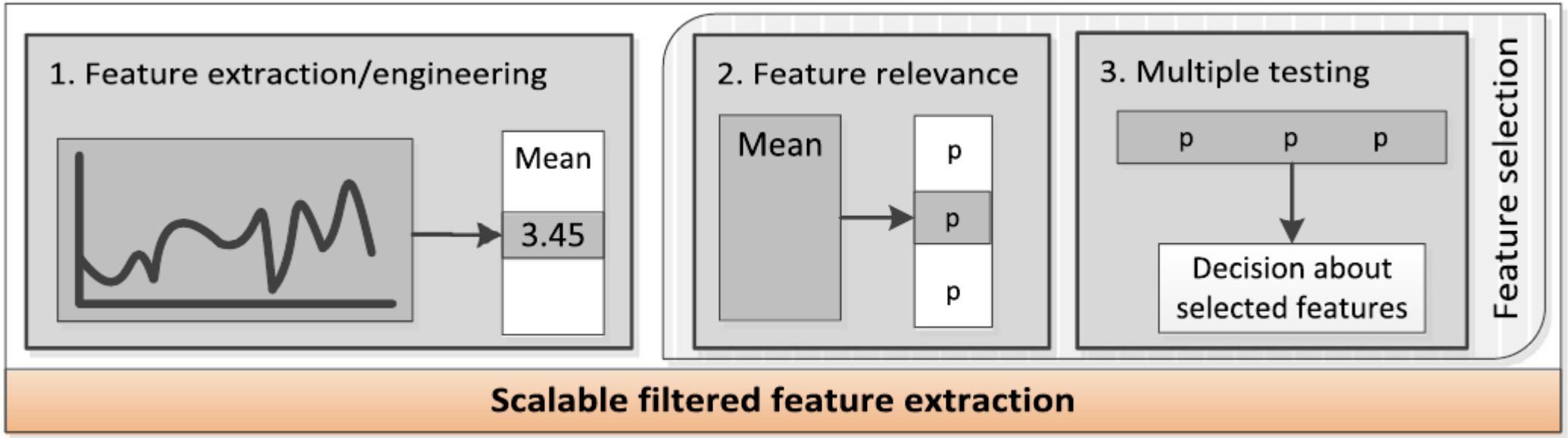
Последовательности данных во времени



Последовательности данных во времени

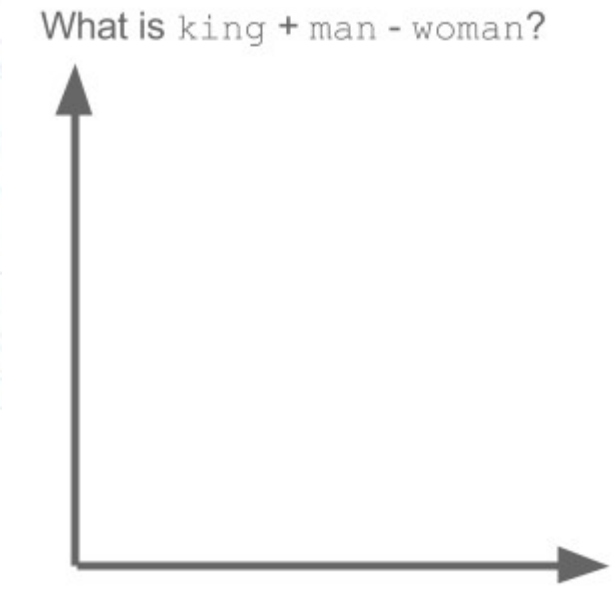
- набор последних значений
- mean/min/max за последние периоды
- экспоненциальное скользящее среднее
- тренд (коэффициенты линейной аппроксимации на последнем периоде)
- обобщение: коэф-ты авторегрессии
- количество пиков на последнем интервале
- вариация (интеграл от модуля производной)

TSFRESH – Python-библиотека для автоматического извлечения и отсева признаков временных рядов

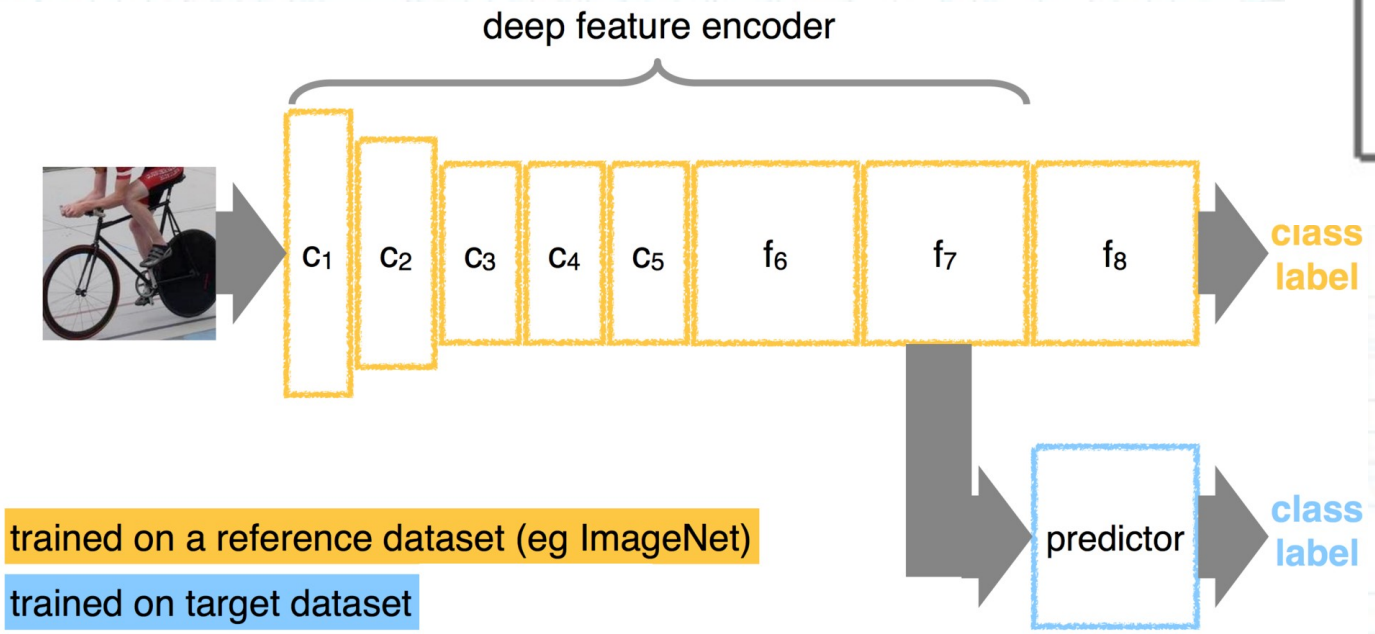


Тексты и изображения

- Word embeddings: Word2Vec (CBoW, skip-gram), GloVe (Global Vectors), Fasttext, ...



- Свертки изображений с ядрами, трансформеры



Бинаризация признаков (One Hot encoding)

- Пусть x - единственный признак (номинальный, закодированный: 0,1,2,...k)
- Классификатор: $a(x) = \text{sign}(wx+w_0)$
- Проблема линейных алгоритмов: вес w нельзя подобрать так, чтобы классификатор был не монотонным.
- Для любых w и w0 значения $a(x) > 0$ когда $x > w_0/w$ и $a(x) \leq 0$ в противном случае

Бинаризация признаков (One Hot encoding)

- Вместо одного номинального признака вводим k бинарных признаков. Пример (k=5):

	x1	x2	x3	x4	x5
Азов	0	0	0	0	1
Аксай	0	0	0	1	0
Ростов	0	0	1	0	0
Новочеркасск	0	1	0	0	0
Таганрог	1	0	0	0	0

- Возможна бинаризация и количественных признаков путем предварительной дискретизации

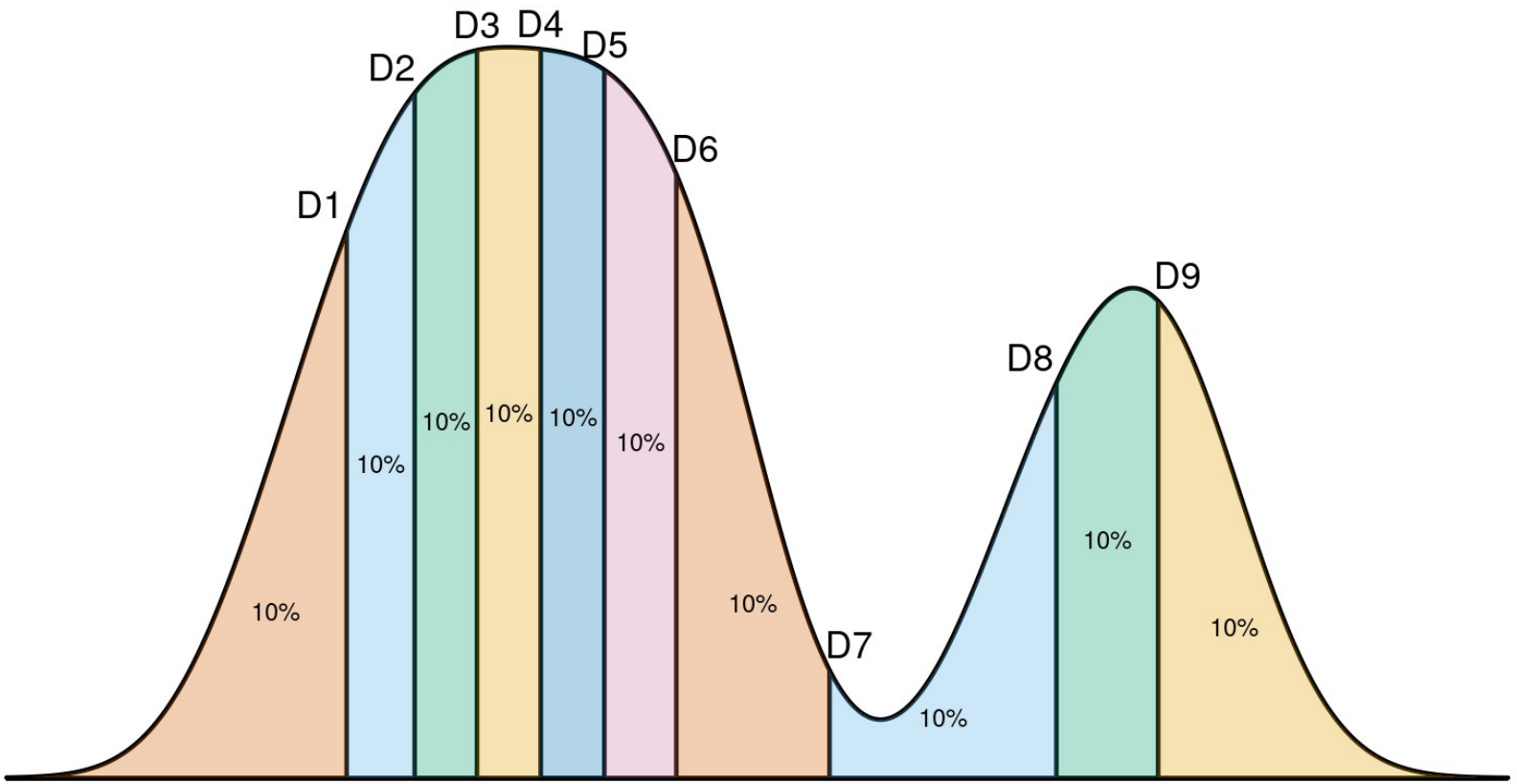
Скоринг

- Если все признаки – бинарные, то линейный классификатор удобно рассматривать как суммирование баллов (score): Sum += w_j, если x_j=1
- Рисунок – фрагмент скоринговой карты для вопроса о выдаче кредита

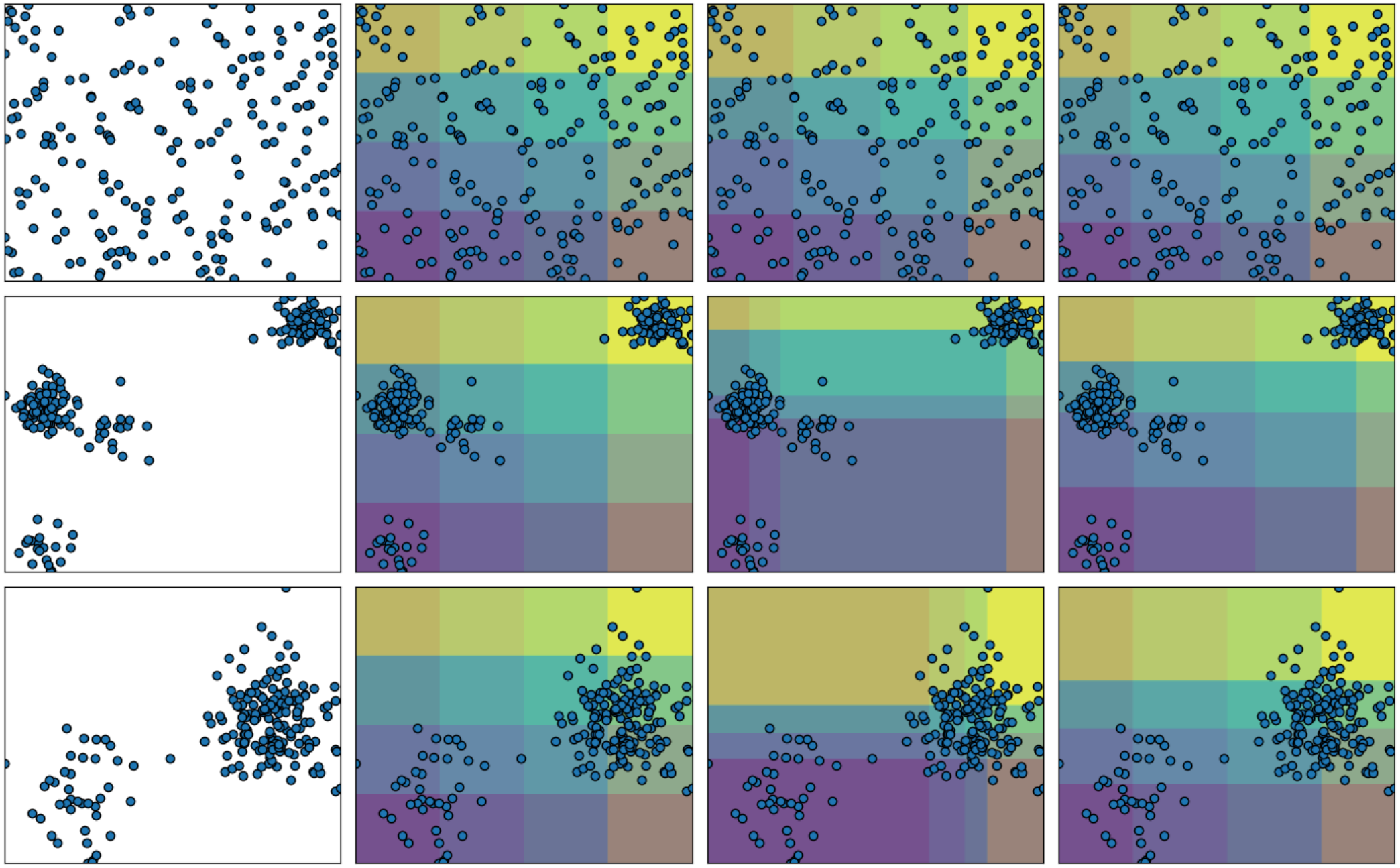
Возраст	до 25	5
	25 - 40	10
	40 - 50	15
	50 и больше	10
Собственность	владелец	20
	совладелец	15
	съемщик	10
	другое	5
Работа	руководитель	15
	менеджер среднего звена	10
	служащий	5
	другое	0
Стаж	1/безработный	0
	1..3	5
	3..10	10
	10 и больше	15
Работа_мужа /жены	нет/домохозяйка	0
	руководитель	10
	менеджер среднего звена	5
	служащий	1

Дискретизация признаков

- Квантильная дискретизация сохраняет равномерность ошибки оценки плотности вероятностей



Стратегии KBinsDiscretizer



Сингулярное разложение

Произвольная $\ell \times n$-матрица представима в виде *сингулярного разложения* (singular value decomposition, SVD):

$$F = VDU^{\mathsf{T}}.$$

Основные свойства сингулярного разложения:

1. $\ell \times n$-матрица $V = (v_1, \ldots, v_n)$ ортогональна, $V^{\mathsf{T}}V = I_n$, столбцы v_j — собственные векторы матрицы FF^{T};
2. $n \times n$-матрица $U = (u_1, \ldots, u_n)$ ортогональна, $U^{\mathsf{T}}U = I_n$, столбцы u_j — собственные векторы матрицы $F^{\mathsf{T}}F$;
3. $n \times n$-матрица D диагональна, $D = \operatorname{diag}\bigl(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_n}\bigr)$, $\lambda_j \geqslant 0$ — собственные значения матриц $F^{\mathsf{T}}F$ и FF^{T}.

Метод главных компонент (PCA)

- $f_1(x), \ldots, f_n(x)$ — исходные числовые признаки;
- $g_1(x), \ldots, g_m(x)$ — новые числовые признаки, $m<n$;
- Требование: старые признаки должны линейно восстанавливаться по новым:

$$\hat{f}_j(x) = \sum_{s=1}^{m} g_s(x) u_{js}, \quad j = 1, \ldots, n, \quad \forall x \in X$$

как можно точнее на обучающей выборке:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{n} \left(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i)\right)^2 \to \min_{\{g_s(x_i)\},\{u_{js}\}}$$

Постановка задачи PCA в матричной форме

$$\hat{F} = GU^{\mathsf{T}} \overset{\text{хотим}}{\approx} F$$

Найти: и новые признаки G , и преобразование U:

$$\sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{n}\left(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i)\right)^2 = \left\|GU^{\mathsf{T}} - F\right\|^2 \to \min_{G,U}$$

Теорема

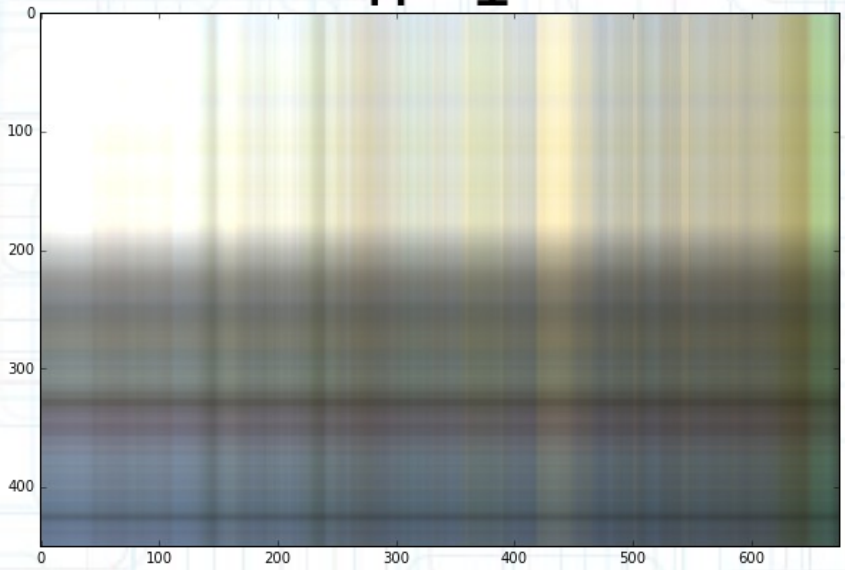
Если $m \leqslant \operatorname{rk} F$, *то минимум* $\left\| GU^{\mathrm{T}} - F \right\|^2$ *достигается, когда столбцы* U *— это с.в. матрицы* $F^{\mathrm{T}}F$, *соответствующие* m *максимальным с.з.* $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$, *а матрица* $G = FU$.

При этом:

1. *матрица* U *ортонормирована:* $U^{\mathrm{T}}U = I_m$;
2. *матрица* G *ортогональна:* $G^{\mathrm{T}}G = \Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$;
3. $U\Lambda = F^{\mathrm{T}}FU$; $G\Lambda = FF^{\mathrm{T}}G$;
4. $\left\| GU^{\mathrm{T}} - F \right\|^2 = \|F\|^2 - \operatorname{tr}\Lambda = \sum\limits_{j=m+1}^{n} \lambda_j$.

Применение SVD к сжатию изображений

n=1



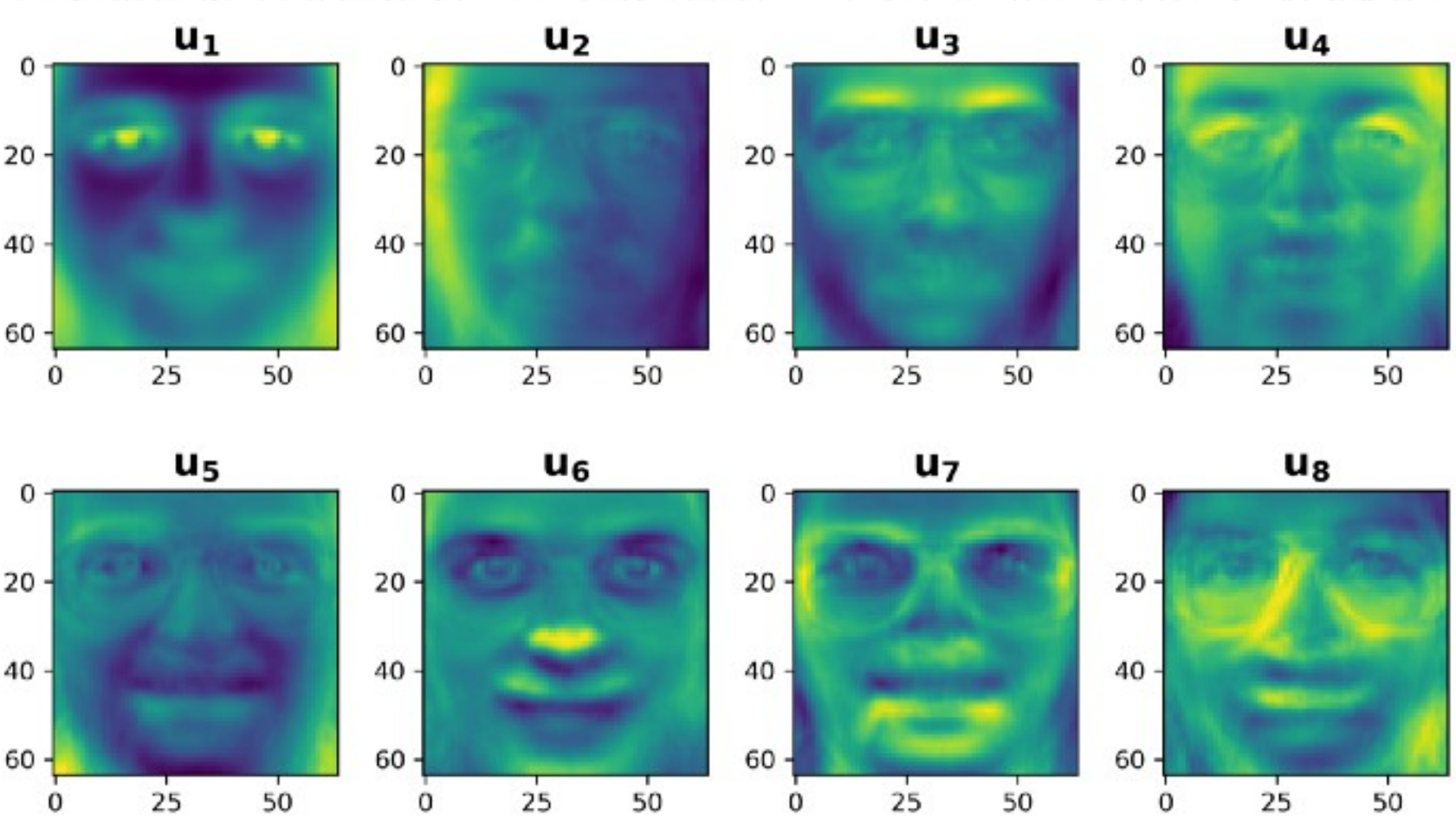
n=10

n=30

n=100

Главные компоненты датасета Olivetti faces

Показывают ортогональные направления, вдоль которых лица датасета меняются сильнее всего

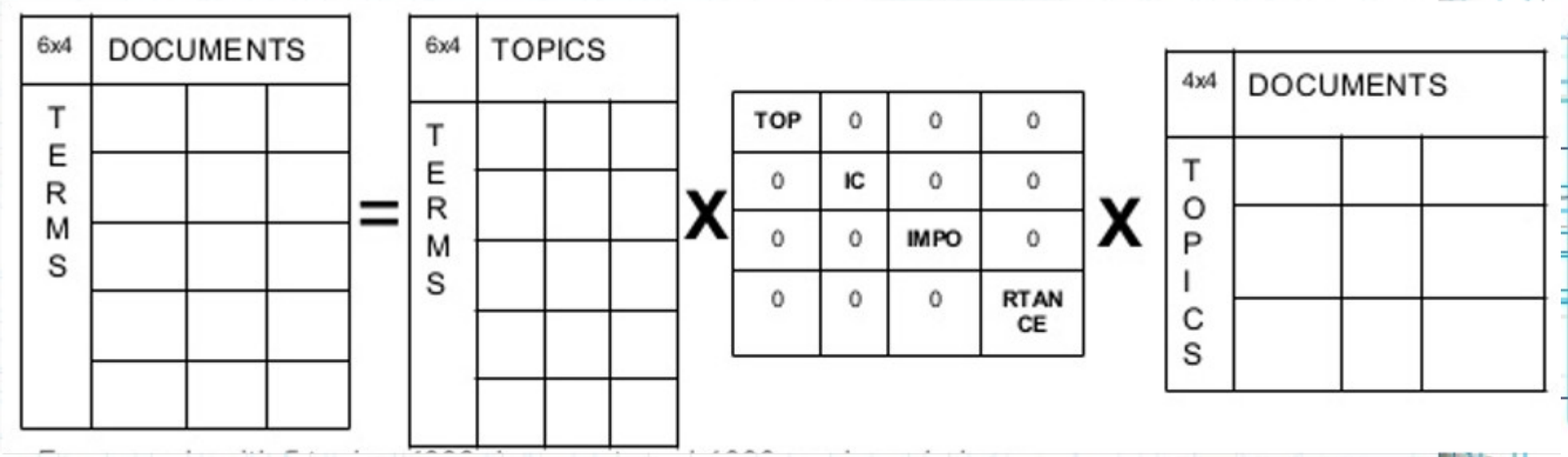


Применение к наборам текстов

$$\begin{matrix} & & \mathbf{d}_j \\ & & \downarrow \\ \mathbf{t}_i^T \rightarrow & \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m,1} & \cdots & x_{m,n} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

	D1	D2	D3	D4
linux	3	4	1	0
modem	4	3	0	1
the	3	4	4	3
clutch	0	1	4	3
steering	2	0	3	3
petrol	0	1	3	4

SVD-разложение Term-Document матрицы



Числа в диагональной матрице имеют смысл “важностей” тем в нашей коллекции документов

Пример

3	4	1	0
4	3	0	1
3	4	4	3
0	1	4	3
2	0	3	3
0	1	3	4

=

	To1	To2	To3	To4
Te1	-0.33	-0.53	0.37	-0.14
Te2	-0.32	-0.54	-0.49	0.35
Te3	-0.62	-0.10	0.26	-0.14
Te4	-0.38	0.42	0.30	-0.24
Te5	-0.36	0.25	-0.68	-0.47
Te6	-0.37	0.42	0.02	0.75

X

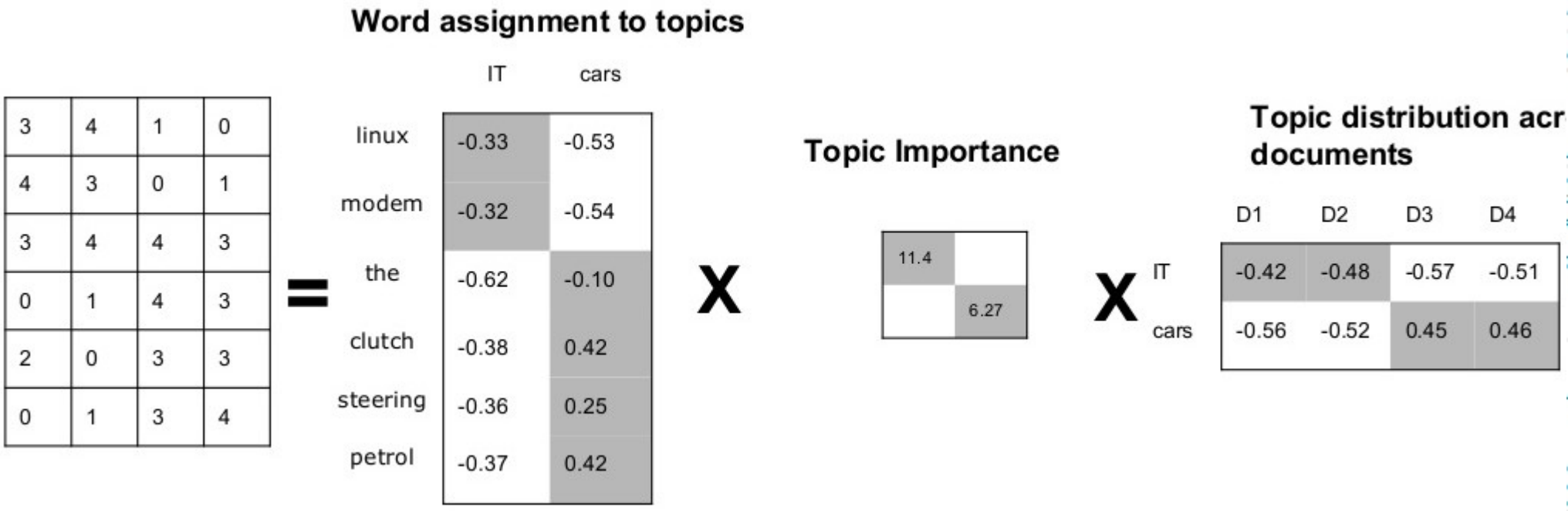
Topic Importance

11.4				
	6.27			
		2.22		
			1.28	

X

	D1	D2	D3	D4
To1	-0.42	-0.48	-0.57	-0.51
To2	-0.56	-0.52	0.45	0.46
To3	-0.65	0.62	0.28	-0.35
To4	-0.30	0.34	-0.63	0.63

Оставили только главные компоненты

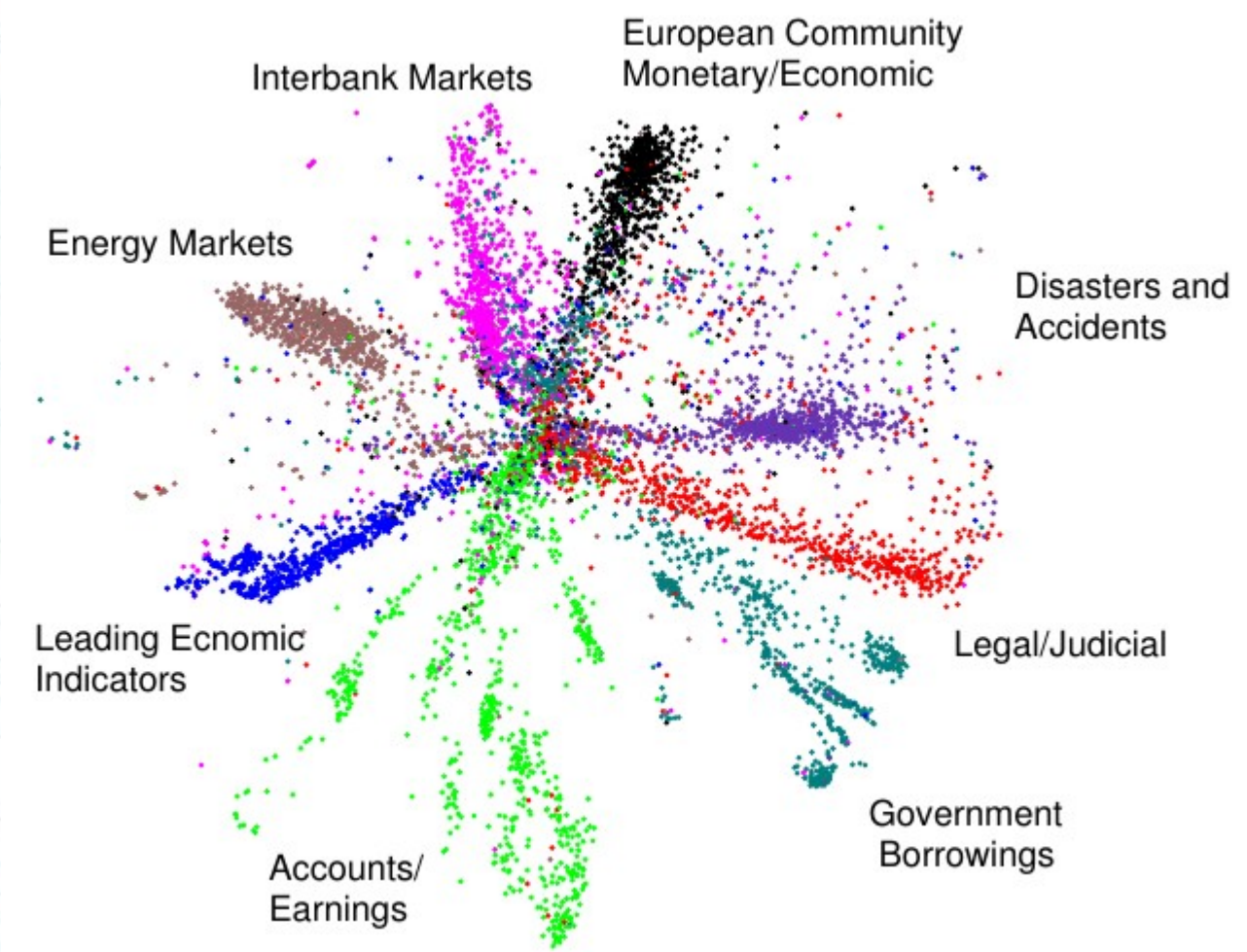


3	4	1	0
4	3	0	1
3	4	4	3
0	1	4	3
2	0	3	3
0	1	3	4

Пример работы
Самые весомые слова
в полученных темах новостей

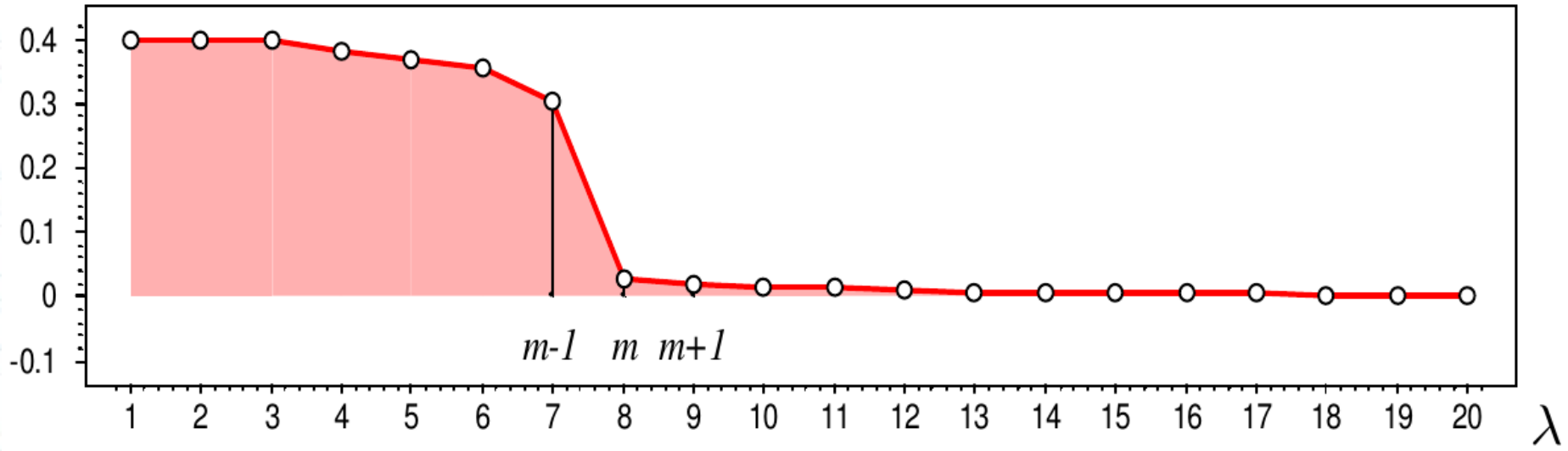
music band songs rock album jazz pop song singer night	book life novel story books man stories love children family	art museum show exhibition artist artists paintings painting century works	game knicks nets points team season play games night coach	show film television movie series says life man character know
theater play production show stage street broadway director musical directed	clinton bush campaign gore political republican dole presidential senator house	stock market percent fund investors funds companies stocks investment trading	restaurant sauce menu food dishes street dining dinner chicken served	budget tax governor county mayor billion taxes plan legislature fiscal

Пример работы 2
Визуализация документов



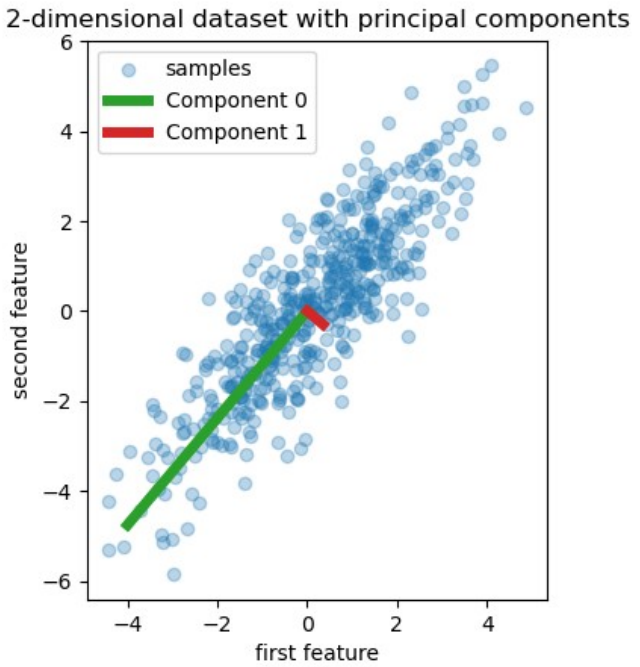
Сколько главных компонент брать?

- Критерий “крутого склона”:

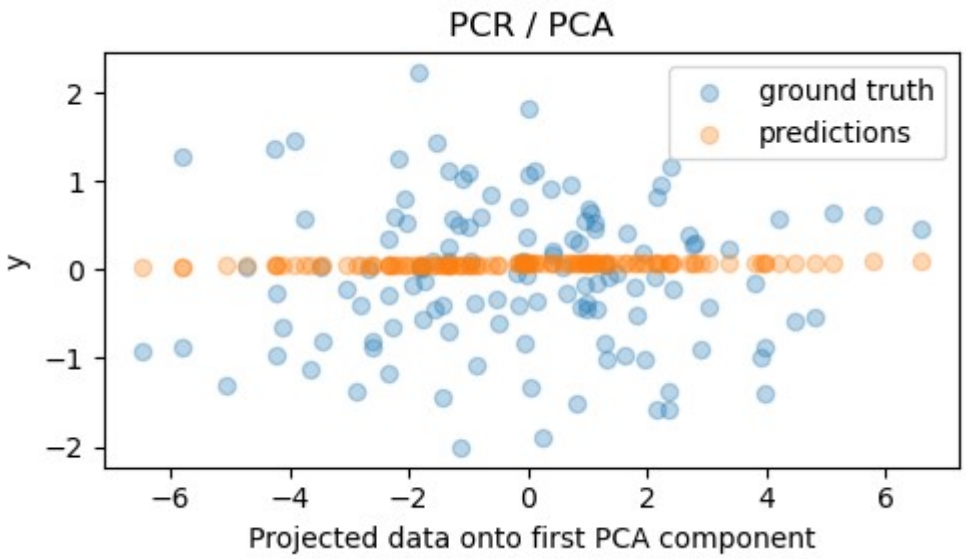


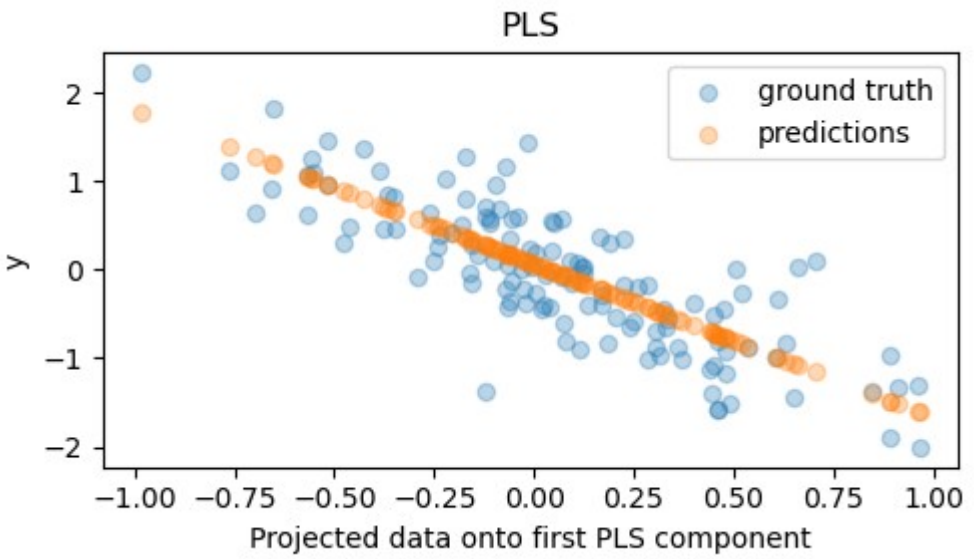
PLS - Partial Least Squares

- PCA находит компоненты, хорошо аппроксимирующи матрицу X, но не связанные с y



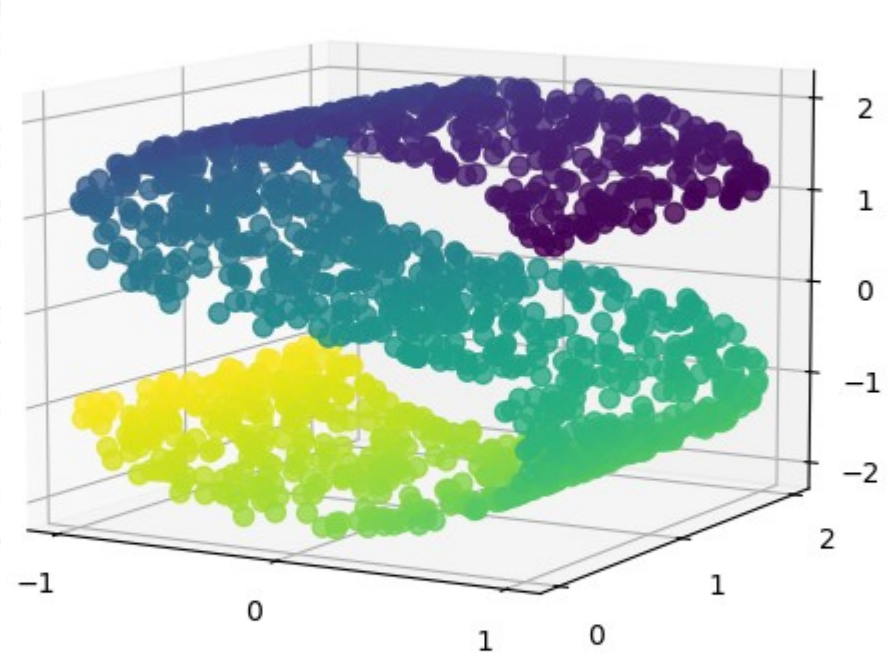
- Компоненты PLS ищутся из условия максимизации корреляций с y





Другие embeddings

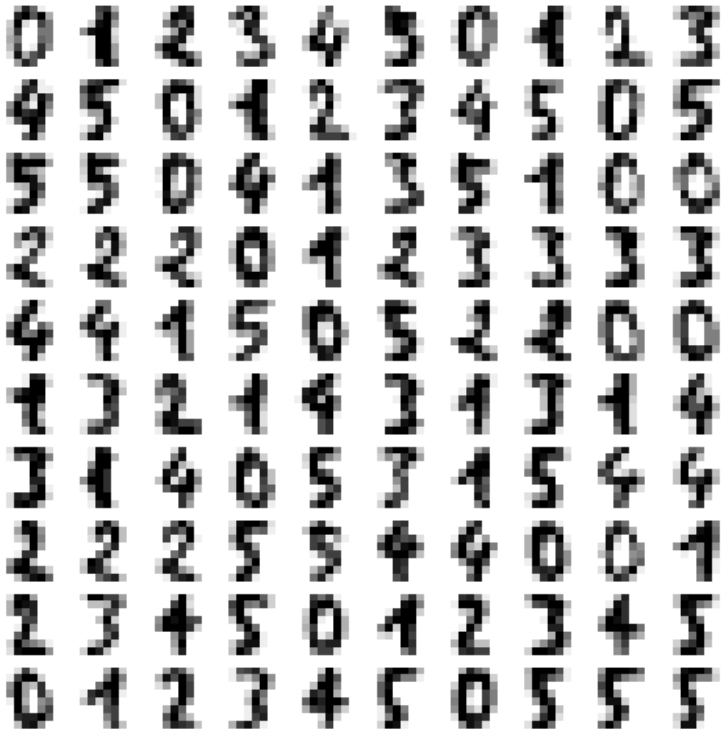
- Многомерность многих датасетов искусственно завышена. Пример: наблюдаемый набор данных физического эксперимента, в котором все зависит от двух варьирующихся параметров



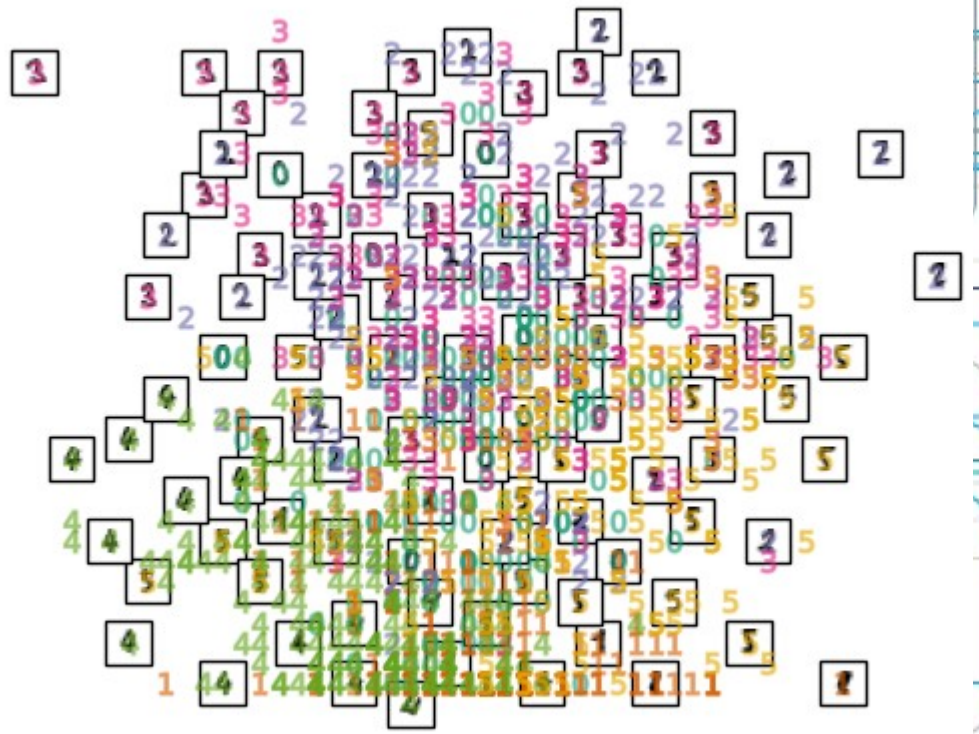
Другие embeddings

- Проекция датасета на случайные ортогональные вектора – не самый хороший способ уменьшения размерности

A selection from the 64-dimensional digits dataset

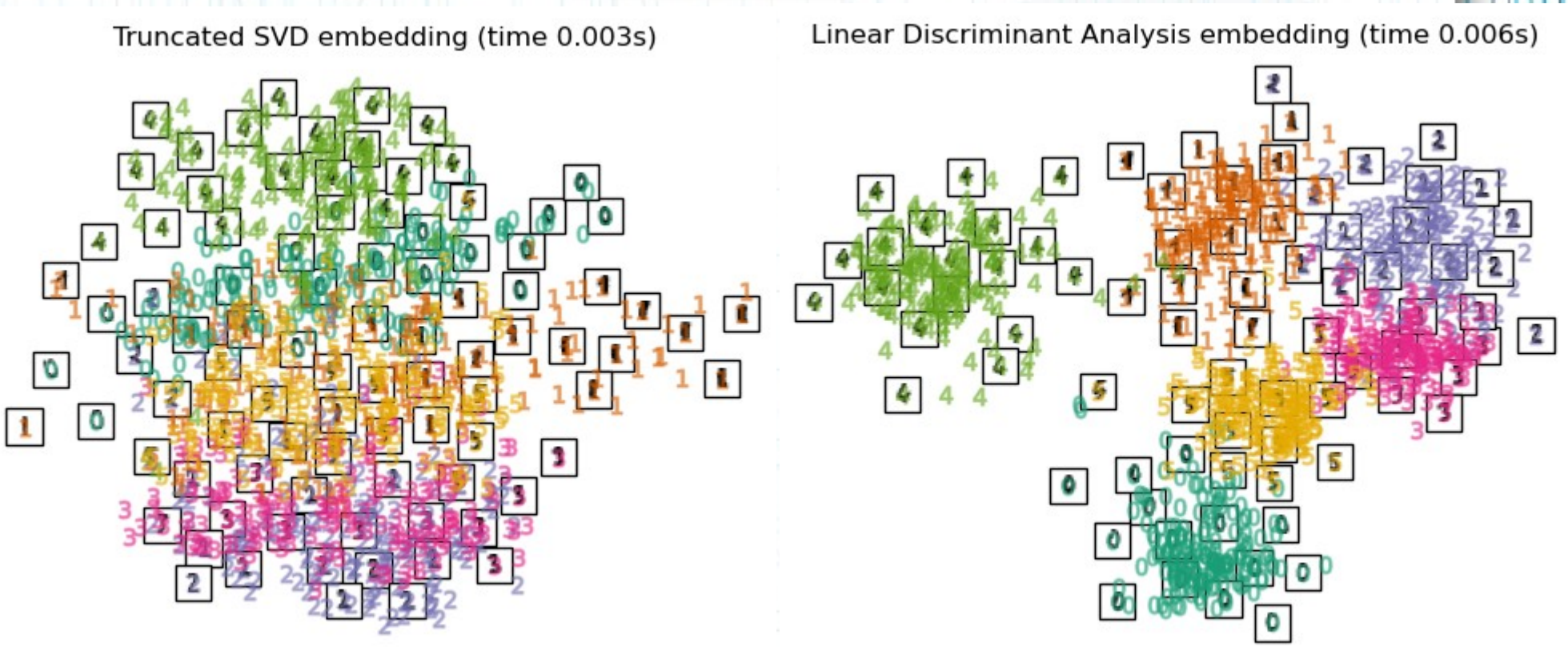


Random projection embedding (time 0.001s)



Другие embeddings

- Выбор PCA/PLS или LDA направлений позволяет получить более "интересные" результаты



LDA – линейный дискриминантный анализ

- Моделирование распределения объектов в классах многомерными нормальными распределениями с общей ковариационной матрицей

$$P(x|y=k) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Sigma_k|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^t \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k)\right)$$

- В качестве "главных направлений" выбираются вектора, проекции μ_k на которые имеют максимальную вариацию

MDS – многомерное шкалирование

- Находит преобразование пространства объектов в пространство меньшей размерности, сохраняющее расстояния между объектами.
- Многие методы оптимизируют функционал стресса:

$$S(X^\ell) = \sum_{(i,j)\in D} w_{ij}(d_{ij} - R_{ij})^2 \to \min$$

R_{ij} – исходные расстояния
d_{ij} – расстояния в пространстве меньшей размерности
w_{ij} – неизвестные веса

tSNE – стохастическое вложение соседей с t-распределением

- Похожесть точки данных x_j точке x_i является условной вероятностью $p_{j|i}$, что для x_i будет выбрана x_j в качестве соседней точки, если соседи выбираются пропорционально их гауссовой плотности вероятности с центром в x_i

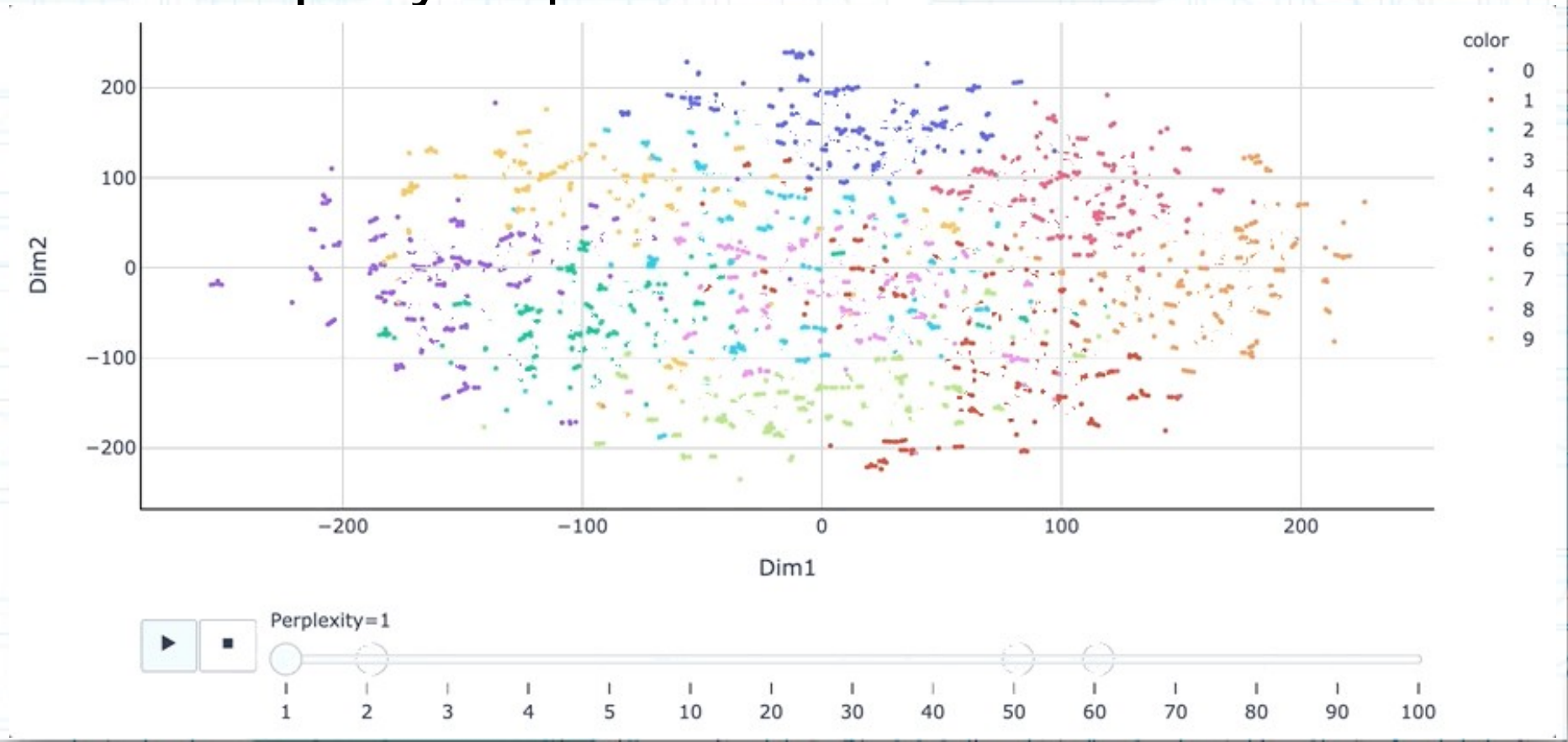
$$p_{j|i} = \frac{\exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / 2\sigma_i^2)}{\sum_{k \neq i} \exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k\|^2 / 2\sigma_i^2)},$$

- В пространстве меньшей размерности для расчета похожести $q_{j|i}$ применяется t-распределение Стьюдента
- Расположение точек в пространстве меньшей размерности итерационно подбирается минимизацией расстояния Кульбака — Лейблера

$$KL(P||Q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}$$

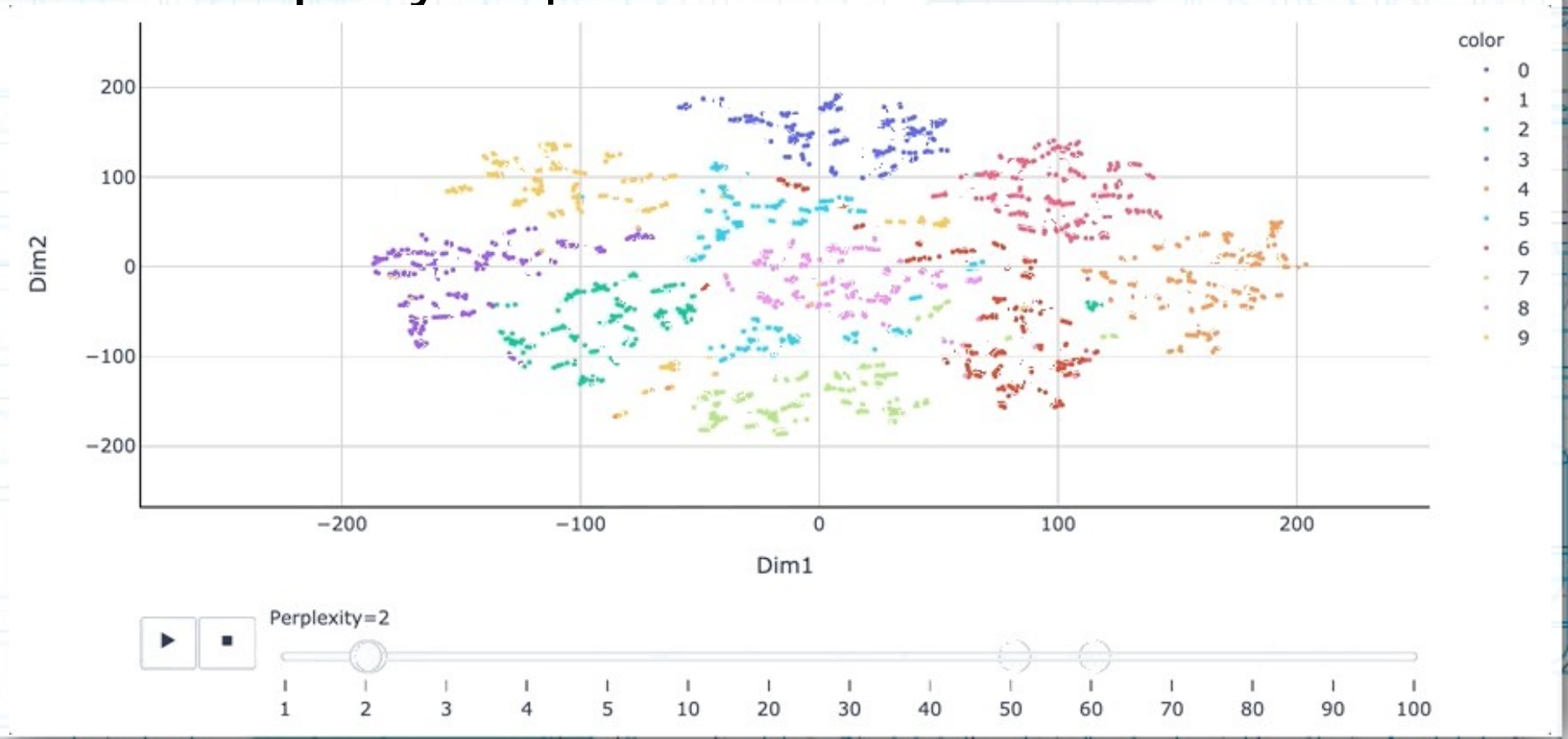
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



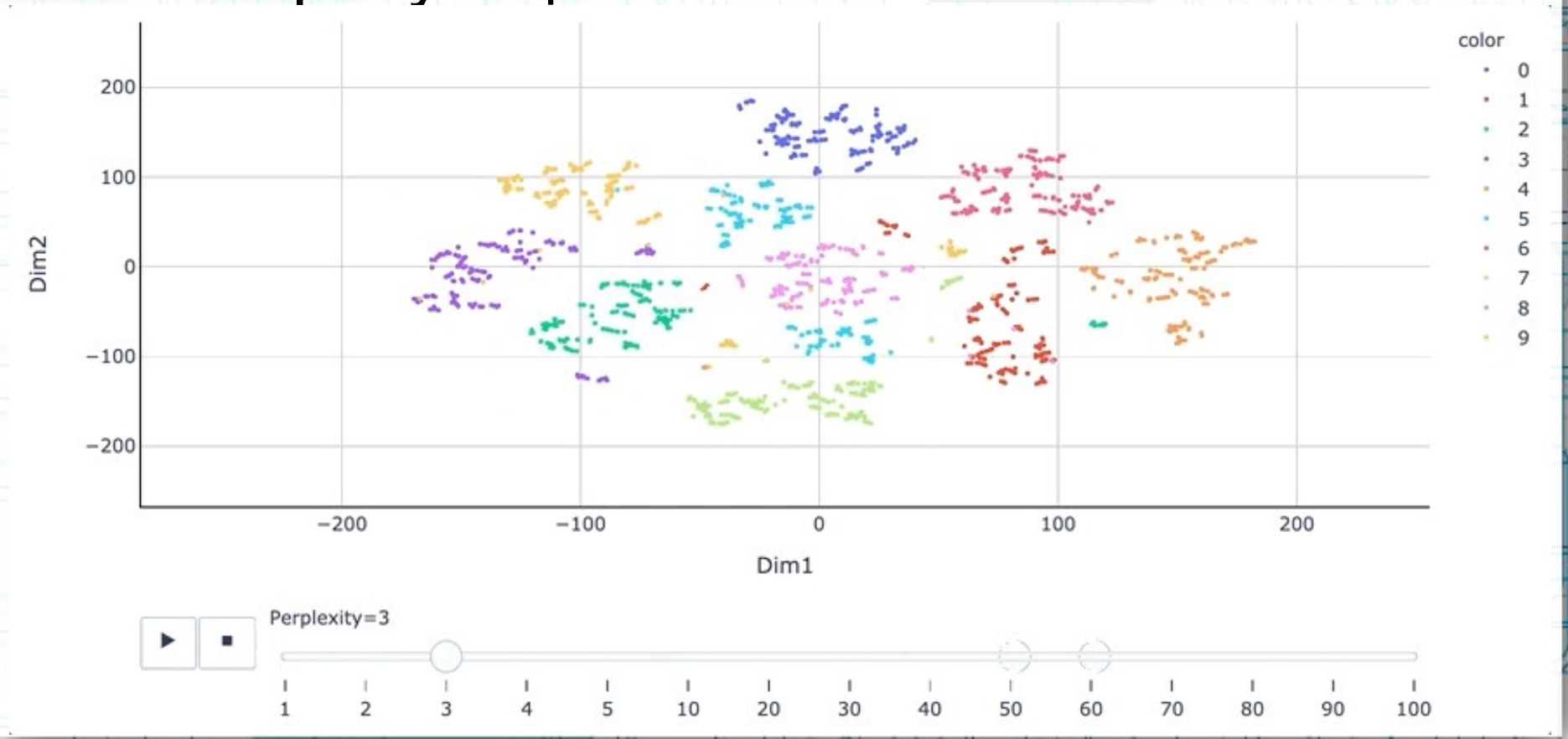
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



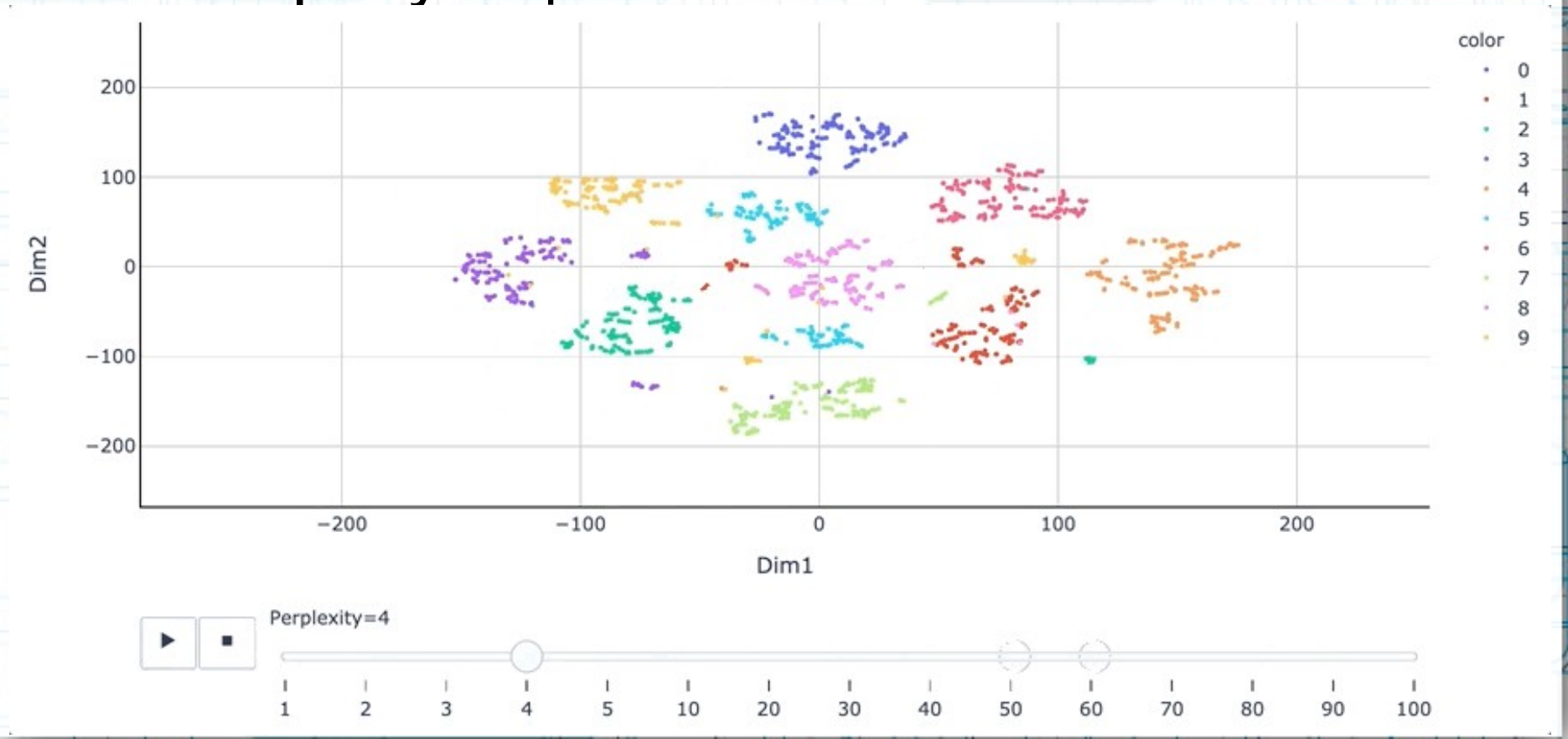
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



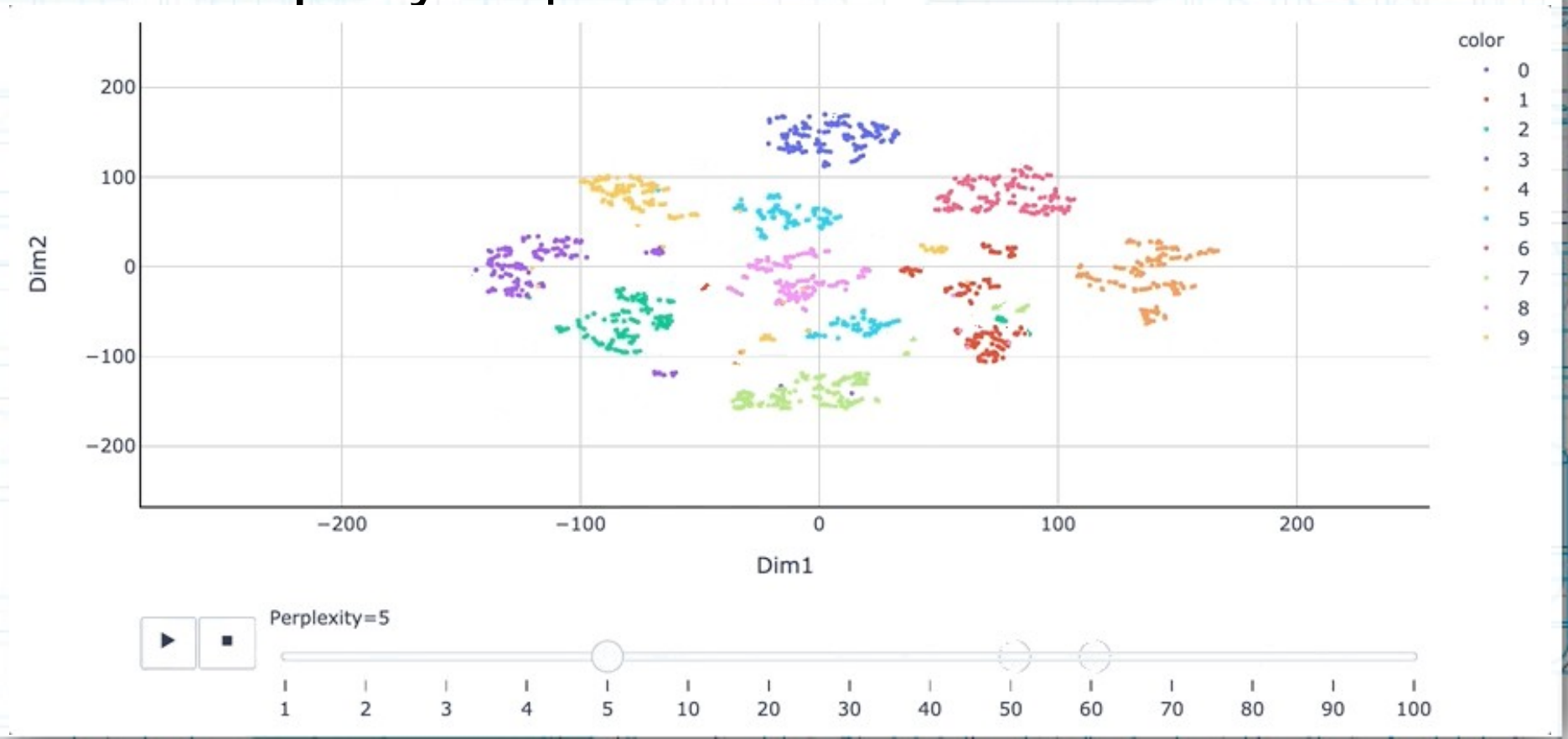
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



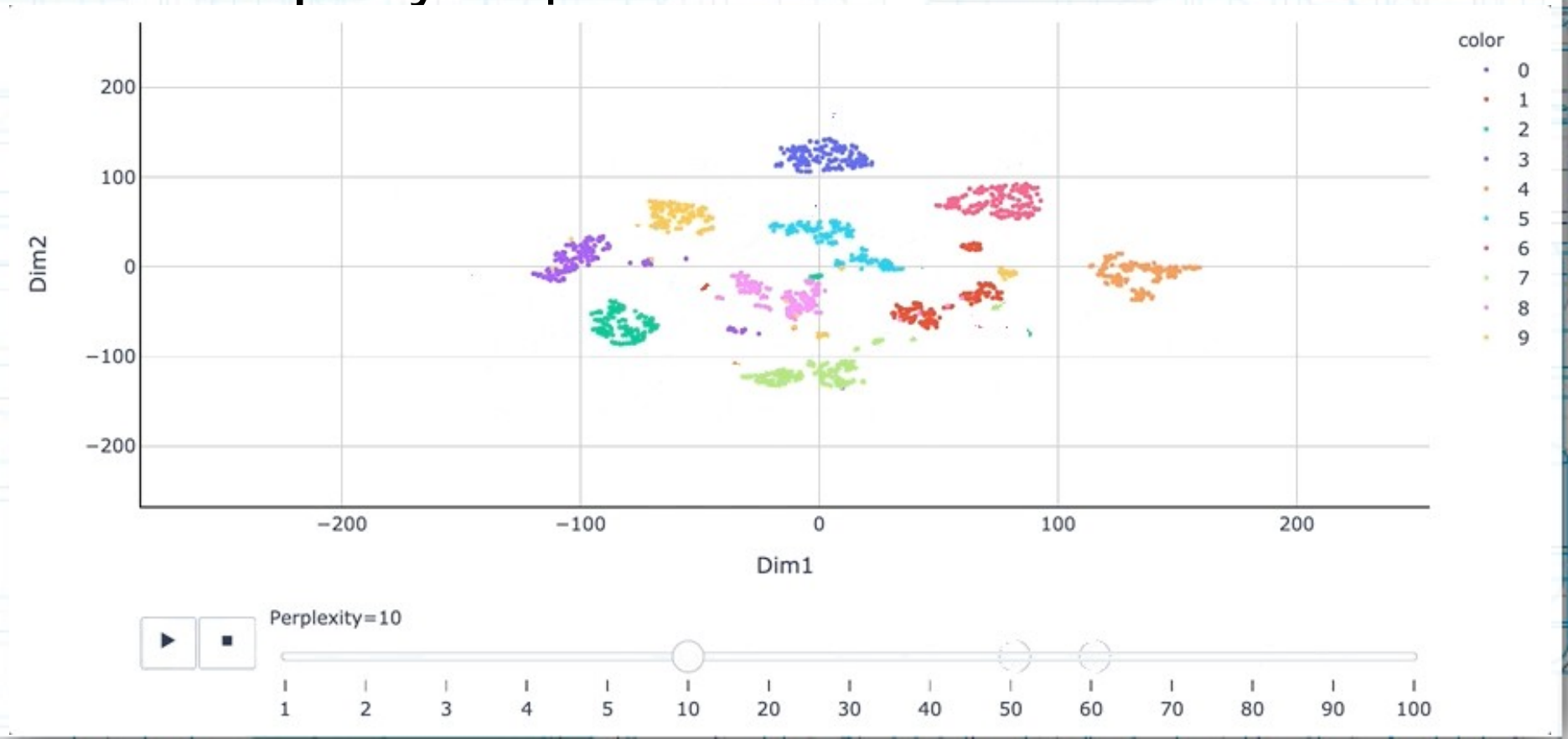
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



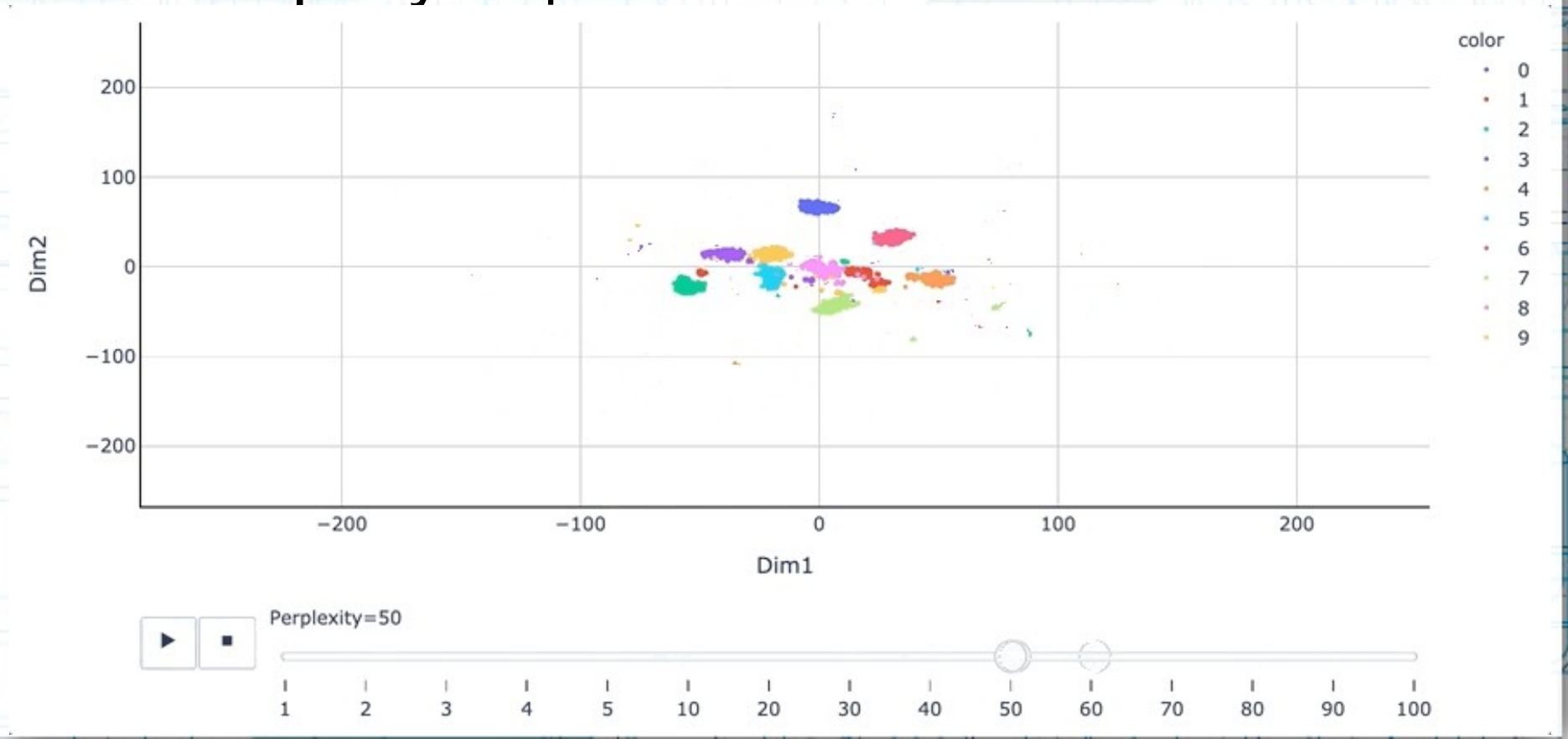
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



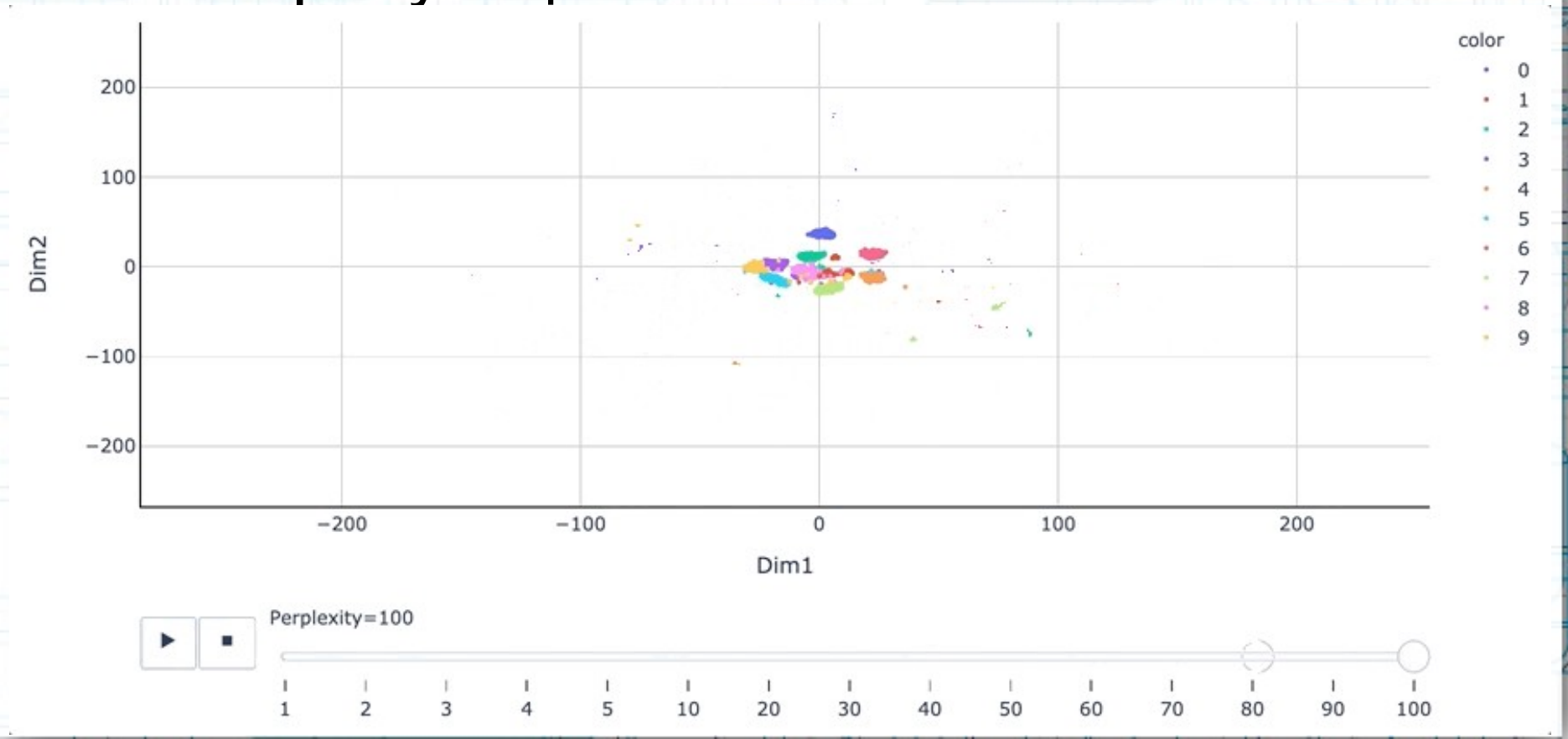
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



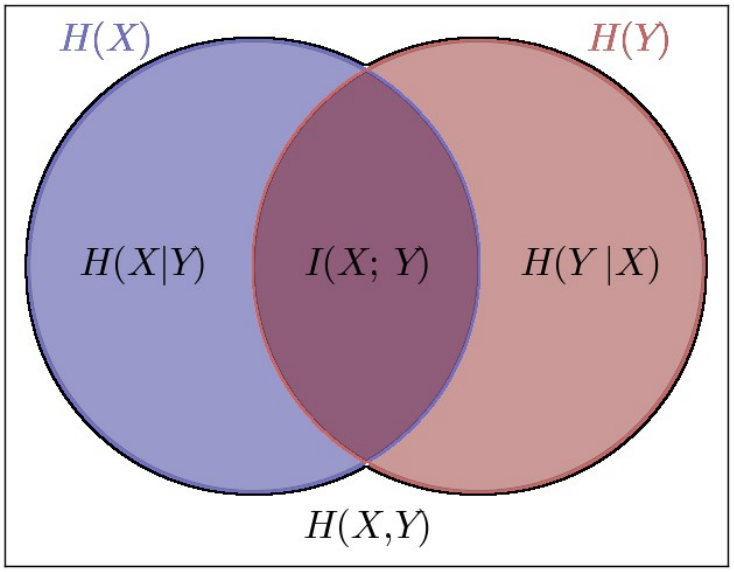
Перплексия в tSNE

- Регулирует ожидаемую плотность вокруг каждой точки или, другими словами, устанавливает соотношение целевого количества ближайших соседей к интересующей точке.



Взаимная информация

Взаимная информация описывает количество информации, содержащееся в одной случайной величине относительно другой.
Она определяется через энтропию и условную энтропию двух случайных величин



$$I(X;Y) = H(X) - H(X/Y)$$

$$I(X;Y) = H(Y) - H(Y/X)$$

$$I(X;Y) = H(X) + H(Y) - H(X,Y)$$

$$I(X;Y) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p(x_i, y_j) \log \frac{p(x_i/y_j)}{p(x_i)} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p(x_i, y_j) \log \frac{p(y_j/x_i)}{p(y_j)}$$

Задачи на экзамен

- Придумайте алгоритм извлечения признаков из геоданных (широта, долгота)
- Извлеките хорошие признаки по наборам взаимодействий пользователей с сайтом мехмата (множество действий и их временных меток)
- По данным из системы БРС в течении семестра предскажите оценки студентов на сессии. Объектом является пара (студент, дисциплина). Данные содержат баллы и временные метки, заносимые преподавателем в БРС в течении семестра
- Придумайте хорошие признаки, описывающие посетителя сайта по данным из HTTP-заголовков User Agent, Referer и IP-адреса