Лекция 4
Линейные методы регрессии. Часть 2.

Кантонистова Е.О.

ВШЭ, 2022

ПЛАН ЛЕКЦИИ

- метрики качества и функционалы ошибки в задаче регрессии; бизнес-метрики
- признаки переобученной модели и методы выявления переобучения и борьбы с ним: кросс-валидация и регуляризация, полезное свойство l1-регуляризации

1. МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИОНАЛЫ ОШИБКИ
В ЗАДАЧАХ РЕГРЕССИИ

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИИ ОШИБКИ

- **Функционал (функция) ошибки –** функция, которую минимизируют в процессе обучения модели для нахождения неизвестных параметров (весов).
- **Метрика качества –** функция, которую используют для оценки качества построенной (уже обученной) модели.

МЕТРИКИ КАЧЕСТВА И ФУНКЦИИ ОШИБКИ

- **Функционал (функция) ошибки –** функция, которую минимизируют в процессе обучения модели для нахождения неизвестных параметров (весов).
- **Метрика качества –** функция, которую используют для оценки качества построенной (уже обученной) модели.

Иногда одна и та же функция может использоваться и для обучения модели (функция ошибки), и для оценки качества модели (метрика качества).

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x_j$$

Обучение линейной регрессии - минимизация среднеквадратичной ошибки:

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

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\boldsymbol{(a(x_i) - y_i)^2}$$

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i}) - \boldsymbol{y_i})^2$$

Плюсы:

- Позволяет сравнивать модели
- Подходит для контроля качества во время обучения

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE

Среднеквадратичное отклонение:

$$MSE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{y}_i)^2$$

Плюсы:

- Позволяет сравнивать модели
- Подходит для контроля качества во время обучения

Минусы:

- Плохо интерпретируется, т.к. не сохраняет единицы измерения (если целевая переменная – кг, то MSE измеряется в кг в квадрате)
- Тяжело понять, насколько хорошо данная модель решает задачу, так как MSE не ограничена сверху.

RMSE (ROOT MEAN SQUARED ERROR)

Корень из среднеквадратичной ошибки:

$$RMSE(a, X) = \sqrt{\frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}$$

Плюсы:

- Все плюсы MSE
- **Сохраняет единицы измерения (в отличие от MSE)**

Минусы:

- Тяжело понять, насколько хорошо данная модель решает задачу, так как RMSE не ограничена сверху.

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

$$R^2(a, X) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}{\boldsymbol{\sum_{i=1}^{l}(y_i - \overline{y})^2}},$$

где $\overline{y} = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$.

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

$$R^2(a, X) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{l}(a(x_i) - y_i)^2}{\boldsymbol{\sum_{i=1}^{l}(y_i - \overline{y})^2}},$$

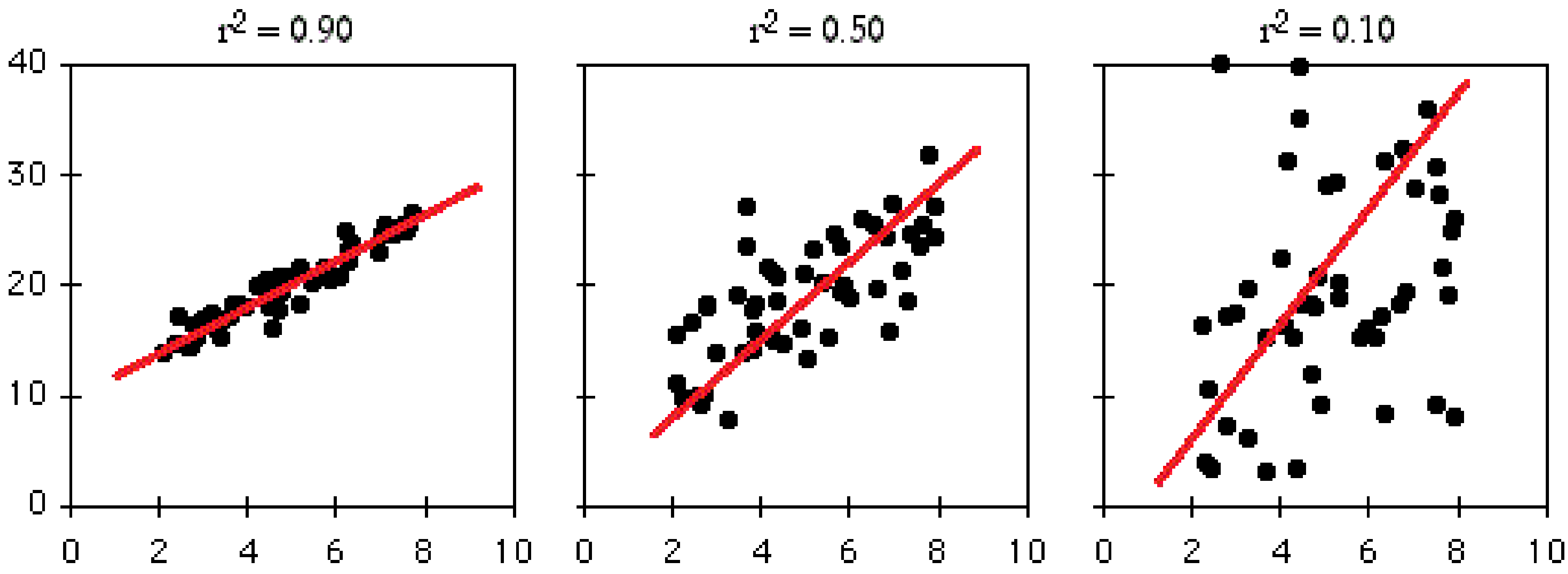
где $\overline{y} = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} y_i$.

Коэффициент детерминации <u>это доля дисперсии целевой переменной, объясняемая моделью</u>.

- Чем ближе R^2 к 1, тем лучше модель объясняет данные
- Чем ближе R^2 к 0, тем ближе модель к константному предсказанию
- Отрицательный R^2 говорит о том, что модель плохо решает задачу

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

$$\boldsymbol{R^2 \leq 1}$$



MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i}) - \boldsymbol{y_i}|$$

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a(x_i) - y_i}|$$

Плюсы:

- Менее чувствителен к выбросам, чем MSE

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE(a, X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} |\boldsymbol{a(x_i) - y_i}|$$

Плюсы:

- Менее чувствителен к выбросам, чем MSE

Минусы:

- MAE - не дифференцируемый функционал

ОПТИМУМЫ MSE И MAE

Рассмотрим вероятностную постановку задачи. Предположим, что на объектах с одинаковым признаковым описанием могут быть разные ответы. В этом случае на всех таких объектах MSE (или MAE) должна выдать один и тот же ответ.

Теорема. Пусть даны l объектов с одинаковым признаковым описанием и значениями целевой переменной $y_1, \dots, y_l$. Тогда:

1. Оптимум MSE достигается на среднем значении ответов:

$$\boldsymbol{\alpha_{MSE} = \sum_{i=1}^{l} y_i}$$

2. Оптимум MAE достигается на медиане ответов:

$$\boldsymbol{\alpha_{MAE} = median\{y_1, \dots, y_l\}}$$

MSLE (MEAN SQUARED LOGARITHMIC ERROR)

Среднеквадратичная логарифмическая ошибка:

$$MSLE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\left(\mathbf{\log(a(x_i) + 1) - \log(y + 1)}\right)^{\mathbf{2}}$$

- Подходит для задач с неотрицательной целевой переменной ($y \geq 0$)
- Штрафует за отклонения в порядке величин
- Штрафует заниженные прогнозы сильнее, чем завышенные

MAPE

MAPE – Mean Absolute Percentage Error:

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|}{|\boldsymbol{y_i}|}$$

MAPE измеряет относительную ошибку.

MAPE

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \frac{|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|}{|\boldsymbol{y_i}|}$$

Плюсы:

- Ограничена: $0 \leq MAPE \leq 1$
- Хорошо интерпретируема: например, MAPE=0.16 означает, что ошибка модели в среднем составляет 16% от фактических значений.

MAPE

$$MAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|}{|\boldsymbol{y_i}|}$$

Плюсы:

- Ограничена: $0 \leq MAPE \leq 1$
- Хорошо интерпретируема: например, MAPE=0.16 означает, что ошибка модели в среднем составляет 16% от фактических значений.

Минусы:

- По-разному относится к недо- и перепрогнозу. Например, если правильный ответ $y = 10$, а прогноз $a(x) = 20$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10|} = \mathbf{1}$, а если ответ $y = 30$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30|} = \frac{1}{3} \approx \mathbf{0.33}$.

SMAPE

SMAPE – *Symmetric Mean Absolute Percentage Error* (симметричный вариант MAPE):

$$SMAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}\frac{|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|}{(|\boldsymbol{y_i}| + |\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|)/\boldsymbol{2}}$$

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

SMAPE

SMAPE – *Symmetric Mean Absolute Percentage Error* (симметричный вариант MAPE):

$$SMAPE(a, X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} \frac{|\boldsymbol{y_i} - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|}{(|\boldsymbol{y_i}| + |\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x_i})|)/\boldsymbol{2}}$$

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

<u>Проверим:</u>

Пусть правильный ответ $\boldsymbol{y} = \mathbf{10}$, а прогноз $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{20}$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx \mathbf{0.67}$, а если ответ $\boldsymbol{y} = \mathbf{30}$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = \mathbf{0.4}$.

SMAPE

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

<u>Проверим:</u>

Пусть правильный ответ $\boldsymbol{y = 10}$, а прогноз $\boldsymbol{a(x) = 20}$, то ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx \boldsymbol{0.67}$, а если ответ $\boldsymbol{y = 30}$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = \boldsymbol{0.4}$.

Ошибки стали меньше отличаться друг от друга, но всё-таки не равны.

SMAPE

SMAPE – попытка сделать симметричным прогноз (то есть дать одинаковую ошибку для недо- и перепрогноза).

“Сейчас уже в среде прогнозистов сложилось более-менее устойчивое понимание, что SMAPE не является хорошей ошибкой. Тут дело не только в завышении прогнозов, но ещё и в том, что наличие прогноза в знаменателе позволяет манипулировать результатами оценки.” (см. источник)

КВАНТИЛЬНАЯ РЕГРЕССИЯ

Квантильная функция потерь:

$$Q(a, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \rho_\tau(y_i - a(x_i))$$

Здесь

$$\rho_\tau(z) = (\tau - 1)[z < 0]z + \tau[z \geqslant 0]z = (\tau - \frac{1}{2})z + \frac{1}{2}|z|$$

Параметр $\tau \in [0; 1]$.

- Чем больше τ, тем больше штрафуем за занижение прогноза.

ВЕРОЯТНОСТНЫЙ СМЫСЛ КВАНТИЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ПОТЕРЬ

Теорема.

Пусть в каждой точке $x \in X$ (пространство объектов) задано распределение $p(y|x)$ на ответах для данного объекта.

Тогда оптимизация функции потерь $\rho_\tau(z)$ дает алгоритм $a(x)$, приближающий τ-квантиль распределения ответов в каждой точке $x \in X$.

МЕТРИКИ: ОНЛАЙН, ОФЛАЙН, БИЗНЕС

Метрики

Бизнес

Показатели бизнеса

Например:

- Lifetime value
- Прибыль
- Расходы
- Доля аудитории
- Цена акций

Мы хотели бы смотреть, как модель влияет на них, но не можем

Измеряются месяцами

Онлайн

Связаны с показателями бизнеса
Можно сделать быстрый тест

Например:

- Конверсия в клик
- Оценка сервиса
- Средний чек
- MAU, DAU, WAU

Мы можем оценить эти метрики, проведя A/B-тест

Измеряются неделями

Офлайн

Являются приближением онлайн-метрик

Считаются на исторических данных

Например:

- Precision, recall
- Accuracy

Считаются минуты-часы

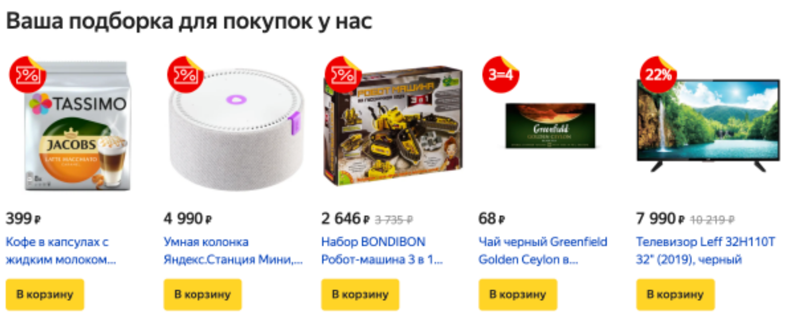
Можем почти бесплатно проверить наши модели

СВОЙСТВА МЕТРИК

- Чувствительность
- Шум
- Интерпретация
- Иерархия

ПРИМЕР ИЕРАРХИИ МЕТРИК

- Хотим внедрить новое ML-ранжирование рекомендаций товаров
- Находимся в ситуации, когда этот элемент уже есть на сайте



Что измеряем?

ИЕРАРХИЯ МЕТРИК

Бизнес-метрика

Онлайн-метрики

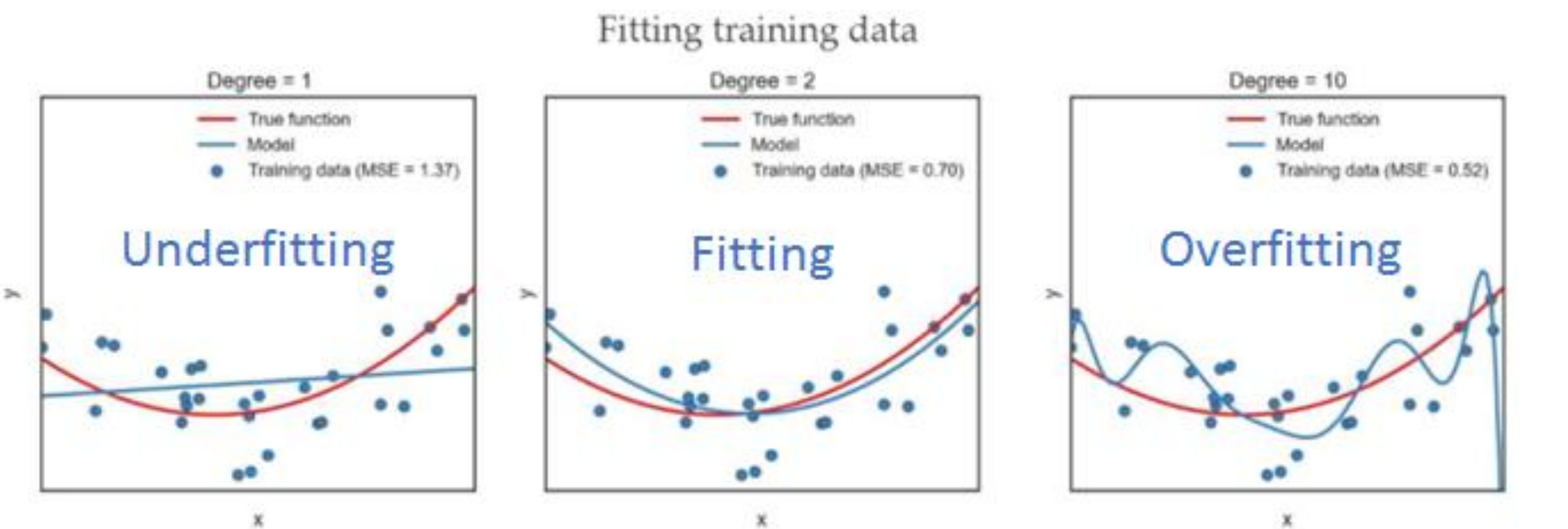
Офлайн-метрики

- Выручка
- Средний чек / Число купивших пользователей
- Выручка проданных товаров, через наш элемент
- CTR элемента
- Оффлайн метрики ранжирования
- Accuracy на валидационной выборке

2. ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ БОРЬБЫ С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ

ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ

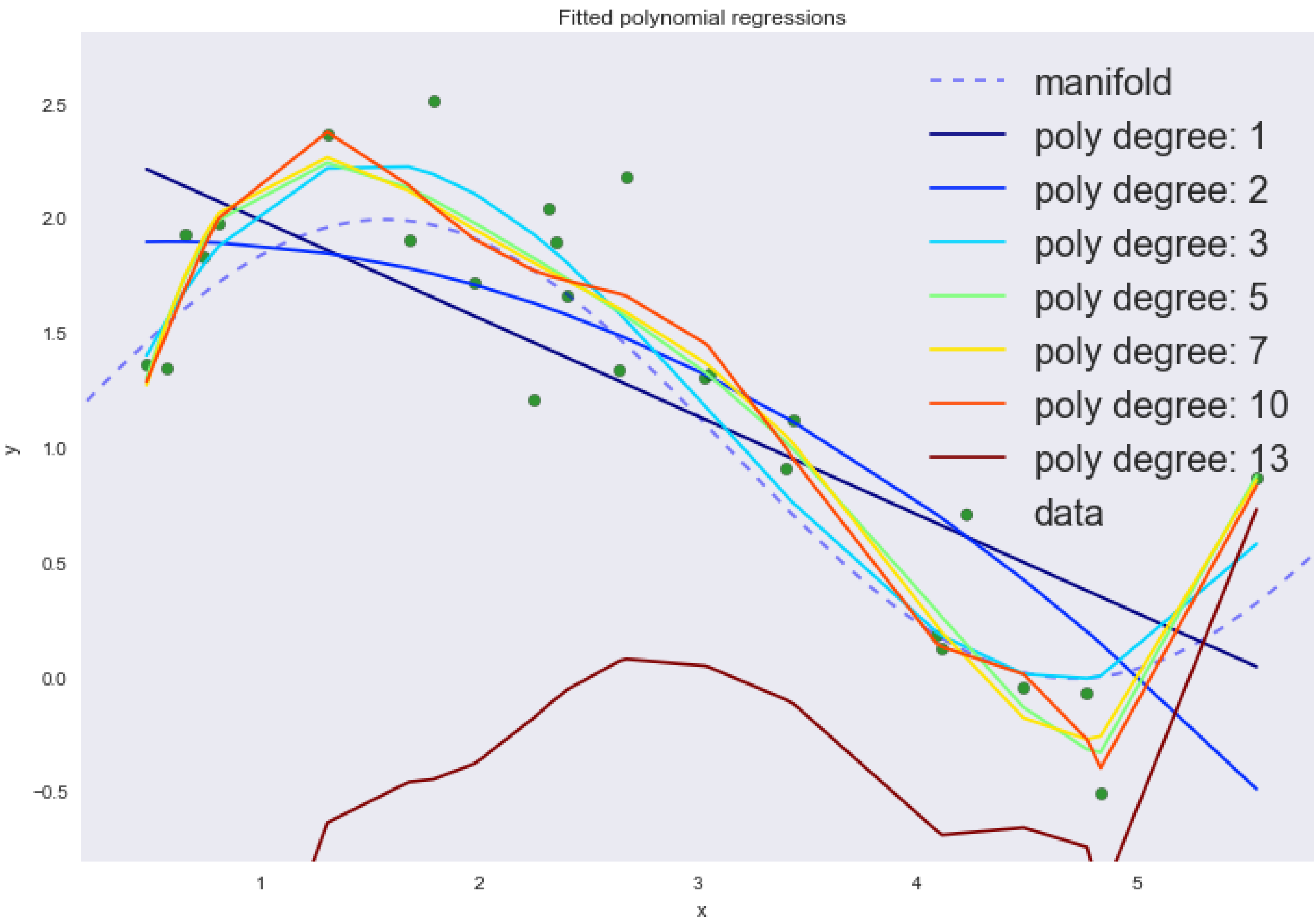
Переобучение (overfitting) – явление, при котором качество модели на новых данных сильно хуже, чем качество на тренировочных данных.



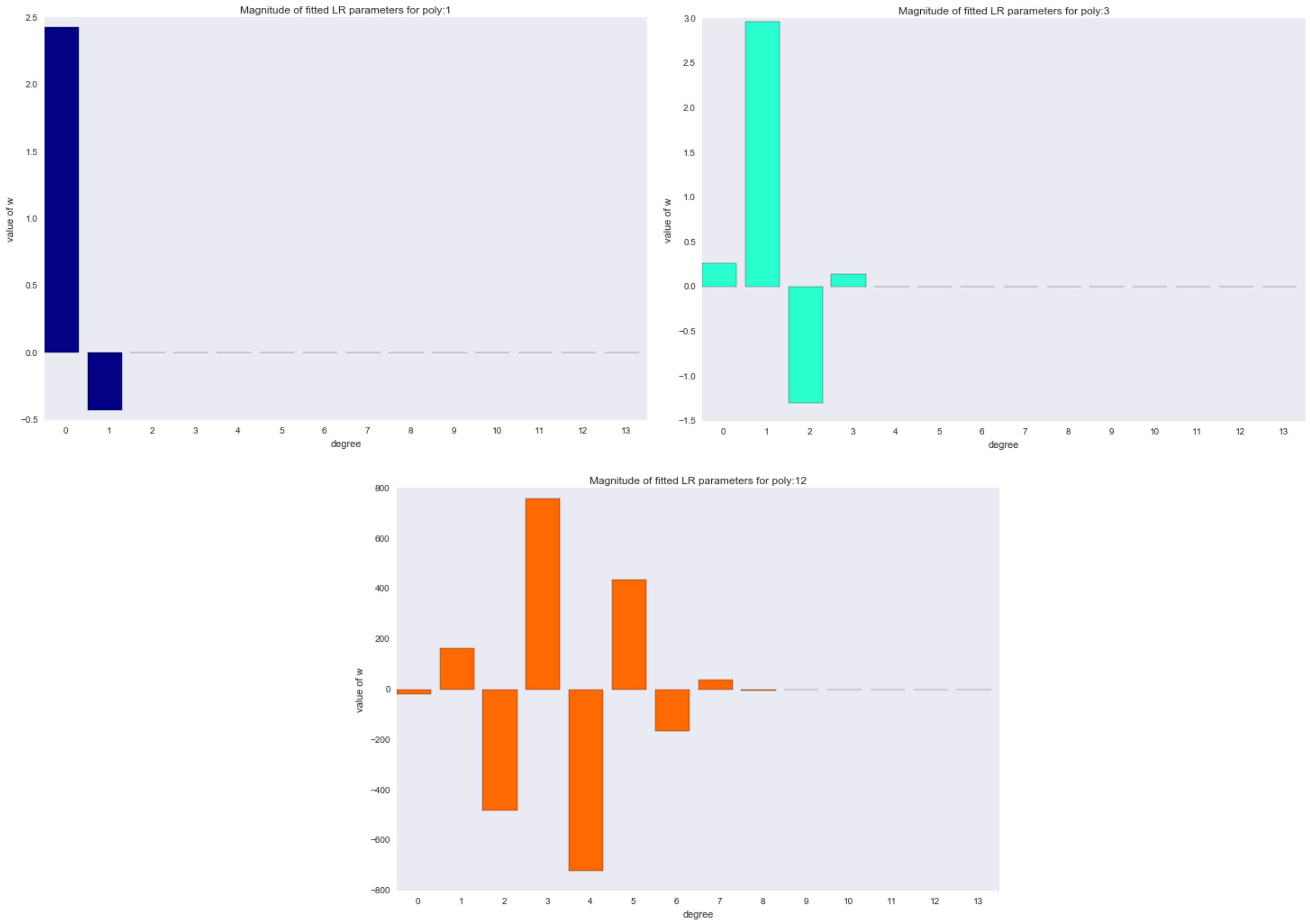
ПРИЗНАКИ ПЕРЕОБУЧЕННОЙ МОДЕЛИ

- Большая разница в качестве на тренировочных и тестовых данных (модель подгоняется под тренировочные данные и не может найти истинную зависимость)
- Большие значения параметров (весов) w_j модели
- Неустойчивость дискриминантной (разделяющей) функции (w, x).

ПЕРЕОБУЧЕНИЕ: ПРИМЕР



ПЕРЕОБУЧЕНИЕ: ПРИМЕР



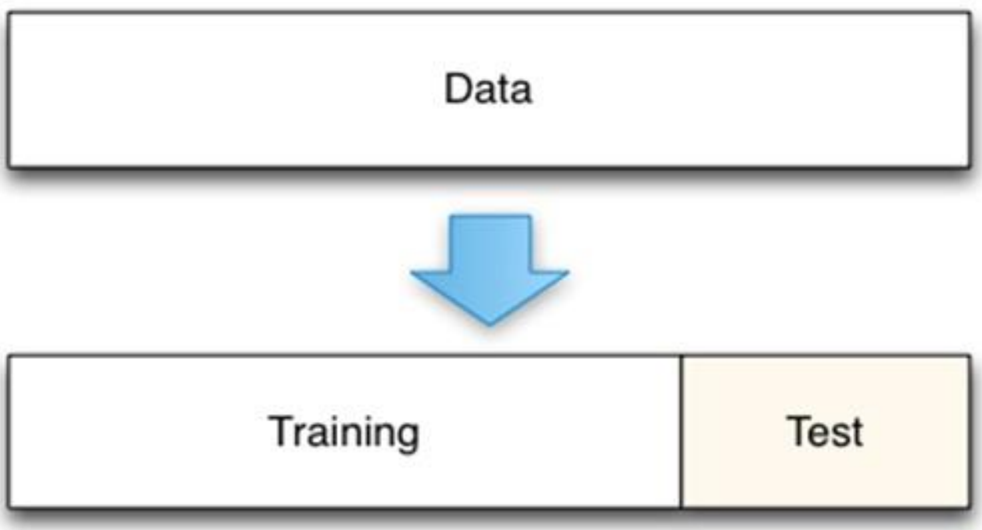
ОЦЕНИВАНИЕ КАЧЕСТВА МОДЕЛИ

- Отложенная выборка
- Кросс-валидация

ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА

Делим тренировочную выборку на две части:

- По первой части обучаем модель (train)
- По оставшимся данным – оцениваем качество (test)

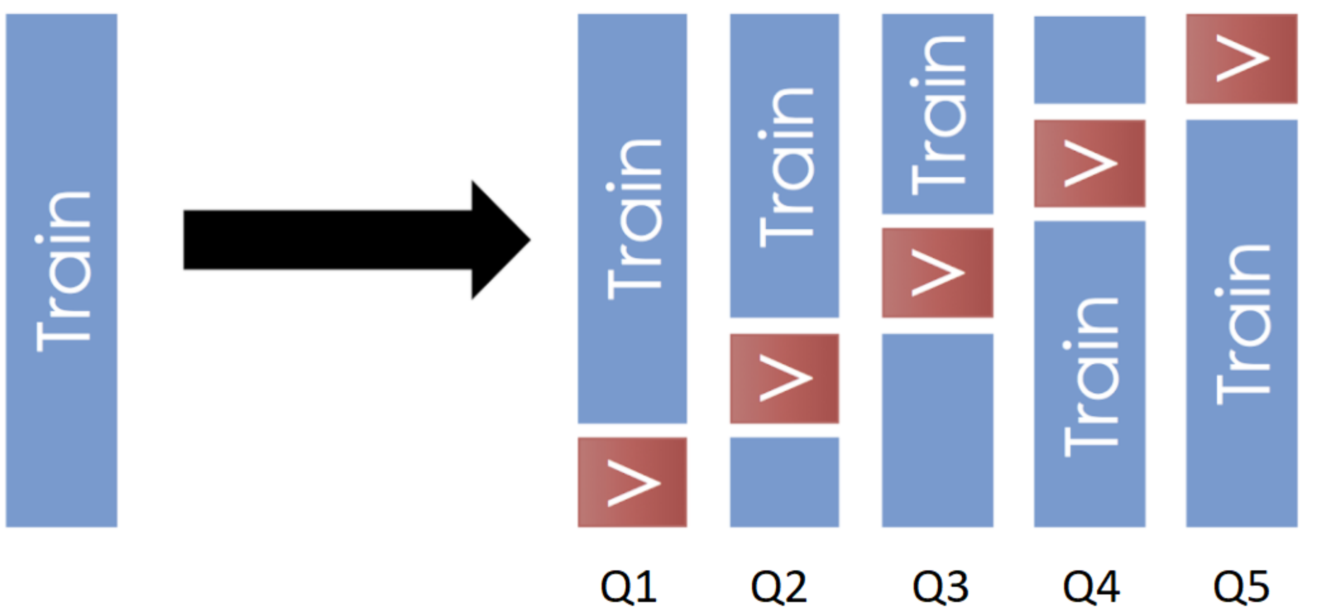


Недостаток:

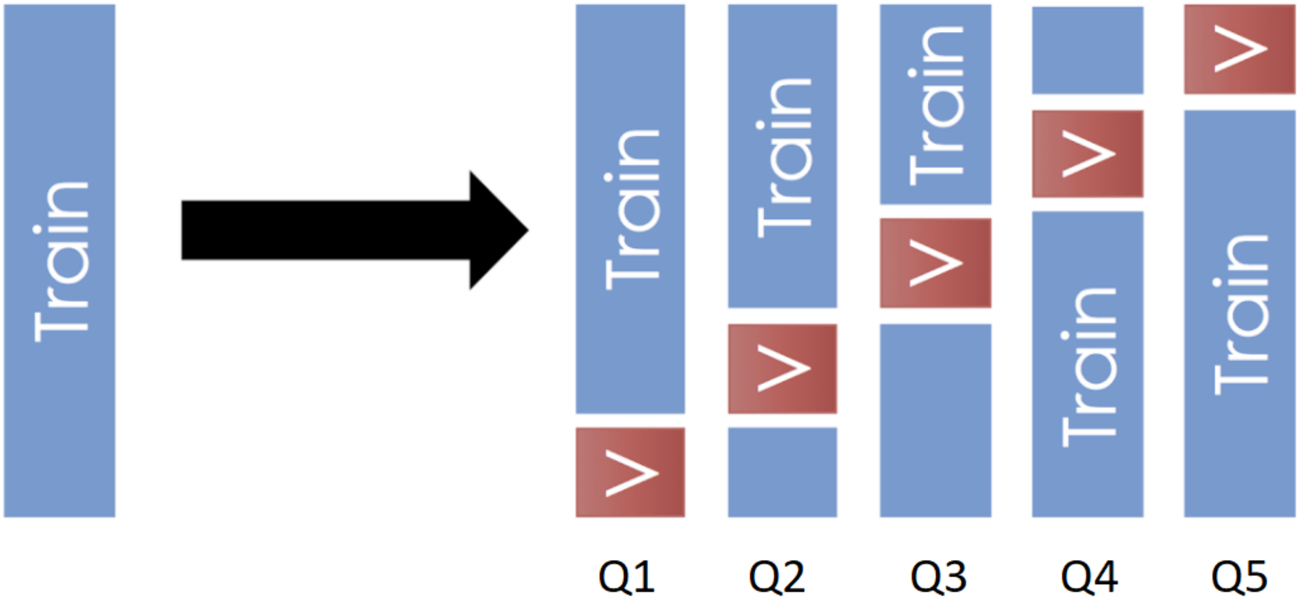
- Результат сильно зависит от разбиения на train и test

КРОСС-ВАЛИДАЦИЯ

- Разбиваем объекты на тренировку (train) и валидацию (validation) несколько раз (при разбиении k раз получаем k-fold кросс-валидацию)
- Для каждого разбиения вычисляем качество на валидационной части
- Усредняем полученные результаты



КРОСС-ВАЛИДАЦИЯ



$$CV = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} Q(a_i(x), X_i) = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} Q_i$$

ВИДЫ КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

- **k-fold** cross-validation – разбиваем данные на k блоков, каждый из которых по очереди становится контрольным (валидационным)
- **Complete** cross-validation – перебираем ВСЕ разбиения
- **Leave-one-out** cross-validation – каждый блок состоит из одного объекта (число блоков = числу объектов)

ВЫБОР КОЛИЧЕСТВА БЛОКОВ В K-FOLD КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

- *Проблемы при маленьком k?*
- *Проблемы при большом k?*

ВЫБОР КОЛИЧЕСТВА БЛОКОВ В K-FOLD КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

- Маленькое k – оценка может быть пессимистично занижена из-за маленького размера тренировочной части
- Большое k – оценка может иметь большую дисперсию из-за маленького размера валидационной части

МЕТОД БОРЬБЫ С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ: РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ

Утверждение. Если в выборке есть линейно-зависимые признаки, то задача оптимизации $Q(w) \to min$ имеет бесконечное число решений.

- Большие значения параметров (весов) модели w – признак переобучения.

МЕТОД БОРЬБЫ С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ: РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ

Утверждение. Если в выборке есть линейно-зависимые признаки, то задача оптимизации $Q(w) \to min$ имеет бесконечное число решений.

- Большие значения параметров (весов) модели w **–** признак переобучения.

Решение проблемы **–** ***регуляризация***.

Будем минимизировать регуляризованный функционал ошибки:

$$\boldsymbol{Q_{alpha}(w) = Q(w) + \alpha \cdot R(w) \to \min_{w}} \quad ,$$

где $R(w)$ - регуляризатор.

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ

- **Регуляризация штрафует за слишком большие веса.**

Наиболее используемые регуляризаторы:

- L_2-регуляризатор: $R(w) = ||w||_2 = \sum_{i=1}^{d} w_i^2$
- L_1-регуляризатор: $R(w) = ||w||_1 = \sum_{i=1}^{d} |w_i|$

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ

- **Регуляризация штрафует за слишком большие веса.**

Наиболее используемые регуляризаторы:

- L_2-регуляризатор: $R(w) = \left||w|\right|_2 = \sum_{i=1}^{d} w_i^2$
- L_1-регуляризатор: $R(w) = \left||w|\right|_1 = \sum_{i=1}^{d} |w_i|$

Пример регуляризованного функционала:

$$Q(a(w), X) = \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l}((w, x_i) - y_i)^2 + \alpha \sum_{i=1}^{d} w_i^2,$$

где α – коэффициент регуляризации.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МНК С L_2-РЕГУЛЯРИЗАТОРОМ

Задача оптимизации в матричном виде:

$$Q(w) = (y - Xw)^T(y - Xw) + \alpha w^T I w \to min \quad (*)$$

где I – единичная матрица.

Эта задача имеет аналитическое решение:

$$\boldsymbol{w = \left(X^T X + \alpha I\right)^{-1} X^T y}$$

- Матрица $X^T X + \alpha I$ всегда положительно определена, поэтому её можно обратить. Следовательно, задача (*) имеет единственное решение.

ПОЛЕЗНОЕ СВОЙСТВО L1-РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

Все ли признаки в задаче нужны?

- Некоторые признаки могут не иметь отношения к задаче, т.е. они не нужны.
- Если есть ограничения на скорость получения предсказаний, то чем меньше признаков, тем быстрее
- Если признаков больше, чем объектов, то решение задачи будет неоднозначным.

Поэтому в таких случаях надо делать отбор признаков, то есть убирать некоторые признаки.

L_1-РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ

Утверждение. В результате обучения модели с L_1-регуляризатором происходит зануление некоторых весов, т.е. отбор признаков.

Можно показать, что задачи

$$(1) \quad Q(w) + \alpha \left|\left|w\right|\right|_1 \to \min_w$$

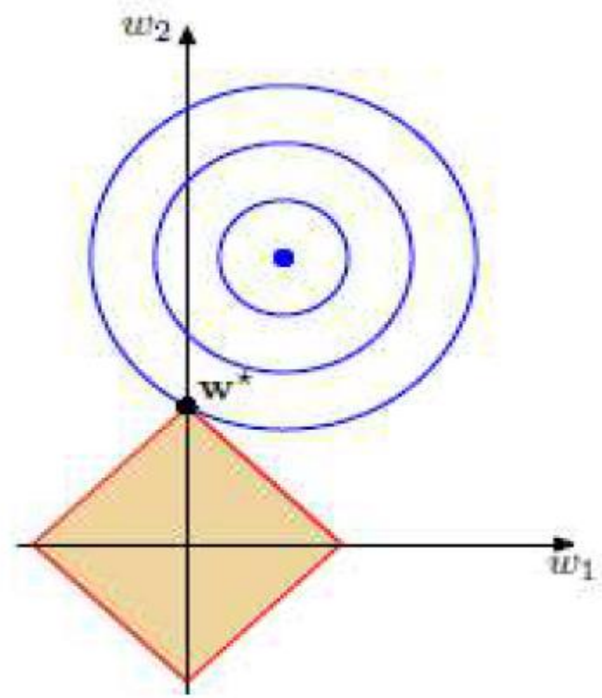
и

$$(2) \quad \begin{cases} Q(w) \to \min\limits_w \\ \left|\left|w\right|\right|_1 \leq C \end{cases}$$

эквивалентны.

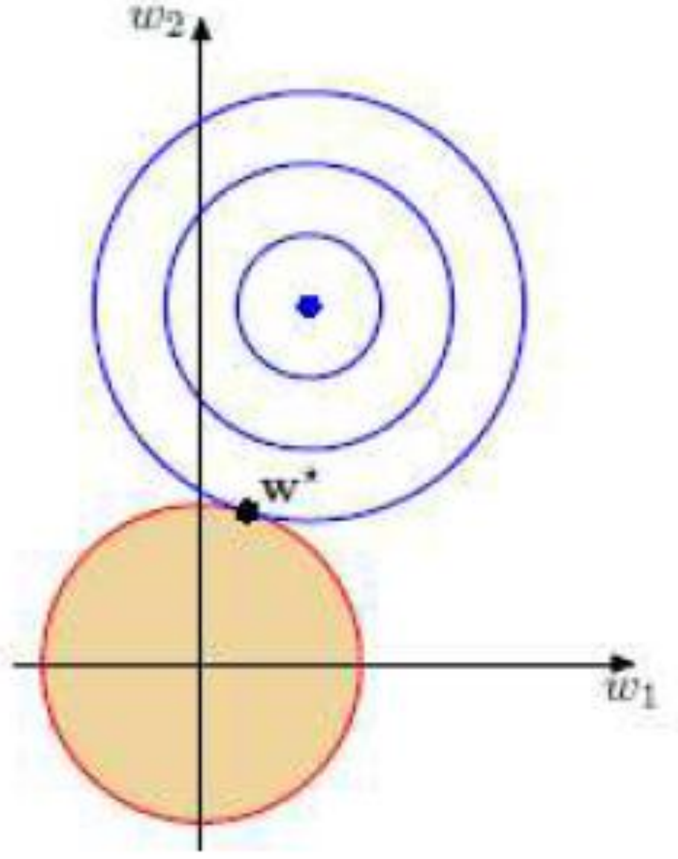
ОТБОР ПРИЗНАКОВ ПО L1-РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

Нарисуем линии уровня $Q(w)$ и область $||w||_1 \leq C$:



Если признак незначимый, то соответствующий вес близок к 0. Отсюда получим, что в большинстве случаев решение нашей задачи попадает в вершину ромба, т.е. обнуляет незначимый признак.

L2-РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ НЕ ОБНУЛЯЕТ ПРИЗНАКИ



РАЗРЕЖЕННЫЕ МОДЕЛИ

Модели, в которых часть весов равна 0, называются ***разреженными моделями***.

- L1-регуляризация зануляет часть весов, то есть делает модель разреженной.