Введение в анализ данных

Лекция 7

Метрики качества регрессии и классификации.

Многоклассовая классификация.

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2018

Подготовка признаков

Важность признаков

- Если признаки масштабированы, то вес характеризует важность признака в модели

Term	Coefficient	Std. Error	Z Score
Intercept	2.46	0.09	27.60
lcavol	0.68	0.13	5.37
lweight	0.26	0.10	2.75
age	−0.14	0.10	−1.40
lbph	0.21	0.10	2.06
svi	0.31	0.12	2.47
lcp	−0.29	0.15	−1.87
gleason	−0.02	0.15	−0.15
pgg45	0.27	0.15	1.74

Квадратичные признаки

- Можно добавлять новые признаки, зависящие от исходных
- Модель может восстанавливать более сложные зависимости
- Пример: квадратичные признаки

[площадь, этаж, число комнат]

- Новые признаки:

[площадь, этаж, число комнат,
площадь^2, этаж^2, число комнат^2,
площадь* этаж, площадь* число комнат, этаж* число комнат,]

Категориальные признаки

- Пример: город клиента банка
- Три объекта со значениями [Москва, Санкт-Петербург, Москва]
- Закодируем двумя числовыми признаками:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

One-hot-кодирование

- Заводим столько новых признаков, сколько значений у категориального
- Каждый соответствует одному возможному значению
- Единице равен тот, который встретился на данном объекте

One-hot-кодирование

- Пример: предсказать, купит ли пользователь данный товар в интернет-магазине
- Признаки:
  - Идентификатор пользователя
  - Идентификатор товара
  - Идентификатор категории товара
  - Стоимость товара
  - …
- Могут иметь смысл квадратичные признаки
  - например, пользователь + категория товара
- После one-hot кодирования получим миллионы признаков
- Линейные модели способны справиться с такими задачами

Метрики качества

- Не все алгоритмы подходят для решения задачи
- Как выбрать лучший?
- Если много способов определить, что такое «лучший»
- Метрики качества
  - Насколько алгоритм подходит для решения задачи?
  - Какой из двух алгоритмов лучше подходит?

Метрики качества регрессии

Среднеквадратичная ошибка

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

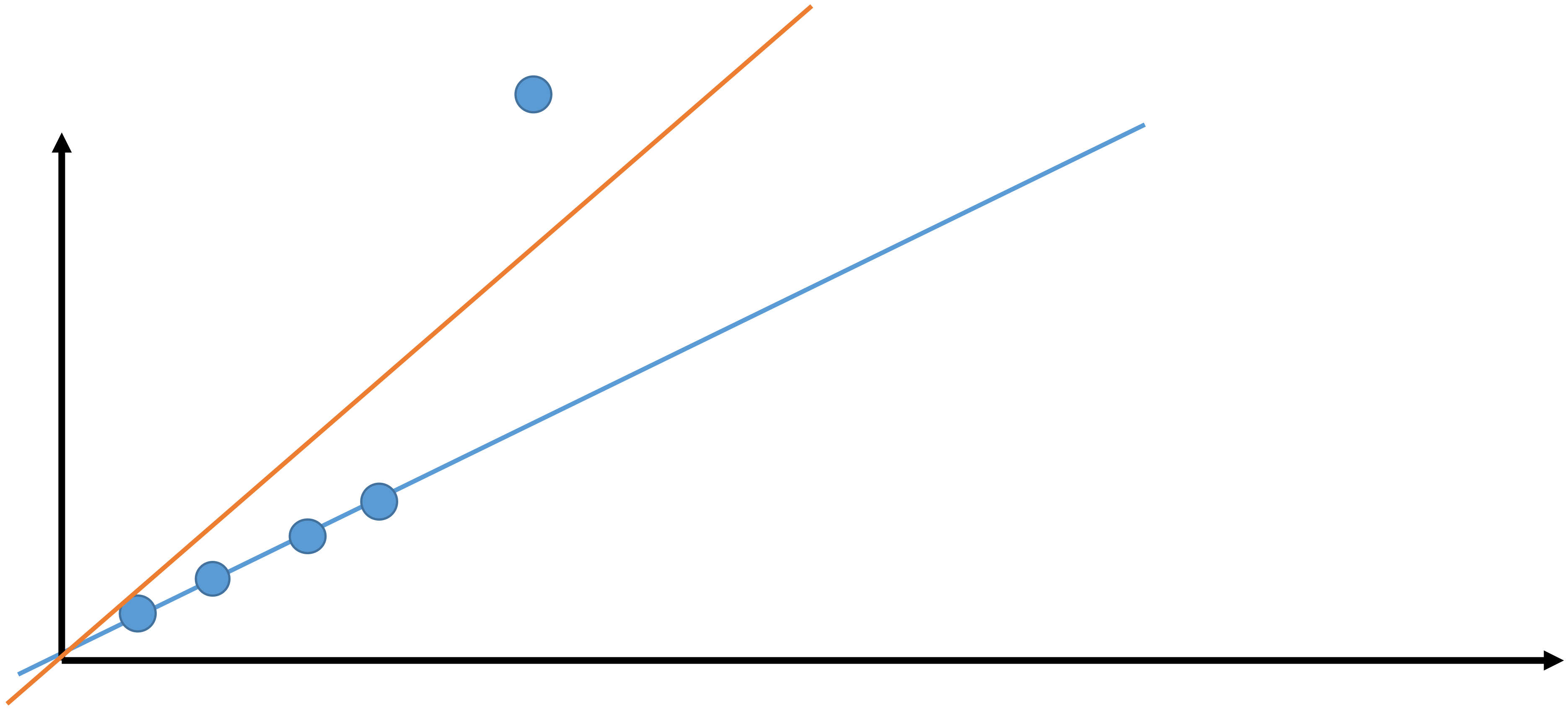
- Легко минимизировать
- Сильно штрафует за большие ошибки

Средняя абсолютная ошибка

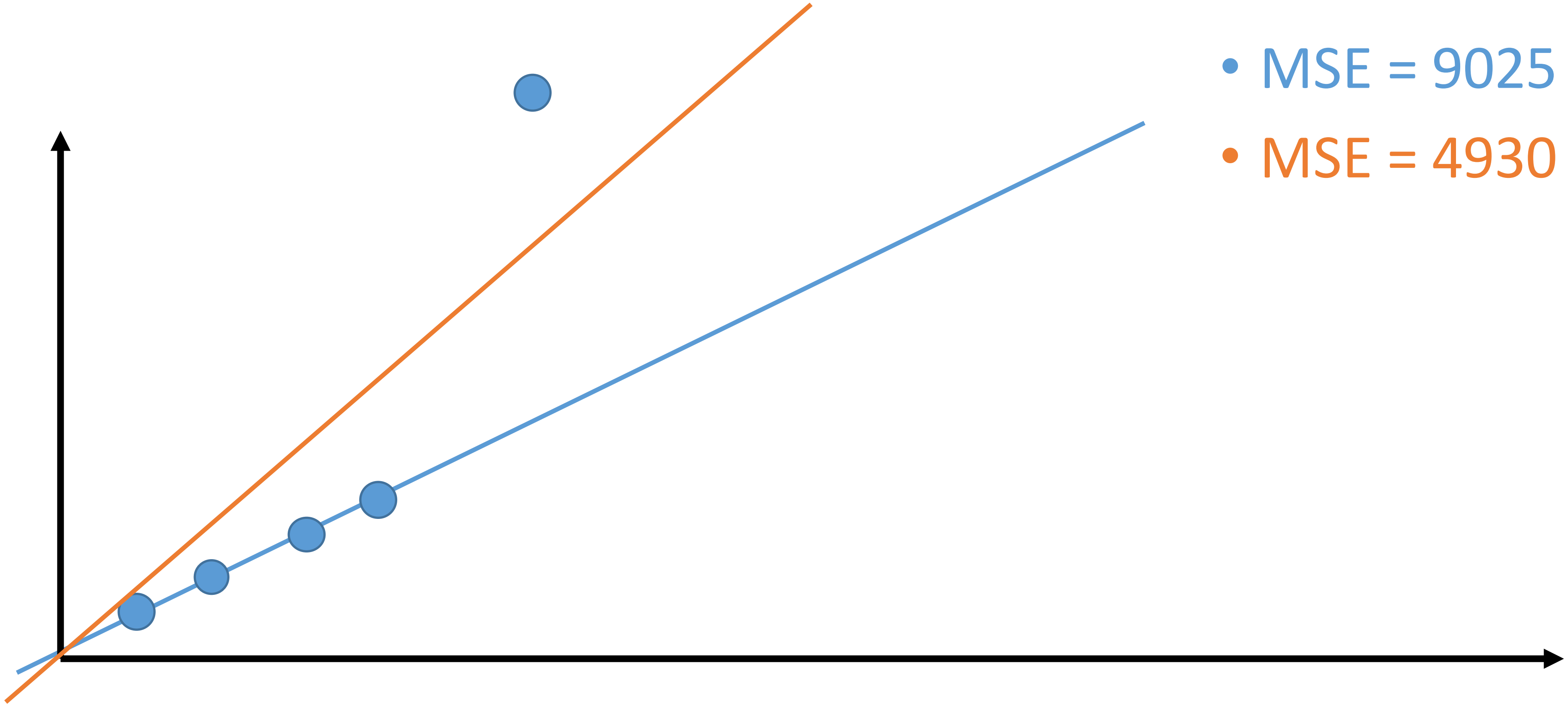
$$\mathrm{MAE}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

- Сложнее минимизировать
- Выше устойчивость к выбросам

Средняя абсолютная ошибка

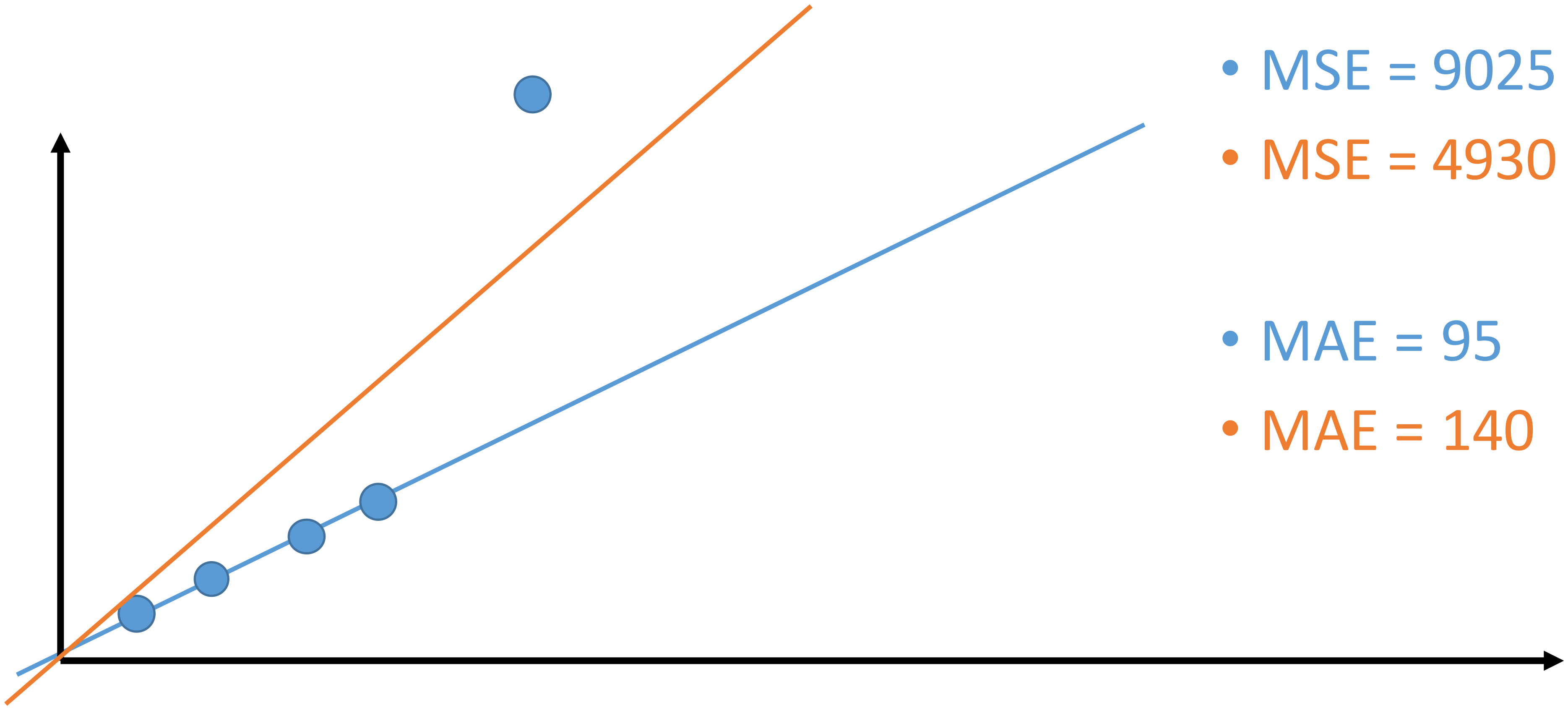


Средняя абсолютная ошибка



- MSE = 9025
- MSE = 4930

Средняя абсолютная ошибка



- MSE = 9025
- MSE = 4930

- MAE = 95
- MAE = 140

Устойчивые оценки

- Оценка среднего значения — матожидание
- Оценка разброса — дисперсия

Математическое ожидание

- Характеризует среднее значение случайной величины

$$\mathbb{E}\xi = \begin{cases} \sum_{i=1}^{n} x_i p_i, & \text{для дискретных величин} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x\, p(x) dx, & \text{для непрерывных величин} \end{cases}$$

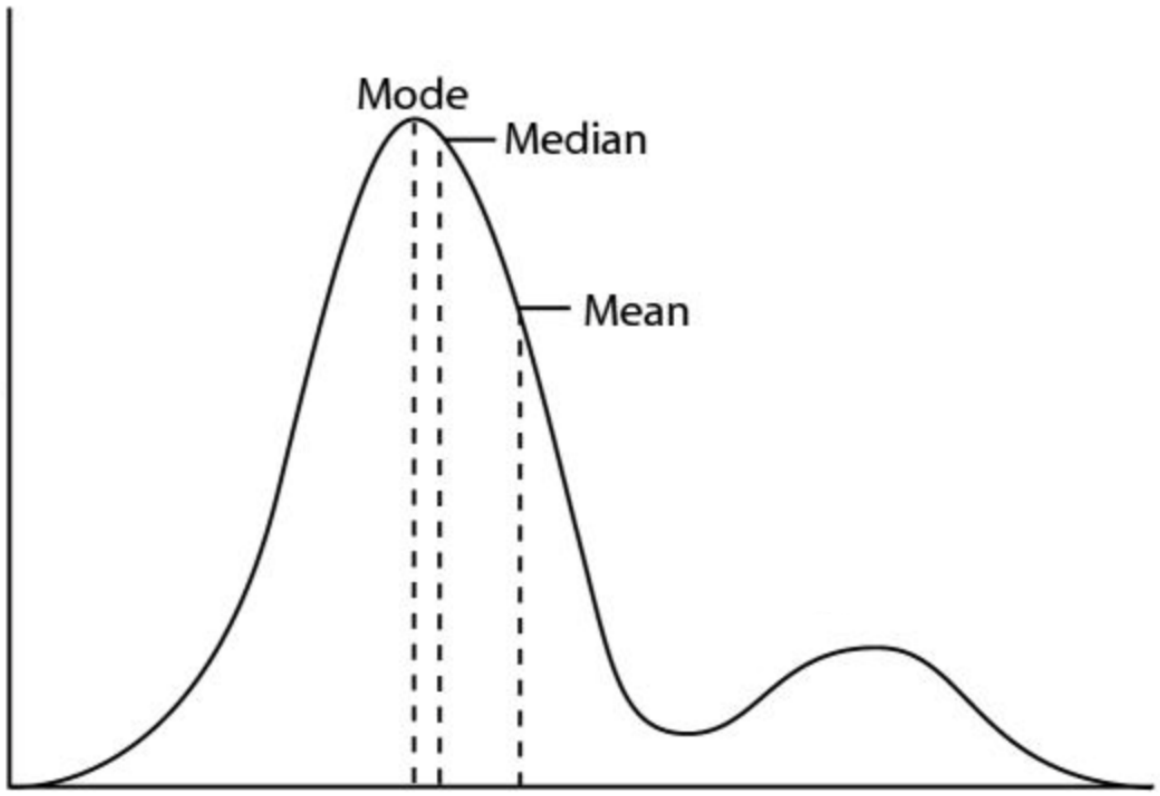
Медиана

- Такое число m, что попасть левее и правее — равновероятно
- $P(\xi \leq m) \geq 0.5$ и $P(\xi \geq m) \geq 0.5$

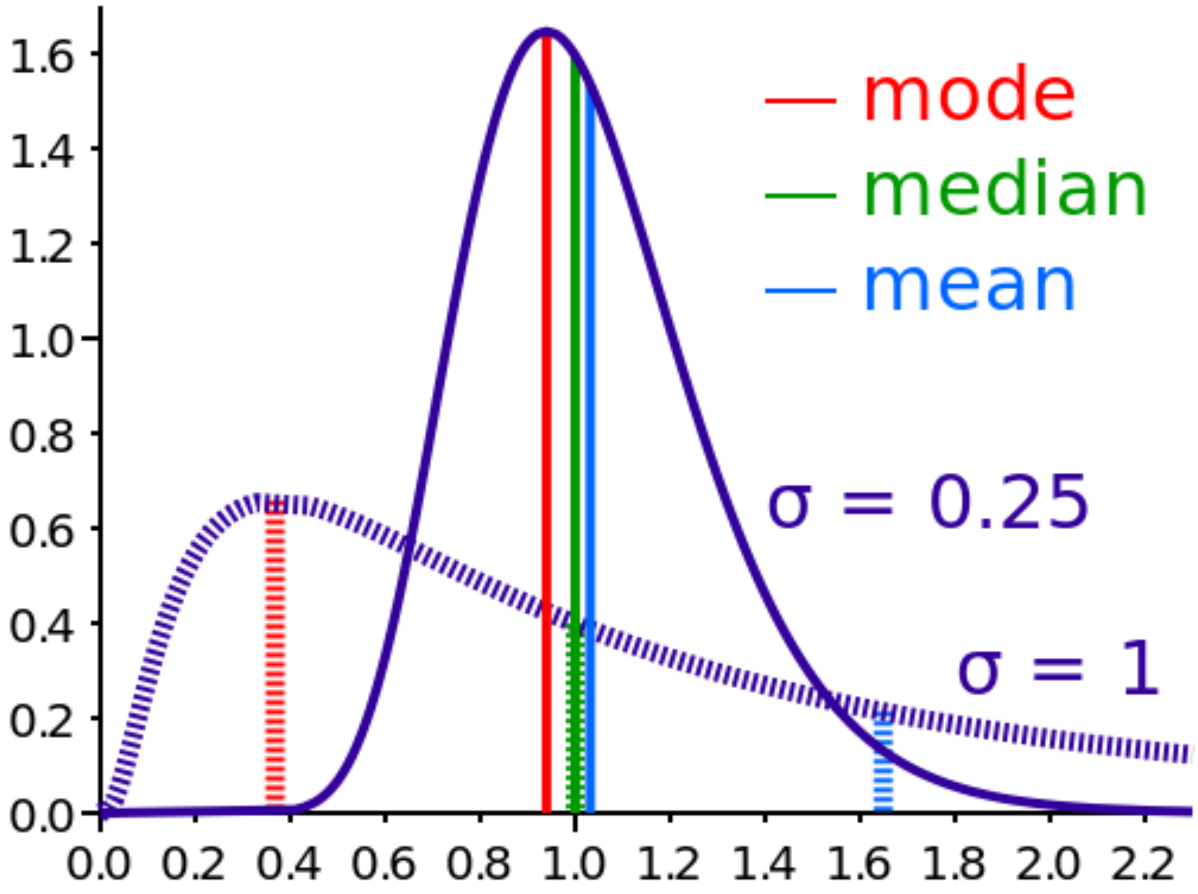
Мода

- Для дискретных величин: точка с максимальной вероятностью
- Для непрерывных величин: точка максимума плотности

Средняя величина

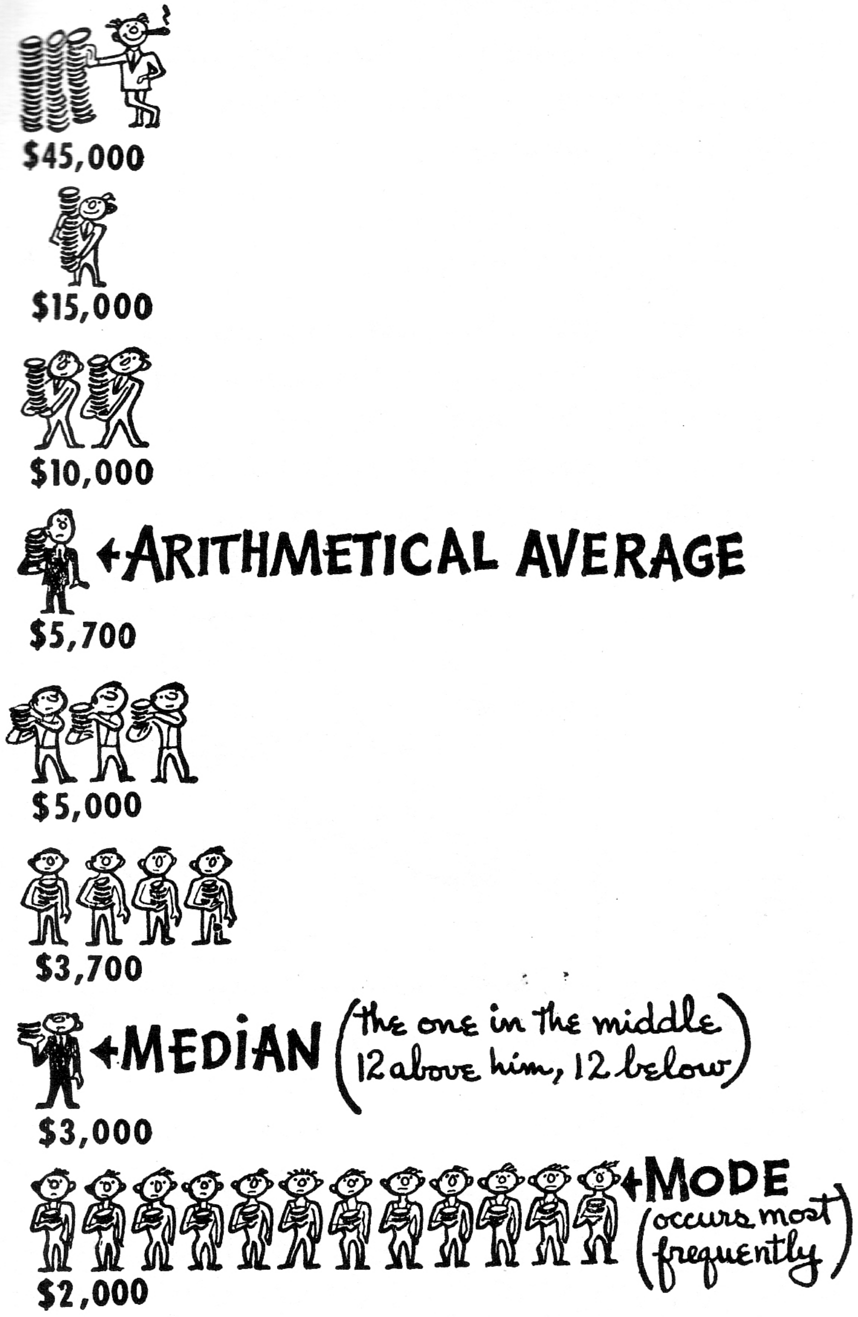


Средняя величина



В чем разница?

- Опросили 100 человек
- 99 имеют доход 10.000 рублей
- 1 имеет доход 1.000.000 рублей
- Среднее: $\frac{99*10000+1000000}{100} = 19900$
- Медиана: 10000
- Мода: 10000

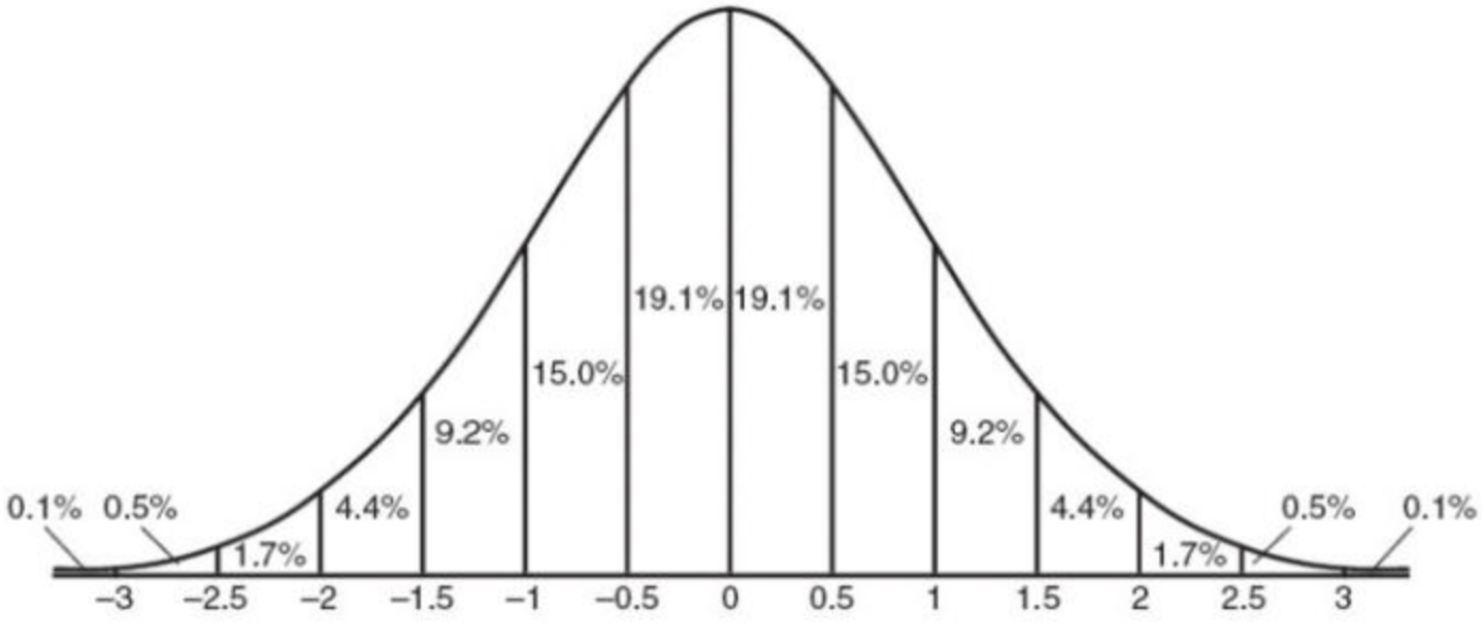

$45,000
$15,000
$10,000
←ARITHMETICAL AVERAGE
$5,700
$5,000
$3,700
←MEDIAN (the one in the middle
12 above him, 12 below)
$3,000
←MODE (occurs most frequently)
$2,000

Дисперсия

- Опросили 100 человек
- 99 имеют доход 10.000 рублей
- 1 имеет доход 1.000.000 рублей
- Дисперсия: 9702990000
- Стандартное отклонение (корень из дисперсии): ~ 98503
- Что-нибудь более устойчивое?

Квантиль

- Q_p — p-квантиль
- Такое число m, что вероятность попасть левее равна p
- Медиана — 0.5-квантиль



Квантиль

- $Q_{0.25}, Q_{0.75}$ — квартили
- $Q_{0.01}, \ldots, Q_{0.99}$ — перцентили

Интерквартильный размах

- Устойчивая к выбросам мера разброса:

$$IQR = Q_{0.75} - Q_{0.25}$$

- В нашем примере: $IQR = 0$

Среднеквадратичная ошибка

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

- Подходит, чтобы сравнивать разные модели
- Чем меньше, тем лучше
- Не позволяет понять, хорошая ли модель получилась
- $\mathrm{MSE} = 32955$ — хорошо или плохо?

Коэффициент детерминации

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

- $\bar{y} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} y_i$ — средний ответ
- Доля дисперсии, объясненная моделью, в общей дисперсии ответов
- Значение можно интерпретировать

Коэффициент детерминации

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

- $0 \le R^2 \le 1$ (для разумных моделей)
- $R^2 = 1$ — идеальная модель
- $R^2 = 0$ — модель на уровне константной
- $R^2 < 0$ — модель хуже константной

Метрики качества классификации

Качество классификации

- Доля правильных ответов (accuracy):

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i]$$

Улучшение метрики

- Два алгоритма
- Доли правильных ответов: r_1 и r_2
- Абсолютное улучшение: $r_2 - r_1$
- Относительное улучшение: $\frac{r_2 - r_1}{r_1}$

Улучшение метрики

- $r_1 = 0.8$
- $r_2 = 0.9$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 12.5\%$

- $r_1 = 0.5$
- $r_2 = 0.75$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 50\%$

- $r_1 = 0.001$
- $r_2 = 0.01$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 900\%$

Матрица ошибок

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	True Positive (TP)	False Positive (FP)
$a(x) = -1$	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Точность (precision)

- Можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?

$$\text{precision}(a, X) = \frac{TP}{TP + FP}$$

Полнота (recall)

- Как много положительных объектов находит классификатор?

$$\text{recall}(a, X) = \frac{TP}{TP + FN}$$

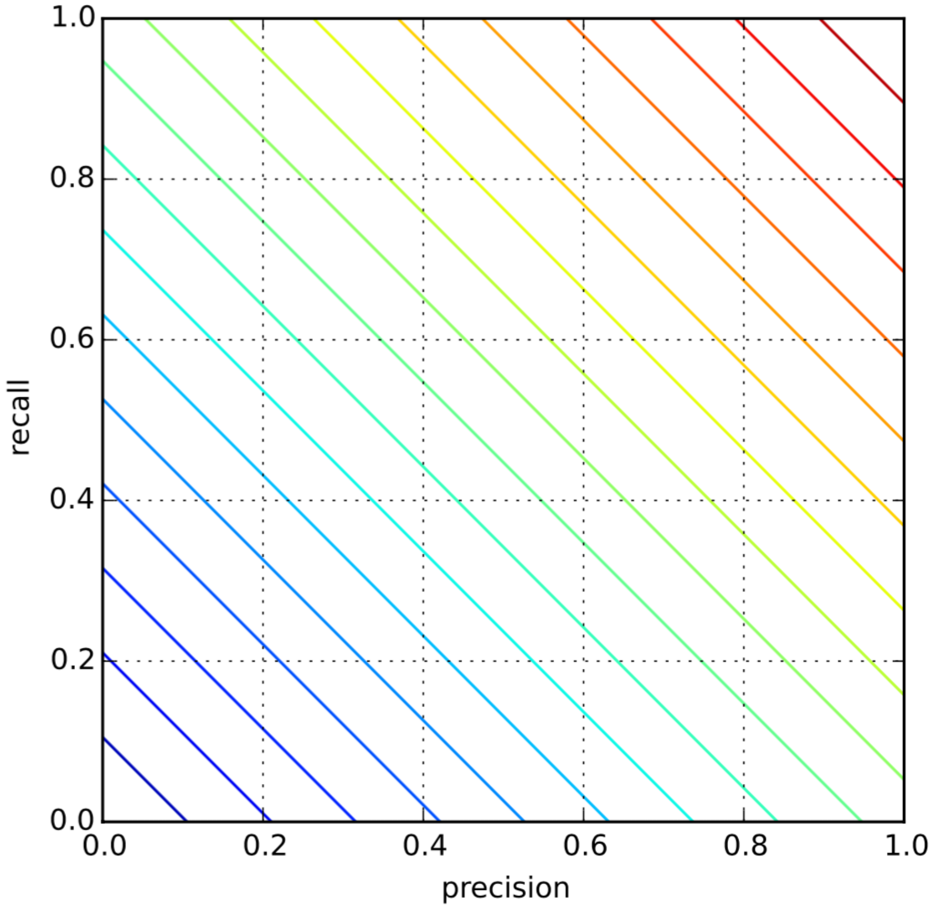
Точность и полнота

- Точность — можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?
- Полнота — как много положительных объектов находит $a(x)$?

- Оптимизировать две метрики одновременно очень неудобно
- Как объединить?

Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

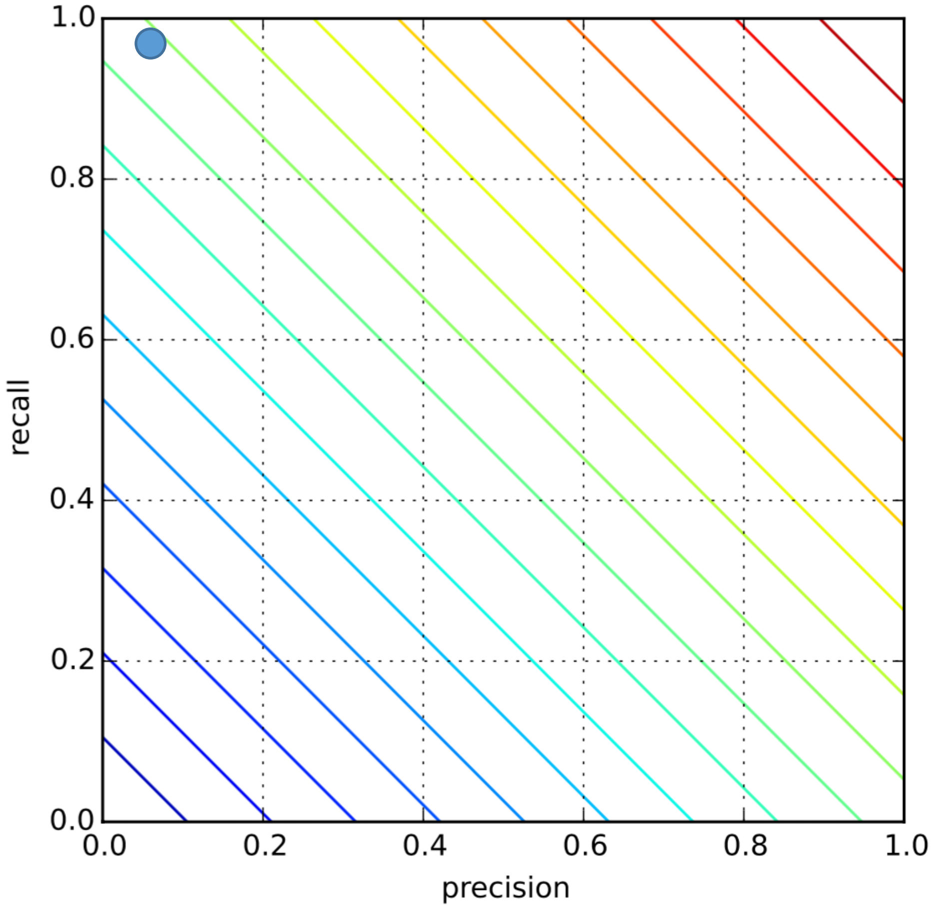


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.1$
- $\text{recall} = 1$
- $A = 0.55$

- Плохой алгоритм

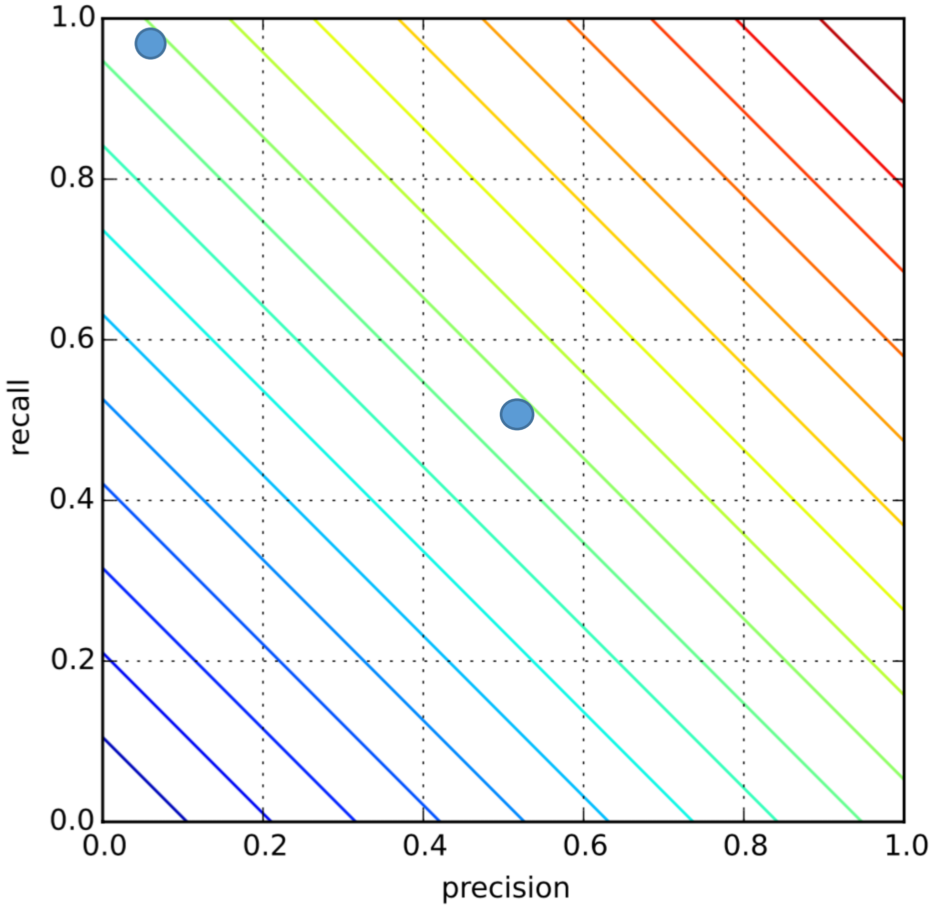


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

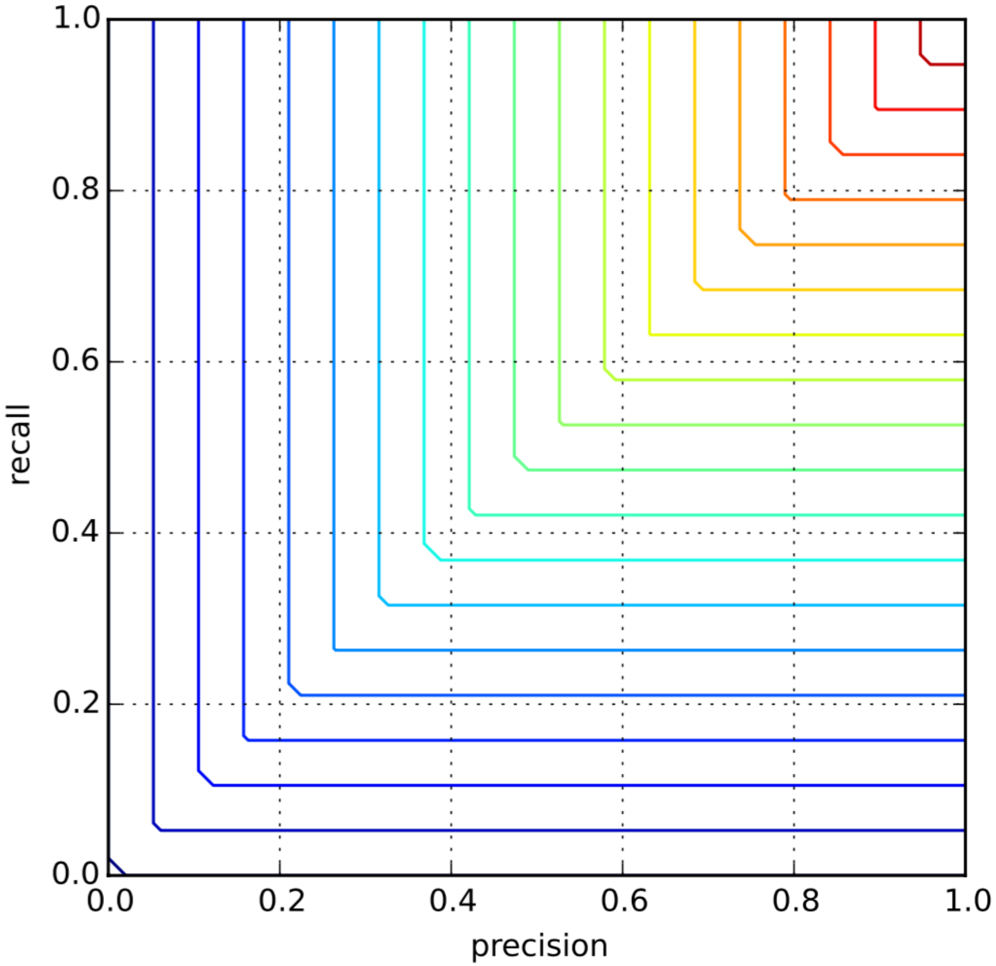
- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $A = 0.55$

- Нормальный алгоритм
- Но качество такое же, как у плохого



Минимум

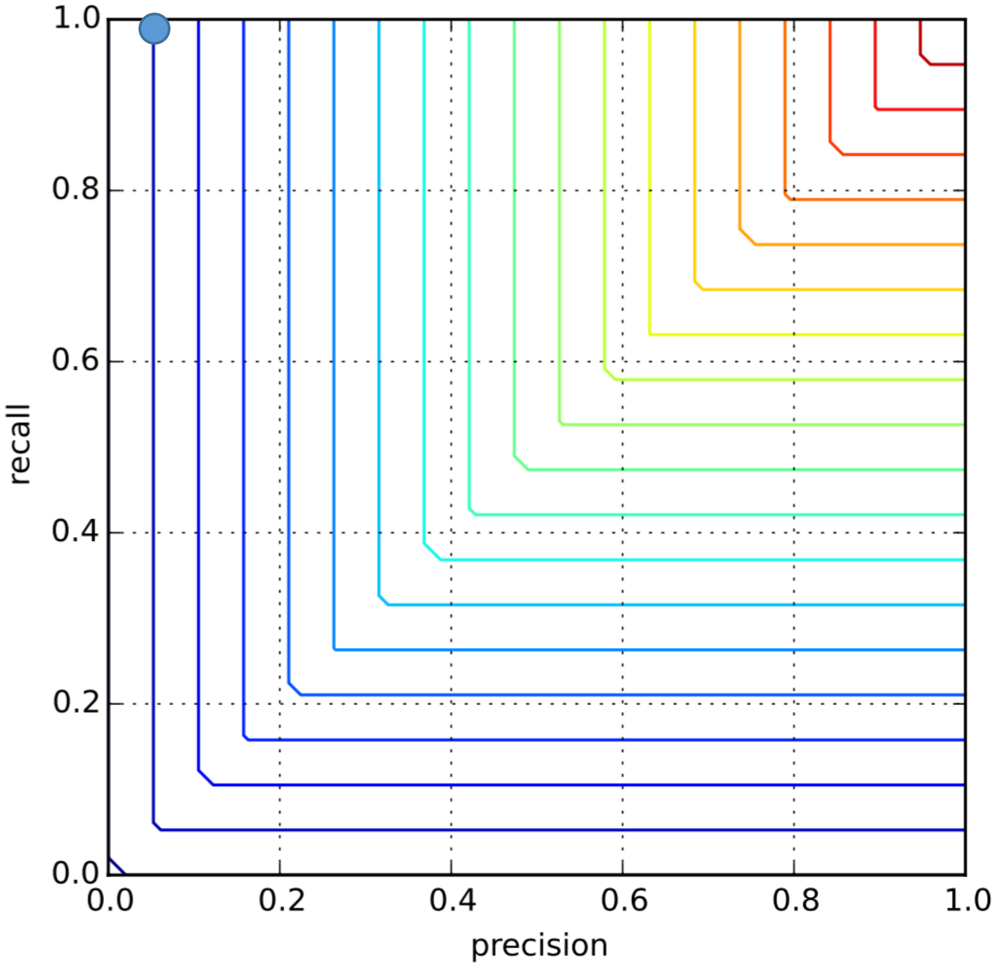
$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

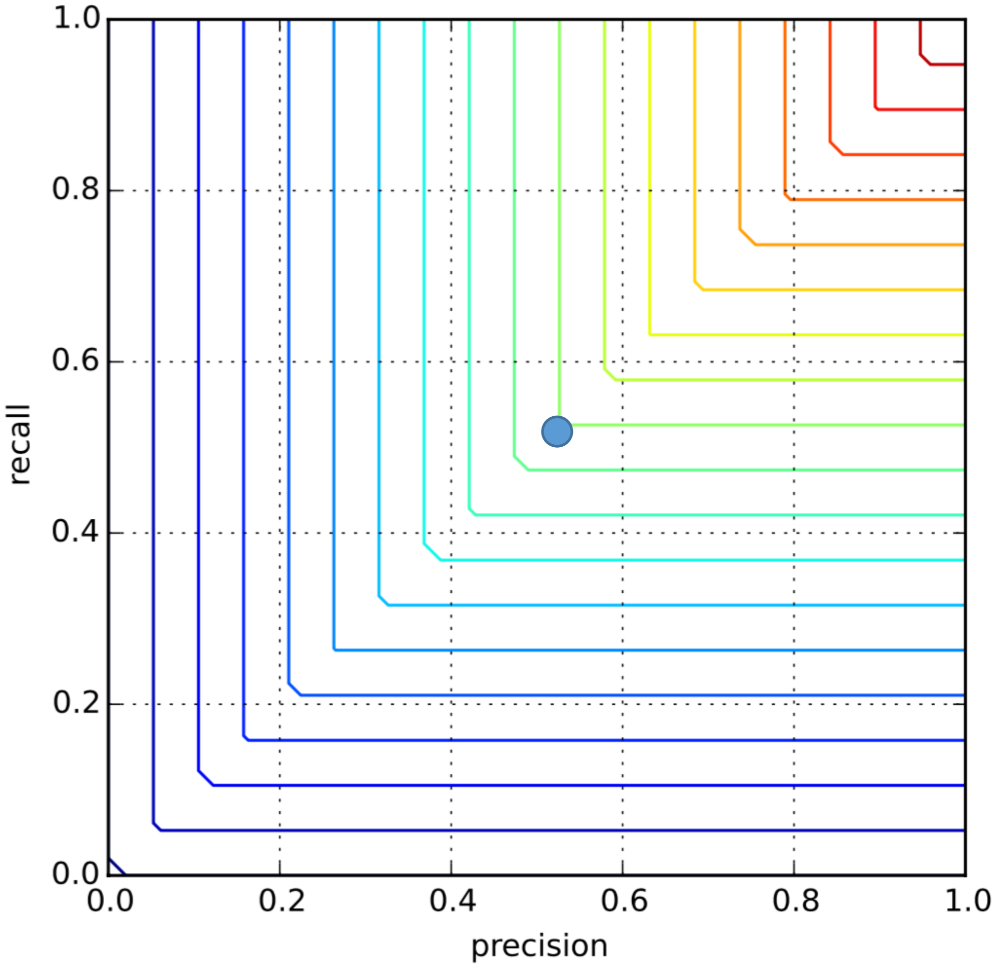
- $\text{precision} = 0.05$
- $\text{recall} = 1$
- $M = 0.05$



Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $M = 0.55$



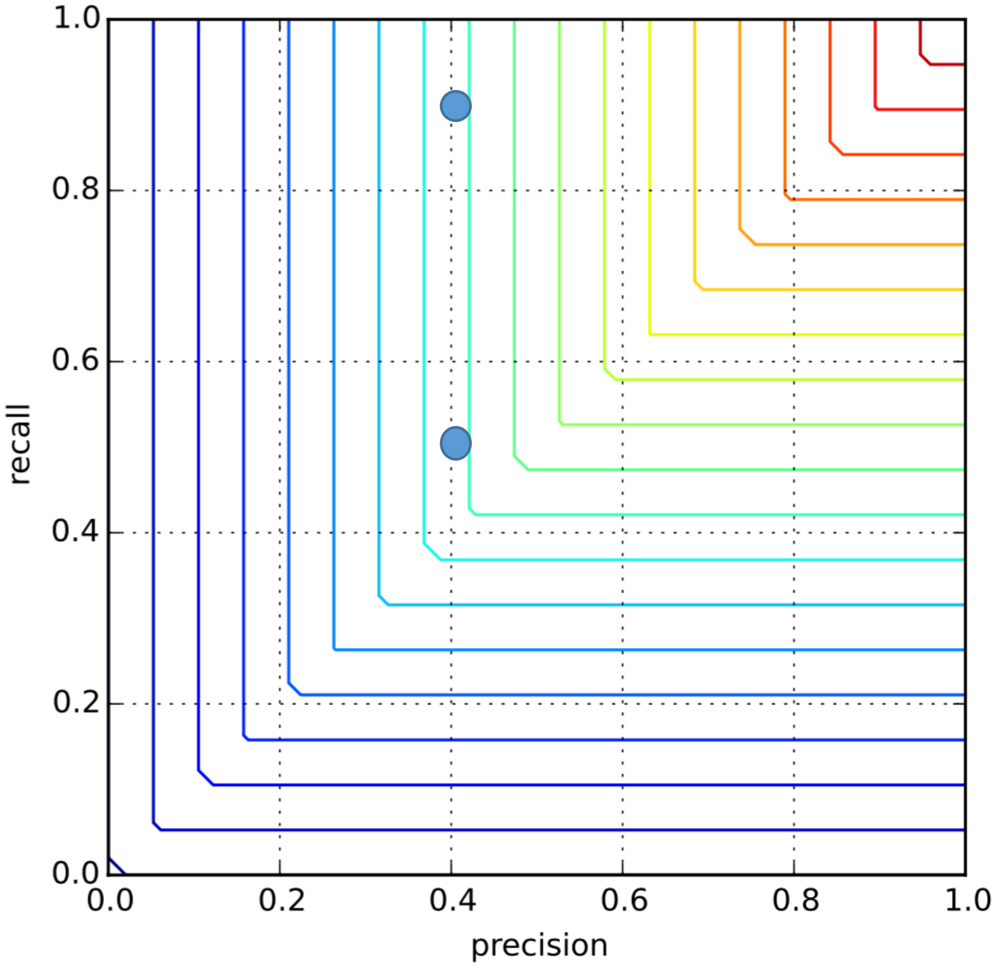
Минимум

$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.4$, $\text{recall} = 0.5$
- $M = 0.4$

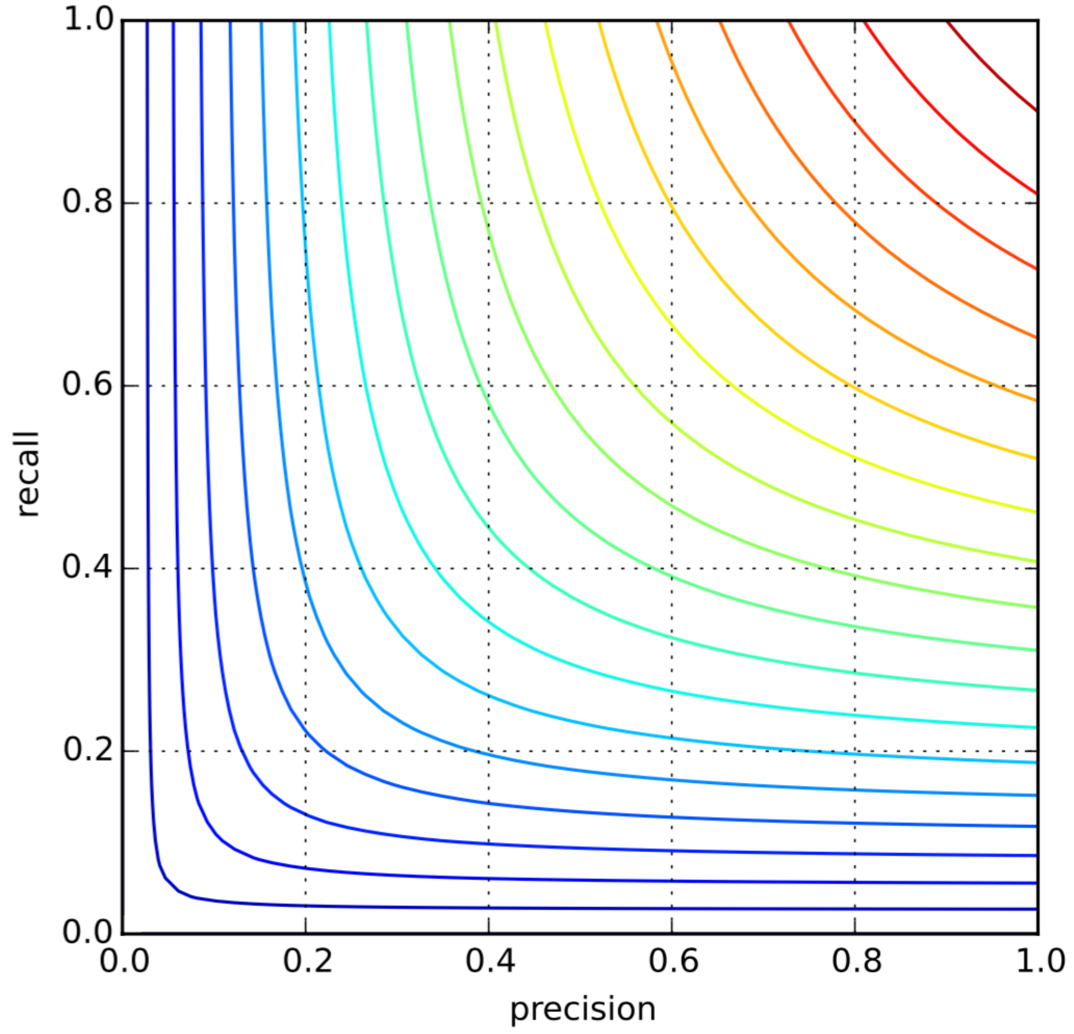
- $\text{precision} = 0.4$, $\text{recall} = 0.9$
- $M = 0.4$

- Но второй лучше!



F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

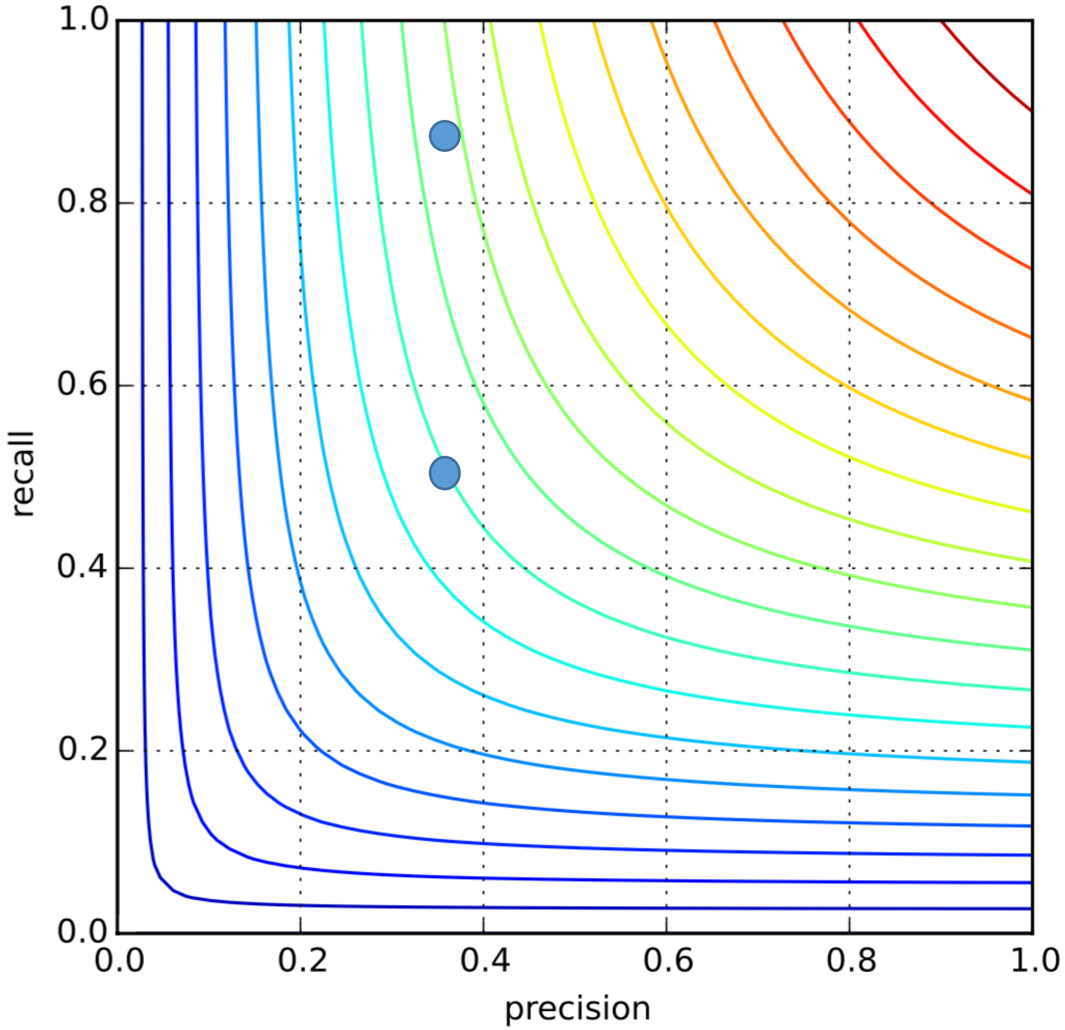


F-мера

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}}$$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $F = 0.44$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.55$



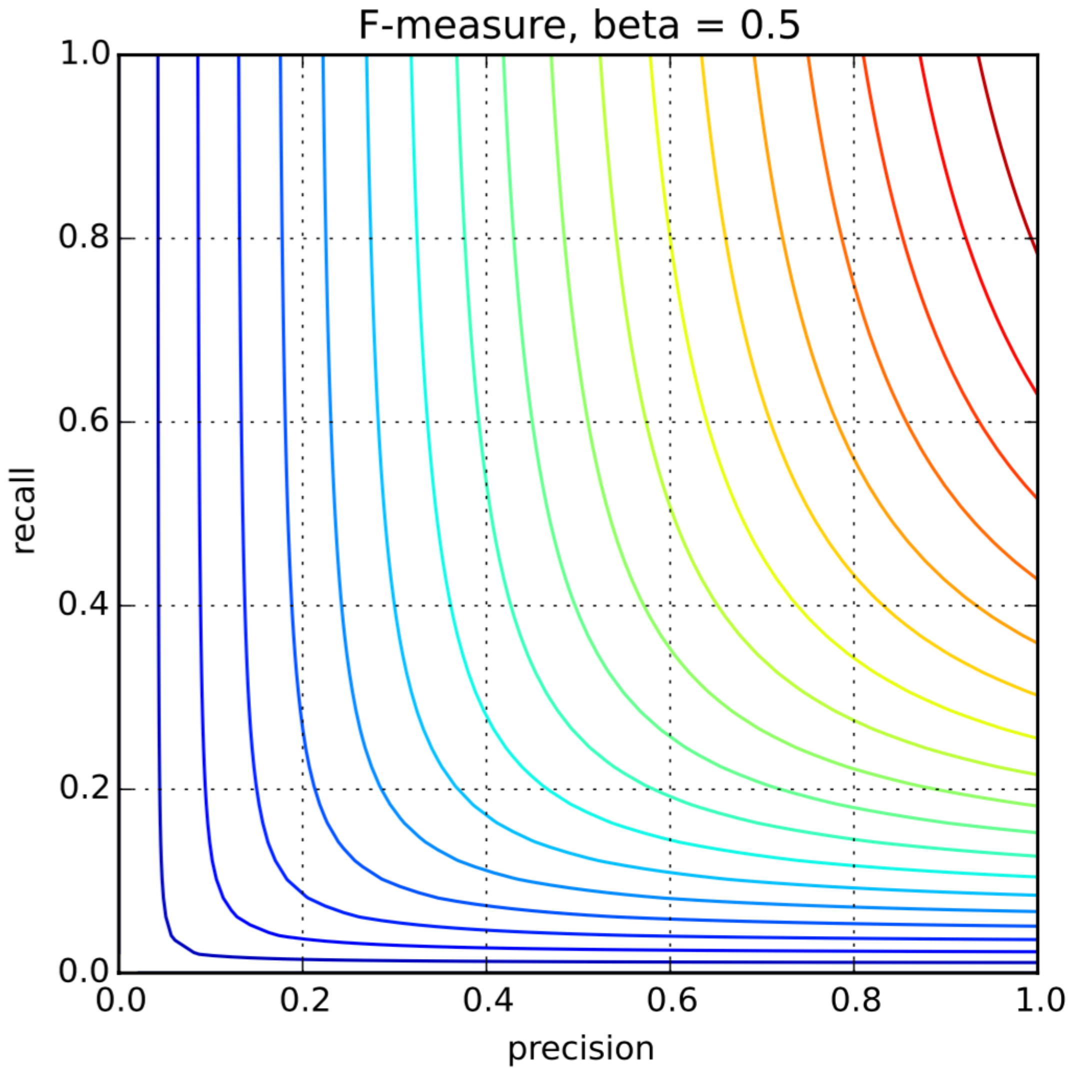
F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

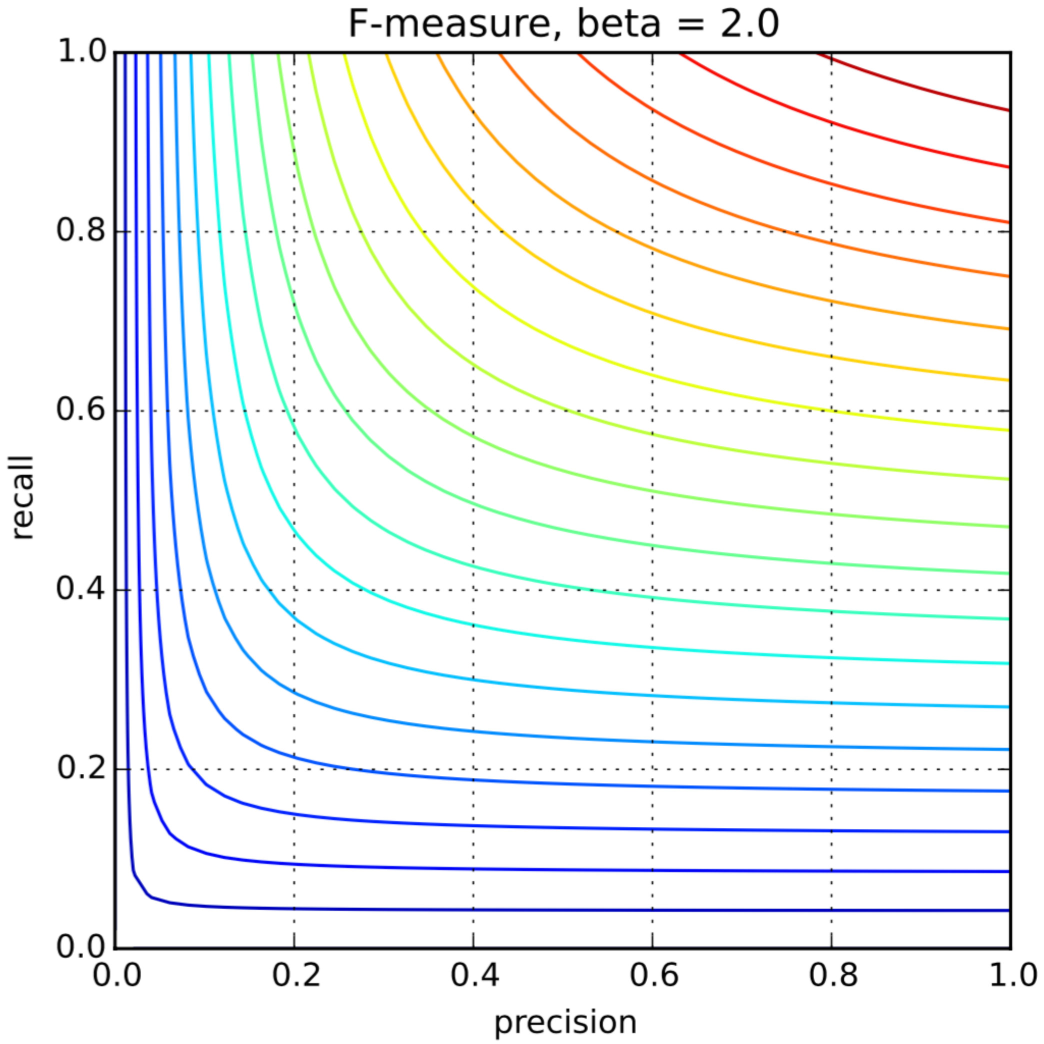
- $\beta = 0.5$
- Важнее полнота



F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

- $\beta = 2$
- Важнее точность



Оценки принадлежности классу

Классификатор

- Частая ситуация:

$$a(x) = [b(x) > t]$$

- $b(x)$ — оценка принадлежности классу +1

Линейный классификатор

$$a(x) = [\langle w, x \rangle > t]$$

- $b(x) = \langle w, x \rangle$ — оценка принадлежности классу +1
- Обычно $t = 0$

Оценка принадлежности

- Как оценить качество $b(x)$?
- Порог выбирается позже
- Порог зависит от ограничений на точность или полноту

Оценка принадлежности

- Высокий порог:
  - Мало объектов относим к +1
  - Точность выше
  - Полнота ниже
- Низкий порог:
  - Много объектов относим к +1
  - Точность ниже
  - Полнота выше

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

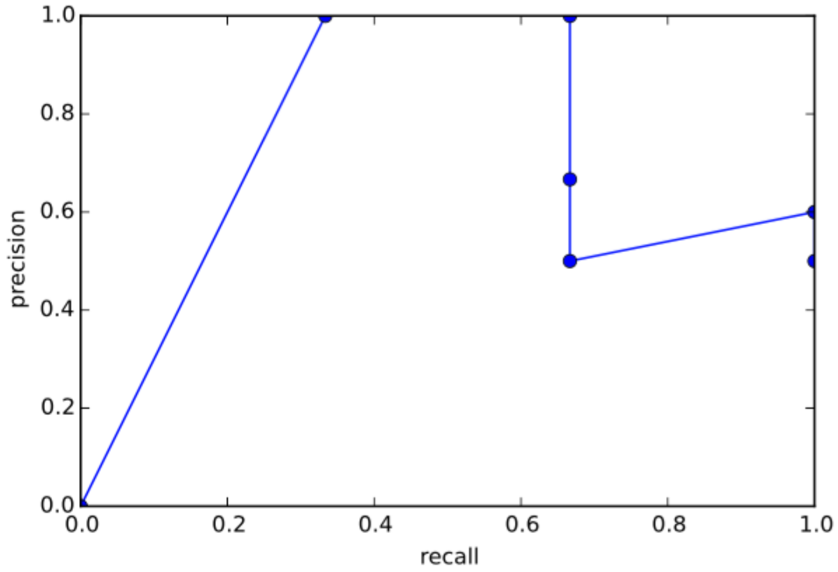
-1	-1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	-1	+1
0.01	0.09	0.12	0.15	0.29	0.4	0.48	0.6	0.83	0.9

Оценка принадлежности

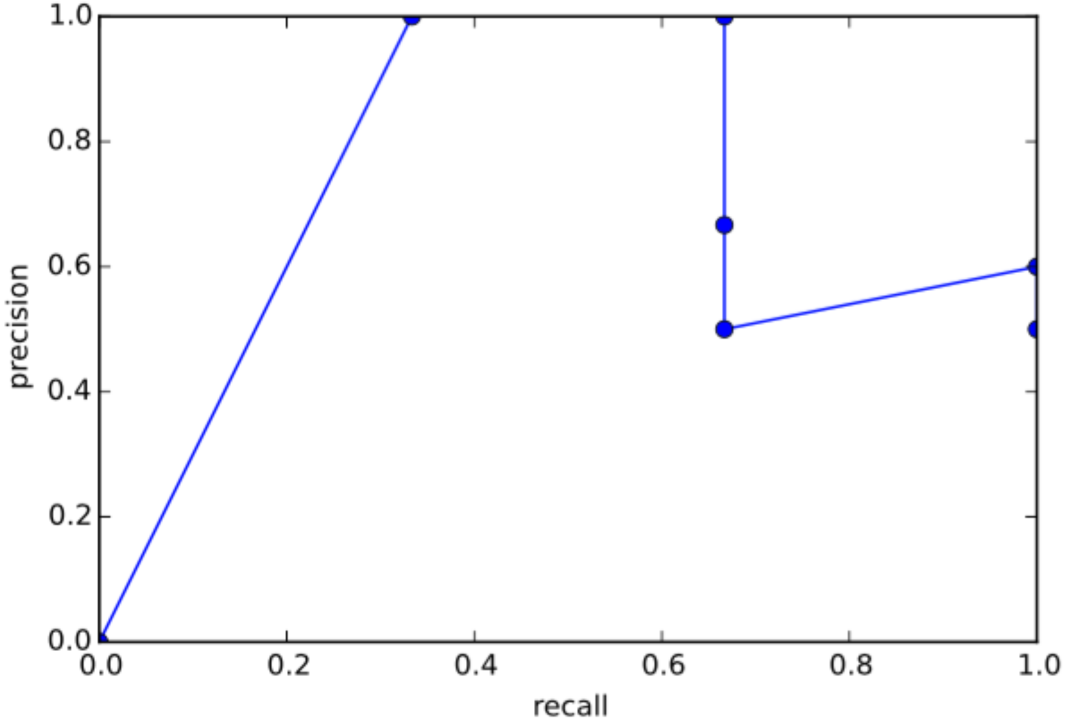
- Пример: кредитный скоринг
- $b(x)$ — оценка вероятности возврата кредита
- $a(x) = [b(x) > 0.5]$
- $\mathrm{precision} = 0.1, \mathrm{recall} = 0.7$
- В чем дело — в пороге или в алгоритме?

PR-кривая

- Кривая точности-полноты
- Ось X — полнота
- Ось Y — точность
- Точки — значения точности и полноты при последовательных порогах

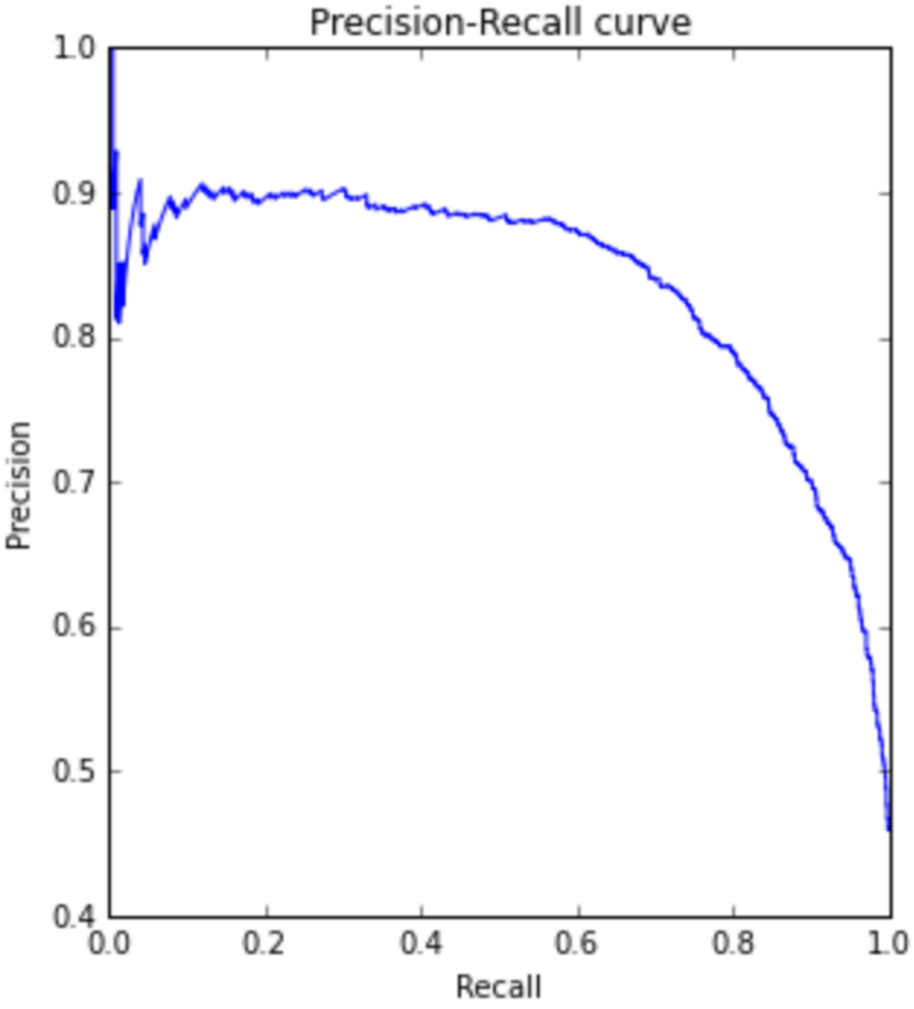


PR-кривая



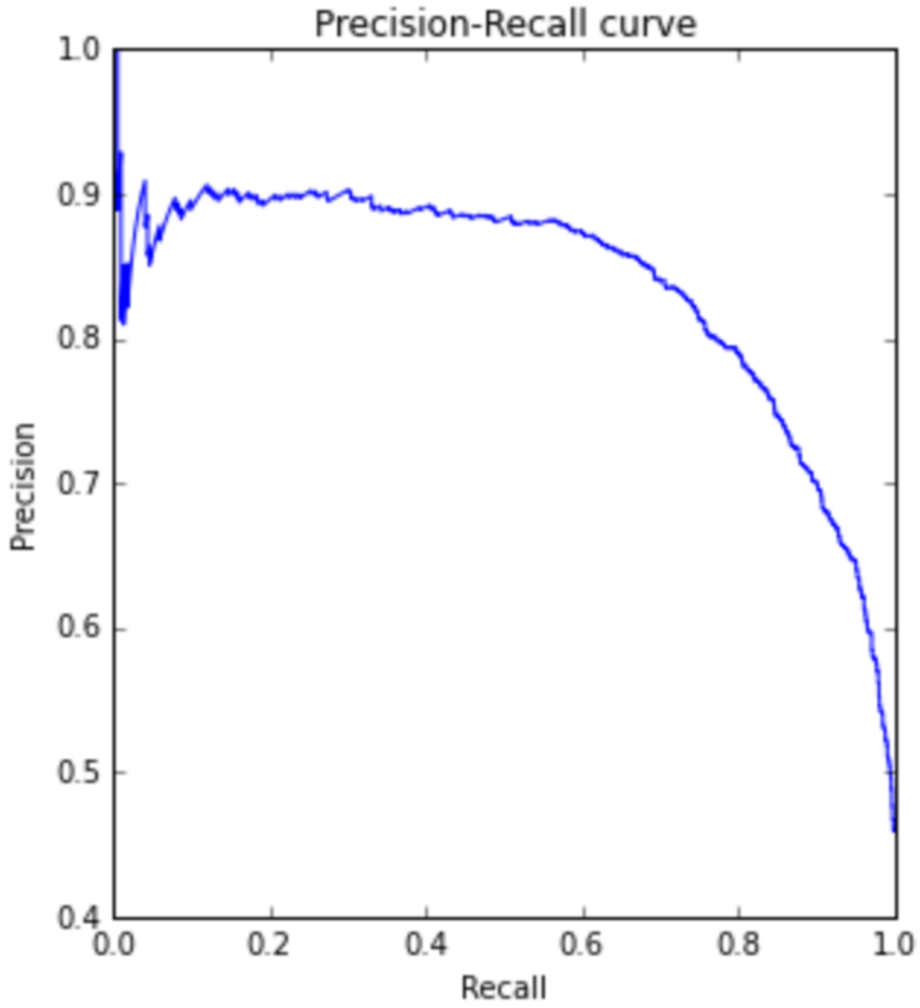
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

PR-кривая в реальности



PR-кривая

- Левая точка: (0, 0)
- Правая точка: $(1, r)$, r — доля положительных объектов
- Для идеального классификатора проходит через (1, 1)
- AUC-PRC — площадь под PR-кривой



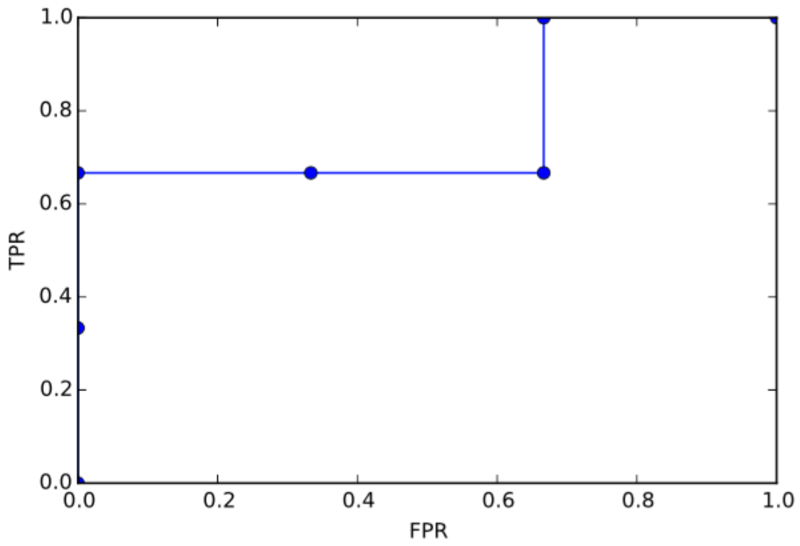
ROC-кривая

- Receiver Operating Characteristic
- Ось X — False Positive Rate

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$

- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$



ROC-кривая

- Receiver Operating Characteristic
- Ось X — False Positive Rate

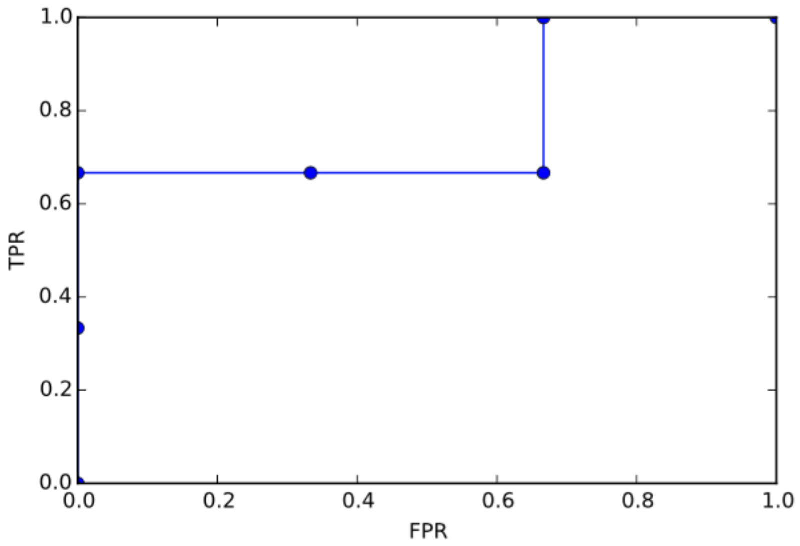
$$FPR = \frac{FP}{\boxed{FP + TN}}$$

Число отрицательных объектов

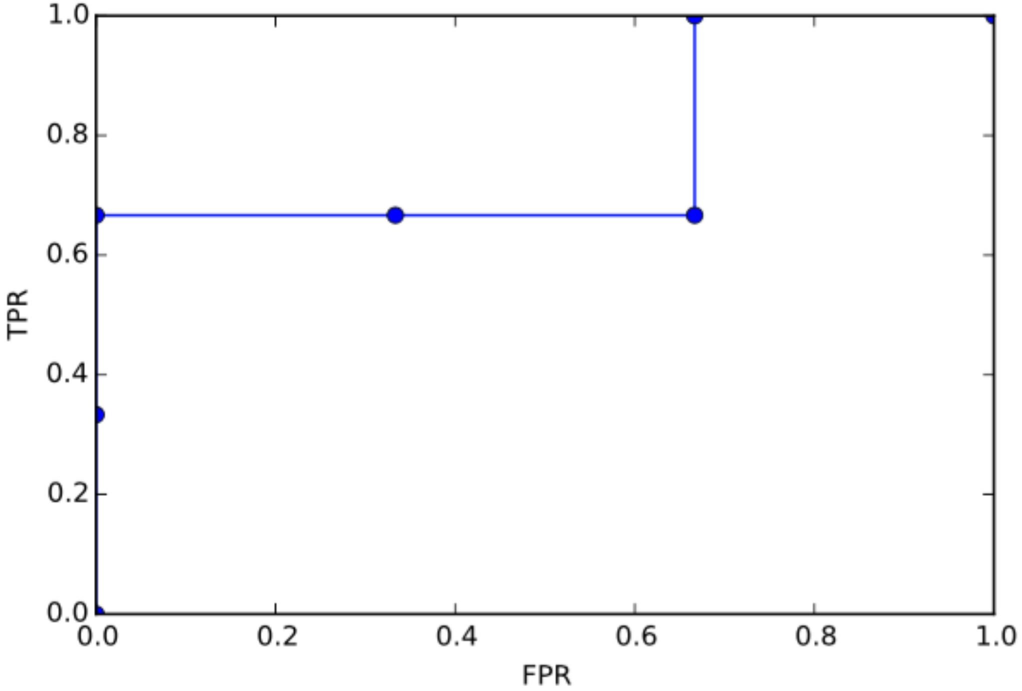
- Ось Y — True Positive Rate

$$TPR = \frac{TP}{\boxed{TP + FN}}$$

Число положительных объектов

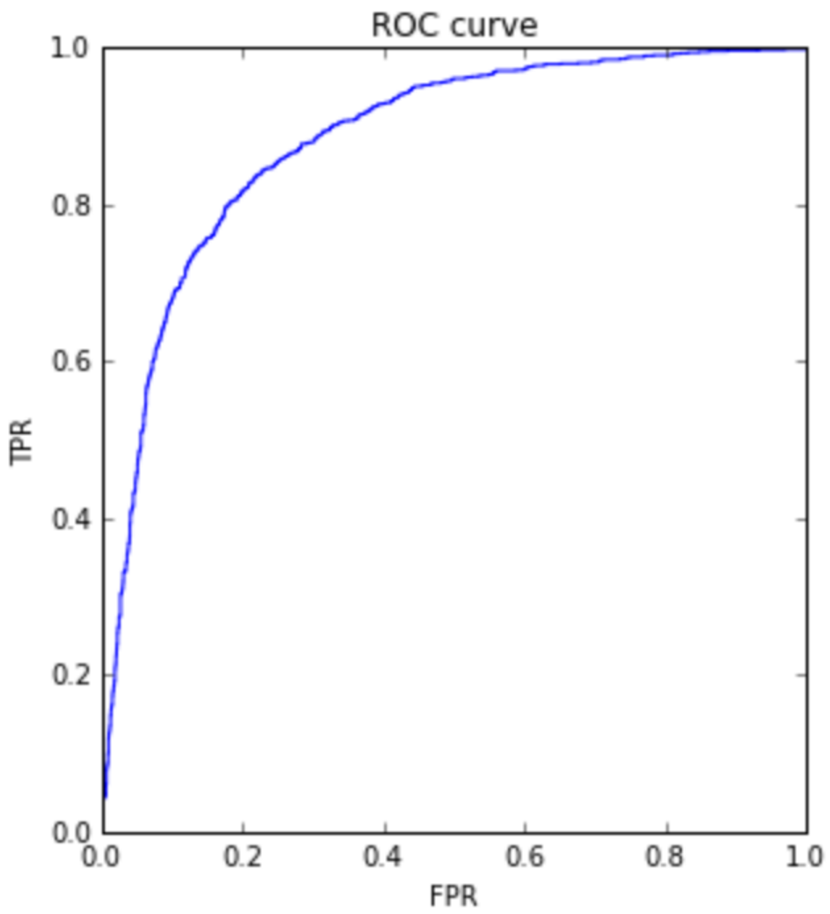


ROC-кривая



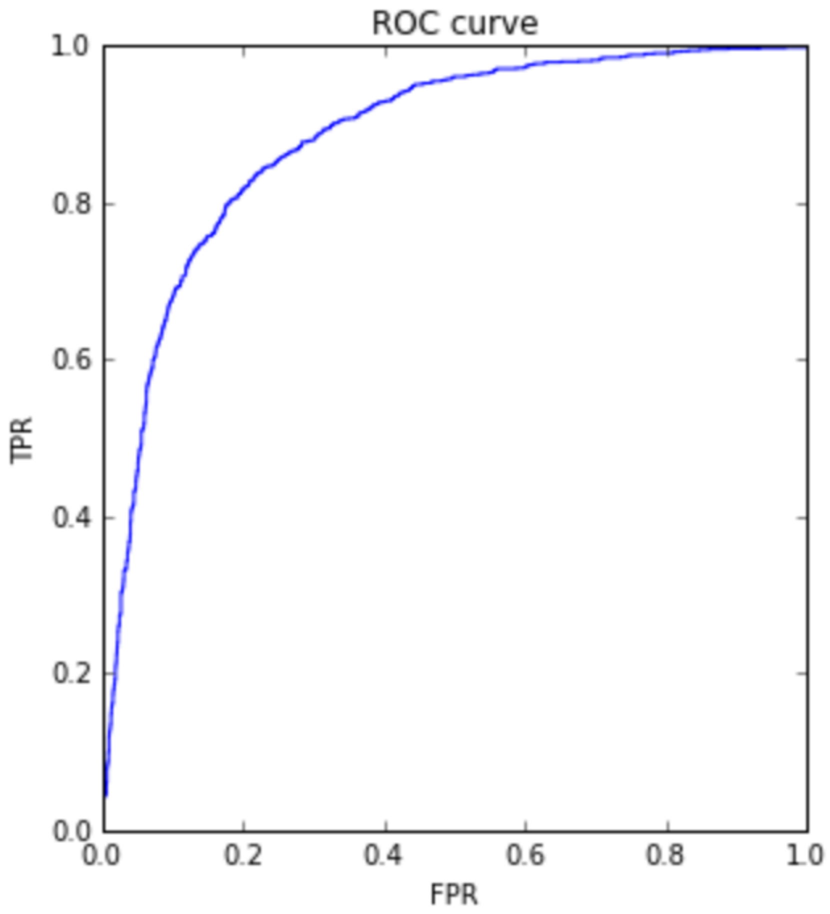
$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

ROC-кривая в реальности



ROC-кривая

- Левая точка: (0, 0)
- Правая точка: $(1, 1)$
- Для идеального классификатора проходит через (0, 1)
- AUC-ROC — площадь под ROC-кривой



AUC-ROC

$$FPR = \frac{FP}{FP+TN}; \qquad TPR = \frac{TP}{TP+FN}$$

- FPR и TPR нормируются на размеры классов
- AUC-ROC не поменяется при изменении баланса классов
- Идеальный алгоритм: $\mathrm{AUC{-}ROC} = 1$
- Худший алгоритм: $\mathrm{AUC{-}ROC} \approx 0.5$

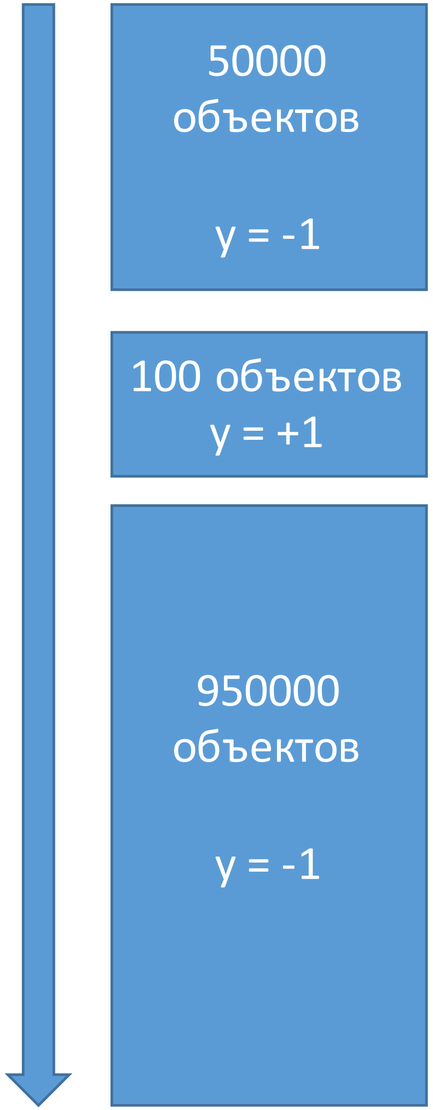
AUC-PRC

$$\text{precision} = \frac{TP}{TP+FP}; \qquad \text{recall} = \frac{TP}{TP+FN}$$

- Точность поменяется при изменении баланса классов
- AUC-PRC идеального алгоритма зависит от баланса классов
- Проще интерпретировать, если выборка несбалансированная
- Лучше, если задачу надо решать в терминах точности и полноты

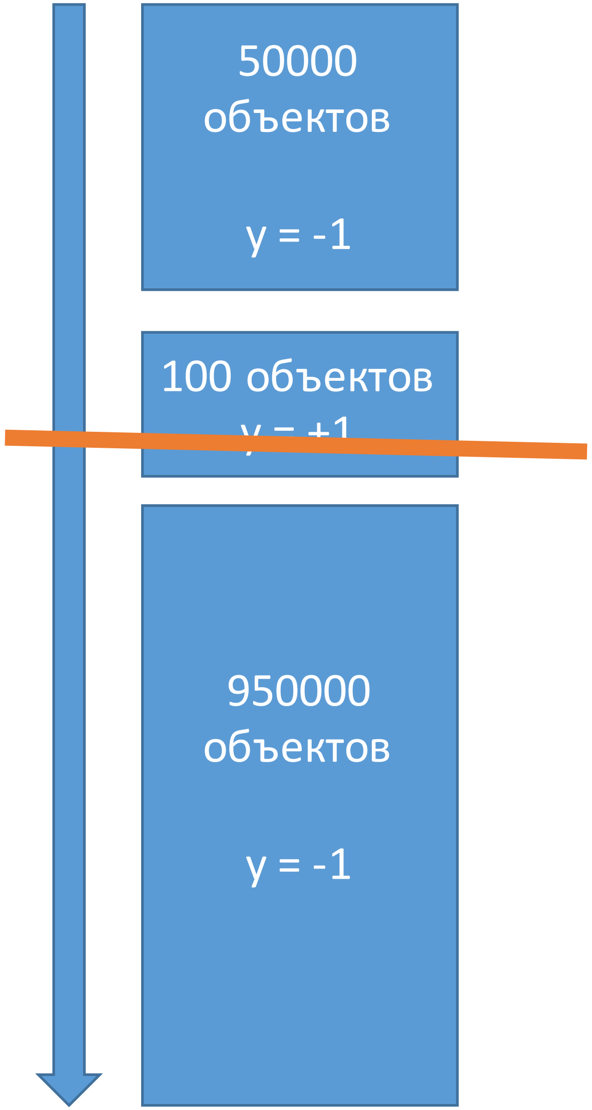
Пример

- AUC-ROC = 0.95
- AUC-PRC = 0.001



Пример

- Выберем конкретный классификатор
- $a(x) = 1$ — 50095 объектов
- Из них FP = 50000, TP = 95
- TPR = 0.95, FPR = 0.05
- precision = 0.0019, recall = 0.95



Параметры и гиперпараметры

Простой пример

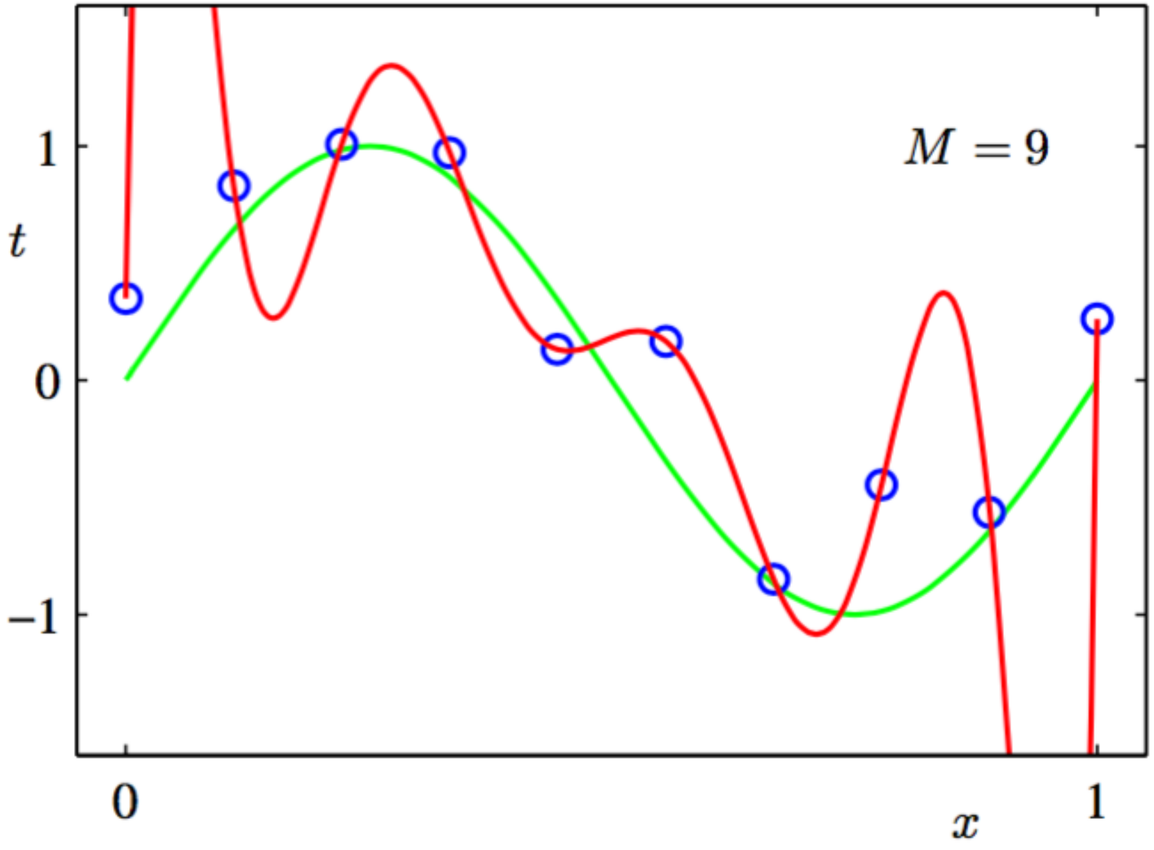
- Максимизируем удовлетворённость студентов
- Обучающая выборка — время до сессии
- Контрольная выборка — сессия
- Параметр — продолжительность лекции
- Гиперпараметр — минимальная продолжительность лекции

Простой пример

- Максимизируем удовлетворённость студентов
- Обучающая выборка — время до сессии
- Контрольная выборка — сессия
- Параметр — продолжительность лекции
- Гиперпараметр — минимальная продолжительность лекции

- Максимальная удовлетворённость на обучении — если не ограничивать продолжительность
- Но оценки во время сессии будут ужасными

Переобучение



Регуляризация

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}(\langle w, x_i\rangle - y_i)^2 + \lambda\|w\|^2 \to \min_w$$

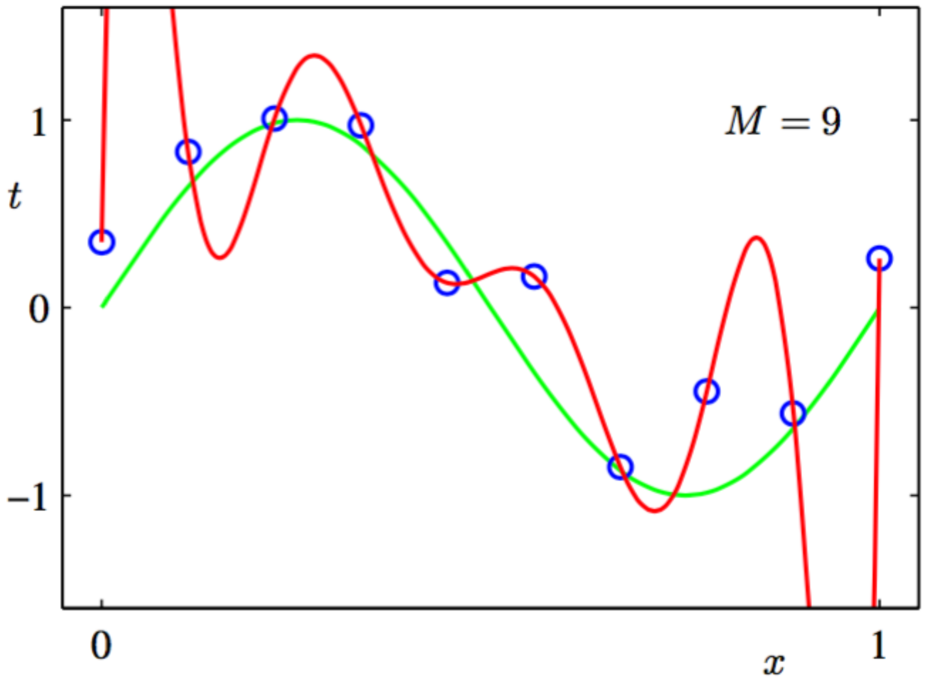
Гиперпараметры

- Параметры модели — веса w
  - Позволяют подогнать модель под обучающую выборку

  - Настраиваются по обучающей выборке
- Гиперпараметр модели — коэффициент регуляризации λ
  - Определяют сложность модели
  - Лучшее качество на обучении достигается при $\lambda = 0$
  - Необходимо настраивать по другим данным

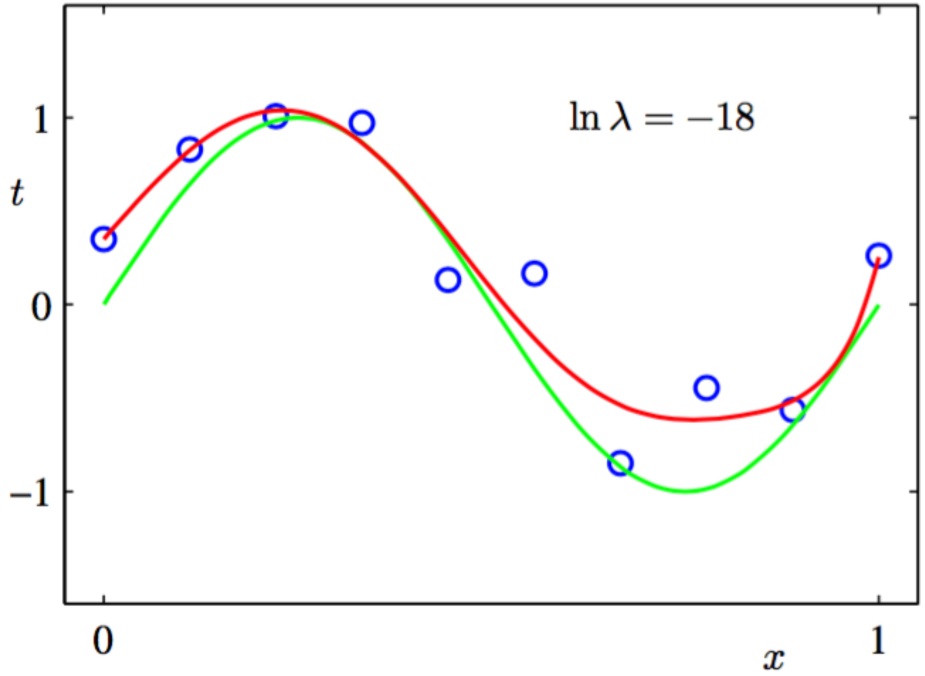
Гиперпараметры

Без регуляризации



Высокое качество на обучении

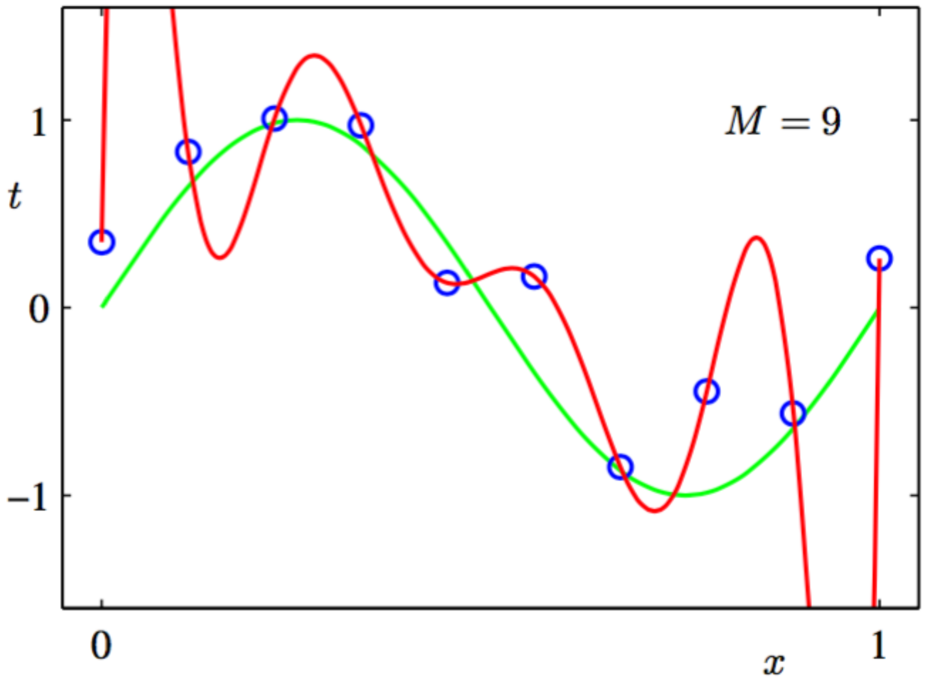
С регуляризацией



Качество на обучении ниже

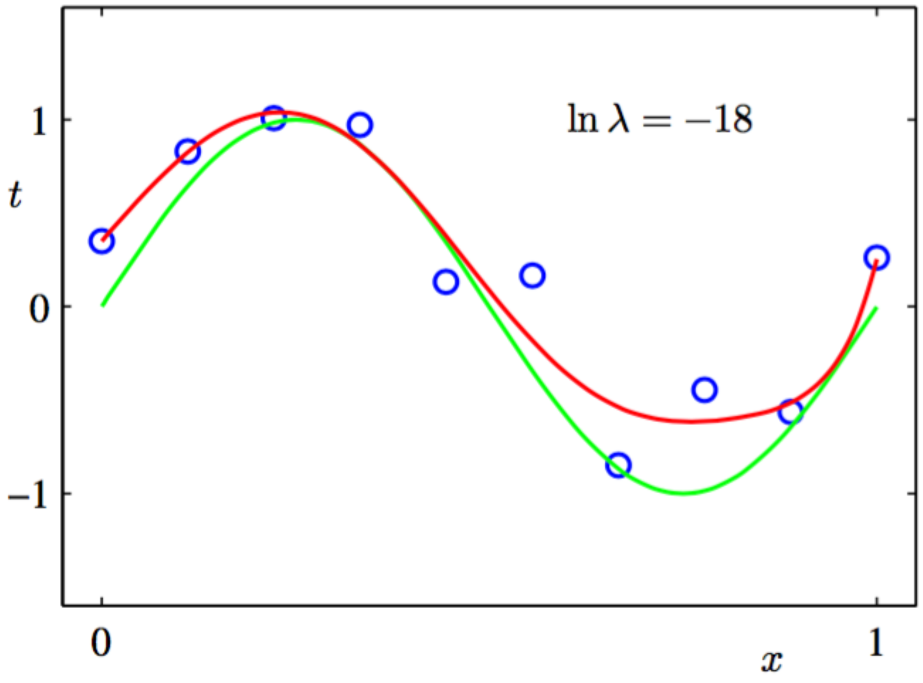
Гиперпараметры

Без регуляризации



Низкая обобщающая способность

С регуляризацией

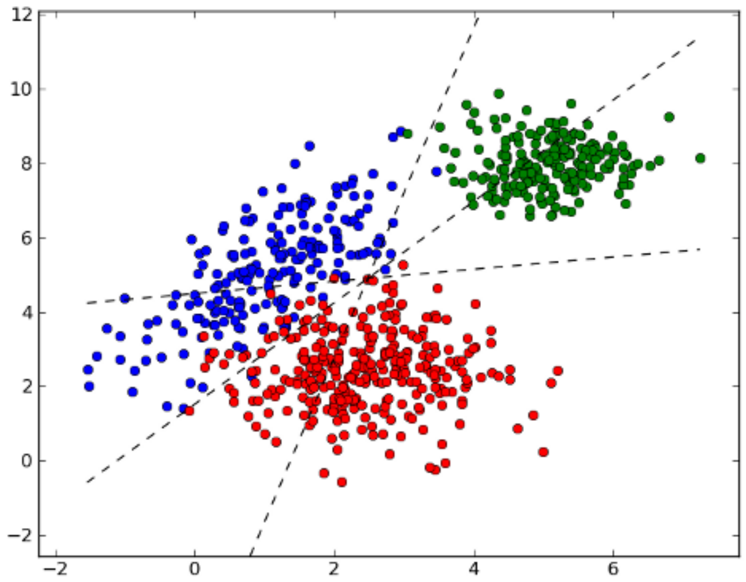


Высокая обобщающая способность

Многоклассовые задачи

Многоклассовая классификация

- $\mathbb{Y} = \{1, 2, \dots, K\}$



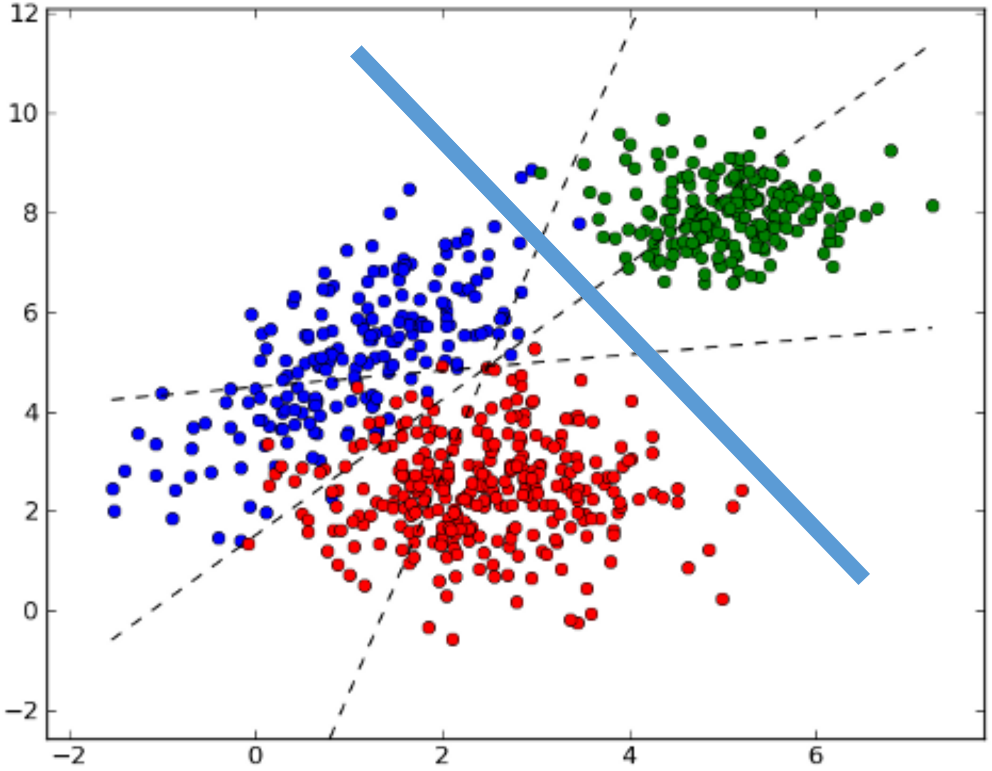
Бинарная классификация

$$a(x) = \operatorname{sign} \langle w, x \rangle$$

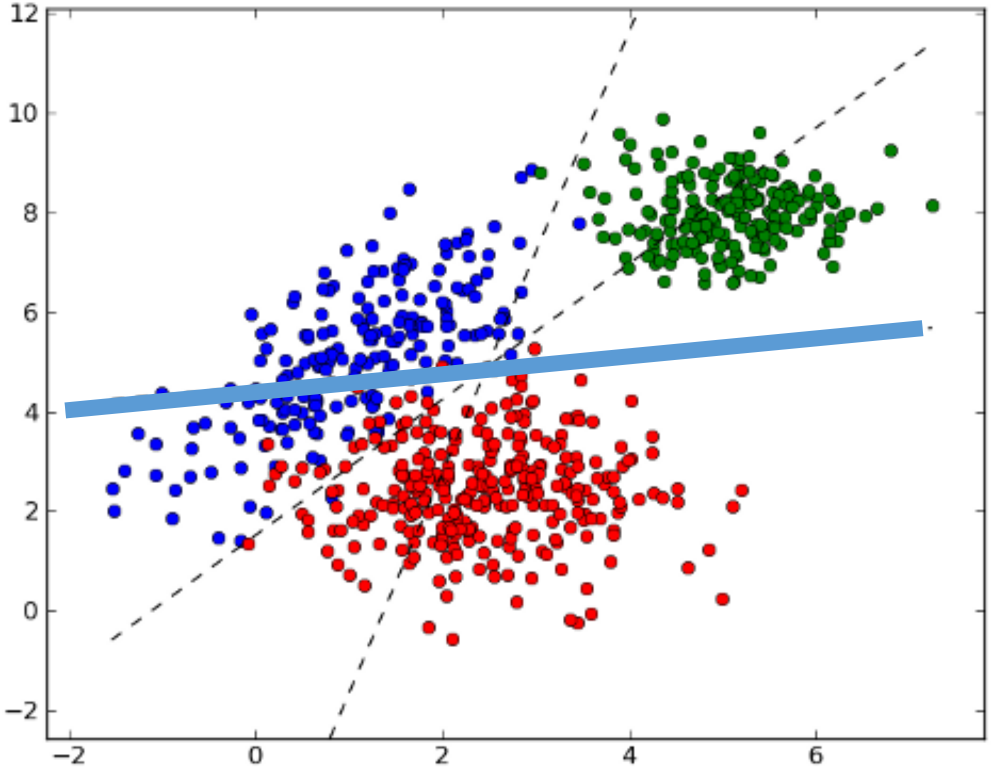
One-vs-all

- Способ сведения многоклассовой задачи к набору бинарных классификаций
- Обучаем свой классификатор для каждого класса
- Задача: отделение класса от всех остальных

One-vs-all



One-vs-all



One-vs-all

- K задач бинарной классификации
- k-я задача:
  - $X = (x_i, [y_i = k])_{i=1}^{\ell}$
  - Классификатор $a_k(x) = \operatorname{sign} \langle w_k, x \rangle$
- Алгоритм:

$$a(x) = \arg \max_{k \in \{1,\dots,K\}} \langle w_k, x \rangle$$

Матрица ошибок

	$y = 1$	$y = 2$	…	$y = \mathrm{K}$
$a(x) = 1$	q_{11}	q_{12}	…	q_{1K}
$a(x) = 2$	q_{21}	q_{22}	…	q_{2K}
…	…	…	…	…
$a(x) = \mathrm{K}$	q_{K1}	q_{K2}	…	q_{KK}

Доля правильных ответов

$$\text{accuracy}(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

Точность и полнота

- Относительно каждого класса
- Можно усреднить точность и полноту по всем классам
- Можно усреднить F-меру

Резюме

- Два вида классификаторов:
  - Ответ — класс
  - Ответ — оценка принадлежности классу
- Метрики в первом случае: доля правильных ответов, точность, полнота, F-мера
- Метрики во втором случае: AUC-ROC, AUC-PRC
- В регрессии: MSE, MAE, R^2
- Кросс-валидация
- Многоклассовая классификация: one-vs-all