Прикладные задачи анализа данных

МИНИМИЗАЦИЯ ОШИБОК

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

Минимизация конкретной функции ошибок на практике

1. Она минимизируется напрямую

RMSE – Ridge

2. Она может быть приближена (имитирована другой)

RLMSE

3. Реализация минимизации конкретной ф-ии

- XGBoost – прописываем метрику и производные
- ниже расщепление в деревьях для AUC

4. Решаем одной, донастариваем на другую

При раннем останове смотрим на значение целевой функции

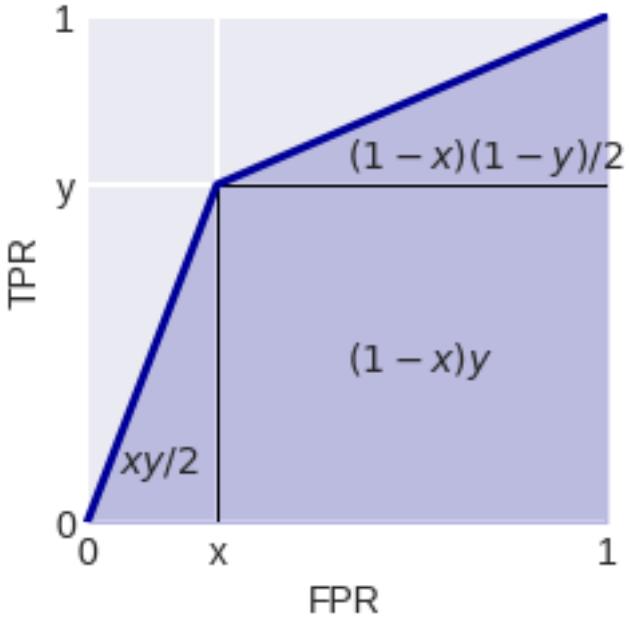
Идеология РП

Прямая настройка – идеология РП

$$F(\underbrace{B}_{\text{стандартная оптимизация}} \cdot \underbrace{C_c}_{\text{простое РР}}) \to \min_c$$

Как в задаче CrowdFlower (выбор порогов)

AUC ROC: Полностью бинарный случай $a \in \{0,1\}^m$, $y \in \{0,1\}^m$



$$S = \frac{xy}{2} + \frac{(1-x)(1-y)}{2} + (1-x)y$$

$$S = \frac{1-x+y}{2}$$

$$\text{AUC} = \frac{1-\text{FPR}+\text{TPR}}{2} = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\text{FP}}{\text{FP}+\text{TP}}+\text{TPR}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(1-\frac{\text{FP}}{\text{FP}+\text{TN}}+\frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FN}}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{\text{TN}}{\text{FP}+\text{TN}}+\frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FN}}\right)$$

AUC ROC: Полностью бинарный случай $a \in \{0,1\}^m$, $y \in \{0,1\}^m$

$$AUC = \frac{R_0 + R_1}{2}$$

Среднее арифметическое полноты по классам 0 и 1…
это же сбалансированная точность!

А если выровнять мощности (как?),
то можно смотреть на точность…

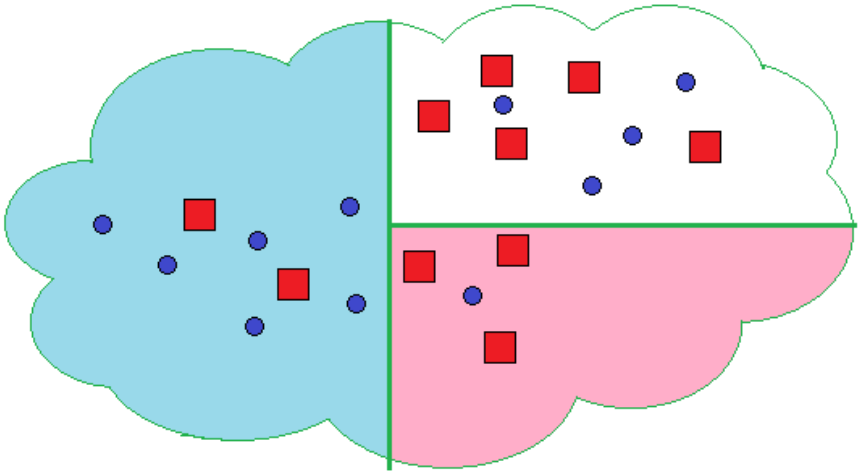
Максимизация AUC ~

$$TPR - FPR \to \max$$

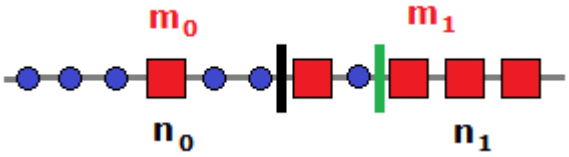
Реальный случай: Сбербанк

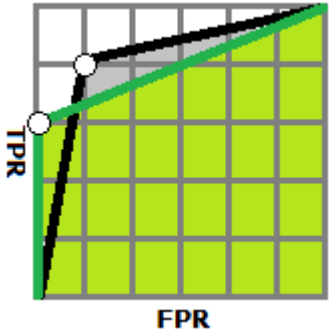
Использование «тайных знаний» на практике

Строим деревья в решающем лесе – хотим минимизировать AUC ROC



Хотим выбирать оптимальный порог





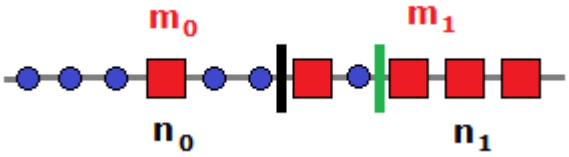
n_i – числа точек в листах

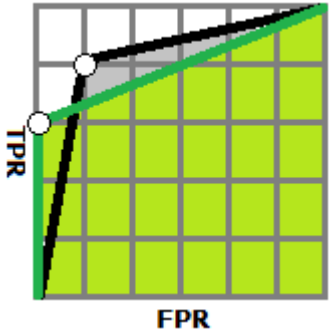
m_i – числа объектов первого класса в листах

$$m = m_1 + m_0$$

$$n = n_1 + n_0$$

Хотим выбирать оптимальный порог





$$AUC = \frac{1}{2}\left[\frac{m_1}{m} + \frac{n_0 - m_0}{n-m}\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{m_1}{m} + \frac{(n-m)-(n_1-m_1)}{n-m}\right] =$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\left[\frac{m_1}{m} - \frac{n_1-m_1}{n-m}\right]$$

Хотим выбирать оптимальный порог

Логично $|AUC - 0.5| \to \max$

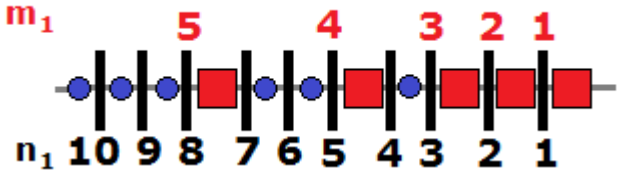
$$\left|\frac{m_1}{m} - \frac{n_1 - m_1}{n - m}\right| \to \max$$

Модуль разностей вероятностей классов «0», «1» в правом листе

$$\left|\frac{m_1 n - n_1 m}{m(n-m)}\right| \to \max$$

$$|m_1 n - n_1 m| \to \max$$

А ведь тогда просто реализовать перебор порогов в скриптовых языках



RF для AUC

Получили «новую» модель алгоритмов!

ДЗ Исследовать подобный критерий…
помогает ли в оптимизации AUC ROC?

Задача классификации {0,1} с ответами на [0,1]

Реальный случай

Пусть ошибка:

$$|\, y_i - a_i \,| \cdot \begin{cases} 0.8, & y_i = 1, \\ 0.2, & y_i = 0, \end{cases} \quad \textbf{(*)}$$

где $y_i \in \{0,1\}$ **– верная классификация** i**-го объекта,**

$a_i \in [0,1]$ **– ответ нашего алгоритма.**

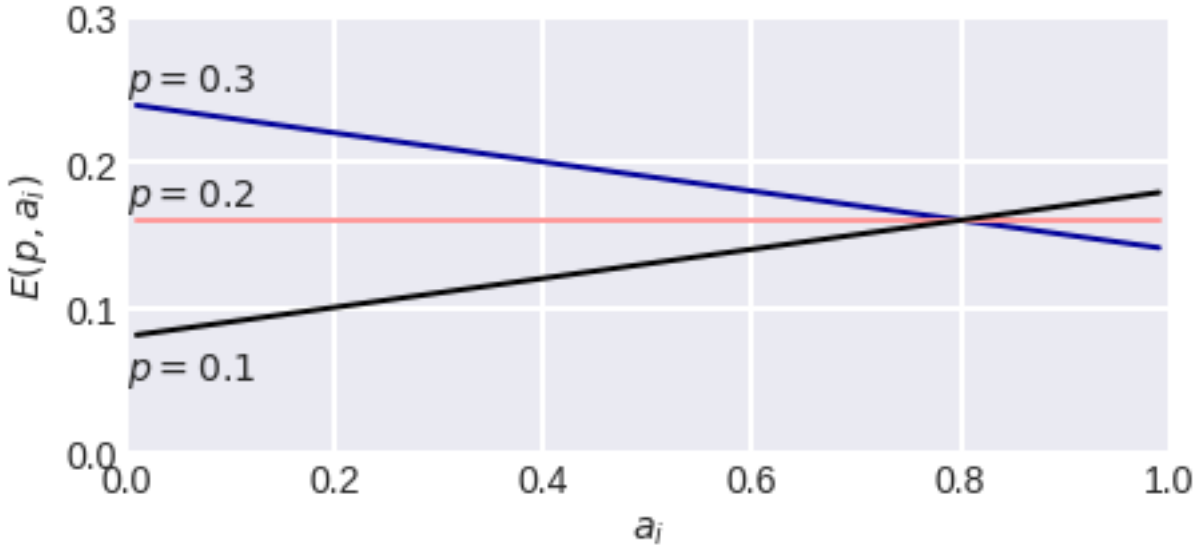
Заказчик: важно получать значения из отрезка [0,1]
и интерпретировать как вероятности принадлежности к классу 1

Вычисление матожидания ошибки

Пусть i-й объект принадлежит к классу 1 с вероятностью p

Посчитаем матожидание нашей ошибки:

$$0.8\,|1-a_i\,|\,p+0.2\,|\,a_i\,|(1-p)=$$
$$=0.8p-0.8pa_i+0.2a_i-0.2pa_i=$$
$$=0.8p-(p-0.2)a_i$$



Вычисление матожидания ошибки

$$0.8p-(p-0.2)a_i \to \min$$

Оптимальное решение
(которое минимизирует матожидание ошибки)

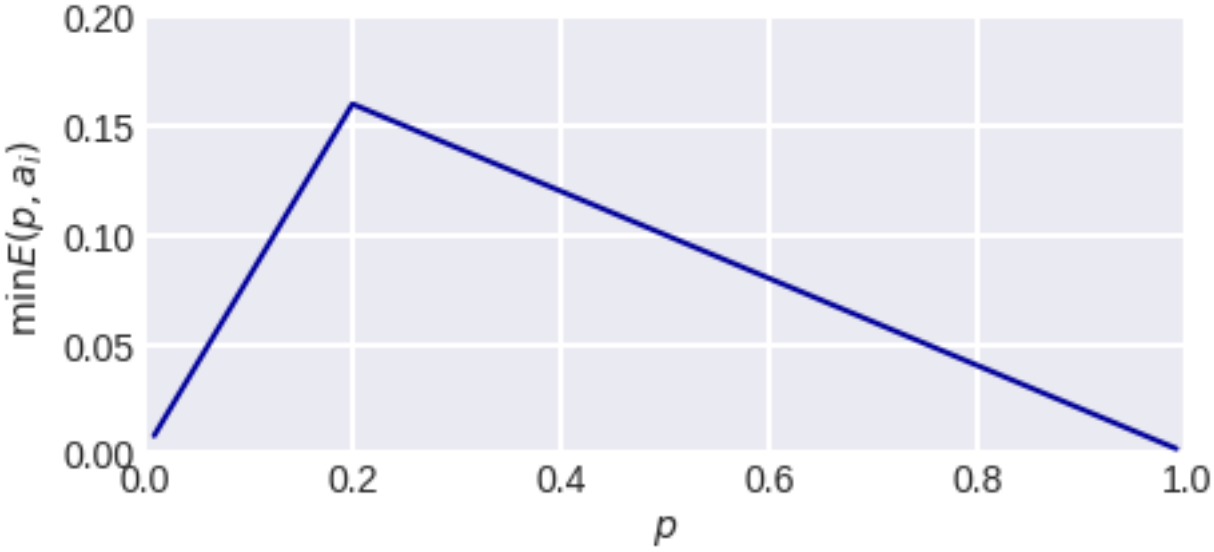
$$a_i=\begin{cases}0, & p<0.2,\\ 1, & p\geq 0.2.\end{cases}$$

Функционал (*) вынуждает нас
выдавать значения из множества {0,1}.

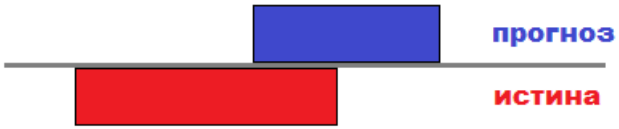
В чём ошибка заказчика, как исправить?

Неправильный выбор функционала

Интересно… матожидание ошибки (при оптимальном решении) в зависимости от p.



Задачи с интервальными признаками…
Как решать



Качество измеряем, например так:

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$

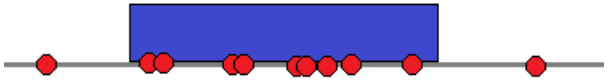
1 способ

Две задачи:
Целевой признак – начало интервала,
Целевой признак – конец интервала

- на практике работает не очень хорошо
- надо дорабатывать классические алгоритмы
(т.к. в случае начала интервала лучше занижать…)

2 способ

Целевой признак – середина интервала,
плюс оцениваем отклонение от середины



- иногда противоречит природе данных
(интервал заходит в отрицательную область)

Концепция решающего правила

Как всё-таки минимизировать нужный функционал…

1. **Есть предварительный ответ**

$$[a,b]$$

2. **Формируем окончательный параметрический…**

$$\left[\frac{a+b}{2}-\varepsilon\frac{b-a}{2},\frac{a+b}{2}-\varepsilon\frac{b+a}{2}\right]$$

3. **Настраиваем параметр**

Прямой перебор – явная минимизация

Можно и по-другому…

Но:

1. **Есть базовые алгоритмы (операторы)**
2. **Есть параметризованный способ перевода их ответов в нужные**
3. **Прямая минимизация функционала**

Из задачи Rossmann Store Sales

Root Mean Square Percentage Error (RMSPE)

$$\sqrt{\frac{1}{|\{i \mid y_i > 0\}|}\sum_{i:\, y_i>0}\left(\frac{a_i - y_i}{y_i}\right)^2}$$ и

Оправдание деформации логарифмом…

Оправдание деформации логарифмом...

Ищем деформацию

$$\frac{a-y}{y} \approx F(a)-F(y)$$

чтобы функционал превратился в RMSE

$$\sqrt{\frac{1}{|\{i \mid y_i > 0\}|}\sum_{i:\, y_i>0}(F(a_i)-F(y_i))^2}$$

Пусть $a = y+\delta$**, тогда**

$$\frac{\delta}{y} \approx F(y+\delta)-F(y) = F'\delta + o(\delta)$$

решим уравнение

$$\frac{\delta}{y} = F'\delta$$

Оправдание деформации логарифмом…

$$\frac{1}{y} = \frac{\partial F}{\partial y}$$

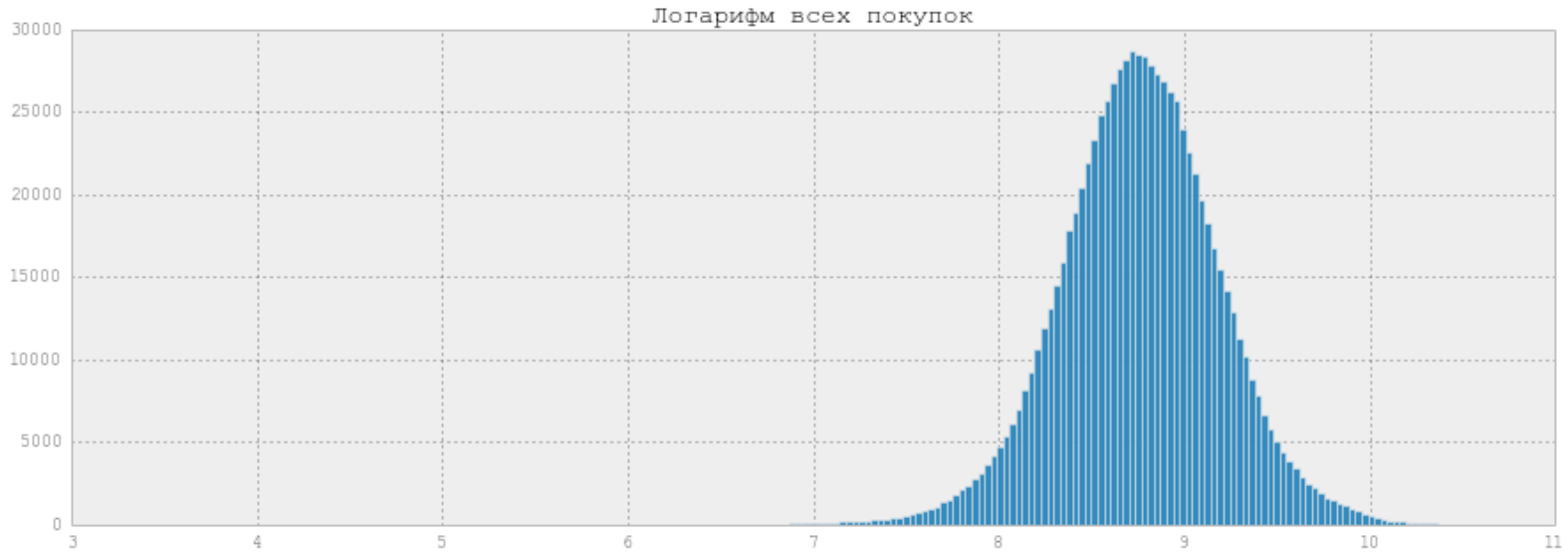
$$F(y) = \ln|y| + C$$

Выбираем деформацию $F(y) = \ln|y|$

Но, возможно, всё проще…

при логарифмировании отклонения похожи на нормальные

Распределения покупок



Метод градиентного спуска

Задача оптимизации

$$J(\tilde{w}) \to \min$$

пусть это

ФУНКЦИЯ ОШИБКИ (ПАРАМЕТРЫ АЛГОРИТМА)

$$\tilde{w} := \tilde{w} - \alpha \left. \frac{\partial J}{\partial \tilde{w}} \right|_{\tilde{w}}$$

Возьмём конкретную задачу и метод

Качество: LOG LOSS

Метод: логистическая регрессия

(правильнее: сигмоида!)

$$LOGLOSS = -\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i \log a_i + (1-y_i)\log(1-a_i))$$

$$a = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

$z = z(w)$ **– может как-то зависеть от параметров** w.

На конкретном объекте:

$$J(w) = -\begin{cases} \log a, & y = 1, \\ \log(1-a), & y = 0. \end{cases}$$

Итак,

$$J(w) = -\begin{cases} \log\left(\dfrac{1}{1+e^{-z}}\right), & y=1, \\ \log\left(1-\dfrac{1}{1+e^{-z}}\right), & y=0. \end{cases}$$

$$J(w) = -\begin{cases} -\log\left(1+e^{-z}\right), & y=1, \\ -z-\log\left(1+e^{-z}\right), & y=0. \end{cases}$$

$$\frac{\partial \log\left(1+e^{-z}\right)}{\partial w} = -\frac{1}{1+e^{-z}} e^{-z} \frac{\partial z}{\partial w}$$

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = -\frac{\partial z}{\partial w}\begin{cases} \dfrac{e^{-z}}{1+e^{-z}}, & y=1, \\ -1+\dfrac{e^{-z}}{1+e^{-z}}, & y=0. \end{cases}$$

Поэтому

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = -\frac{\partial z}{\partial w}\begin{cases} 1-\dfrac{1}{1+e^{-z}}, & y=1, \\ 0-\dfrac{1}{1+e^{-z}}, & y=0. \end{cases} = -\frac{\partial z}{\partial w}(y-a)$$

Получаем формулу для коррекции весов:

$$w = w + \alpha(y-a)\frac{\partial z}{\partial w}$$

Очень логичная: изменение зависит от величины ошибки

$$(y-a)$$

В классической логистической регрессии

$$a = \frac{1}{1 + e^{-\sum_{t=1}^{n} w_t [x]_t}}$$

(линейная комбинация признаков)

Поэтому

$$w = w + \alpha(y - a)x$$

x **– признаковое описание объекта**

Вопрос с подвохом

Качество: LOG LOSS

Метод: линейная регрессия

$$J(w) = -\begin{cases} \log(z), & y = 1, \\ \log(1-z), & y = 0. \end{cases}$$

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = -\frac{\partial z}{\partial w}\begin{cases} 1/z, & y = 1, \\ -1/(1-z), & y = 0, \end{cases} = \frac{1}{z+y-1}\frac{\partial z}{\partial w}$$

тогда

$$w = w - \frac{\alpha}{z+y-1}\frac{\partial z}{\partial w}$$

Что смущает в этой формуле?

Почему так получилось?

Вопрос с подвохом

$$w = w - \frac{1}{z + y - 1}\frac{\partial z}{\partial w}$$

Коррекция происходит даже при абсолютно правильном ответе…

минимум не при z=1

$$J(w) = -\begin{cases} \log(z), & y = 1, \\ \log(1-z), & y = 0. \end{cases}$$

Нужны ещё ограничения

$$\min(\max(z, 0), 1)$$

В логистической регрессии

$$\frac{1}{1+e^{-z}} \in [0, 1]$$

Линейная регрессия с НСКО

$$J(\tilde{w}) = (\tilde{w}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{x} - y)^2 \to \min$$

$\tilde{x}$ **– объект,**

y **– его регрессионная метка**

$$\frac{\partial J}{\partial \tilde{w}} = 2 \cdot (\tilde{w}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{x} - y) \cdot \tilde{x}$$

$$\tilde{w} := \tilde{w} - \alpha \cdot (\tilde{w}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{x} - y) \cdot \tilde{x}$$

Выберем α

Коррекция такая же как в логистической регрессии с logloss-ом!

Метод наискорейшего спуска

$$((\tilde{w}-\alpha\cdot(\tilde{w}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y)\cdot\tilde{x})^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y)^2\to\min$$

$$\tilde{w}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-\alpha\cdot(\tilde{w}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y)\cdot\tilde{x}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y=0$$

$$\tilde{w}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y=\alpha\cdot(\tilde{w}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}-y)\cdot\tilde{x}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}$$

$$\alpha=\frac{1}{\tilde{x}^{\mathrm{T}}\cdot\tilde{x}}$$

Задача 1.

Качество: СКО

$$J = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i - a_i)^2$$

Метод: логистическая регрессия

$$a = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

Вычислить формулу для коррекции весов методом стохастического градиентного спуска

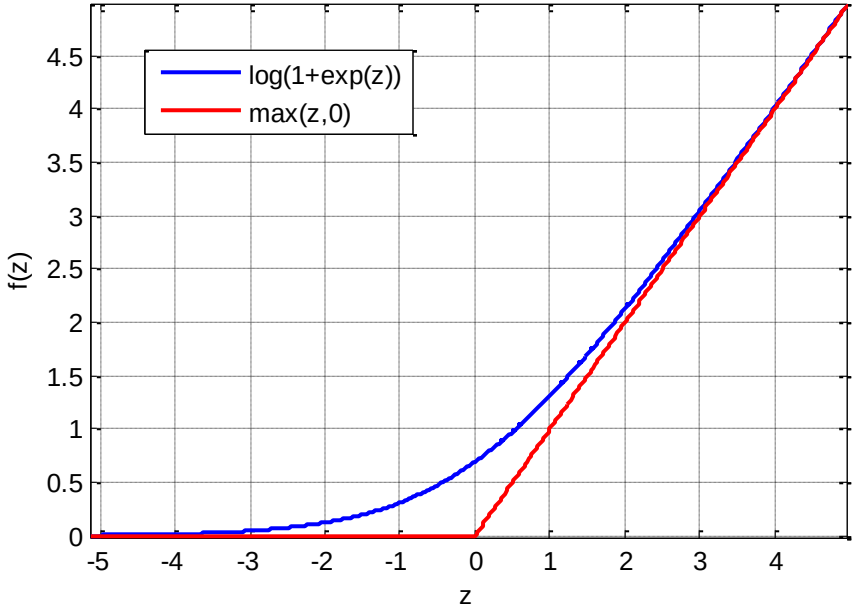
Задача 2.

Качество: СКО

$$J = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i - a_i)^2$$

Метод: $a = \ln(1+e^z)$

Вычислить формулу для коррекции весов методом стохастического градиентного спуска



Задача 2. Ответ

$$w = w - \alpha \frac{(a-y)}{1+e^{-z}} \frac{\partial z}{\partial w}$$

Почти классический вариант (линейная регрессия + СКО), но с поправкой на отрицательной оси…

$$w = w - \alpha \frac{(a-y)}{1+e^{-z}} \frac{\partial z}{\partial w}$$

классика

сигмоида

$$\frac{(a-y)}{1+e^{-z}} \approx \begin{cases} (a-y), & z >> 0 \\ 0, & z << 0 \end{cases}$$

Всё очень логично!

Задача 1. Ответ

$$w = w - \alpha \cdot a(a-1)(a-y)\frac{\partial z}{\partial w}$$

что-то новое...

$$w = w - \alpha \cdot a(a-1)(a-y)\frac{\partial z}{\partial w}$$

классика

Вопрос: что плохого в это формуле?

Задача 1. Ответ

$$w = w - \alpha \cdot a(a-1)(a-y)\frac{\partial z}{\partial w}$$

что-то новое...

$$w = w - \alpha \cdot a(a-1)(a-y)\frac{\partial z}{\partial w}$$

классика

Вопрос: что плохого в это формуле?

В случае полностью неправильного ответа, например

$$y = 0, a \approx 1$$

коррекции почти не будет:

$$a(a-1)(a-y) \approx 0$$

Вопрос: что с этим делать?

Задача. Вычислить Cohen's Kappa

	yes	no
yes	20	5
no	10	15

0.4

	yes	no
yes	45	15
no	25	15

~0.13

	yes	no
yes	30	10
no	10	5

~0.08

	yes	no
yes	30	20
no	10	15

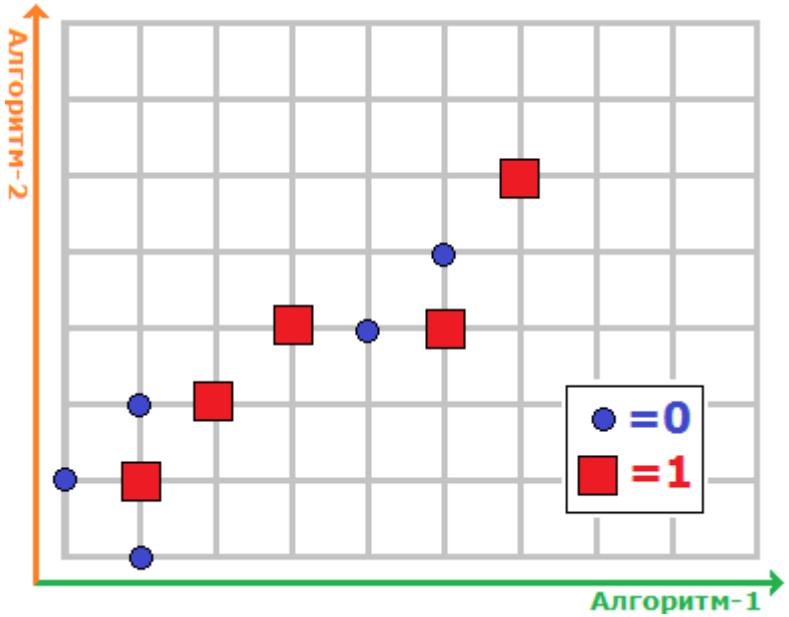
~0.18

```
s = sum(H.iloc[i,i] for i in range(2)) # 35
n = H.values.sum() # 50
po = s / n # 0.7
pe = sum(H.iloc[i,:].sum() * H.iloc[:,i].sum() /
         n**2 for i in range(2)) # 0.5 = 36/n**2 + 64/n**2
(po - pe) / (1 - pe) # 0.4

from sklearn.metrics import cohen_kappa_score
cohen_kappa_score(a, y) # но это по ответам!
```

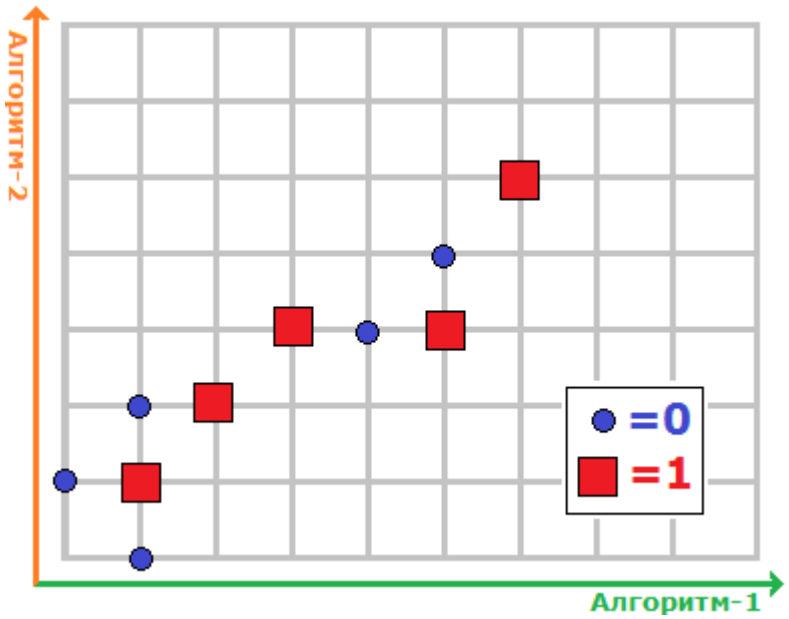
Упражнение №1.

Рассматривается задача классификации на два класса. На рисунке показаны объекты в пространстве ответов двух алгоритмов. Вычислить AUC ROC для алгоритмов.



Упражнение №1 - Решение

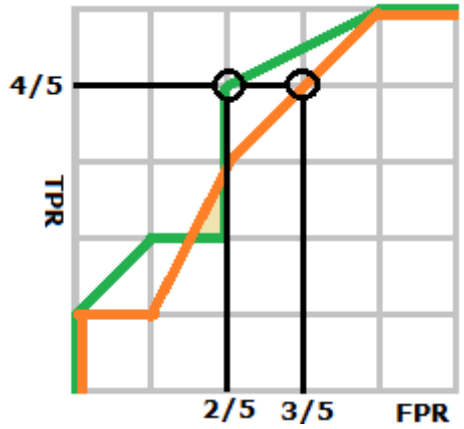
1. Смотрим проекции на оси – ответы алгоритмов

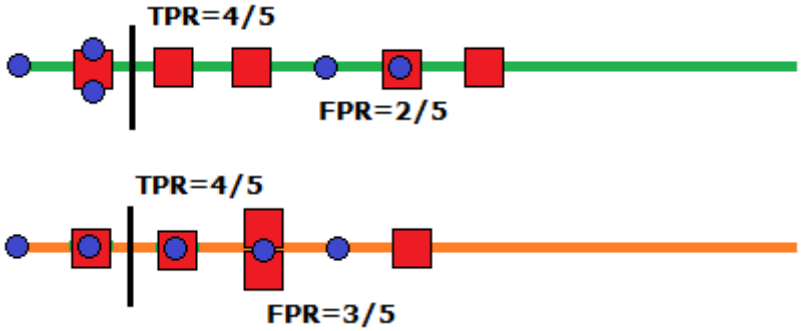


Первый алгоритм:

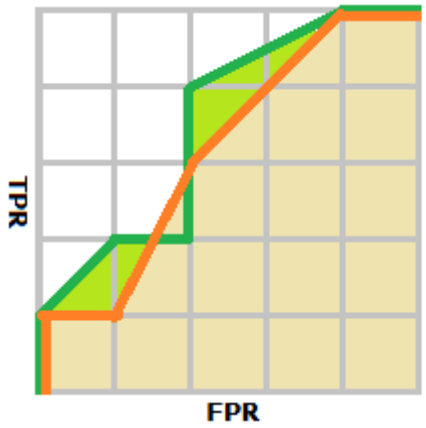
Второй алгоритм:

2. По проекциям строим ROC - кривые:





3. Вычисляем площади под ROC - кривыми:



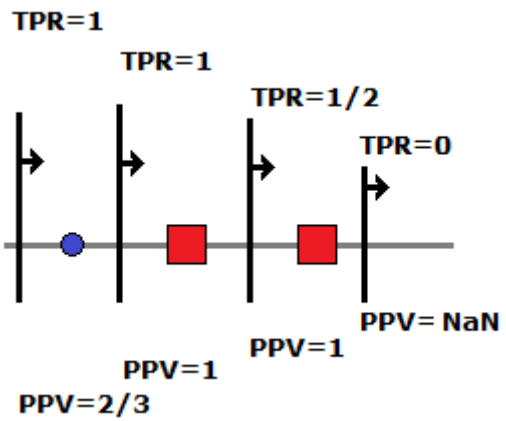
16/25
17.5/25

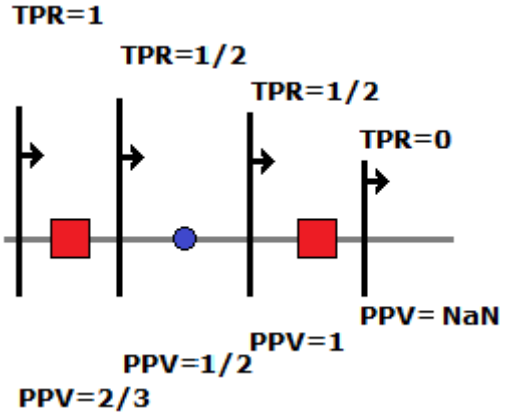
Упражнение №2.

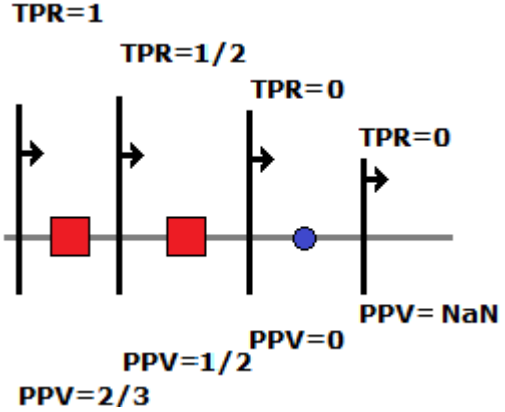
Какие значения F_1-меры могут быть у классификатора в задаче с двумя непересекающимися классами и тремя объектами?

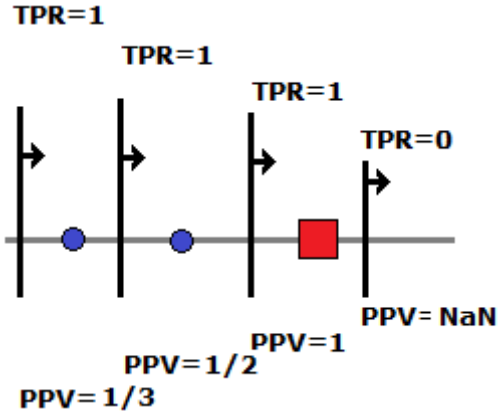
Упражнение №2 – Решение.

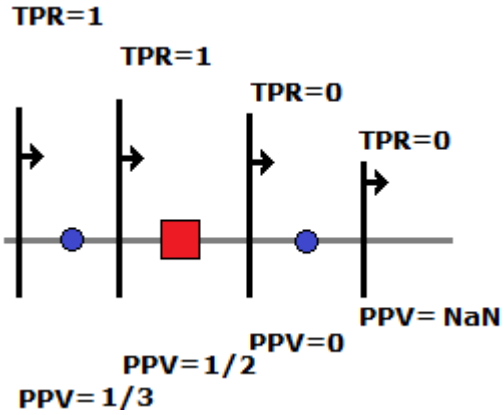
Можно честно рассмотреть все возможные случаи:

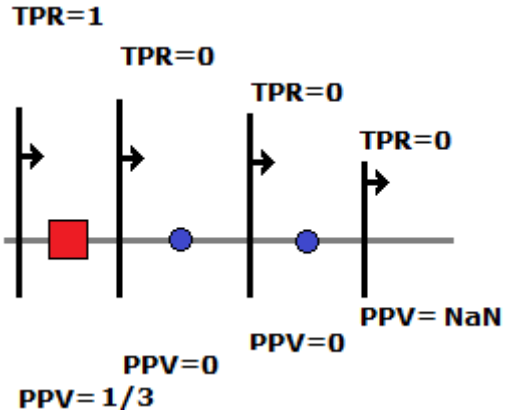












Упражнение №2 - Решение.

Получаем, что F1-мера – среднее гармоническое чисел из пар
(1, 1), (1/2, 1), (2/3, 1), (1/3, 1), (1/2, 1/2), (0, 0)

Все возможные значения F1-меры:
1, 0.8, 2/3, 0.5, 0

Но можно быстрее догадаться до ответа…

Упражнение №3

Вычислить ap@k:

ap@5(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3])

ap@3(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3])

ap@3(actual = [1], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

ap@3(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

ap@2(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

Упражнение №3

Решение:

ap@5(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3]) = 0.5

ap@3(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3]) = 1/3

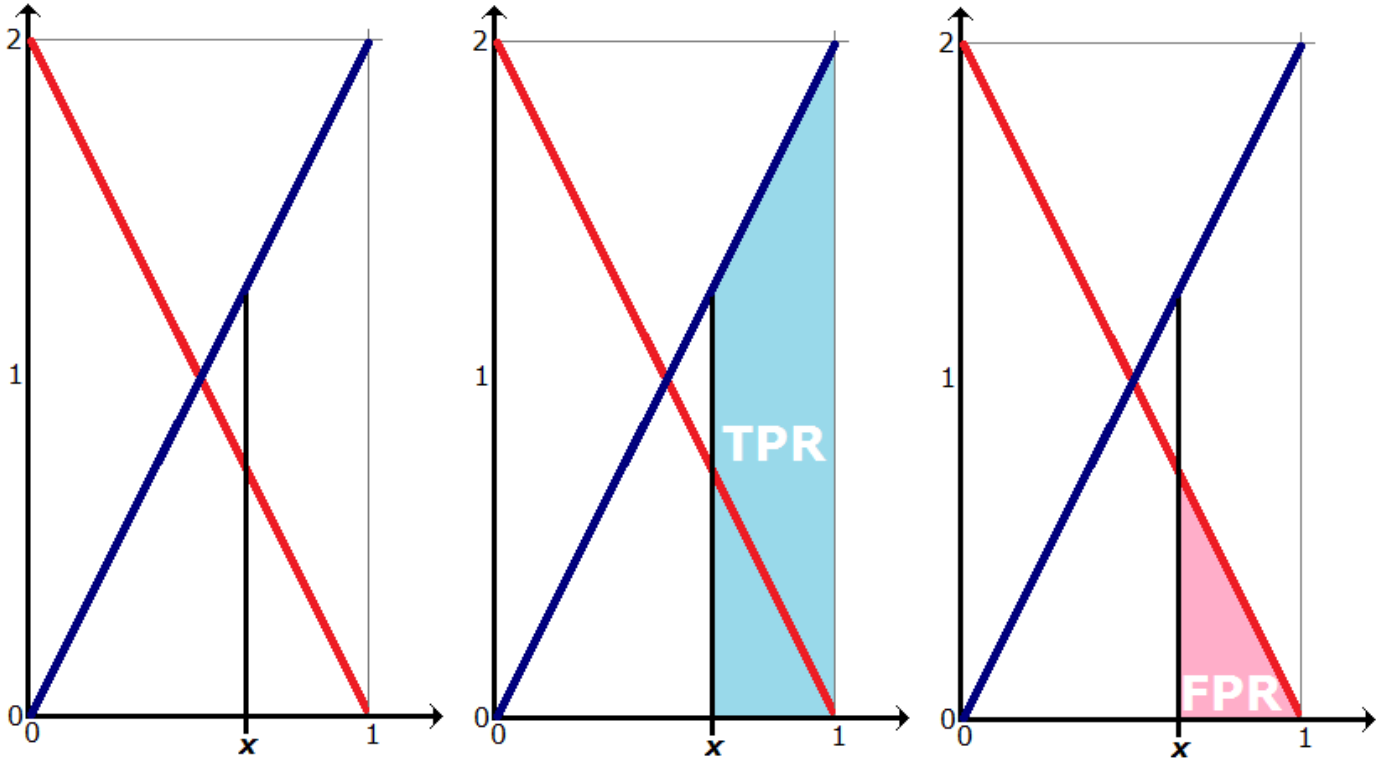
ap@3(actual = [1], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 1

ap@3(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 5/6

ap@2(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 1/2

Упражнение №4

На ответах алгоритма $a(x) \in [0,1]$ объекты класса 0 распределены с плотностью $p_0(a) = 2 - 2a$, а объекты класса 1 – с плотностью $p_1(a) = 2a$. Построить ROC-кривую и вычислить площадь под ней.



Упражнение №4

Решение

$$\mathrm{TPR}(x) = 1 - \frac{1}{2} x 2x = 1 - x^2$$

$$\mathrm{FPR}(x) = \frac{1}{2}(1-x)(2-2x) = (1-x)^2$$

Площадь под параметрической кривой

$$\int_1^0 \mathrm{TPR}(x) \cdot \mathrm{FPR}'(x) \partial x = 2\int_0^1 (1-x^2)(1-x) \partial x$$

или

$$\mathrm{TPR} = 2\sqrt{\mathrm{FPR}} - \mathrm{FPR}.$$

$$\int_0^1 (2\sqrt{t} - t) \partial t = \frac{5}{6} \approx 0.83.$$

Задачи на вычисление

Вычислить коэффициент Мэттьюса

$$MCC = \frac{TP \cdot TN - FP \cdot FN}{\sqrt{(TP+FP)(TP+FN)(TN+FP)(TN+FN)}}$$

для следующих векторов меток и ответов

истина	ответ	MCC
[1,1,1,1,0,0,0,0]	[1,1,1,0,0,0,1,1]	0.258
[1,1,1,1,0,0,0,0]	[1,1,1,1,1,0,1,1]	0.378
[1,1,1,1,1,1,0,0]	[1,1,1,1,1,0,1,1]	-0.218

Задачи на вычисление

Проверить иллюстрацию из лекции про многомерный AUC

матрица классификаций

	class 1	class 2	class 3
0	1	0	0
1	0	1	0
2	0	0	1
3	1	1	0

macro	micro	weighted	samples
0.49	0.53	0.52	0.56

матрица ответов

	class 1	class 2	class 3
0	0.75	0.00	0.25
1	0.00	0.50	0.25
2	0.25	1.00	0.25
3	0.00	0.25	0.75

	class 0	class 1	class 2
AUC_per_class	0.62	0.5	0.33
P_per_class	0.50	0.5	0.25

	class 0	class 1	class 2	class 3
AUC_per_instance	1.0	1.0	0.25	0.0

Очень полезно «чувствовать функции»

Пример из жизни: лайки

L	D	
+100	0	Совсем хорошо
+10	0	Хорошо
+1	–0	Мало статистики, но нет минусов
+2	–1	Есть минусы
+10	–9	Много минусов
+100	–100	Неоднозначно
+1	–1	Мало статистики
+9	–10	Много плюсов
+1	–2	Мало плюсов
0	–1	Нет плюсов

Как придумать один признак на базе двух?

Очень полезно «чувствовать функции»

Пример из жизни: лайки

L	D	$(\lvert L\rvert-\lvert D\rvert)/\sqrt{\lvert L\rvert+\lvert D\rvert}$
+100	0	10.0000
+10	0	3.1623
+1	–0	1.0000
+2	–1	0.5774
+10	–9	0.2294
+100	–100	0
+1	–1	0
+9	–10	-0.2294
+1	–2	-0.5774
0	–1	-1.0000