

Лекция 3 Линейные методы регрессии. Часть 2.

Дубенюк Анна Антоновна
anya.dubenyuk@yandex.ru
@andu192

ВШЭ, 2023

ПЛАН ЛЕКЦИИ

- метрики качества и функционалы ошибки в задаче регрессии
- признаки переобученной модели и методы выявления переобучения и борьбы с ним: кросс-валидация и регуляризация, полезное свойство ℓ_1 -регуляризации
- параметры и гиперпараметры модели; способы кодирования категориальных признаков

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:

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

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

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

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ: MSE (MEAN SQUARED ERROR)

Среднеквадратичное отклонение:

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

Плюсы:

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

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНение: MSE

Среднеквадратичное отклонение:

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

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.

КОЭФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

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

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

КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

Коэффициент детерминации:

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

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

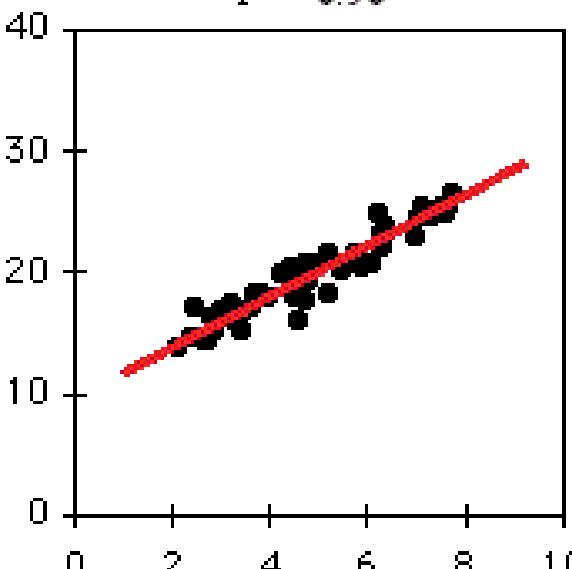
Коэффициент детерминации это доля дисперсии целевой переменной, объясняемая моделью.

- 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

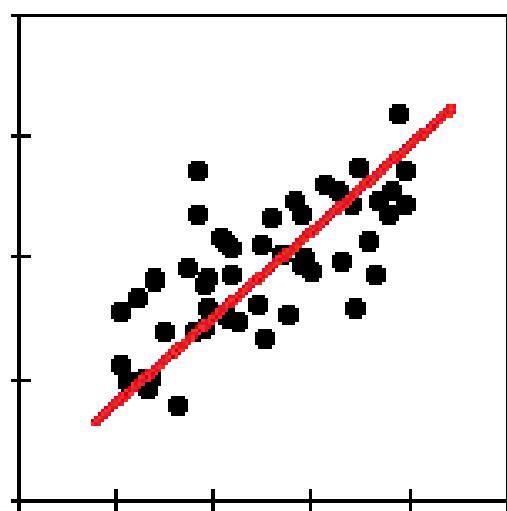
КОЭФФИЦИЕНТ ДЕТЕРМИНАЦИИ (R^2)

$$R^2 \leq 1$$

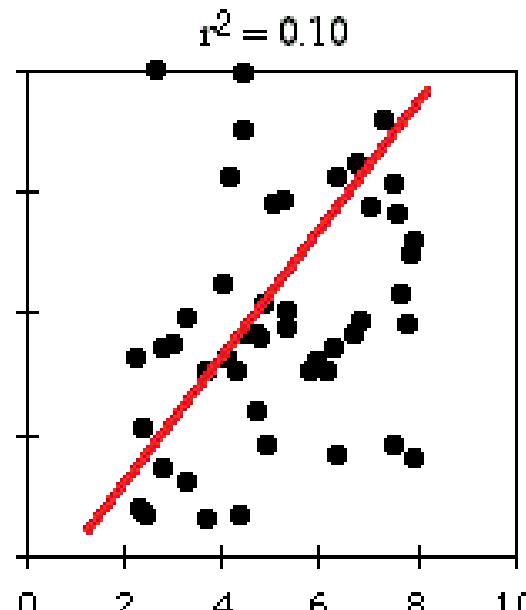
$r^2 = 0.90$



$r^2 = 0.50$



$r^2 = 0.10$



MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

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

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

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

Плюсы:

- Менее чувствителен к выбросам, чем MSE

MAE (MEAN ABSOLUTE ERROR)

Средняя абсолютная ошибка:

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

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 выдавать 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:

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

2. Оптимум MAE достигается на медиане ответов:

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

MSLE (MEAN SQUARED LOGARITHMIC ERROR)

Среднеквадратичная логарифмическая ошибка:

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

- 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:

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

MAPE измеряет относительную ошибку.

MAPE

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

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

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

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 $\frac{|10-20|}{|10|} = 1$, а если ответ $y = 30$, то ошибка $\frac{|30-20|}{|30|} = \frac{1}{3} \approx 0.33$.

SMAPE

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

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

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

SMAPE

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

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

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

Проверим:

Пусть правильный ответ $y = 10$, а прогноз $a(x) = 20$, то

ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx 0.67$, а если ответ $y = 30$, то ошибка

$$\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = 0.4.$$

SMAPE

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

Проверим:

Пусть правильный ответ $y = 10$, а прогноз $a(x) = 20$, то

ошибка $\frac{|10-20|}{|10+20|/2} = \frac{2}{3} \approx 0.67$, а если ответ $y = 30$, то ошибка

$\frac{|30-20|}{|30+20|/2} = \frac{2}{5} = 0.4$.

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 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

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

Параметр $\tau \in [0; 1]$.

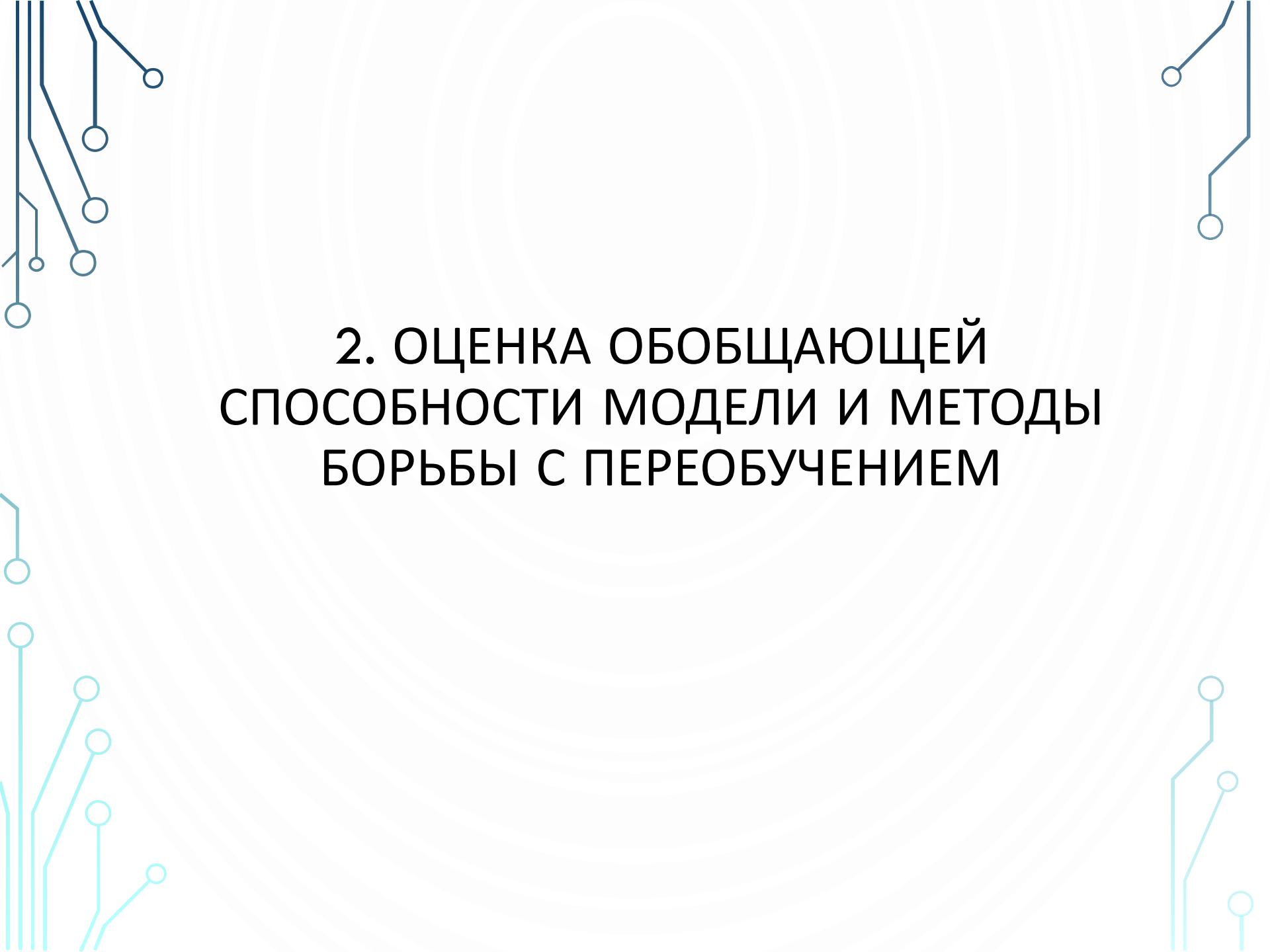
- Чем больше τ , тем больше штрафуем за занижение прогноза.

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 $x \in X$.

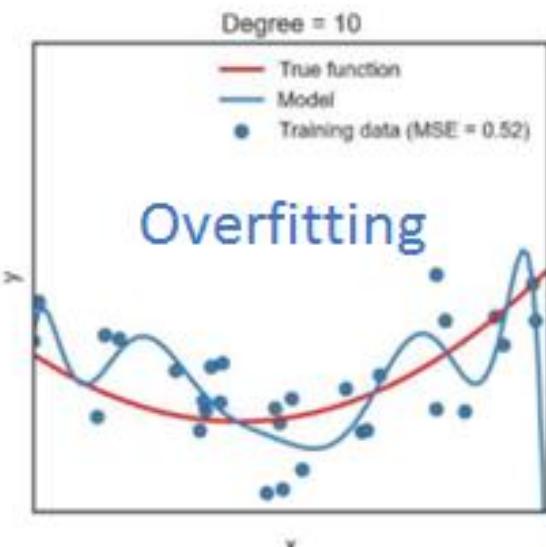
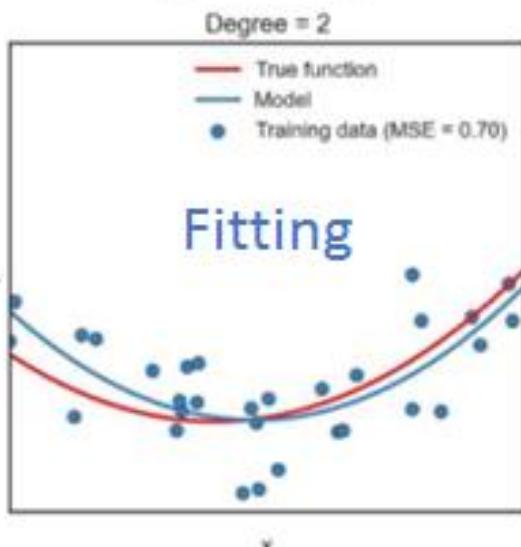
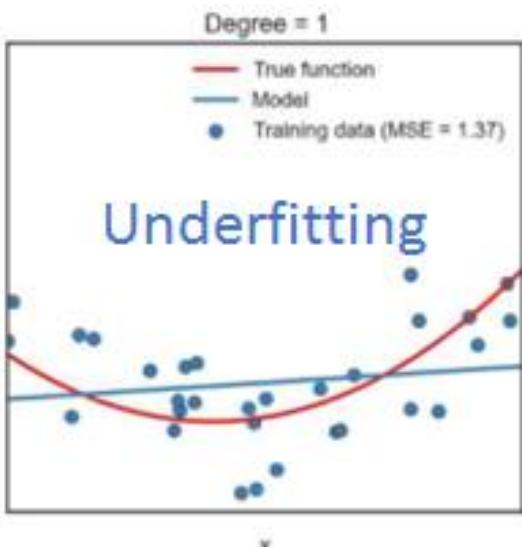


2. ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ БОРЬБЫ С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ

ОЦЕНКА ОБОБЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ

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

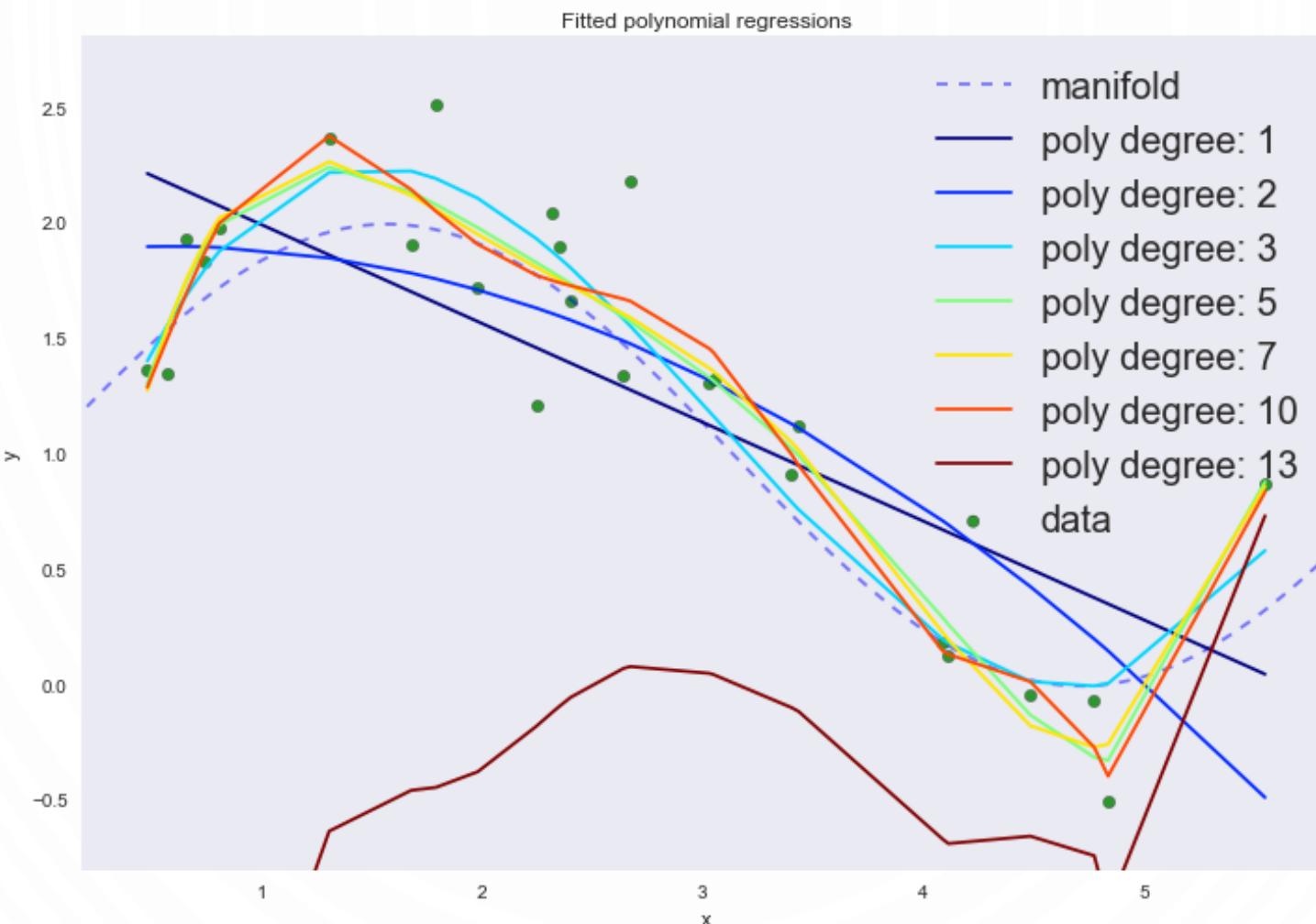
Fitting training data



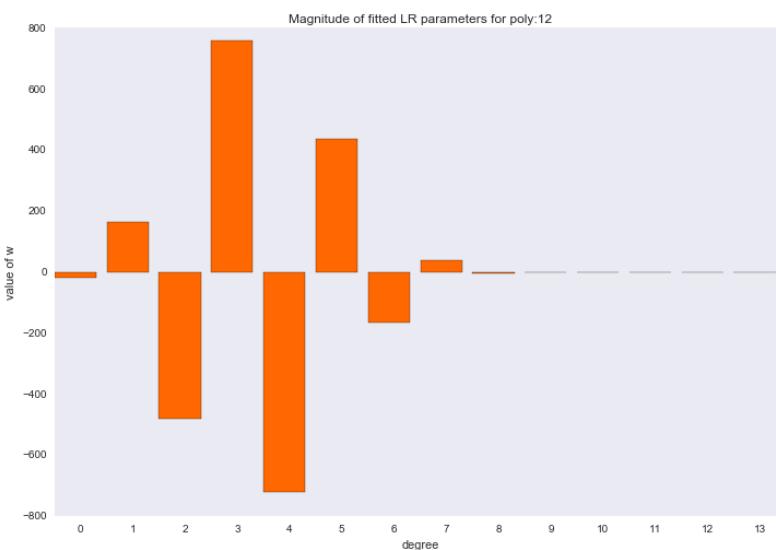
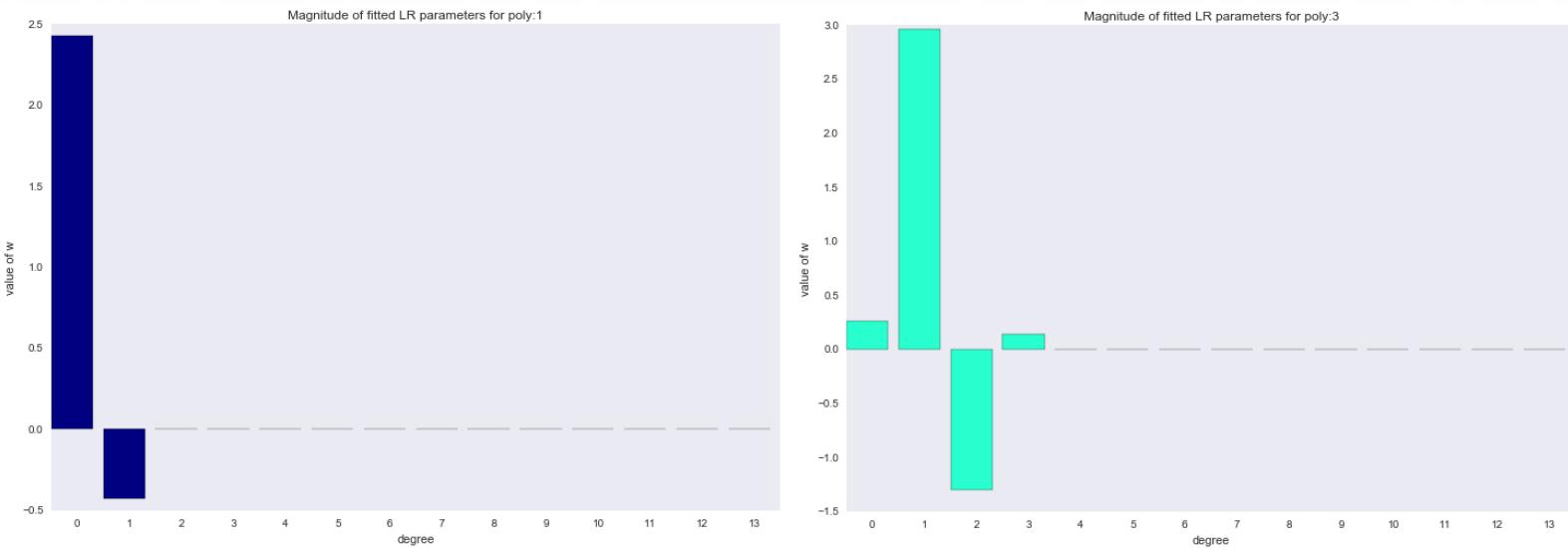
ПРИЗНАКИ ПЕРЕОБУЧЕННОЙ МОДЕЛИ

- 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*)

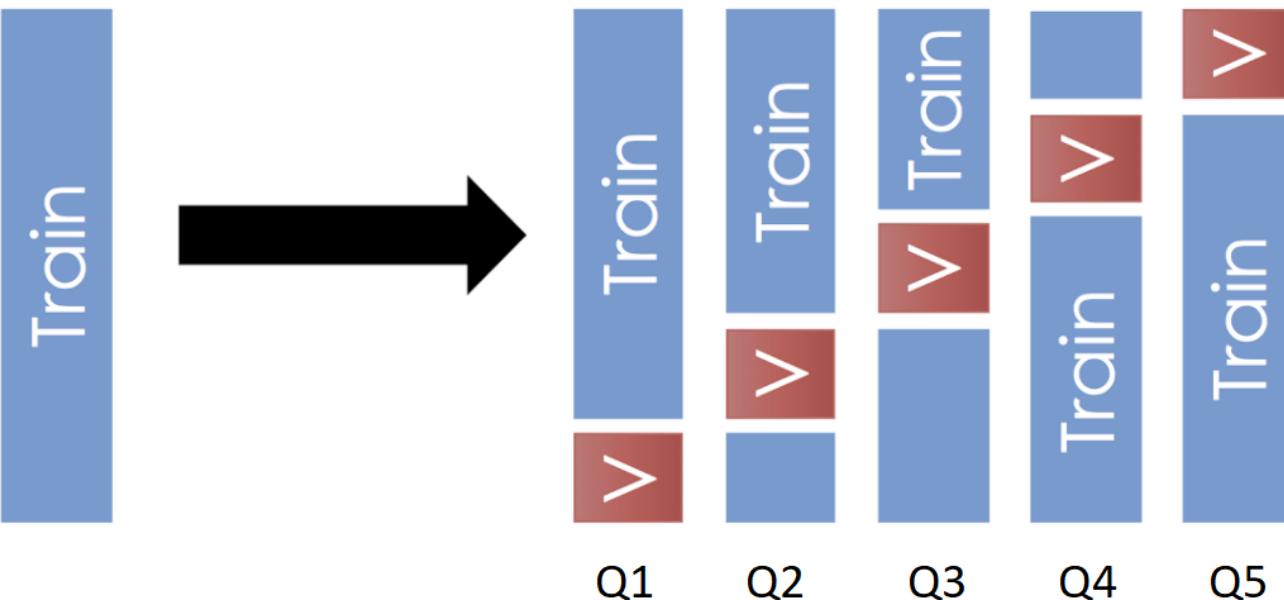


Недостаток:

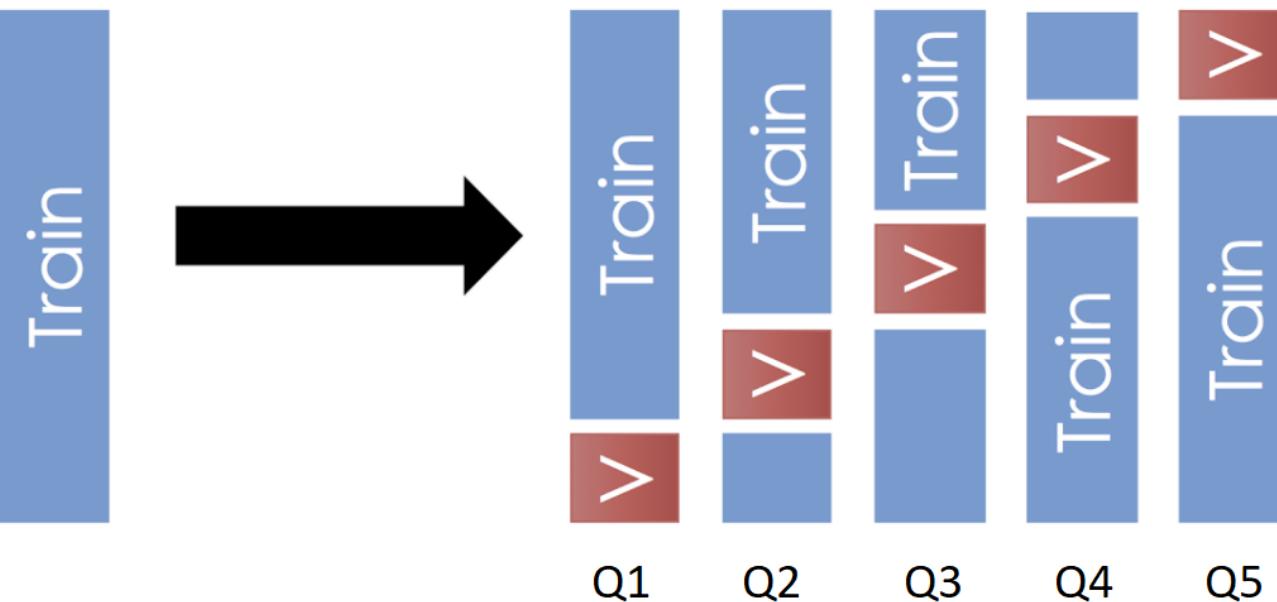
- Результат сильно зависит от разбиения на *train* и *test*

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



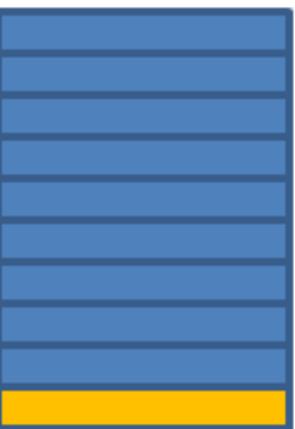
$$CV = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Q(a_i(x), X_i) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Q_i$$

ВИДЫ КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

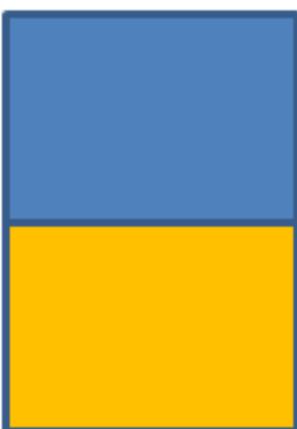
- **k-fold cross-validation** – разбиваем данные на k блоков, каждый из которых по очереди становится контрольным (валидационным)
- **Complete cross-validation** – перебираем ВСЕ разбиения
- **Leave-one-out cross-validation** – каждый блок состоит из одного объекта (число блоков = числу объектов)

ВЫБОР КОЛИЧЕСТВА БЛОКОВ В K-FOLD КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

Validation Set
Training Set



$k = 10$



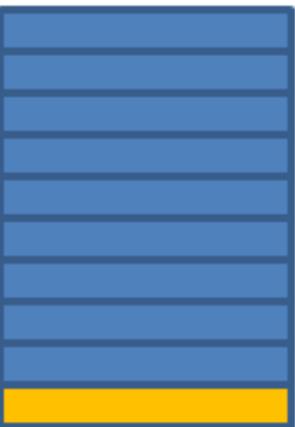
$k = 2$

• Проблемы при маленьком k ?

• Проблемы при большом k ?

ВЫБОР КОЛИЧЕСТВА БЛОКОВ В K-FOLD КРОСС-ВАЛИДАЦИИ

 Validation Set
 Training Set



$k = 10$



$k = 2$

- 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 $Q(w) \rightarrow \min$ 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 $Q(w) \rightarrow \min$ имеет бесконечное число решений.

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

Решение проблемы – *регуляризация*.

Будем минимизировать регуляризованный функционал ошибки:

$$Q_{alpha}(w) = Q(w) + \alpha \cdot R(w) \rightarrow \min_w ,$$

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

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:

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

где I – единичная матрица.

Эта задача имеет аналитическое решение:

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

- 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

$$(1) \quad Q(w) + \alpha \|w\|_1 \rightarrow \min_w$$

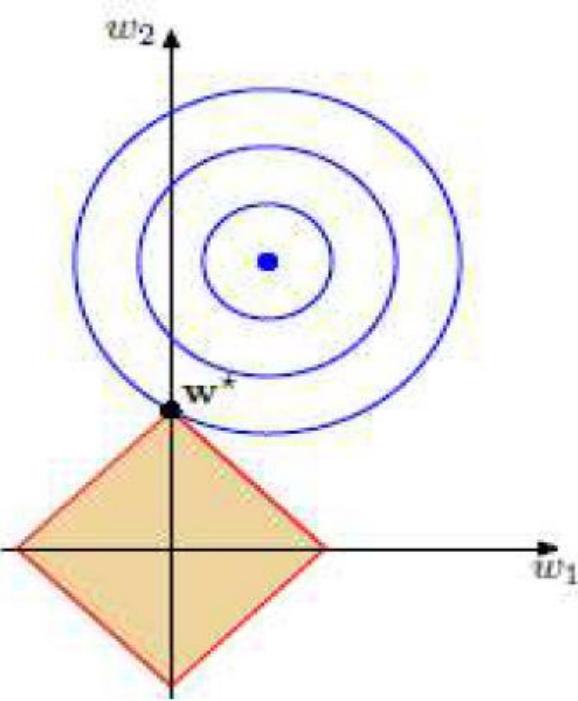
и

$$(2) \quad \begin{cases} Q(w) \rightarrow \min_w \\ \|w\|_1 \leq C \end{cases}$$

эквивалентны.

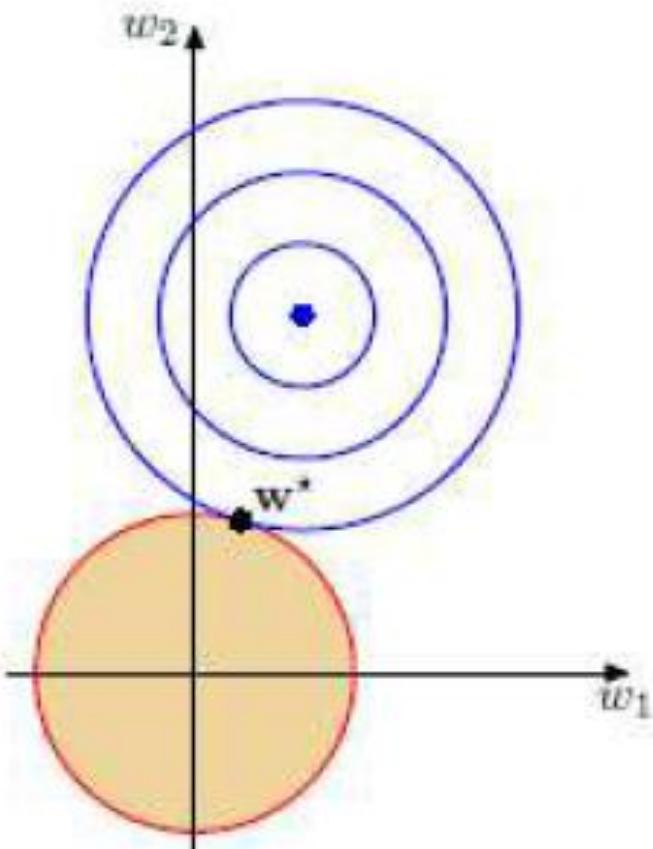
ОТБОР ПРИЗНАКОВ ПО L1-РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

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.

3. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

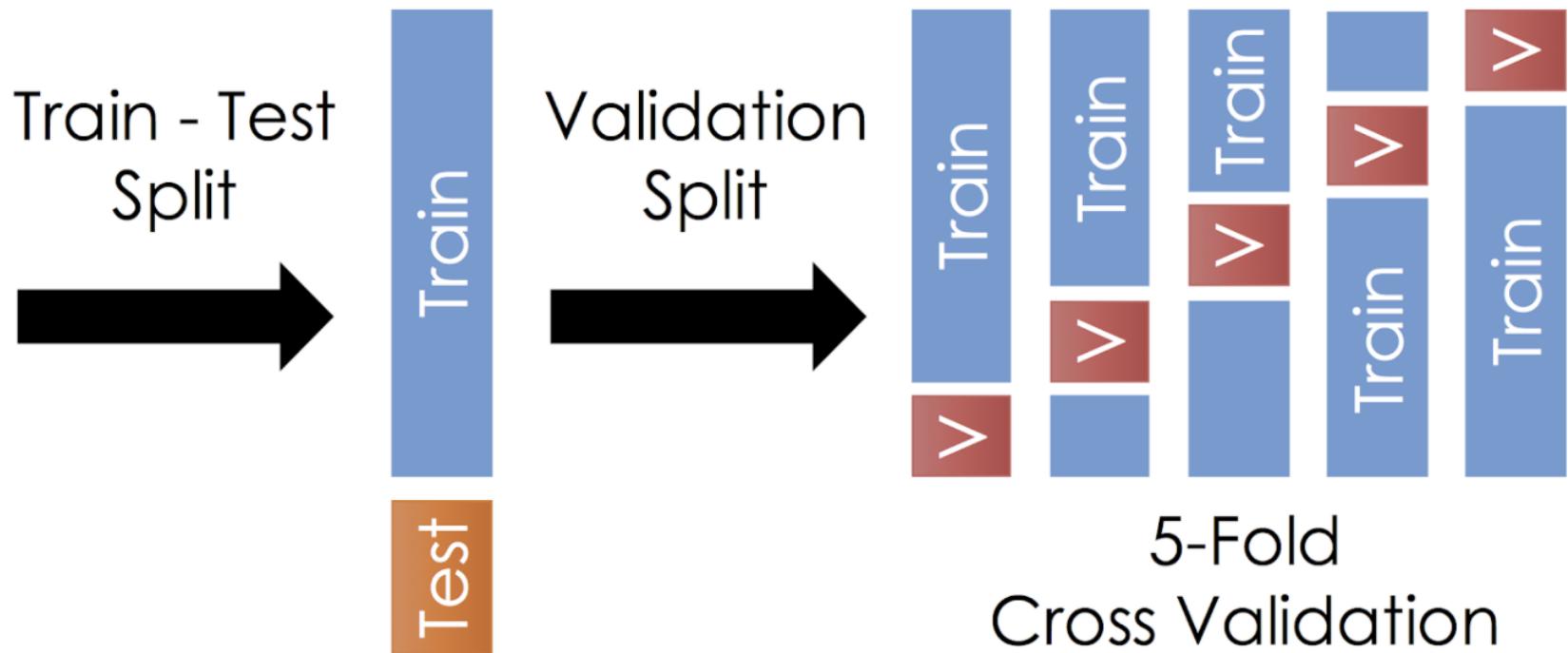
- Параметры и гиперпараметры модели
- Работа с признаками: способы кодирования категориальных признаков

ГИПЕРПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ

- **Параметры модели** – величины, настраивающиеся по обучающей выборке (например, веса w в линейной регрессии)
- **Гиперпараметры модели** – величины, контролирующие процесс обучения. Поэтому они не могут быть настроены по обучающей выборке (например, коэффициент регуляризации α).

Проблема: если подбирать гиперпараметры по кросс-валидации, то мы будем использовать отложенную (валидационную) выборку для поиска наилучших значений гиперпараметров. Т.е. отложенная выборка становится обучающей.

СХЕМА РАЗБИЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ ПОДБОРА ПАРАМЕТРОВ И ГИПЕРПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ



КОДИРОВАНИЕ КАТЕГОРИАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ: ONE-HOT ENCODING

- Предположим, категориальный признак $f_j(x)$ принимает m различных значений: C_1, C_2, \dots, C_m .

Пример: еда может быть *горькой, сладкой, солёной или кислой* (4 возможных значения признака).

КОДИРОВАНИЕ КАТЕГОРИАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ: ONE-HOT ENCODING

- Предположим, категориальный признак $f_j(x)$ принимает m различных значений: C_1, C_2, \dots, C_m .

Пример: еда может быть *горькой, сладкой, солёной или кислой* (4 возможных значения признака).

- Заменим категориальный признак на m бинарных признаков: $b_i(x) = [f_j(x) = C_i]$ (индикатор события).

Тогда One-Hot кодировка для нашего примера будет следующей:

горький = $(1, 0, 0, 0)$, *сладкий* = $(0, 1, 0, 0)$,

солёный = $(0, 0, 1, 0)$, *кислый* = $(0, 0, 0, 1)$.

СЧЁТЧИКИ

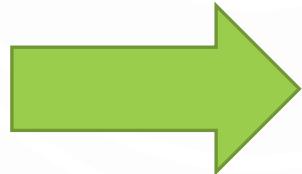
Счётчик (*mean target encoding*) – это вероятность получить значение целевой переменной для данного значения категориального признака.

СЧЁТЧИКИ (ПРИМЕР)

	feature	target
0	Moscow	0
1	Moscow	1
2	Moscow	1
3	Moscow	0
4	Moscow	0
5	Tver	1
6	Tver	1
7	Tver	1
8	Tver	0
9	Klin	0
10	Klin	0
11	Tver	1

СЧЁТЧИКИ (ПРИМЕР)

	feature	target
0	Moscow	0
1	Moscow	1
2	Moscow	1
3	Moscow	0
4	Moscow	0
5	Tver	1
6	Tver	1
7	Tver	1
8	Tver	0
9	Klin	0
10	Klin	0
11	Tver	1



	feature	feature_mean	target
0	Moscow	0.4	0
1	Moscow	0.4	1
2	Moscow	0.4	1
3	Moscow	0.4	0
4	Moscow	0.4	0
5	Tver	0.8	1
6	Tver	0.8	1
7	Tver	0.8	1
8	Tver	0.8	0
9	Klin	0.0	0
10	Klin	0.0	0
11	Tver	0.8	1

СЧЁТЧИКИ: ПРИМЕР

city	target	0	1	2
Moscow	1	1/4	1/2	1/4
London	0	1/2	0	1/2
London	2	1/2	0	1/2
Kiev	1	1/2	1/2	0
Moscow	1	1/4	1/2	1/4
Moscow	0	1/4	1/2	1/4
Kiev	0	1/2	1/2	0
Moscow	2	1/4	1/2	1/4

СЧЁТЧИКИ В ЗАДАЧЕ БИНАРНОЙ КЛАССИФИКАЦИИ

В случае бинарной классификации счётчики можно задать формулой:

$$Likelihood = \frac{Goods}{Goods + Bads} = mean(target),$$

где *Goods* – число единиц в столбце *target*,

Bads – число нулей в столбце *target*.

СЧЁТЧИКИ (ОБЩАЯ ФОРМУЛА)

- Пусть целевая переменная y принимает значения от 1 до K .
- Закодируем категориальную переменную $f(x)$ следующим способом:

$$counts(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u]$$

$$successes_k(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u][y = k], k = 1, \dots, K$$

Тогда кодировка:

$$mean_target_k(x, X) = \frac{successes_k(f(x), X)}{counts(f(x), X)} \approx p(y = k | f(x))$$

СЧЁТЧИКИ (ОБЩАЯ ФОРМУЛА)

$$counts(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u]$$

$$successes_k(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u][y = k], k = 1, \dots, K$$

Тогда кодировка:

$$mean_target_k(x, X) = \frac{successes_k(f(x), X)}{counts(f(x), X)}$$

Недостаток? Когда такой способ кодирования
переобучит наш алгоритм?

СЧЁТЧИКИ (ОБЩАЯ ФОРМУЛА)

$$counts(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u]$$

$$successes_k(u, X) = \sum_{(x,y) \in X} [f(x) = u][y = k], k = 1, \dots, K$$

Тогда кодировка:

$$mean_target_k(x, X) = \frac{successes_k(f(x), X)}{counts(f(x), X)}$$

*Недостаток? Когда такой способ кодирования
переобучит наш алгоритм?*

Ответ: если в данных много редких категорий.

СЧЁТЧИКИ + СГЛАЖИВАНИЕ

Используем счётчики (mean target encoding) со сглаживанием:

$$\frac{\text{mean}(\text{target}) \cdot n_{\text{rows}} + \text{global mean} \cdot \alpha}{n_{\text{rows}} + \alpha},$$

n_{rows} - количество строк в категории,

α – параметр регуляризации.

СЧЁТЧИКИ: ОПАСНОСТЬ ПЕРЕОБУЧЕНИЯ

Вычисляя счётчики, мы закладываем в признаки информацию о целевой переменной и, тем самым, переобучаемся!

СЧЁТЧИКИ: КАК ВЫЧИСЛЯТЬ

- Можно вычислять счётчики так:

city	target	
Moscow	1	Вычисляем счетчики по этой части
London	0	
London	2	
Kiev	1	
Moscow	1	
Moscow	0	Кодируем признак вычисленными счётчиками и обучаемся по этой части
Kiev	0	
Moscow	2	

СЧЁТЧИКИ: КАК ВЫЧИСЛЯТЬ

Более продвинутый способ (по кросс-валидации):

1) Разбиваем выборку

на m частей X_1, \dots, X_m

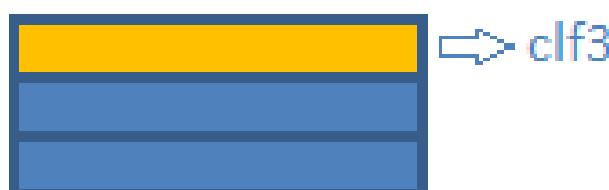
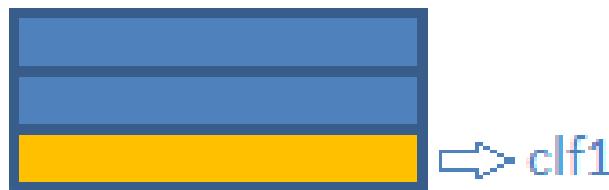
2) На каждой части X_i

значения признаков

вычисляются по

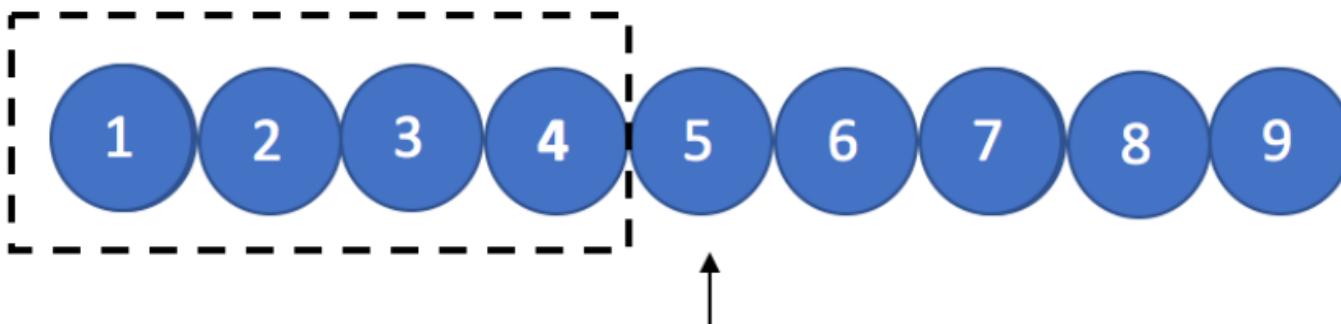
оставшимся частям:

$$x \in X_i \Rightarrow g_k(x) = g_k(x, X \setminus X_i)$$



ВЫЧИСЛЕНИЕ СЧЕТЧИКОВ С ПОМОЩЬЮ СХЕМЫ EXPANDING MEAN

Суть схемы заключается в том, чтобы пройти по отсортированному в определенном порядке датасету и для подсчета счетчика для строки t использовать строки от 0 до $t-1$.



Running mean calculation.

Numbers are assigned randomly to each observation. Only 1-4 are used to find encoding for 5

БОРЬБА С ПЕРЕОБУЧЕНИЕМ В СЧЁТЧИКАХ

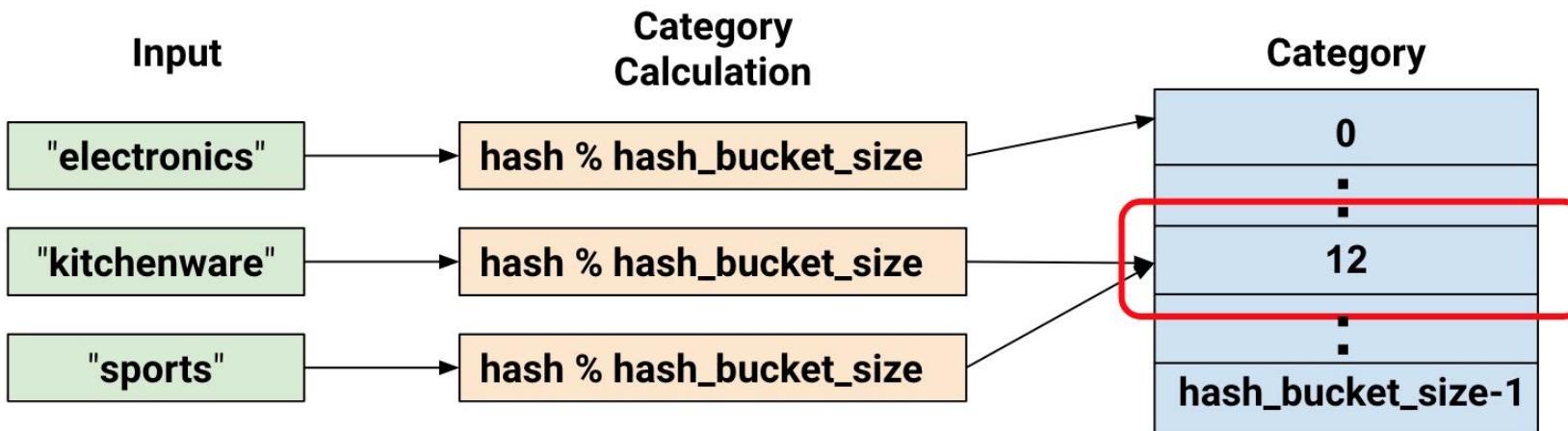
- Вычисление счётчиков по кросс-валидации
- Сглаживание
- Добавление случайных шумов
- *Expanding mean*

ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ

- Если у категориального признака слишком много значений, скажем, миллион, то после применения one-hot кодировки мы получим миллион новых столбцов. С такой огромной матрицей тяжело работать.
- Хэширование развивает идею one-hot кодирования, но позволяет получать любое заранее заданное число новых числовых столбцов после кодировки.

АЛГОРИТМ ХЭШИРОВАНИЯ

- 1) Для каждого значения признака вычисляем значение некоторой функции – хэш-функции (hash)
- 2) Задаем hash_bucket_size – итоговое количество различных значений категориального признака.
- 3) Берем остаток: $\text{hash} \% \text{hash_bucket_size}$ – тем самым кодируем каждое значение признака числом от 0 до $\text{hash_bucket_size}-1$.
- 4) Дальше к полученным числам применяем ОНЕ.

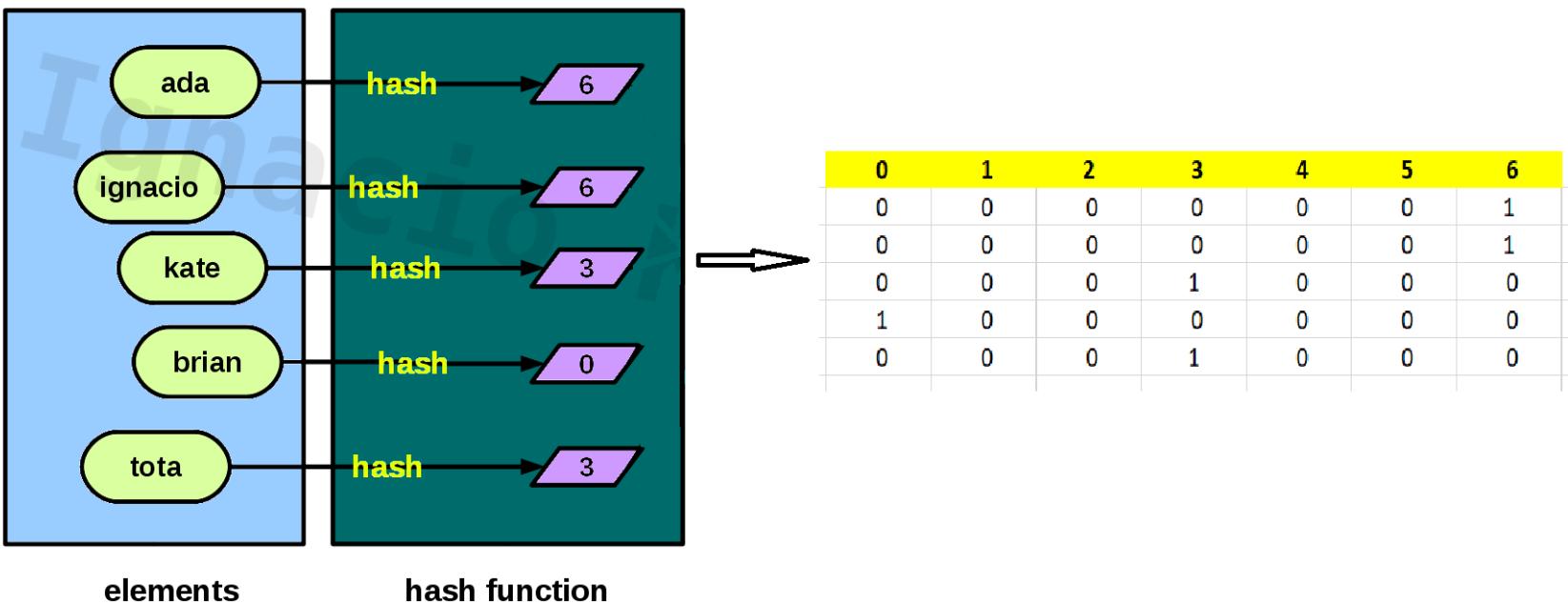


ЧТО ДЕЛАЕТ ХЭШ-ФУНКЦИЯ

Идея: хэш-функция группирует значения категориального признака:

- часто встречающиеся значения признака формируют отдельные группы
- редко встречающиеся значения попадают в одну группу при группировке

ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ: ПРИМЕР



ХЭШИРОВАНИЕ

- Хэширование – это способ кодирования категориальных данных, принимающих множество различных значений, показывающий хорошие результаты на практике.
- **Хэширование позволяет закодировать любое значение категориального признака (в том числе то, которого не было в тренировочной выборке).**

Статья про хэширование:

<https://arxiv.org/abs/1509.05472>

ЧТО ПОЧИТАТЬ ПРО КОДИРОВАНИЕ КАТЕГОРИАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ

- [Лекция Жени Соколова](#)
- [Блог Александра Дьяконова](#)
- [Кусочек статьи с Хабра про хеширование](#)