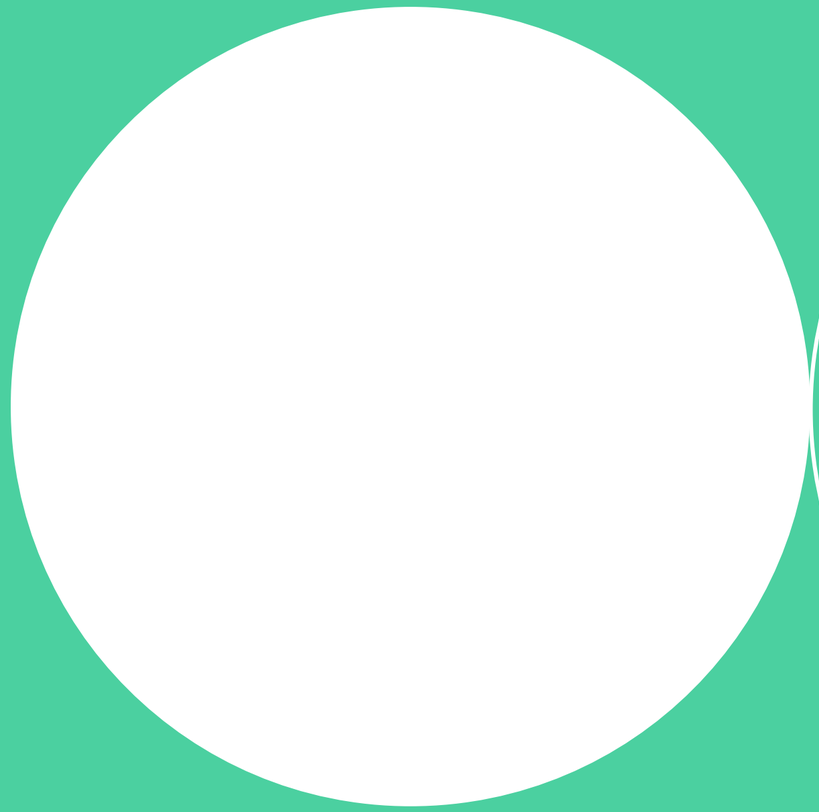
Метрики качества Модели и переобучение

Занятие 1.8

Алексей Миронов

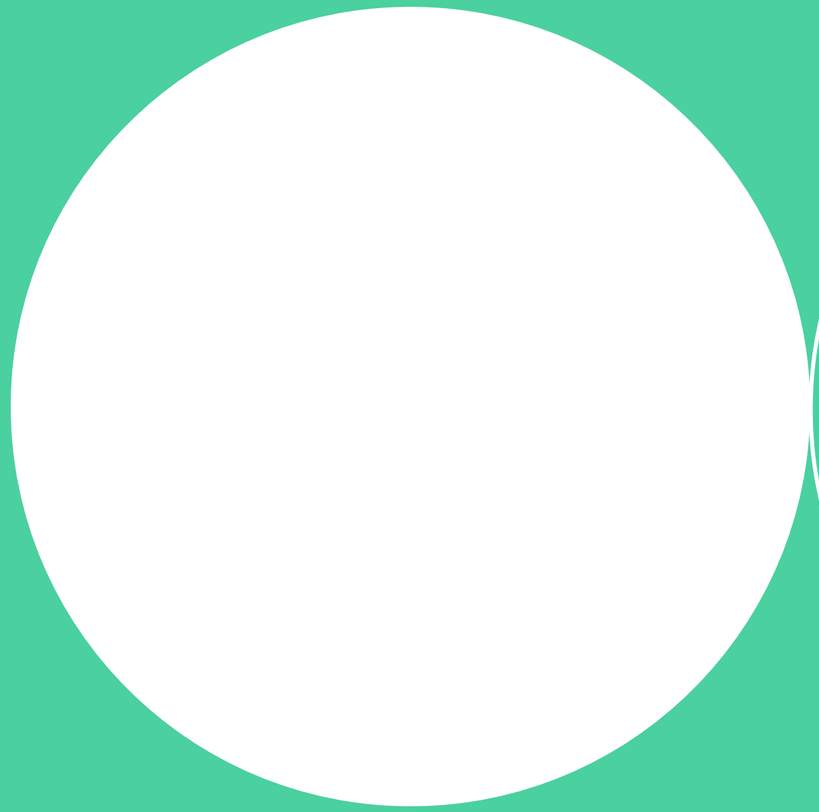
Цели занятия



В конце занятия вы:

1. Будете знать как проводить кросс-валидацию модели
2. Сможете оценить качество разных версий модели по AUC
3. Подберете параметры модели для борьбы с переобучением

О чём поговорим и что сделаем



О чём поговорим и что сделаем

1. Обучающая и тестовая выборка, кросс - валидация: немного теории
2. Метрики качества: accuracy, precision, recall: определения и практическое задание
3. Смещение и разброс (bias-variance trade off): немного теории
4. Признаки переобучения и регуляризация: основы и практическое задание

Обучающая, тестовая выборка и переобучение

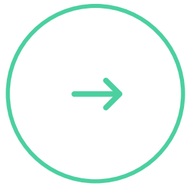
1

Обучающая выборка

- Содержит значения признаков и целевой переменной.
- На обучающей выборке строим модель.

Тестовая выборка

Содержит значения признаков, по которым необходимо предсказать значение целевой переменной.



Оцениваем качество различных вариантов модели.

Проблемы

1. Модель может хорошо работать на обучающей выборке, однако сильно терять в качестве на тестовой (один из вариантов-переобучение).

2. Преобразования данных на обучающей выборке должны быть повторены и иметь смысл для тестовой.

Разбиваем обучающую выборку

Разбиваем обучающую выборку на 2 части.
На одной будем тренировать модель, на другой – проверять (т. е. использовать в качестве тестовой, только с известной целевой переменной)

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split( X, y, test_size = 0.3, random_state = 0 )
```

Немного практики

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

Оценка качества модели

2

Precision и Recall
Точность и Полнота

Порог для тестовой выборки

```
model = LogisticRegression()

model.fit(X_train, y_train)
predictions = model.predict_proba(X_test)

zip(predictions[:, 1], y_test)
```

```
[(0.645831937965280 38, 0),
 (0.075906148028446599, 0),
 (0.2704606033743272, 0),
 (0.26938542699540474, 0),
 (0.26433391263337475, 1),
 (0.1443590034736055, 0),
 (0.17840859560894495, 0),
 (0.21871761029690232, 0),
 (0.75293068528621931, 1),
 (0.2694630112685994, 0),
 (0.11209927315788928, 0),
 (0.18717054508217956, 0),
 (0.08178748666456936 4, 0)
```

Выберем порог, выше которого будем считать полученное значение принадлежащим первому классу, а ниже – второму.

Это определит долю угаданных моделью значений.

Матрица ошибок для порога

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

False positive – ошибка I рода (ложная тревога)

False negative – ошибка II рода (пропуск цели)

Точность

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

Accuracy – доля правильно предсказанных от всех вариантов

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + FP + FN + TN}$$

Немного посчитаем

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

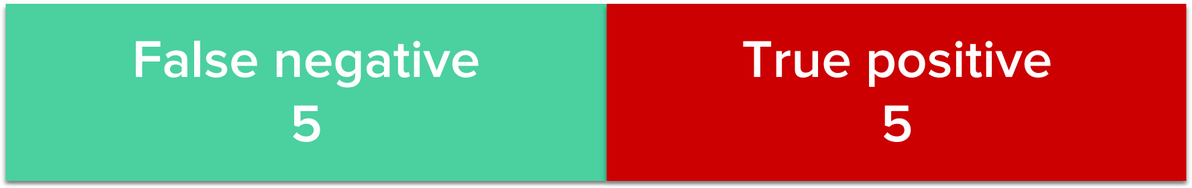
Почему точности не достаточно

100 обычных писем

На почту пришло 100 обычных писем и из них 10 писем спама.

Наша модель из 100 обычных 10 классифицировала как спам.
Из 10 спам-писем – 5 как спам

10 спам-писем



Почему точности не достаточно

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	5	5
Predicted negative	10	90

Accuracy – доля правильно предсказанных от всех вариантов

$$Accuracy = \frac{5 + 90}{5 + 90 + 10 + 5} = 86\%$$

Почему точности не достаточно

100 обычных писем

True negative
100

10 спам-писем

False negative
10

Возьмем модель, которая считает все письма обычными

Почему точности не достаточно

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	0	10
Predicted negative	0	100

Возьмем модель, которая считает все письма обычными

$$Accuracy = \frac{0 + 100}{0 + 100 + 0 + 10} = 91\%$$

Precision

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

Precision – доля правильно предсказанных среди причисленных моделью к категории 1

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Способность алгоритма отличать данный класс от других классов

Recall

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

Recall – доля правильно предсказанные среди категории 1

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

Синоним – True Positive Rate (sensitivity)

Способность алгоритма обнаруживать данный класс вообще

Precision и Recall для спама

100 обычных писем

True negative
100

10 спам-писем

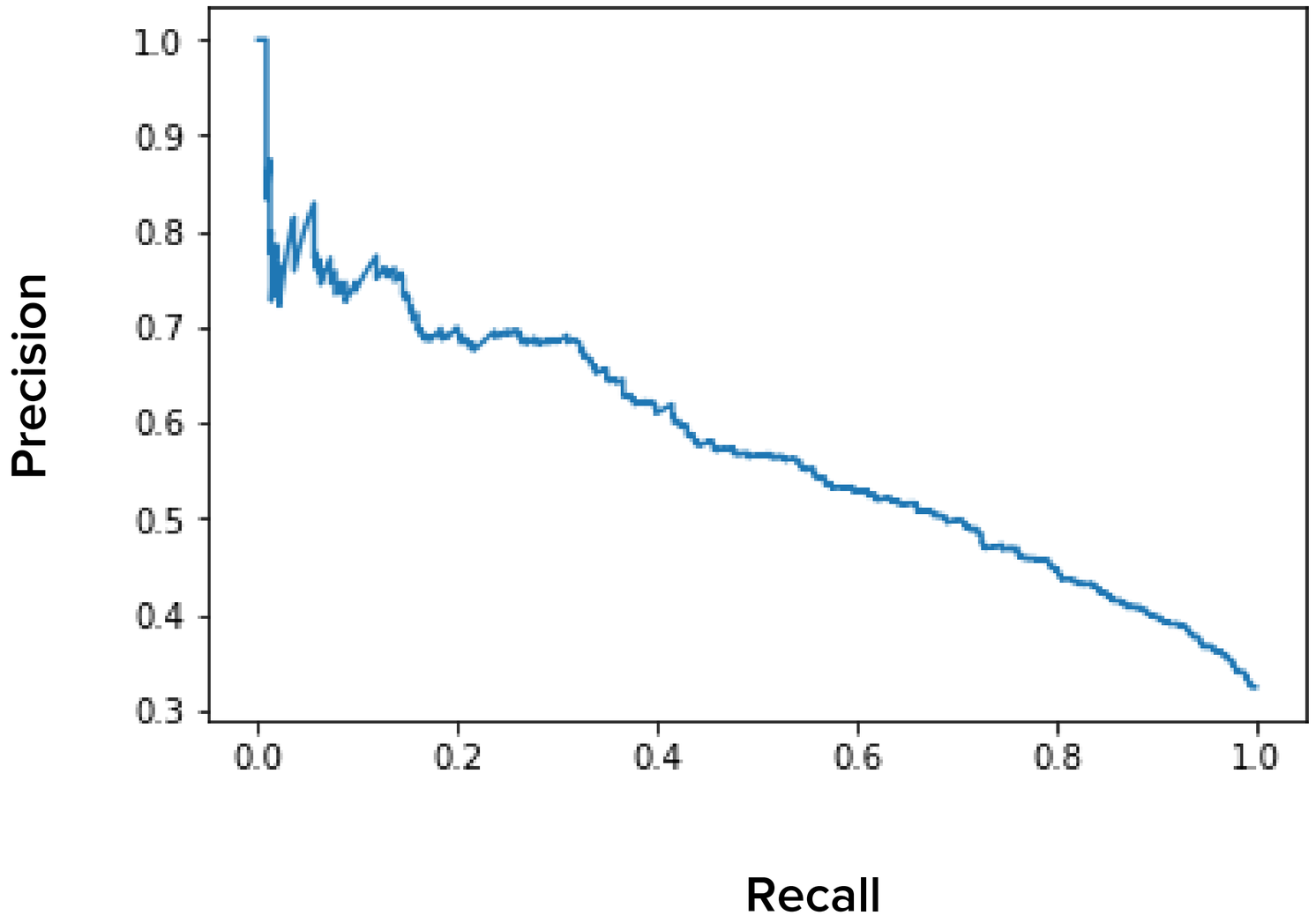
False negative
10

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	0	0
Predicted negative	10	100

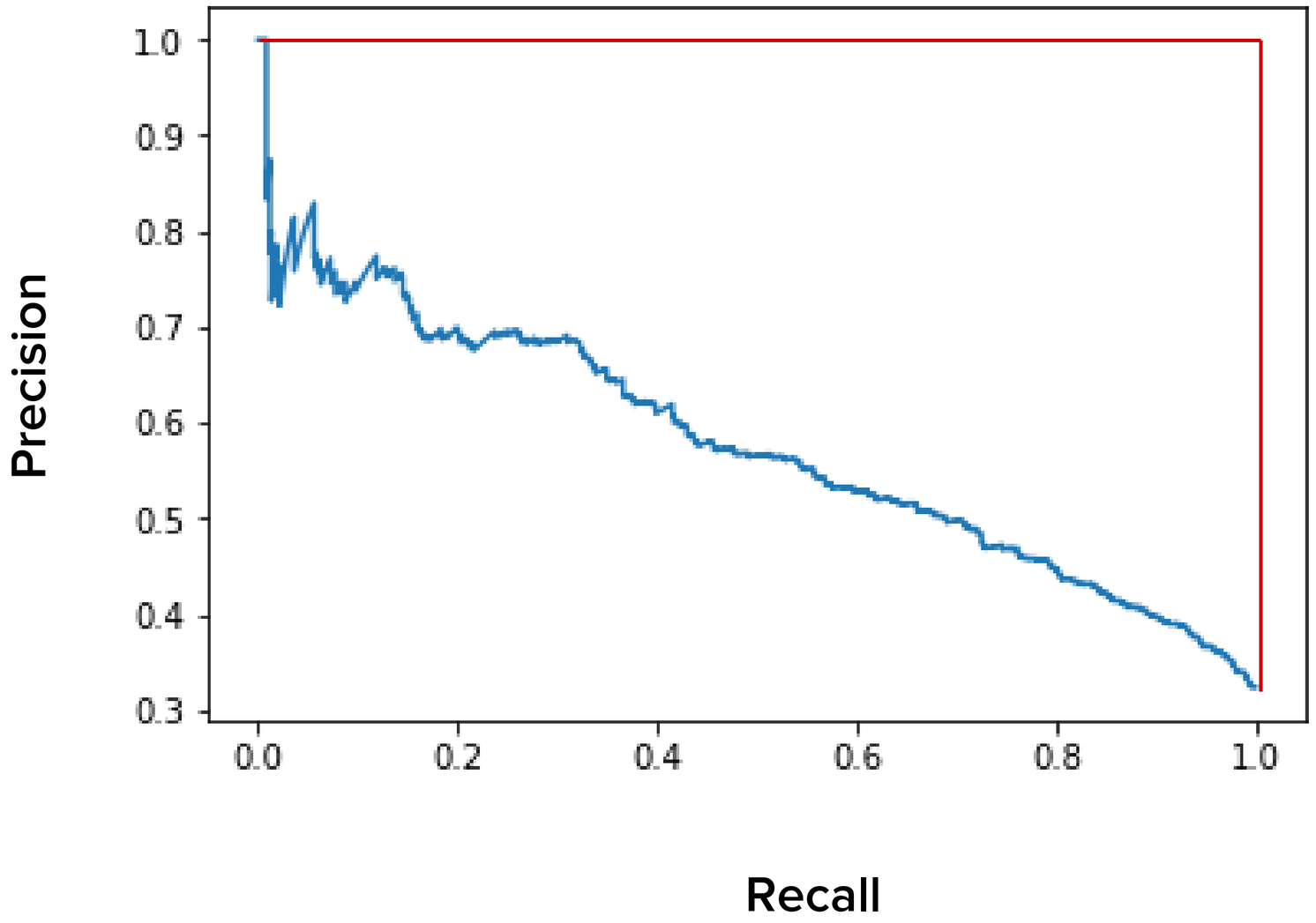
Снова тот же файл

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

Кривая Precision — Recall



Кривая Precision — Recall



Модель тем лучше, чем выше площадь под кривой

Area under curve

3

True positive rate

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

True Positive Rate – доля правильно предсказанных среди категории 1

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

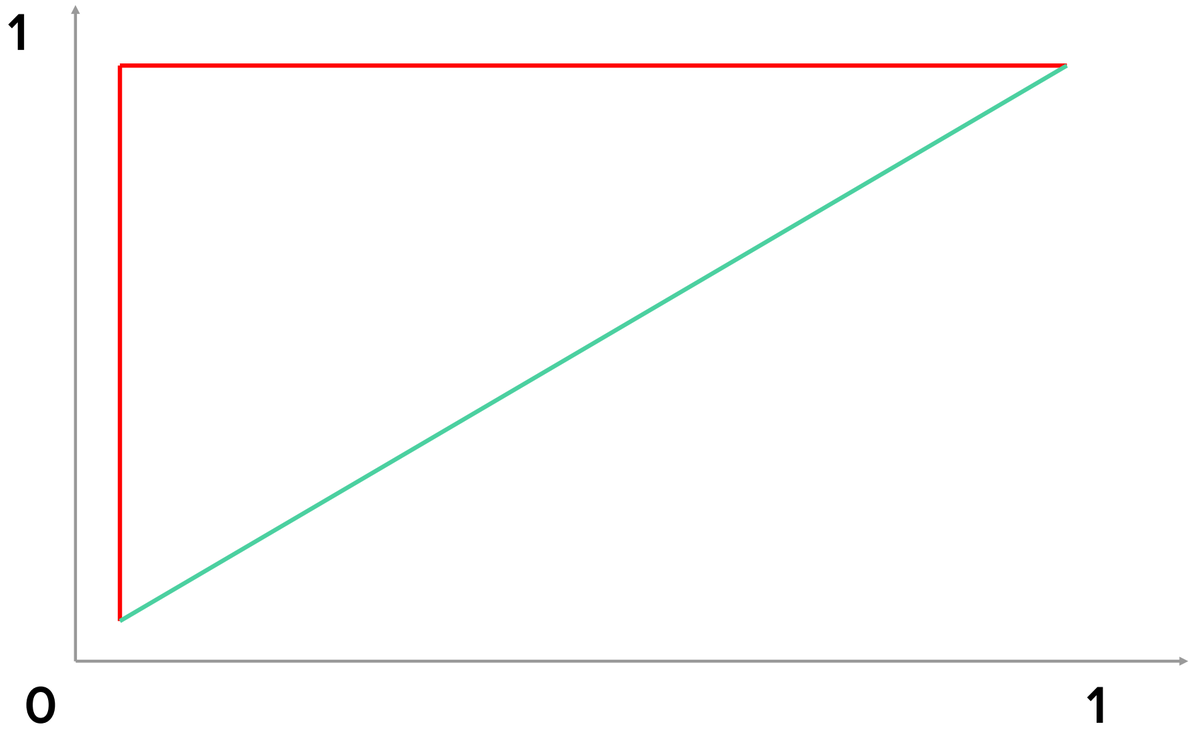
False positive rate

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	True positive	False positive
Predicted negative	False negative	True negative

False Positive Rate – доля неправильно предсказанных среди относящихся к категории 0

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

Идеальный случай



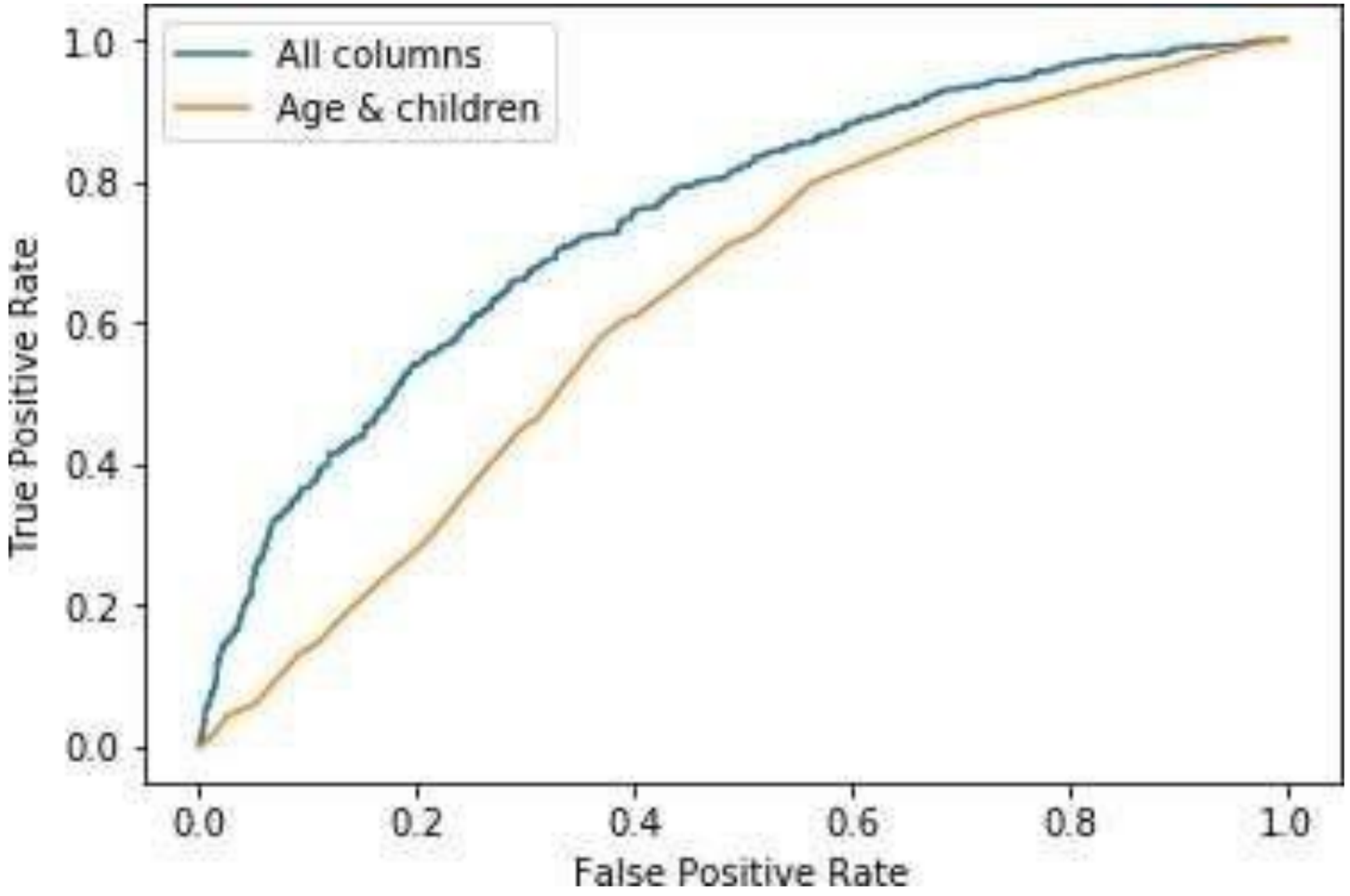
Модель предсказываета бсолютно верно

TPR = 1

FPR = 0

случайные предсказания

Сравнение двух моделей



Практическое задание

1

Классификация спортсменов

ATHLETES_CLASSIFIER.IPYNB

- Дана статистика спортсменов ОИ 2016. Необходимо построить модель, предсказывающая пол спортсмена по имеющимся признакам (кроме столбца sex)

- Построить графики посчитать AUC, Precision - Recall и FPR - TPR

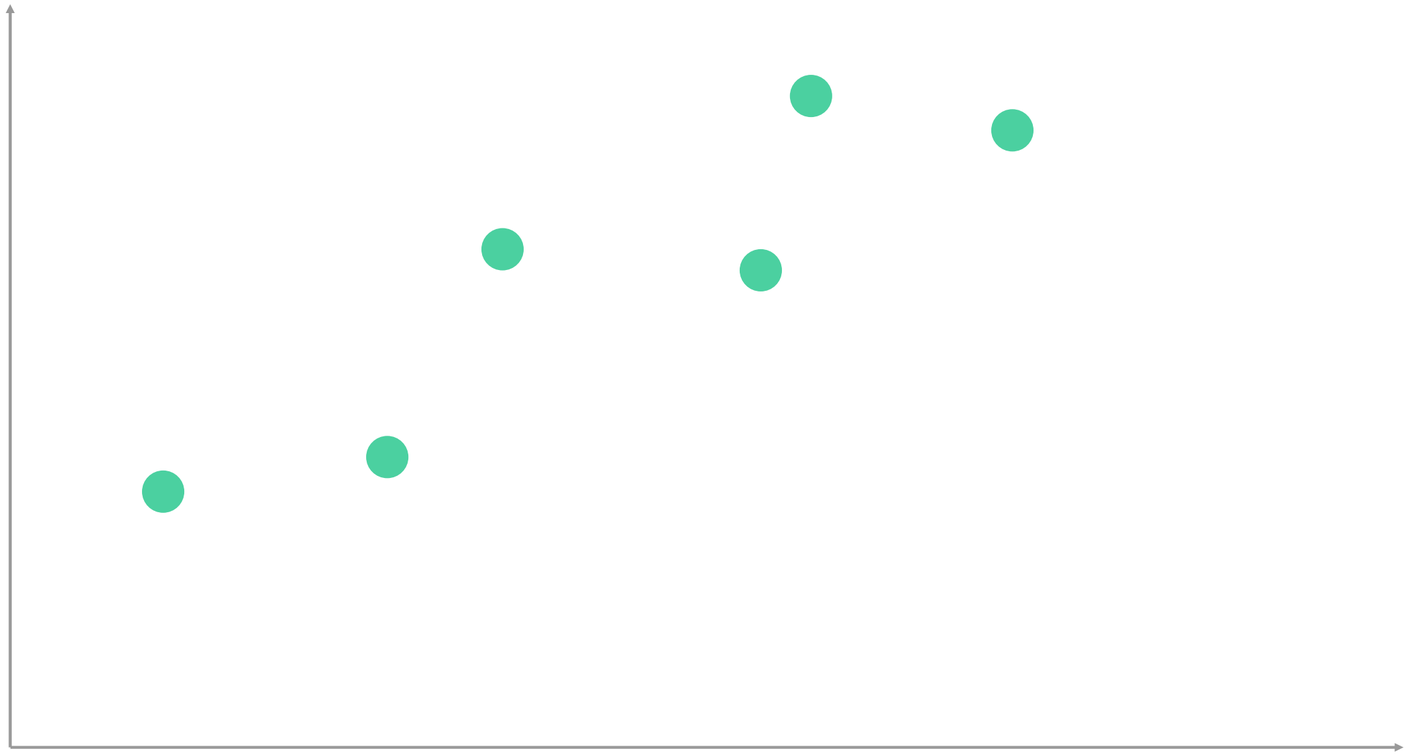
Время на задание 20 минут

Борьба с переобучением

4

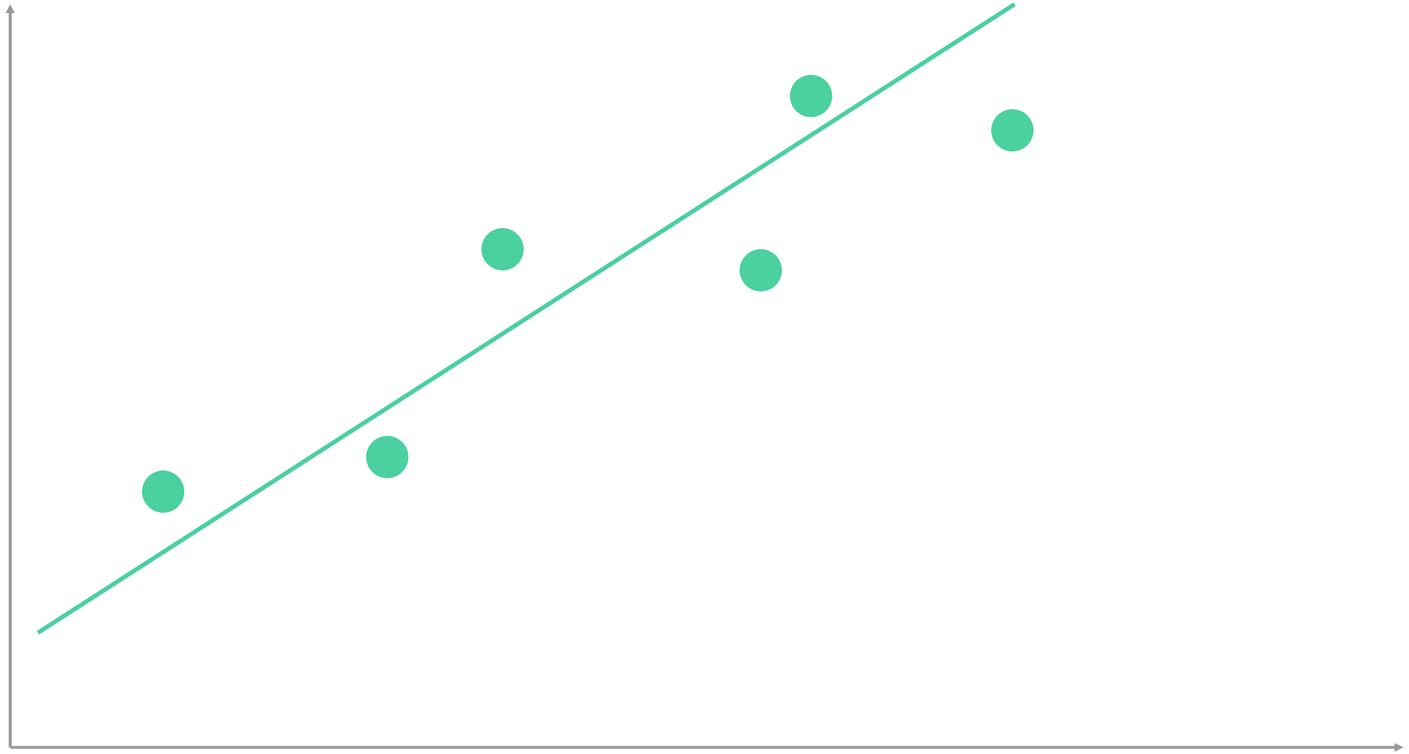
Пример переобучения

Имеются данные из 6 точек



Пример переобучения

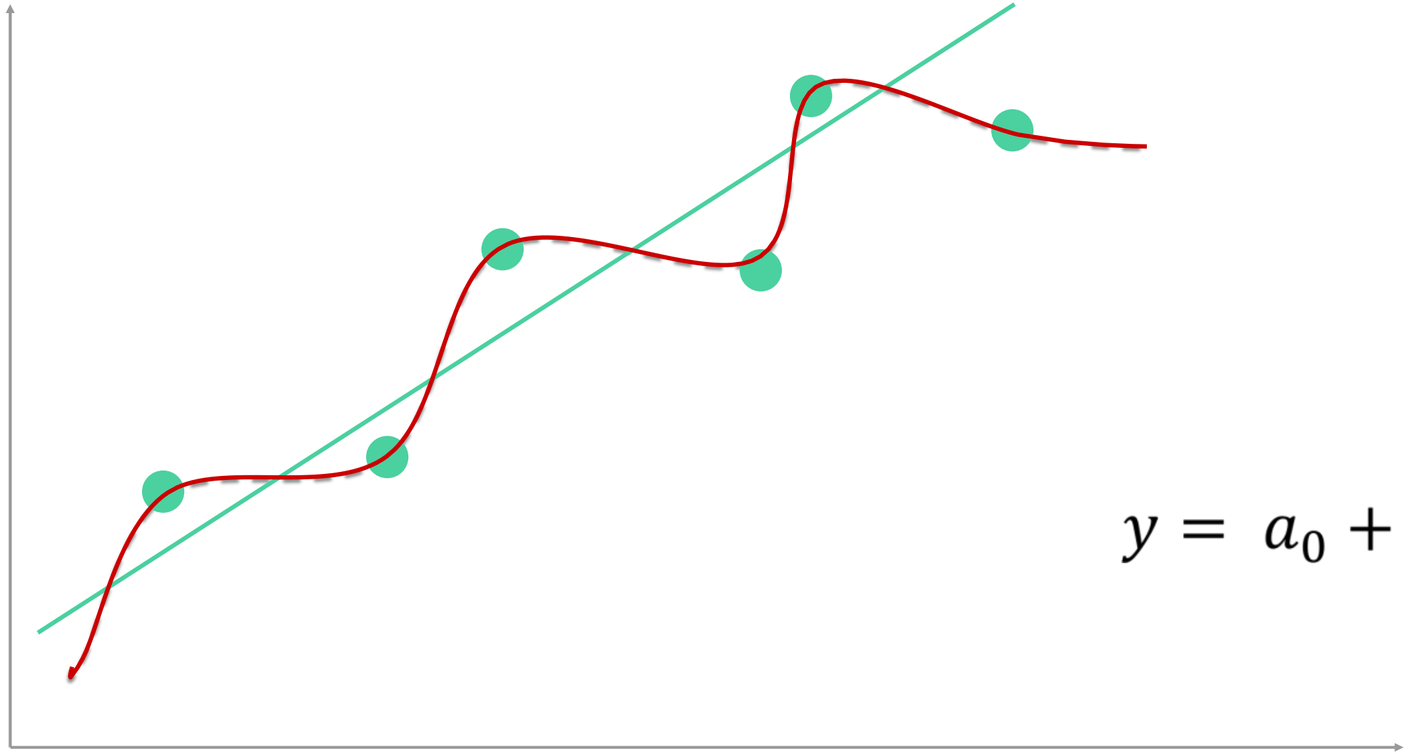
Имеются данные из 6 точек



y = kx + b;
ошибка > 0

Пример переобучения

Имеются данные из 6 точек

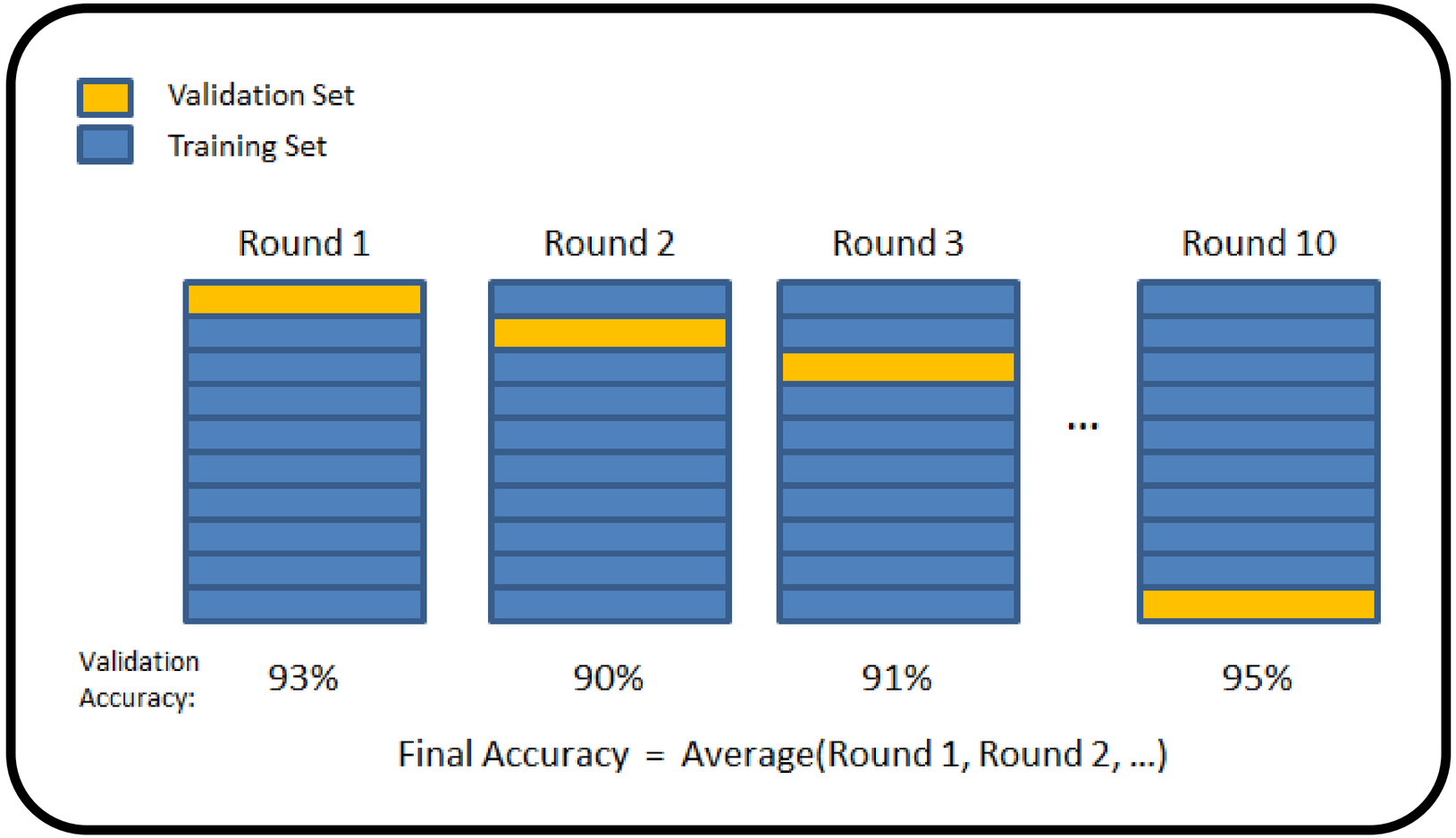


y = kx + b;
ошибка > 0

ошибка = 0. Круто?

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5$$

Кросс-валидация
k-fold cross validation



Лучше, чем случайная выборка

CROSS_VAL_SCORE.IPYNB

Практическое задание

2

Распознавание цифр

Дана статистика картинок цифр, каждая из которых описывается набором из 64 признаков.

Используя модель DecisionTreeClassifier, необходимо подобрать значение параметра модели max_depth (от 1 до 20), при котором точность модели (accuracy) максимальна

Время на задание 20 минут

Смещение и разброс

5

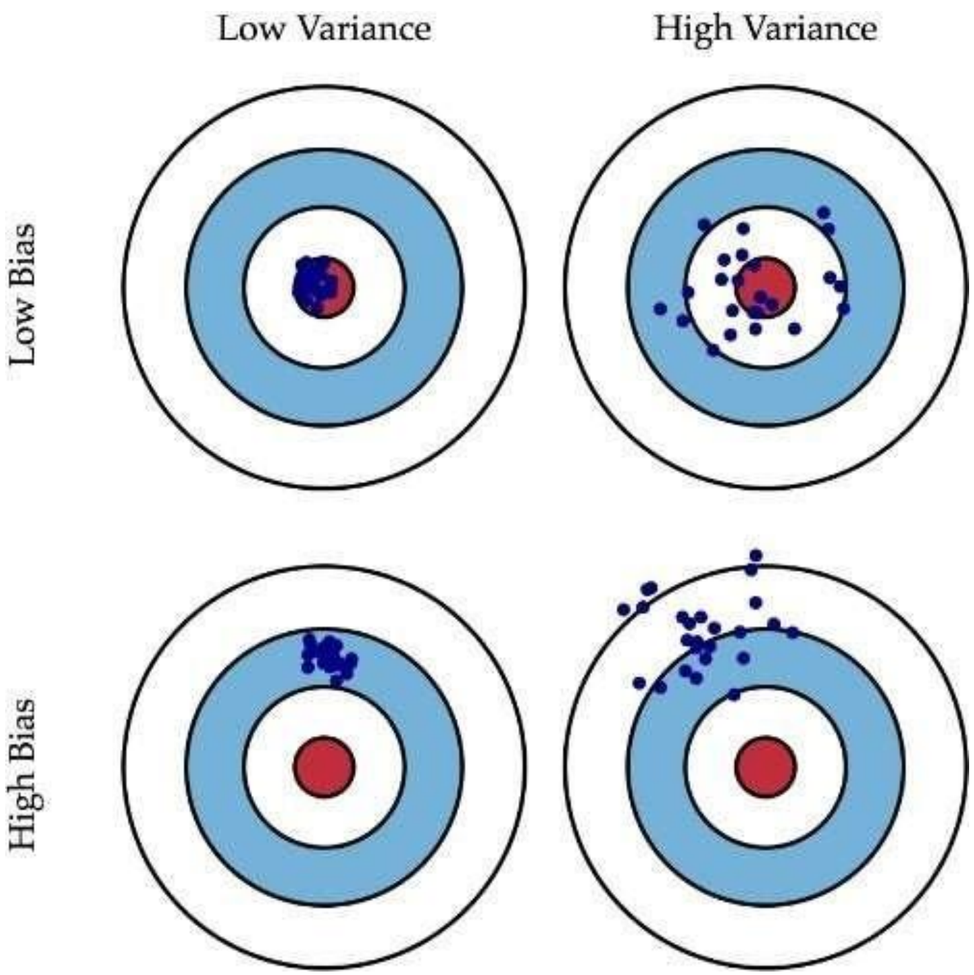
Ошибка прогноза

HTTPS://HABRAHABR.RU/COMPANY/ODS/BLOG/323890/#RAZLOZHENIE-OSHIBKI-NA-SMESCHENIE-I-RAZBROS-BIAS-VARIANCE-DECOMPOSITION

Можем разложить на слагаемые:

- Bias – средняя ошибка прогноза
- Variance – изменение ошибки при обучении на разных наборах данных
- Неустранимая ошибка

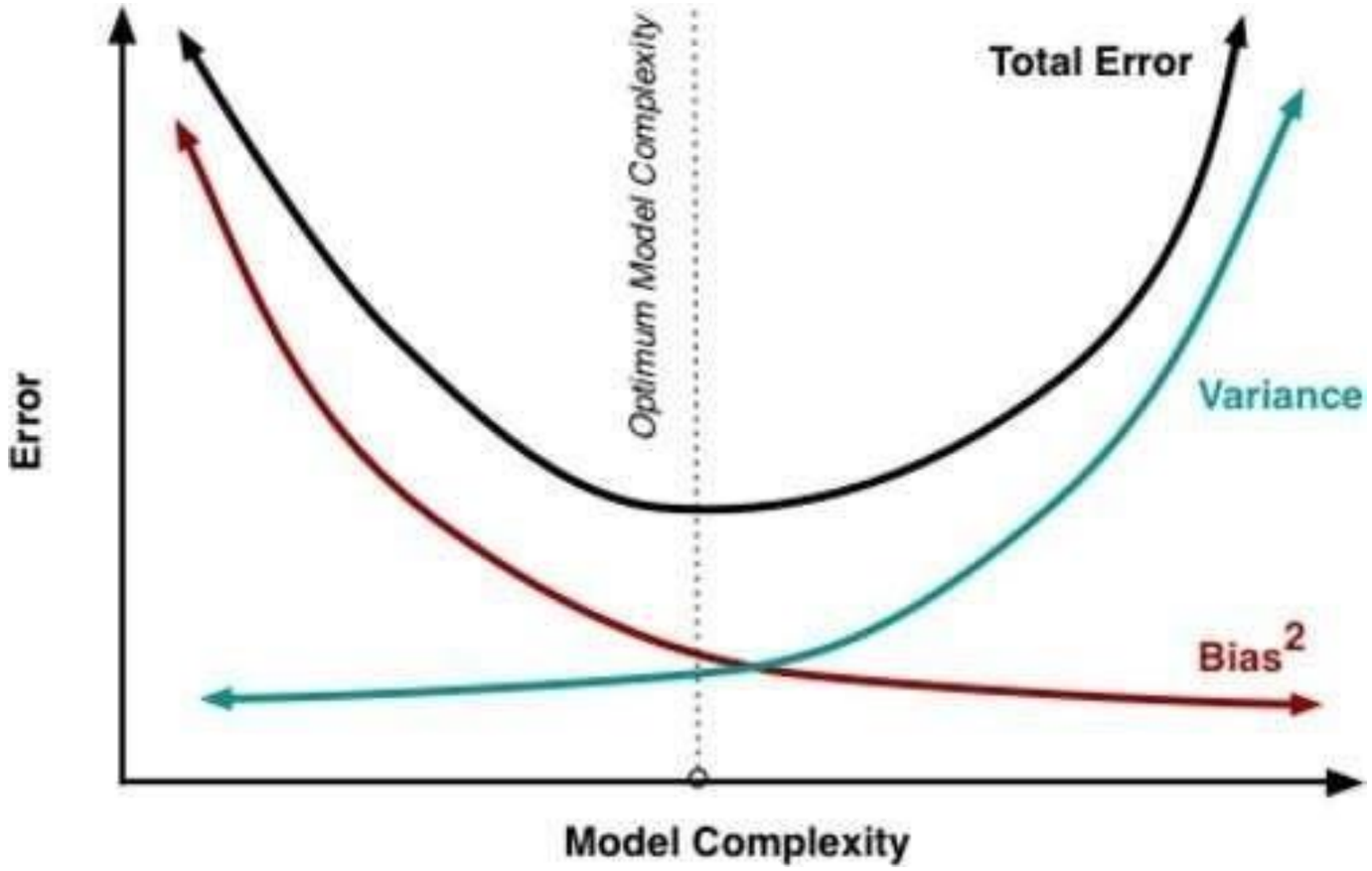
Ошибка прогноза



Сложная модель (учитывает много признаков) – увеличивает разброс ошибки

Слишком простая модель (мало признаков) – вызывает смещение в пользу одного признака

Оптимальный вариант

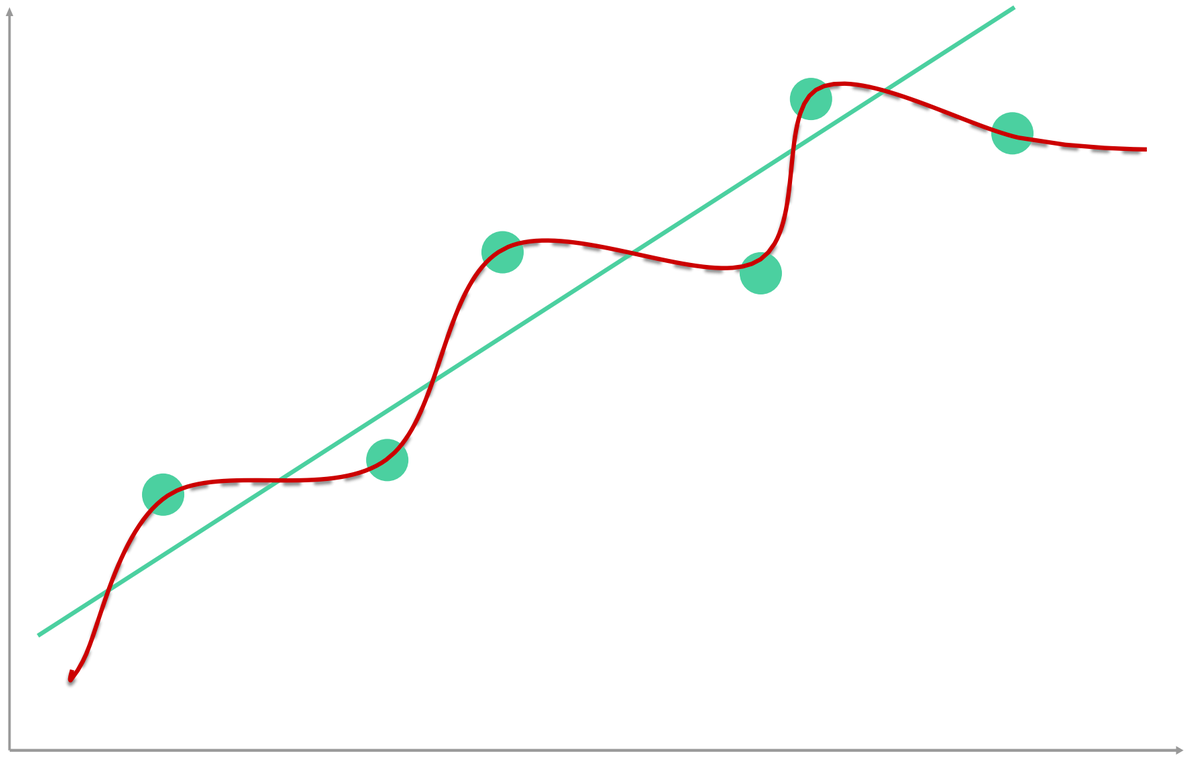


Можно ли повлиять на стабильность модели, т. е. уменьшить Variance?

L1 и L2 регуляризация

6

Прошлый пример переобучения



Переберем модели,
увеличивая степень функции

$$y = a_0 + a_1 x$$

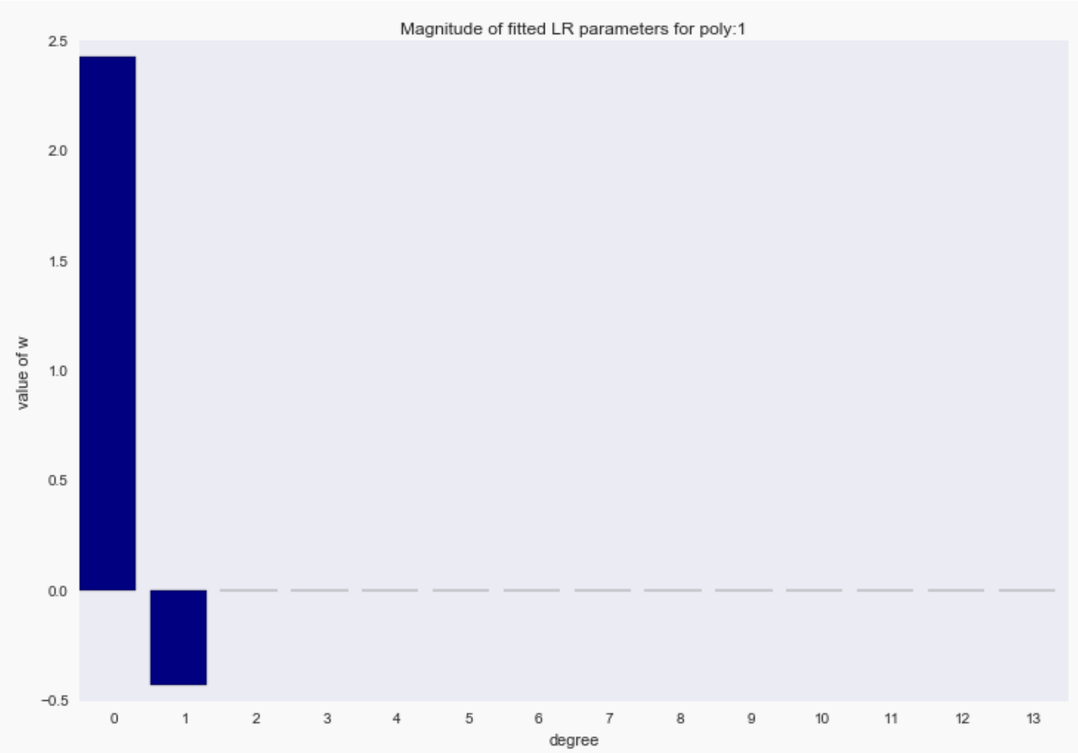
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

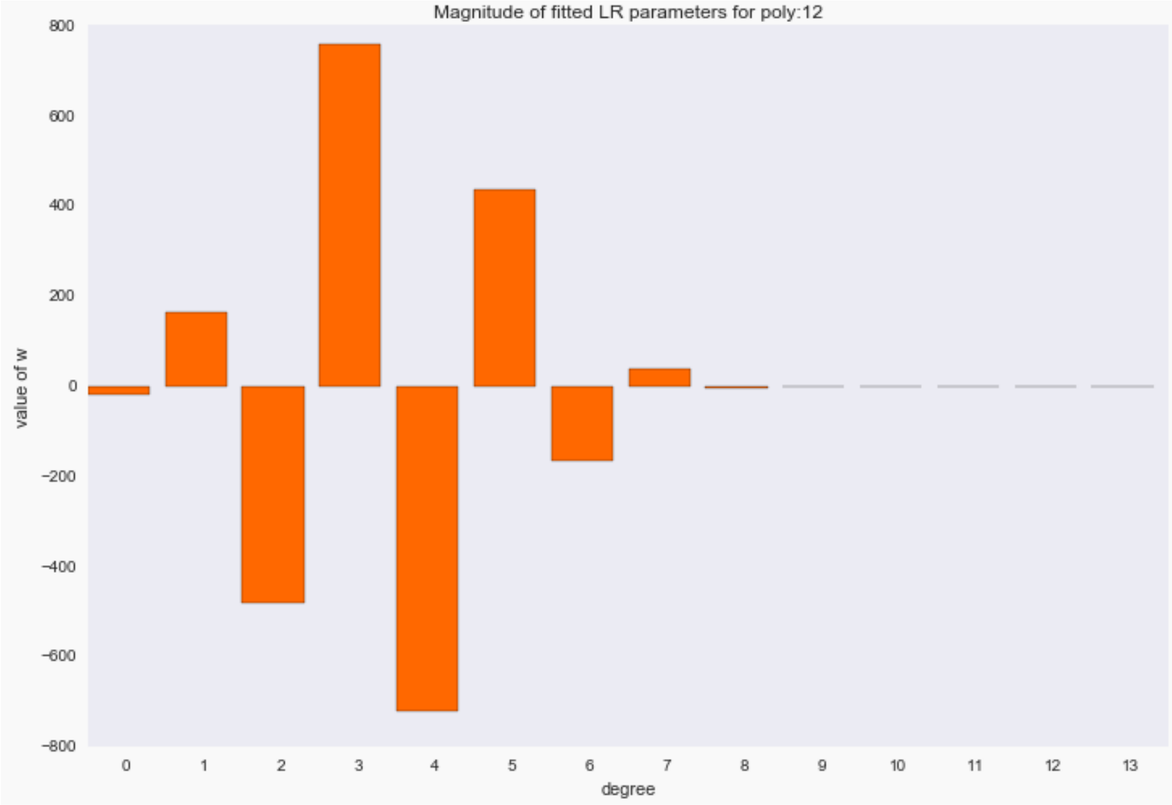
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_5 x^5$$

Как будут варьироваться?

При увеличении и степени полинома
вариация коэффициентов быстро растет





Надо уменьшить разброс коэффициентов

Имеем модель целевой переменной y и коэффициентами a

$$\text{Целевая функция} = \sum_i (y_{\text{факт}} - Xa)^2$$

Штраф за сложность

Основные варианты регуляризации

$$L_1 = \sum_i (y_{\text{факт}} - Xa)^2 + \lambda \sum_i |a_i|$$

$$L_2 = \sum_i (y_{\text{факт}} - Xa)^2 + \lambda \sum_i a_i{}^2$$

Практическое задание

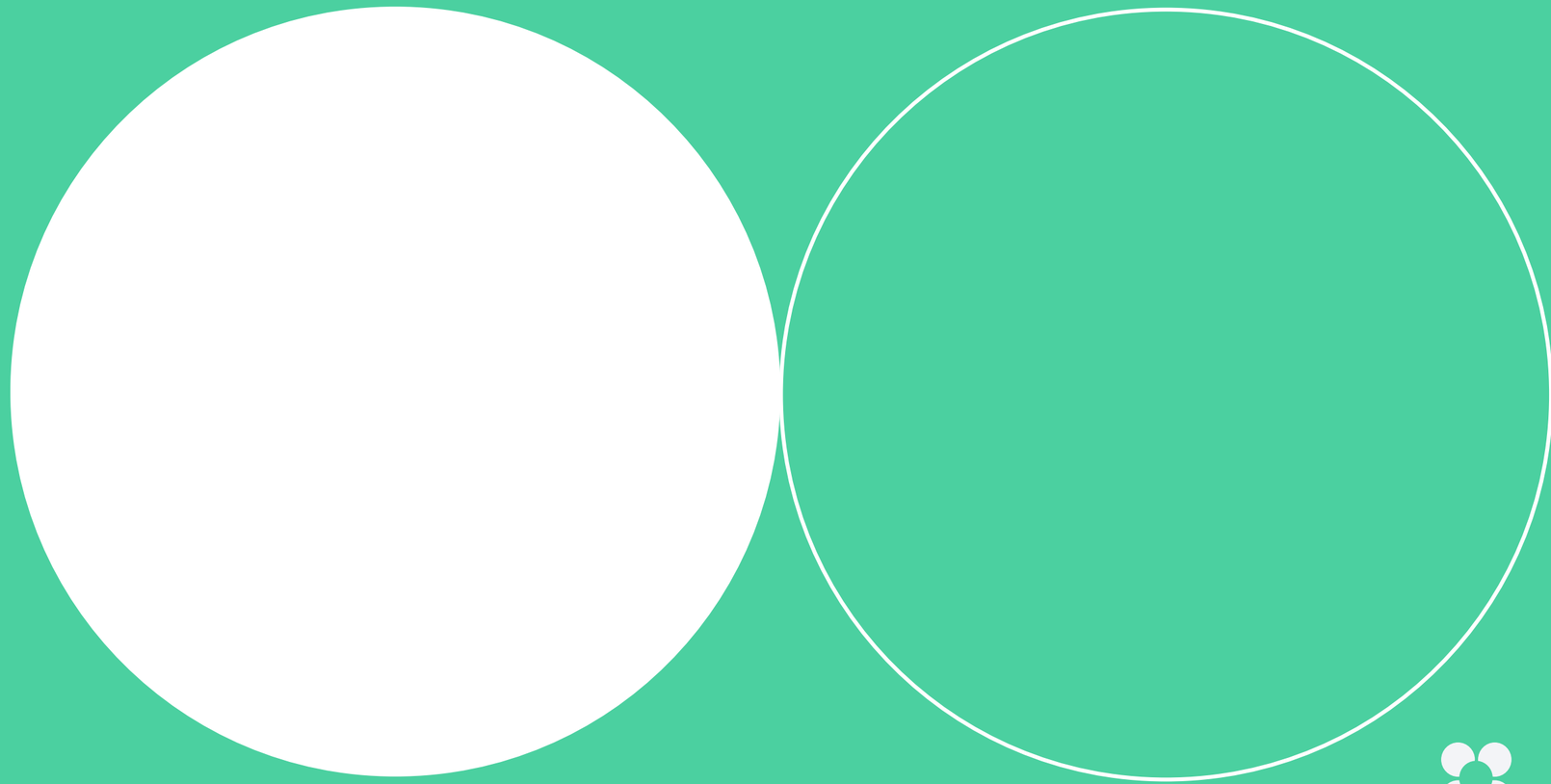
3

Предсказание уровня дохода

- Дана статистика пользователей adult.csv
- Получите значения AUC для различных моделей и их параметров

Время
на задание
20 минут

Что мы сегодня узнали



Что мы сегодня узнали

1. Изучили метрики оценки качества моделей.

2. На практике потренировались в проведении кросс-валидации моделей.

3. Изучили признаки и способы борьбы с переобучением на примере L1 и L2 регуляризации.

Полезные материалы

Полезные материалы

1. Наглядные примеры переобучения модели и теоретические выкладки регуляризации
   https://habrahabr.ru/company/ods/blog/322076/

1. О разнице между L1 и L1 регуляризацией
   http://www.chioka.in/differences-between-l1-and-l2-as-loss-function-and-regularization/

2. Более сложный пример регуляризации
   https://habrahabr.ru/company/ods/blog/323890/#3-naglyadnyy-primer-regulyarizacii-logisticheskoy-regressii

Спасибо за внимание!

Иван Иванов
Должность

sergio@gmail.com

fb.com/sergio