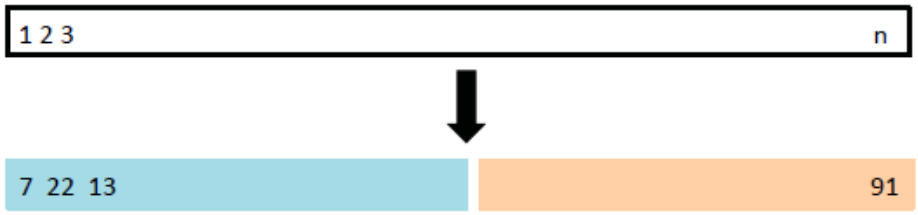
Лекция 4:
Оценка и сравнение моделей

Валидация, кросс-валидация и бутстреппинг

- Эти методы позволяют:
  - оценить ошибки прогнозирования тестового набора
  - найти оценки параметров модели
  - выбрать лучшую модель
- Различия между *ошибкой тестирования* и *ошибкой обучения:*
  - Ошибка тестирования - это усредненная ошибка, которая возникает в результате применения модели машинного обучения для прогнозирования отклика на новом наблюдении, которое не было задействовано в процессе обучения.
  - Ошибка обучения вычисляется после применения алгоритма машинного обучения к наблюдениям, используемым в обучении.

Применение валидационного набора

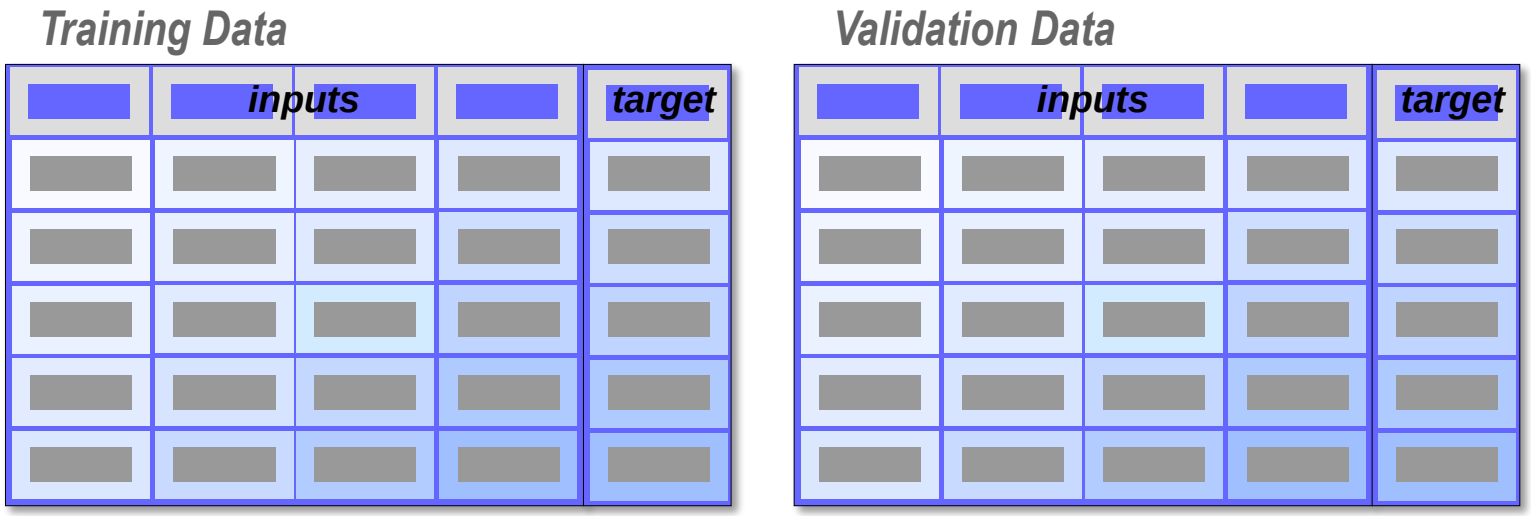
- Разделим случайным образом имеющийся набор образцов на две части*: обучающую и валидационную выборки*.



- Построим модель на обучающем наборе и используем ее для прогнозирования откликов наблюдений в валидационном наборе.
- Полученная ошибка на валидационном множестве дает оценку тестовой ошибки.

$$HO\ (\mu, Z, Z_{val}) = Q(\mu(Z \backslash Z_{val}), Z_{val})$$

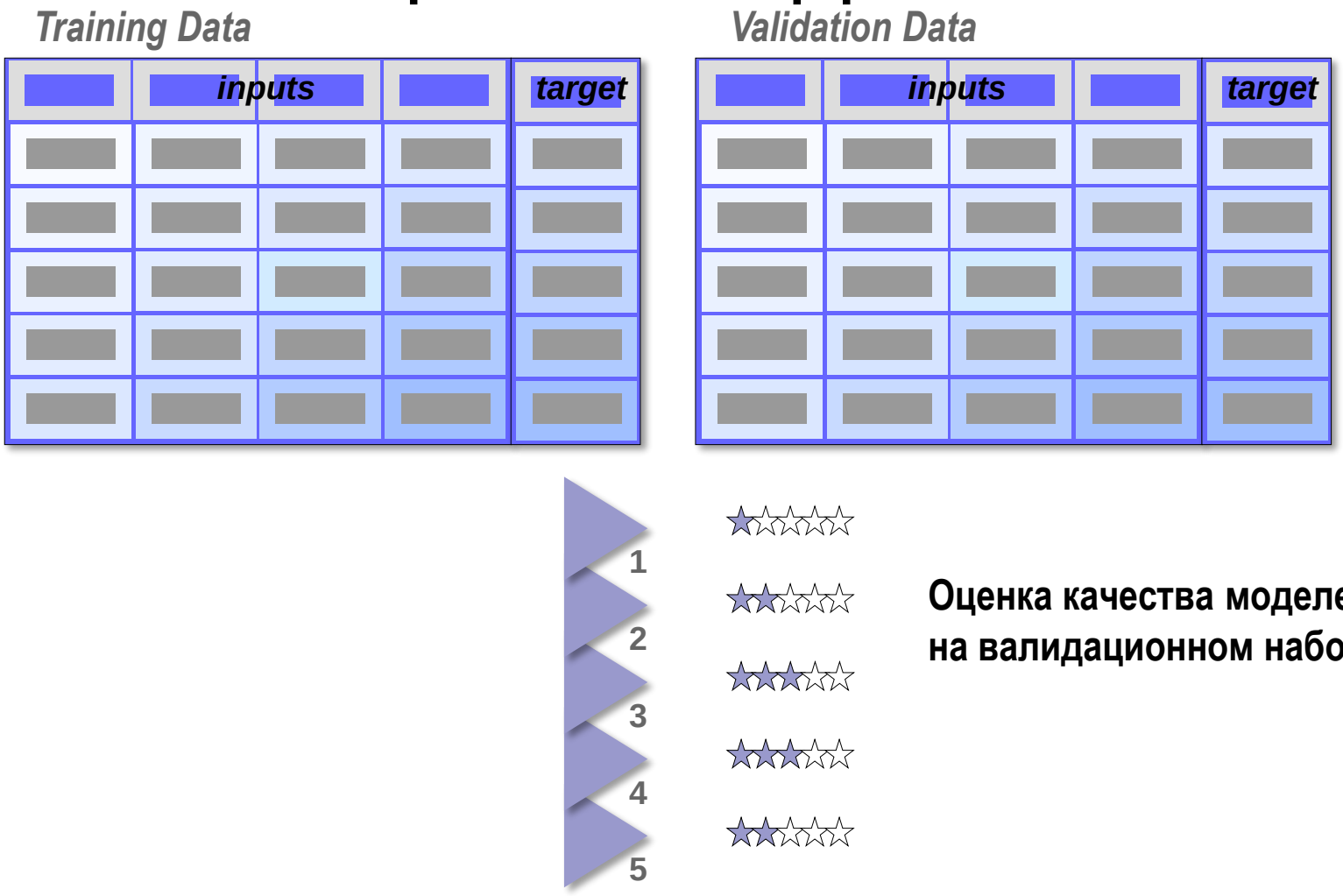
Использование валидационного набора данных



Основные методы генерации валидационного набора:

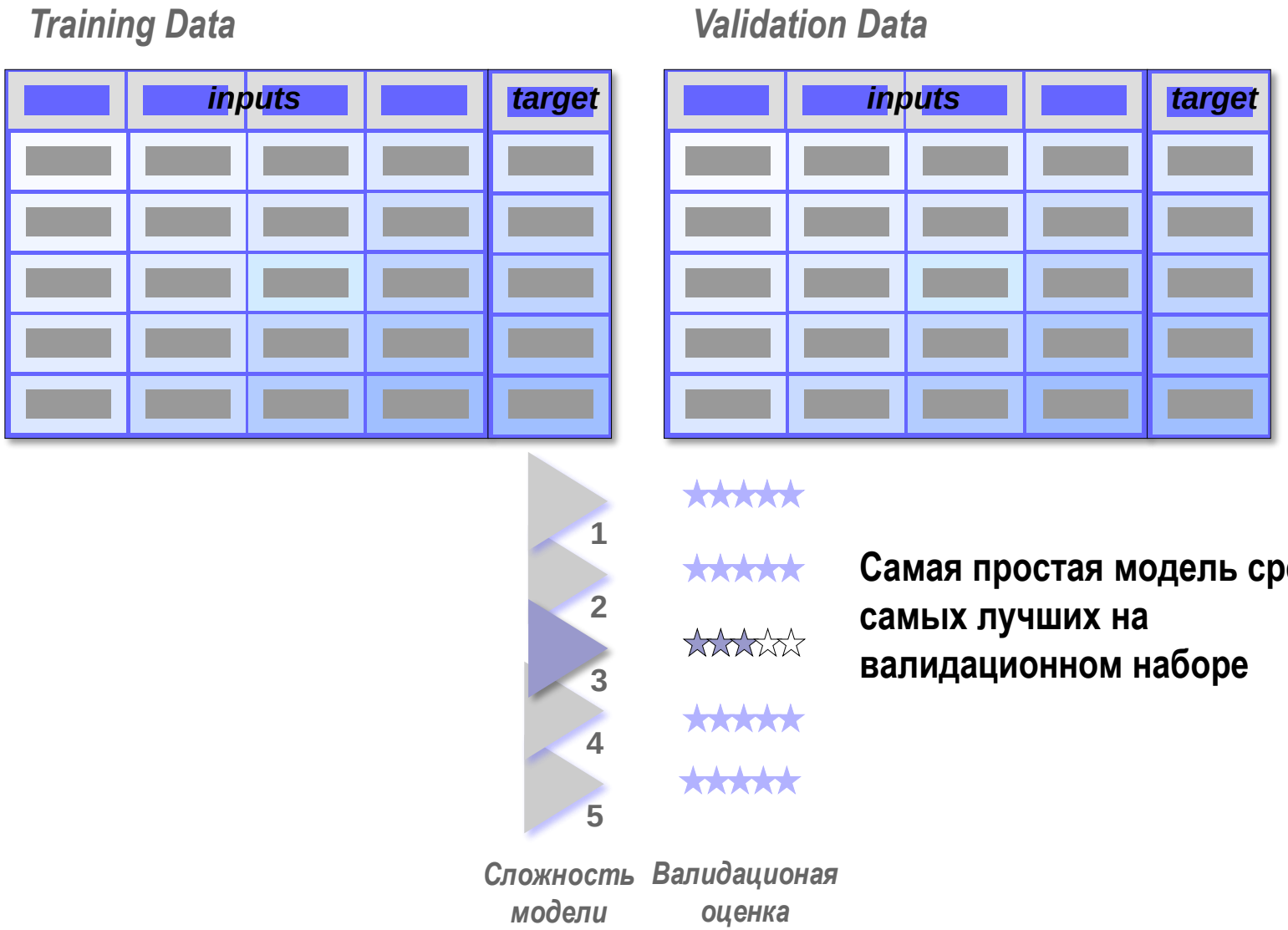
- Случайная выборка
- Стратифицированная выборка (сохраняем распределение выбранных переменых)
- Кластерная выборка (сохраняем пропорции кластеров)

Оценка моделей



Оценка качества моделей на валидационном наборе

Выбор модели



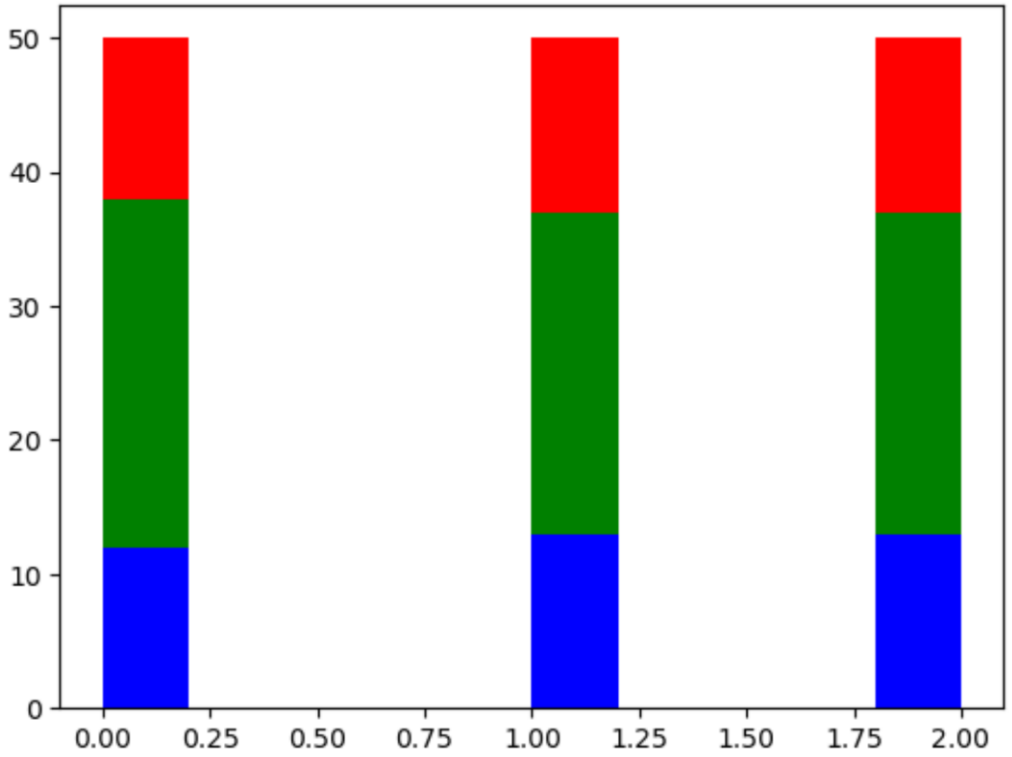
Самая простая модель среди самых лучших на валидационном наборе

Пример (Python)

```python
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.datasets import load_iris
```

```python
iris = load_iris()
X_train, X_test, y_train, y_test, = train_test_split(iris.data, iris.target, test_size=0.25,
    shuffle=True, # Random select
    stratify=iris.target, # Stratification
    random_state=123)
```

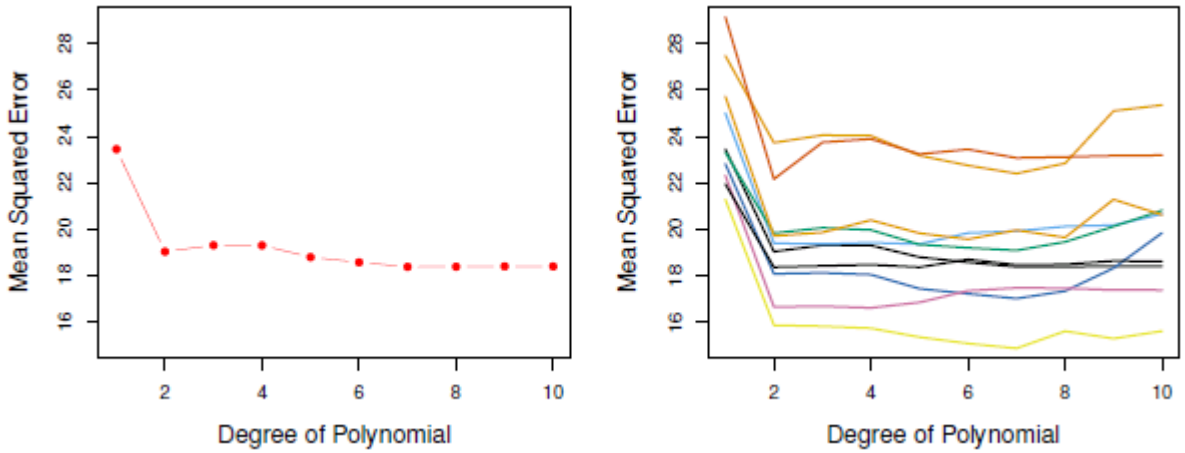
```python
plt.hist(iris.target, color="red")
plt.hist(y_train, color="green")
plt.hist(y_test, color="blue")
pass
```



Для кластерной выборки передаем в качестве stratify метки кластеров

Пример

- Хотим сравнить регрессионные модели с разными степенями полиномима
- Разделим случайным образом 392 наблюдения на две группы: обучающий набор, содержащий 196 объектов и валидационный набор, содержащий оставшиеся 196 объектов.



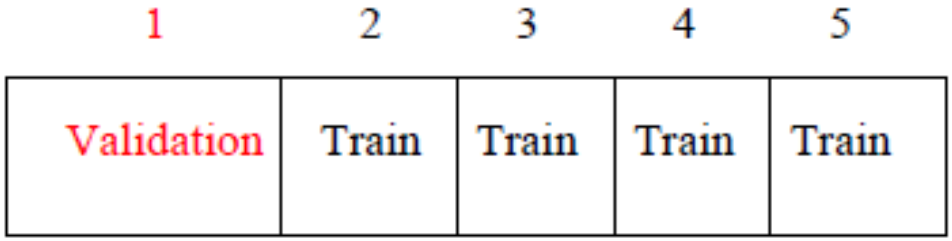
Слева показано одиночное разбиение, справа - множественное

Недостатки подхода применения валидационного набора

- Если плохое разбиение:
  - Валидационная оценка ошибки тестирования может сильно варьироваться в зависимости от того, какие именно наблюдения включены в обучающий наборе, а какие в валидационный.
- Не вся информация используется при обучении:
  - При валидационный подходе только подмножество наблюдений (те, которые включены в обучающий набора, а не в валидационный) используются для построения модели.
- Чрезмерный оптимизм:
  - Ошибка на валидационном наборе может иметь тенденцию *переоценивать* ошибку тестирования

Кросс-валидация

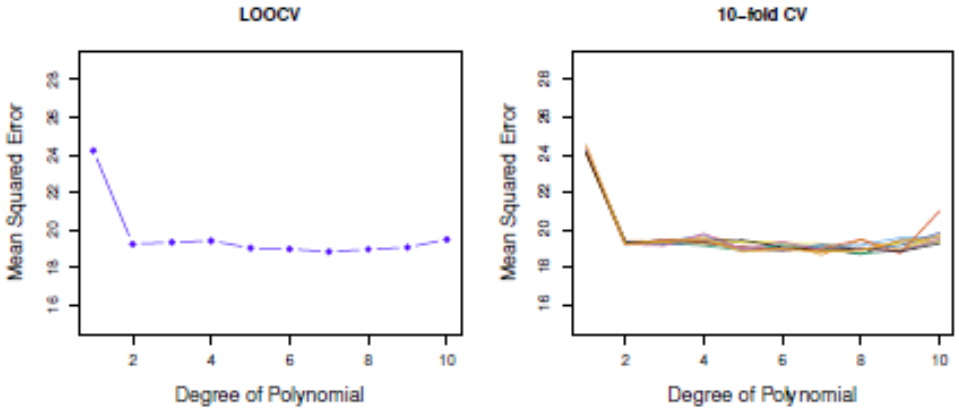
- *Широко используемый подход* для оценки ошибки тестирования.
- Оценки могут быть использованы для:
  - выбора оптимальной модели,
  - оценки тестовой ошибки результирующей выбранной модели.
- Идея - разделить данные на *K* частей равного размера. Мы удаляем часть *k,* строим модель на оставшихся частях, а затем получаем прогнозы для удаленной *k*-ой части.



- Это делается в свою очередь для каждой части *k = 1, 2, ..., K*, а затем результаты объединяются.

Кросс-валидация для оценки ошибки

- Обозначим *K* частей как $Z_1, \ldots, Z_K$, где Z_k - наблюдения в части k. l_k - наблюдений в части k, удобно брать $l_k = l/K$
- Вычислим: $CV_Z(\mu) = \sum_{k=1}^{K} \frac{l_k}{l} Q(\mu(Z \backslash Z_k), Z_k)$

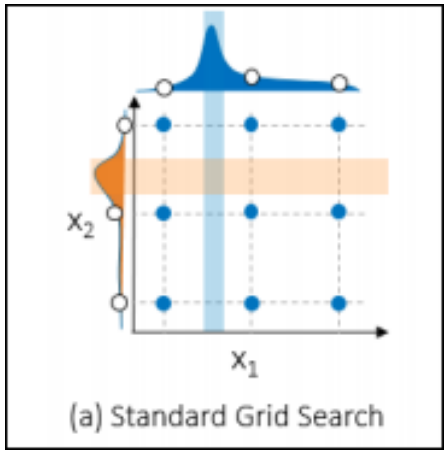


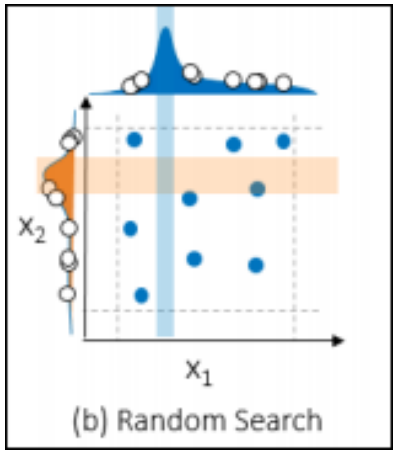
- При $K = l$ имеем l папок или кросс-валидацию с попеременным исключением одного наблюдения – скользящий контроль (*leave-one out cross-validation*, LOOCV).

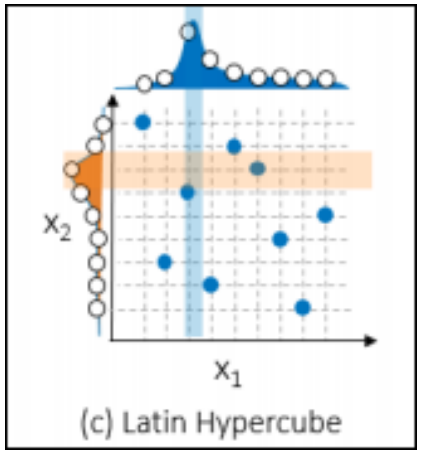
Кросс-валидация для оценки метапараметров (мета-обучение) и выбора модели

- Задают стратегию перебора вариантов метапараметров
- Запускают кросс-валидацию для разных значений метапараметров
- Рассчитывают кросс-валидационные ошибки для каждого варианта
- Выбирают лучшее значение метапараметра по кросс-валидационной ошибке
- Перестраивают модель на всей выборке с этим значением метапараметра

Кросс-валидация и валидация для выбора метапараметров (мета-обучение)







- AutoML:
  - Поиск по решетке
  - Случайный поиск
  - Латинский гиперкуб
  - Эволюционные и генетические алгоритмы поиска
  - «Мета» оптимизация
  - Байесовская оптимизация
- Оценка качества:
  - Не обязательно (и даже как правило) оценка качества для выбора модели совпадает с функцией потерь для обучения модели

Пример (Python)

```
from sklearn.utils import resample
```

```
X, y = fetch_california_housing(return_X_y=True, as_frame=True)
X
```

	MedInc	HouseAge	AveRooms	AveBedrms	Population	AveOccup	Latitude	Longitude
0	8.3252	41.0	6.984127	1.023810	322.0	2.555556	37.88	-122.23
1	8.3014	21.0	6.238137	0.971880	2401.0	2.109842	37.86	-122.22
2	7.2574	52.0	8.288136	1.073446	496.0	2.802260	37.85	-122.24
3	5.6431	52.0	5.817352	1.073059	558.0	2.547945	37.85	-122.25
4	3.8462	52.0	6.281853	1.081081	565.0	2.181467	37.85	-122.25
...	...	...	...	...	...	...	...	...
20635	1.5603	25.0	5.045455	1.133333	845.0	2.560606	39.48	-121.09
20636	2.5568	18.0	6.114035	1.315789	356.0	3.122807	39.49	-121.21
20637	1.7000	17.0	5.205543	1.120092	1007.0	2.325635	39.43	-121.22
20638	1.8672	18.0	5.329513	1.171920	741.0	2.123209	39.43	-121.32
20639	2.3886	16.0	5.254717	1.162264	1387.0	2.616981	39.37	-121.24

20640 rows × 8 columns

Пример – Grid Search (Python)

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.datasets import fetch_california_housing
```

```
X, y = fetch_california_housing(return_X_y=True)
```

```
N = 5000
X, y = X[:N], y[:N]
X.shape, y.shape
```

```
((5000, 8), (5000,))
```

```
scaler = StandardScaler()
VT = VarianceThreshold() # Preprocessing
KNN = KNeighborsRegressor() # Regressor
```

```
# Combined model - encapsulates all stages
model = Pipeline([("scaler", scaler), ("VT", VT), ("KNN", KNN)])
```

Пример – Grid Search (Python)

```
# Parameters to cycle through
# Pipeline parameters are passed as <STAGE>__<PARAMETER NAME>
parameters = {"KNN__n_neighbors": range(2, 20),
              "VT__threshold": [0, 1]}
```

```
# 5-fold cross-validation
GSCV = GridSearchCV(model, parameters, cv=5)
GSCV.fit(X, y)
pass
```

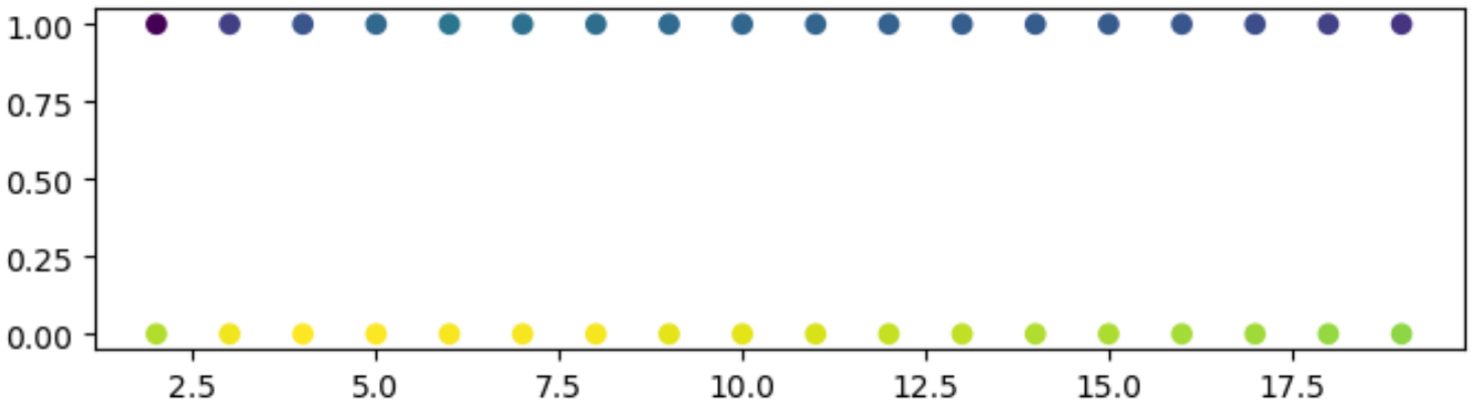
```
GSCV.best_params_
```

```
{'KNN__n_neighbors': 4, 'VT__threshold': 0}
```

```
pred = GSCV.predict(X) # GSCV is equal to the best estimator
```

Пример – Grid Search (Python)

```
plt.scatter(*pd.DataFrame(GSCV.cv_results_["params"]).T.values, c=GSCV.cv_results_["mean_test_score"])
plt.gcf().set_size_inches(8, 2)
```



Пример – Случайный поиск (Python)

```
from sklearn.model_selection import RandomizedSearchCV
from scipy.stats import randint, uniform
```

```
model = Pipeline([("scaler", scaler),
                  ("VT", VarianceThreshold()),
                  ("KNN", KNeighborsRegressor())])
```

```
distributions = {"KNN__n_neighbors": randint(2, 20),
                 "VT__threshold": uniform(0, 1)}
```

```
# 5-fold cross-validation
RSCV = RandomizedSearchCV(model, distributions, n_iter=20,
                          cv=5, random_state=123)
RSCV.fit(X, y)
pass
```

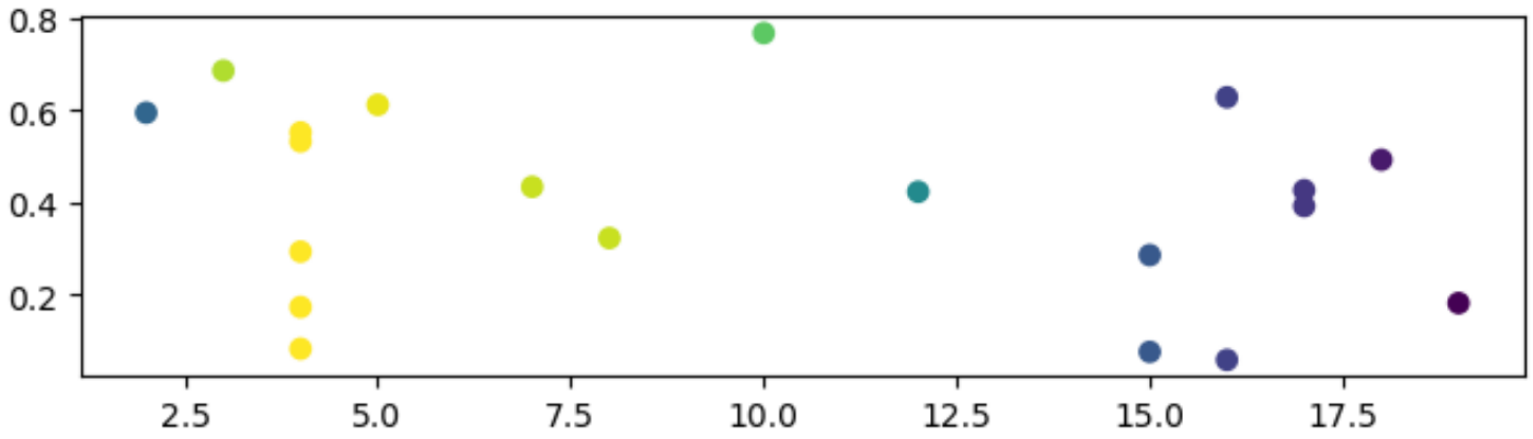
Пример – Случайный поиск (Python)

```
RSCV.best_params_
```

```
{'KNN__n_neighbors': 4, 'VT__threshold': 0.5513147690828912}
```

```
pred = RSCV.predict(X) # RSCV is equal to the best estimator
```

```
plt.scatter(*pd.DataFrame(RSCV.cv_results_["params"]).T.values, c=RSCV.cv_results_["mean_test_score"])
plt.gcf().set_size_inches(8, 2)
```



Пример – Отбор (Python)

```
from sklearn.experimental import enable_halving_search_cv # Required import
from sklearn.model_selection import HalvingGridSearchCV, HalvingRandomSearchCV
```

```
model = Pipeline([("scaler", scaler),
                  ("VT", VarianceThreshold()),
                  ("KNN", KNeighborsRegressor())])
```

```
distributions = {"KNN__n_neighbors": randint(2, 20),
                 "VT__threshold": uniform(0, 1)}
```

```
HRSV = HalvingRandomSearchCV(model, distributions, cv=5,
                             factor=2, # Candidate selection cut-off
                             # Resource increasing during selection:
                             resource="n_samples",
                             min_resources=100)
HRSV.fit(X, y)
pass
```

Пример – Отбор (Python)

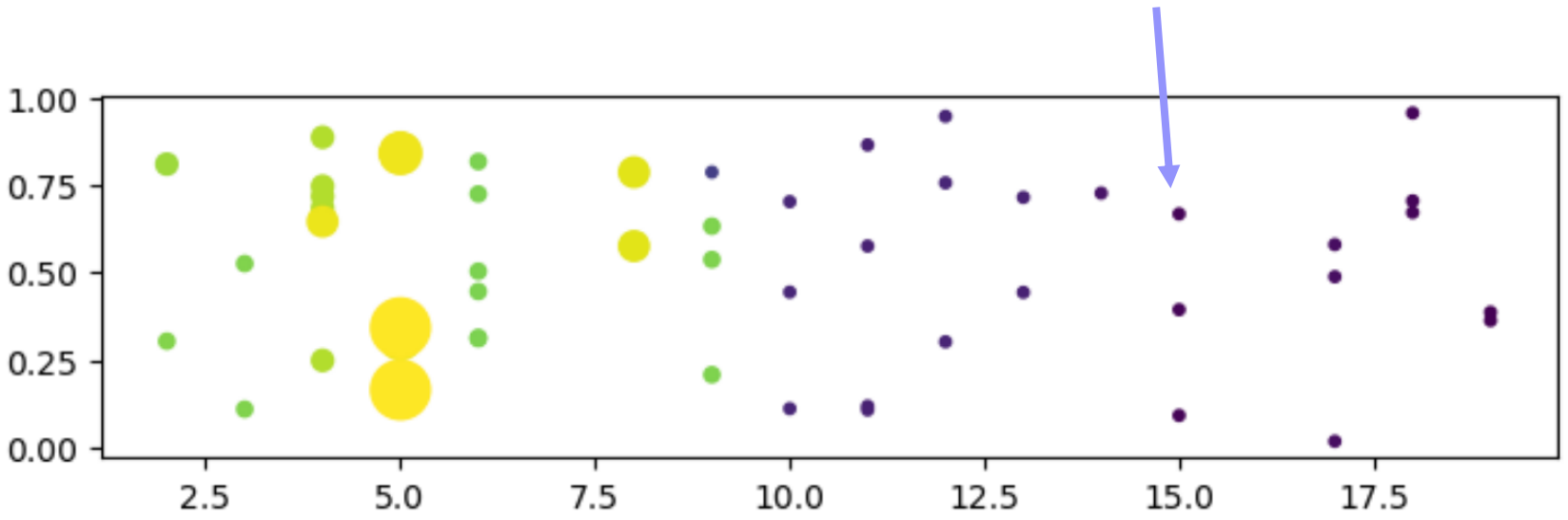
```
HRSV.best_params_
```

```
{'KNN__n_neighbors': 5, 'VT__threshold': 0.3417047325655804}
```

```
pred = HRSV.predict(X) # RSCV is equal to the best estimator
```

```
plt.scatter(*pd.DataFrame(HRSV.cv_results_["params"]).T.values,
            c=HRSV.cv_results_["mean_test_score"],
           s=HRSV.cv_results_["n_resources"]/10)
plt.gcf().set_size_inches(8, 2)
```

Размер отвечает за число семплов



Бутстрэппинг

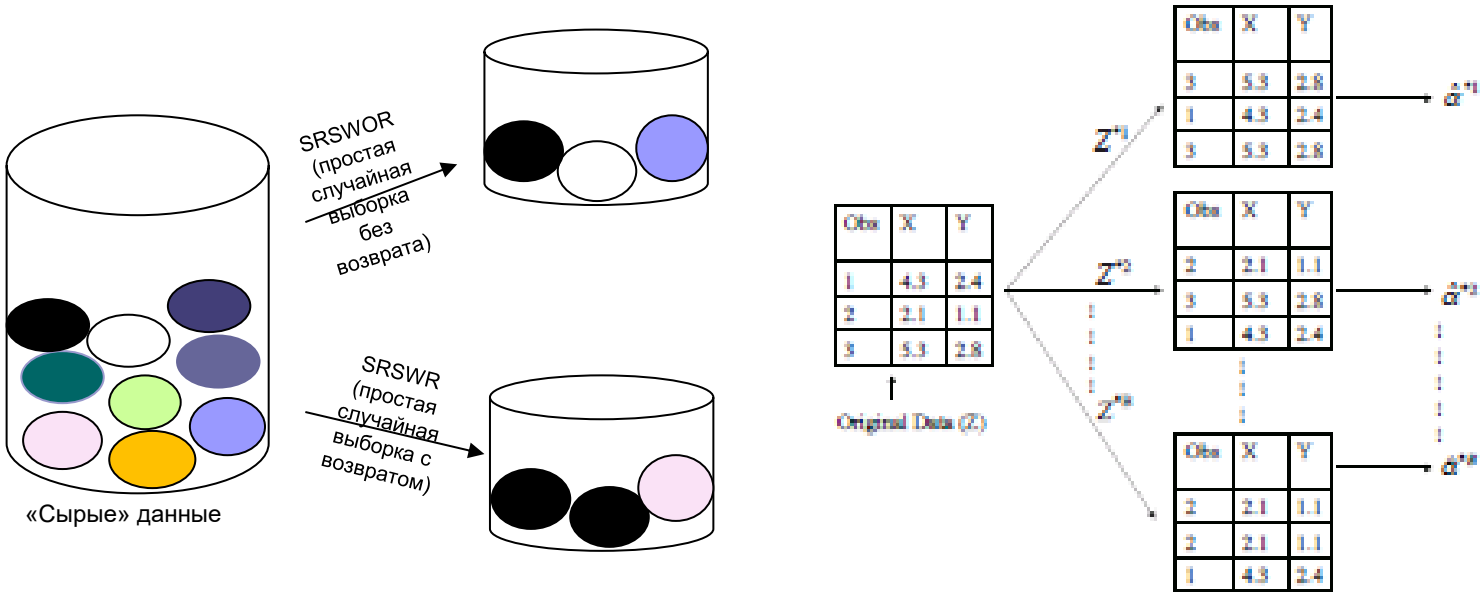
- *Бутстрэппинг* представляет собой мощный статистический инструмент, который может быть использован для количественной оценки неопределенности.
- Например, он может позволить произвести оценку стандартной ошибки коэффициента или доверительного интервала для этого коэффициента.
- Использование термина бутстреппинг происходит от фразы, чтобы *to pull oneself up by one's bootstraps*, - «пример» из книги «Удивительные приключения барона Мюнхгаузена»

Барон упал на дно глубокого озера. Когда казалось, что все было потеряно, он решил вытащить себя своими собственными силами.

Бутстрэппинг

- Подход бутстрэппинга позволяет имитировать процесс получения новых случайных наборов данных, так что мы можем оценить дисперсию нашей оценки, не создавая дополнительных образцов.
- Вместо того, чтобы постоянно получать независимые наборы данных, мы получаем различные наборы путем многократной выборки наблюдений из исходного набора *с замещением* (или *с возвращением*).
- Каждый из этих "наборов данных" создается путем выборки *с замещением* и имеет *такой же размер* как наш исходный набор данных. В результате некоторые наблюдения могут появляться более одного раза в наборе данных бутстреппинга, а некоторые нет вообще.

Демонстрационный пример



- Графическая иллюстрация бутсреппингового подхода на маленькой выборке
- Каждый бутсреппинговый набор данных содержит наблюдения, отобранные с заменой из исходного набора.
- Каждый такой набор данных начальной используется для получения оценки

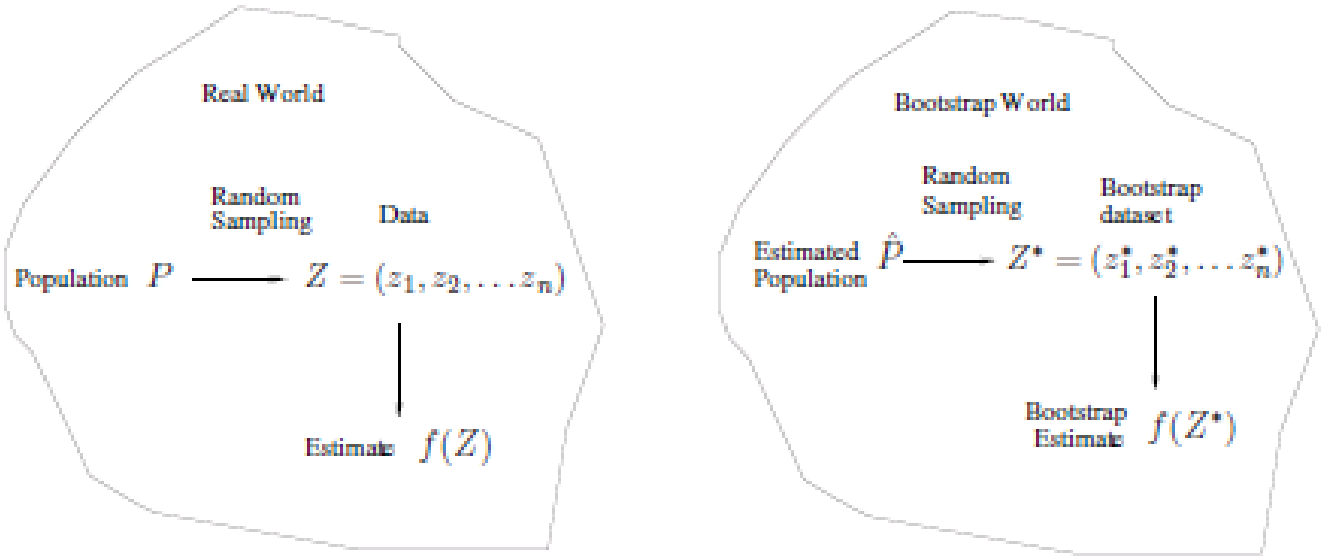
Бутстрэппинг

- Обозначая k-й набор данных бутстреппинга как Z^{*k}, мы используем его, чтобы выполнить новую оценку для a^{*k}
- Эта процедура повторяется *B* раз для некоторого большого значения *B* (например, 100 или 1000), чтобы получить *B* различных наборов данных бутстреппинга $Z^{*1}, Z^{*2}, \ldots, Z^{*B}$, и *B* соответствующих оценок $a^{*1}, a^{*2}, \ldots, a^{*B}$
- Оценим среднее и стандартную ошибку этих оценок бутстреппинга:

$$\hat{a} = \frac{1}{B}\sum_{r=1}^{B}(a^{*r}), SE_B(a) = \sqrt{\frac{1}{B-1}\sum_{r=1}^{B}(\hat{a} - a^{*r})^2}$$

- Они служат в качестве оценки, полученной на тестовом наборе данных.

Общая схема бутсрепинга



- В более сложных ситуациях, определение подходящего способа для получения выборок бутстрепинга может потребовать значительных усилий.
- Например, если данные представляют собой временные ряды, мы не можем просто выбирать наблюдения с замещением

Как бутстрепинг оценивает ошибку прогнозирования

- При кросс-валидации каждый из *K* блоков валидации отличается от других *K - 1*, используемых для обучения: *перекрытия нет*.
- Для оценки ошибки прогнозирования с помощью бутстреппинга мы могли бы использовать каждый набор данных бутстреппинга как валидационный набор для остальных (или наоборот), но:
  - каждая выборка бутстрепинга имеет значительное перекрытие с исходным набором (около двух третей).
  - это приведет бутстреппинг к существенному недооцениванию истинной ошибки прогнозирования
- Удаление перекрытия (*out of bag*) - можно частично решить эту проблему, используя для оценки только те наблюдения, которые не появились (случайно) в текущей выборке бутстреппинга $OOB(\mu) = \sum_{k=1}^{K} \frac{l_k}{l} Q(\mu(Z^{*k}), Z \backslash Z^{*k})$

Пример (Python)

```
ITER = 100
SAMPLES = 100
frame = []
for i in range(ITER):
    sample = resample(X, replace=True, n_samples=SAMPLES, stratify=None)
    stat = sample["HouseAge"].mean()
    frame.append(stat)
frame = np.array(frame).flatten()
frame = pd.Series(frame).sort_values()
```

Доверительные интервалы 90% для среднего возраста жилища:

```
frame.quantile(0.05), frame.quantile(0.95)
```

```
(26.248, 30.6515)
```

Бутстреп-регрессия (Python)

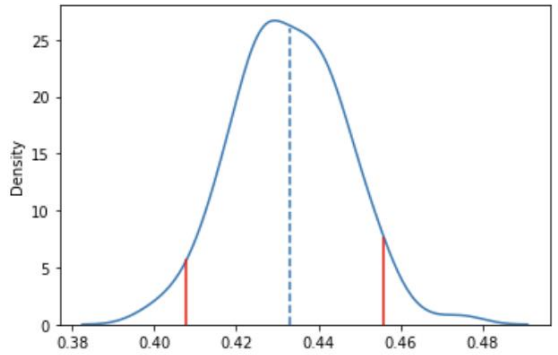
```
from sklearn.ensemble import BaggingRegressor
```

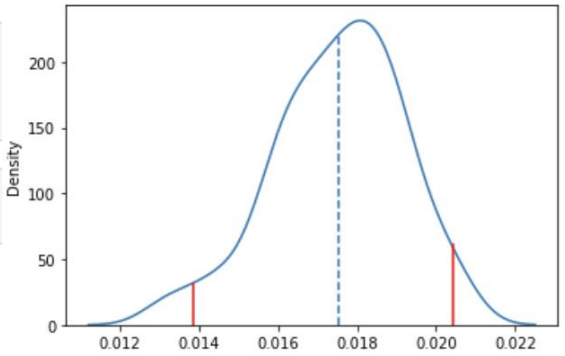
```
estimator = BaggingRegressor(LinearRegression(), n_estimators=100
                             bootstrap=True, max_samples=0.1,
                             random_state=42)
```

```
features = X[["MedInc", "HouseAge"]]
```

```
estimator.fit(features, y)
pass
```

```
coefs = np.array([x.coef_ for x in estimator.estimators_])
```






```
sns.kdeplot(data=coefs[:, 0])
plt.axvline(coefs[:, 0].mean(), 0, 0.93, ls="--")
plt.axvline(np.quantile(coefs[:, 0],0.025), 0, 0.20,c="red")
plt.axvline(np.quantile(coefs[:, 0],0.975), 0, 0.27,c="red")
```

```
sns.kdeplot(data=coefs[:, 1])
plt.axvline(coefs[:, 1].mean(), 0, 0.91, ls="--")
plt.axvline(np.quantile(coefs[:, 1],0.025), 0, 0.13,c="red")
plt.axvline(np.quantile(coefs[:, 1],0.975), 0, 0.25,c="red")
pass
```

Бутстреп-регрессия (Python)

```
pred = np.array([x.predict(features.values) for x in estimator.estimators_]).T
pred.shape
```

```
(20640, 100)
```

```
plt.plot(np.percentile(pred, q=5, axis=1)[:25], c="blue")
plt.plot(np.percentile(pred, q=95, axis=1)[:25], c="red")
plt.scatter(range(25), estimator.predict(features)[:25], c="green")
pass
```