Đánh giá các mô hình học máy

Giới thiệu

Trong quá trình xây dựng một mô hình Machine Learning, một phần không thể thiếu để xét xem mô hình có chất lượng tốt hay không chính là đánh giá mô hình. Đánh giá mô hình giúp chúng ta chọn lựa được các mô hình phù hợp với bài toán cụ thể. Để có thể áp dụng đúng thước đo đánh giá mô hình phù hợp, chúng ta cần hiểu bản chất, ý nghĩa cũng như các trường hợp sử dụng nó.

Để rõ ràng hơn, mình sẽ tập trung phân tích các metric đánh giá đối với: mô hình phân loại (**classification**), mô hình hồi quy (**regression**).

Bài toán phân loại (Classification)

Classifcation là một bài toán được sử dụng vô cùng rộng rãi trong Machine Learning với các tính ứng dụng đa dạng như nhận diện khuôn mặt, phân loại video Youtube, phân loại văn bản, phân loại giọng nói, …

Có thể kể tới một vài mô hình tiêu biểu như Support Vector Machine (SVM), Logistic Regression, Decision Trees, Random Forest, XGboost, … Dưới đây là một số metrics để đánh giá mô hình phân loại:

Confusion Matrix (Đây không phải là 1 metric, nhưng rất quan trọng)

Chúng ta cùng tìm hiểu một thuật ngữ cơ bản được sử dụng trong các bài toán phân loại – Confusion matrix (AKA error matrix). Nó thể hiện được có bao nhiêu điểm dữ liệu thực sự thuộc vào một class, và được dự đoán là rơi vào một class.

Để dễ hiểu hơn, chúng ta cùng làm một ví dụ: bài toán phân loại ảnh đó là mèo hay không, trong dữ liệu dự đoán có 100 ảnh là mèo, 1000 ảnh không phải là mèo. Ở đây, kết quả dự đoán là như sau

Trong 100 ảnh mèo dự đoán đúng 90 ảnh, còn 10 ảnh được dự đoán là không phải. Nếu ta coi cat là “positive” và non-cat là “negative”, thì 90 ảnh được dự đoán là cat, được gọi là True Positive, còn 10 ảnh được dự đoán non-cat kia được gọi là False Negative

Trong 1000 ảnh non-cat, dự đoán đúng được 940 ảnh là non-cat, được gọi là True Negative, còn 60 ảnh bị dự đoán nhầm sang cat được gọi là False Positive

Có thể tới đây nhiều người sẽ khá là lẫn lộn, “True”, “False” rồi “Positive”, “Negative”. Vậy để có một cách dễ nhớ, có một mánh nhỏ như sau

- True/False ý chỉ những gì ta đã dự đoán là đúng hay chưa
- Positive/Negative chỉ những gì ta dự đoán (có hoặc không) Nói cách khách, nếu thấy chữ True tức là dự đoán là đúng (là cat hay non-cat, chỉ cần đúng), còn False thì ngược lại.

Classification Accuracy

Đây là độ đo của bài toán phân loại mà đơn giản nhất, tính toán bằng cách lấy số dự đoán đúng chia cho toàn bộ các dự đoán. Ví dụ với bài toán Cat/Non-cat như trên, độ chính xác sẽ được tính như sau:

Classification Accuracy = (90+940)/(1000+100) = 93.6%

Nhược điểm của cách đánh giá này là chỉ cho ta biết được bao nhiêu phần trăm lượng dữ liệu được phân loại đúng mà không chỉ ra được cụ thể mỗi loại được phân loại như thế nào, lớp nào được phân loại đúng nhiều nhất hay dữ liệu của lớp nào thường bị phân loại nhầm nhất vào các lớp khác.

Precision

Như đã nói phía trên, sẽ có rất nhiều trường hợp thước đo Accuracy không phản ánh đúng hiệu quả của mô hình. Giả sử mô hình dự đoán tất cả 1100 ảnh là Non-cat, thì Accuracy vẫn đạt tới 1000/1100 = 90.9%, khá cao nhưng thực chất mô hình khá là tồi Vì vậy chúng ta cần một metric có thể khắc phục được những yếu điểm này. Precision là một trong những metrics có thể khắc phục được, công thức như sau:

$$Precision = \frac{True\ Positive}{\text{True Positive+False Positive}}$$

Áp dụng vào bài toán Cat/Non-cat, Precision sẽ được tính như sau:

Precision(cat) = 90/(90+60) = 60% Precision(non-cat) = 940/(940+10) = 98.9%

Có thể thấy việc dự đoán Cat chưa thực sự tốt nhờ phép đó Precision này. Precision sẽ cho chúng ta biết thực sự có bao nhiêu dự đoán Positive là thật sự True

Recall

Recall cũng là một metric quan trọng, nó đo lường tỷ lệ dự báo chính xác các trường hợp positive trên toàn bộ các mẫu thuộc nhóm positive. Công thức của Recall như sau:

$$Recall = \frac{True\ Positive}{\text{True Positive+False Negative}}$$

Áp dụng vào bài toán Cat/Non-cat, Precision sẽ được tính như sau:

- Recall(cat) = 90/(90+10) = 90%
- Recall(non-cat) = 940/(940+60) = 94%

Recall cao đồng nghĩa với việc True Positive Rate cao, tức là tỷ lệ bỏ sót các điểm thực sự là positive là thấp

F1-score

Tùy thuộc vào bài toán mà bạn sẽ muốn ưu tiến sử dụng Recall hay Precision. Nhưng cũng có rất nhiều bai toán mà cả Precision hay Recall đều quan trọng. Một metric phổ biến đã kết hợp cả Recall và Precision lại được gọi là F1-score

F1-score được tính theo công thức sau:

$$F1 - score = \frac{2 * Precision * Recall}{\text{Precision+Recall}}$$

Sensitivity – Specificity

Sensitivity và Specificity là 2 metrics được sử dụng trong các bài toán phân loại liên quan đến y tế và sinh học. Chúng được định nghĩa như sau:

$$\boldsymbol{Sensitivity} = \boldsymbol{Recall} = \frac{\boldsymbol{True\ Positive}}{\textbf{True Positive+False Negative}}$$

$$\boldsymbol{Specificity} = \textbf{True Negative Rate} = \frac{\boldsymbol{True\ Negative}}{\textbf{True Negative+False Positive}}$$

AUC

AUC (Area Under the Curve) là một phép đo tổng hợp về hiệu suất của phân loại nhị phân trên tất cả các giá trị ngưỡng có thể có. Để hiểu rõ hơn về metric này, chúng ta sẽ tìm hiểu về một khai niệm cơ sở trước, đó là ROC Curve

ROC Curve (The receiver operating characteristic curve) là một đường cong biểu diễn hiệu suất phân loại của một mô hình phân loại tại các ngưỡng threshold. Về cơ bản, nó hiển thị True Positive Rate (TPR) so với False Positive Rate (FPR) đối với các giá trị ngưỡng khác nhau. Các giá trị TPR, FPR được tính như sau:

$$\textbf{TPR} = \frac{\boldsymbol{True\ Positive}}{\textbf{True Positive} + \textbf{False Positive}}$$

$$\textbf{FPR} = \frac{\boldsymbol{False\ Positive}}{\textbf{True Negative} + \textbf{False Negative}}$$

Cùng làm một ví dụ cho dễ hình dung:

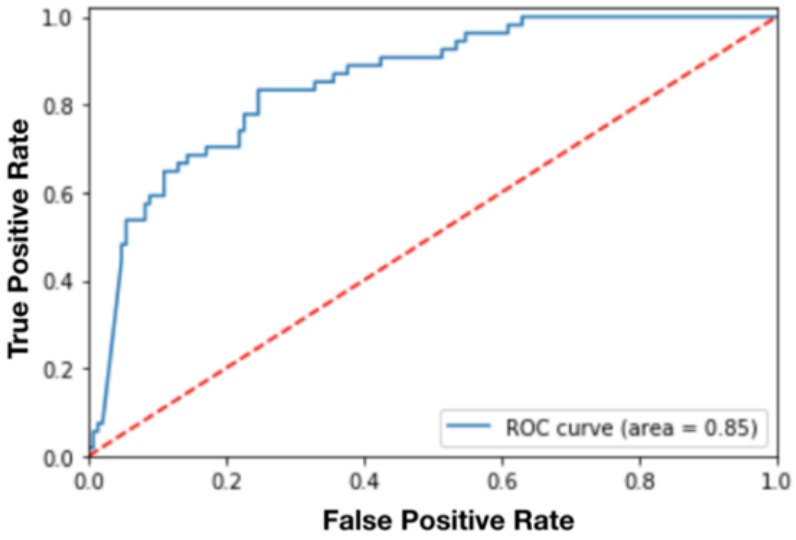
Có rất nhiều mô hình phân loại mang tính xác suất, ví dụ dự doán xác suất của một mẫu là Cat. Chúng so sánh xác suất đầu ra với một số ngưỡng giới hạn và nếu nó lớn hơn ngưỡng đó, mô hình dự đoán nhãn là Cat, còn không thì là Non-cat.

Ví dụ mô hình của bạn dự đoán giá trị xác suất cho 4 samples lần lượt là [0.45, 0.6, 0.7, 0.3]. Tùy vào giá trị ngưỡng mà sẽ có các nhãn đầu ra dự đoán khác nhau:

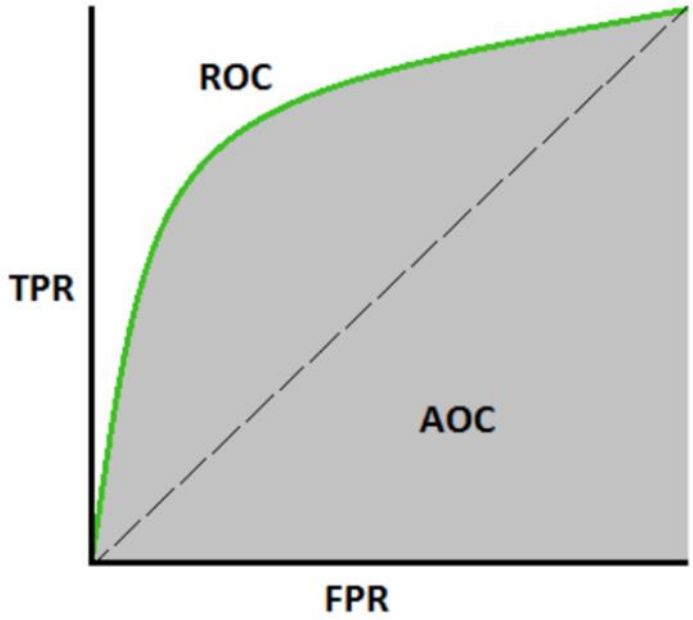
- Ngưỡng là 0.5: Sample 2,3 là Cat
- Ngưỡng là 0.25: Tất cả samples đều là Cat
- Ngưỡng là 0.8: Tất cả sample là Non-cat

Có thể thấy với các ngưỡng khác nhau, chúng ta sẽ có kết quả dự đoán nhãn khác nhau, kéo theo các giá trị như precision hay recall cũng sẽ khác nhau

ROC tìm ra TPR và FPR ứng với các giá tị ngưỡng khác nhau và vẽ biểu đồ để dễ dàng quan sát TPR so với FPR. Ví dụ dưới đây là một đường cong ROC



AUC là chỉ số được tính toán dựa trên đường cong ROC nhằm đánh giá khả năng phân loại của mô hình tốt như thê nào. Phần diện tích nằm dưới đường cong ROC và trên trục hoành chính là AUC,có giá trị nằm trong khoảng [0, 1].



Khi diện tích này càng lớn, đường cong này sẽ dần tiệm cận với đường thẳng y=1 tương đương với khả năng phân loại của mô hình càng tốt. Còn khi đường cong ROC nằm sát với đường chéo đi qua hai điểm (0, 0) và (1, 1), mô hình sẽ tương đương với một phân loại ngẫu nhiên.

Bài toán hồi quy (Regression)

Mô hình hồi quy (Regerssion model) được sử dụng để dự đoán các giá trị mục tiêu là giá tị liên tục. Mô hình này cũng có tính ứng dụng vô cùng rộng, từ bài toán dự đoán giá nhà, hệ thống định giá thương mại điện tử, dự báo thời tiết, dự đoán thị trường chứng khoán, cho đến chuyển hóa độ phân giải hình ảnh siêu cao, tính năng học tập thông qua bộ mã hóa tự động, nén hình ảnh.

Một vài mô hình hồi quy phổ biến có thể kể tới như hồi quy tuyến tính (Linear Regression), Random Forest, Convolution neural netwok (tùy vào bài toán mà CNN sẽ phục vụ, CNN có thể đáp ứng cả bài toán phân loại cũng như hồi quy), …

Các metrics được sử dụng để đánh giá mô hình hồi quy phải có khả năng làm việc với tập các giá trị liên tục, một số metrics phổ biến như sau:

MSE

MSE (Mean Square Error) có lẽ là một metric phổ biến nhất trong các bài toán hồi quy. Về cơ bản, nó tính trung bình của bình phương sai số giữa giá trị thực tế và giá trị dự đoán

Giả sử ta có một bài toán mà chắc hẳn ai đọc về Machine Learning cũng từng đọc qua, chính là bài toán dự đoán giá nhà. Coi giá trị thực tế của nhà thứ i là yi, còn giá trị dự đoán của căn nhà đó là yi'. Vậy, MSE có thể được tính như sau:

$$\mathbf{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i')^2$$

MAE

MAE (Mean Absolute Error) là 1 metric đánh giá mô hình bằng cách tính trung bình giá trị tuyệt đối sai số giữa giá trị thực tế và giá trị dự đoán. Công thức MAE được định nghĩa như sau:

$$\mathbf{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}|y_i - y_i'|$$

MAE được biết đến là mạnh mẽ hơn đối với các yếu tố ngoại lai (outliers) so với MSE. Lý do chính bởi vì MSE sử dụng bình phương lỗi, các ngoại lai (những samples mà có lỗi cao hơn hẳn các samples khác) sẽ được chú ý và chiếm ưu thế hơn (do tính bình phương) trong việc đánh giá và điều này tác động đến các thông số của mô hình.

Inlier Ratio Metric

Ngoài ra còn có một metric khác dùng để đánh giá các mô hình hồi quy, được gọi là tỷ lệ Inlier. Metric này mình thấy cũng không có nhiều bài báo khoa học dùng, về cơ bản là tính tỷ lệ phần trăm các điểm dữ liệu được dự đoán có lỗi nhỏ hơn biên. Số liệu này chủ yếu được sử dụng trong mô hình RANSAC4 và các phần mở rộng của nó.