Факультет
математики
и компьютерных
наук
СПбГУ

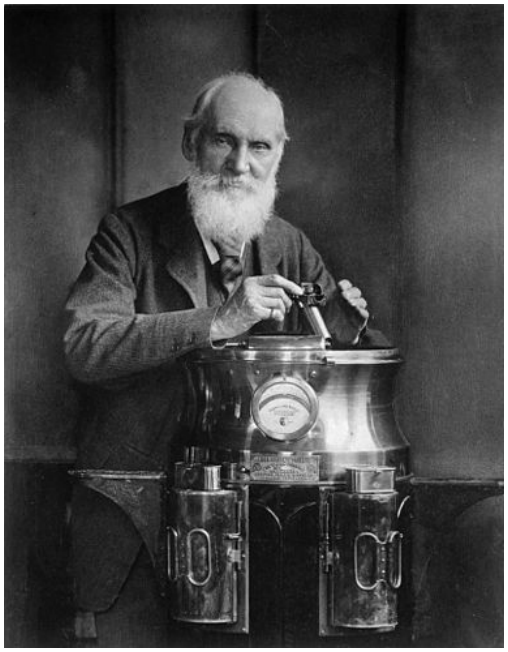
Машинное обучение

Лекция 5. Оценивание качества классификации. Обобщающая способность. Методы отбора признаков.

1 октября 2021

Пятиминутка

1. Нарисуйте единичные окружности в L_p для нескольких значений p
2. Что можно обучать в метрических классификаторах?
3. Как можно решить проблему выбросов в данных?



«If you can't measure it, you can't improve it»

William Thomson, 1st Baron Kelvin

Способы оценки качества алгоритма

- Оценка при использовании — оценка «чёрного ящика». AB-тестирование
  - делим кейсы использования на две эквивалентные выборки: A и B
  - на выборке A применяем алгоритм a, на выборке B применяем алгоритм b
  - сравниваем качество
- Оценка при обучении — оценка «прозрачного ящика»

Анализ ошибок классификации

Вспомним задачу:

X — объекты, Y — ответы

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка, $y_i \in \{-1, +1\}$

Алгоритм классификации $a(x_i) \in \{-1, +1\}$

	ответ классификатора	правильный ответ
TP, True Positive	$a(x_i) = +1$	$y_i = +1$
TN, True Negative	$a(x_i) = -1$	$y_i = -1$
FP, False Positive	$a(x_i) = +1$	$y_i = -1$
FN, False Negative	$a(x_i) = -1$	$y_i = +1$

Accuracy

Доля правильных ответов (чем больше, тем лучше):

Accuracy = $\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i] = \frac{\mathrm{TP} + \mathrm{TN}}{\mathrm{TP} + \mathrm{TN} + \mathrm{FP} + \mathrm{FN}}$

Преимущества:

- соответствует интуитивным представлениям о качестве классификации

Недостатки:

- не учитывается возможная несбалансированность выборки
- неважна цена ошибки на объектах разных классов

Например, если в выборке из 1000 человек 950 здоровых и 50 больных, то легко получить Accuracy = 0.95 константой.

Precision, Recall

Precision (Точность) $= \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FP}}$ — доля правильных среди найденных

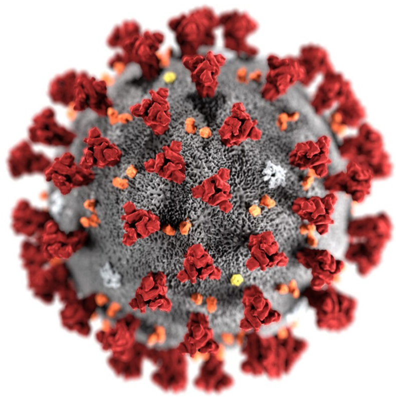
Recall (Полнота) $= \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$ — доля найденных среди правильных

Характеризуют разные стороны качества классификатора:

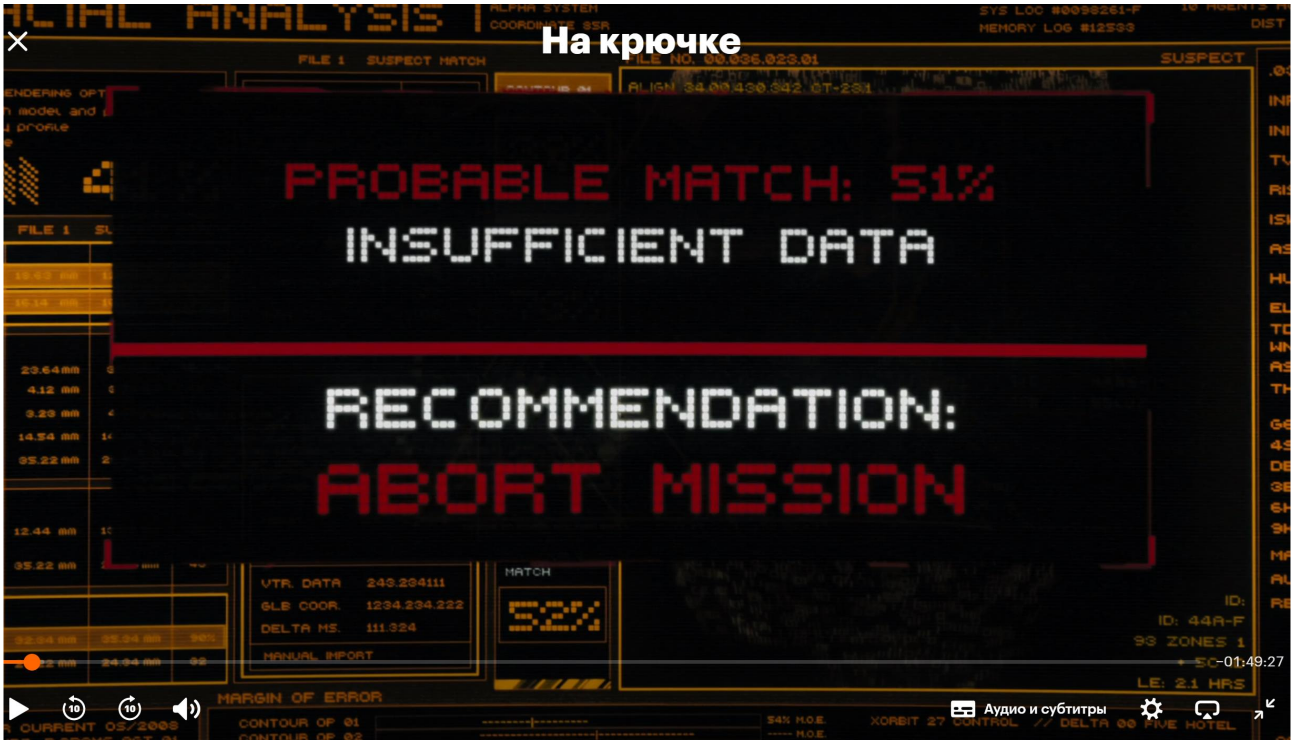
- Чем выше точность, тем меньше ложных срабатываний
- Чем выше полнота, тем меньше ложных пропусков
- Приоритет в сторону точности или полноты выбирается в зависимости от задачи

Точность и полнота. Примеры

- Тестирование на Covid-19 (опасный вирус):
    - Важнее полнота — лучше лишний раз поднять тревогу, чем пропустить



- Боевая система автонаведения:
  - Важнее точность — по своим стрелять не хочется



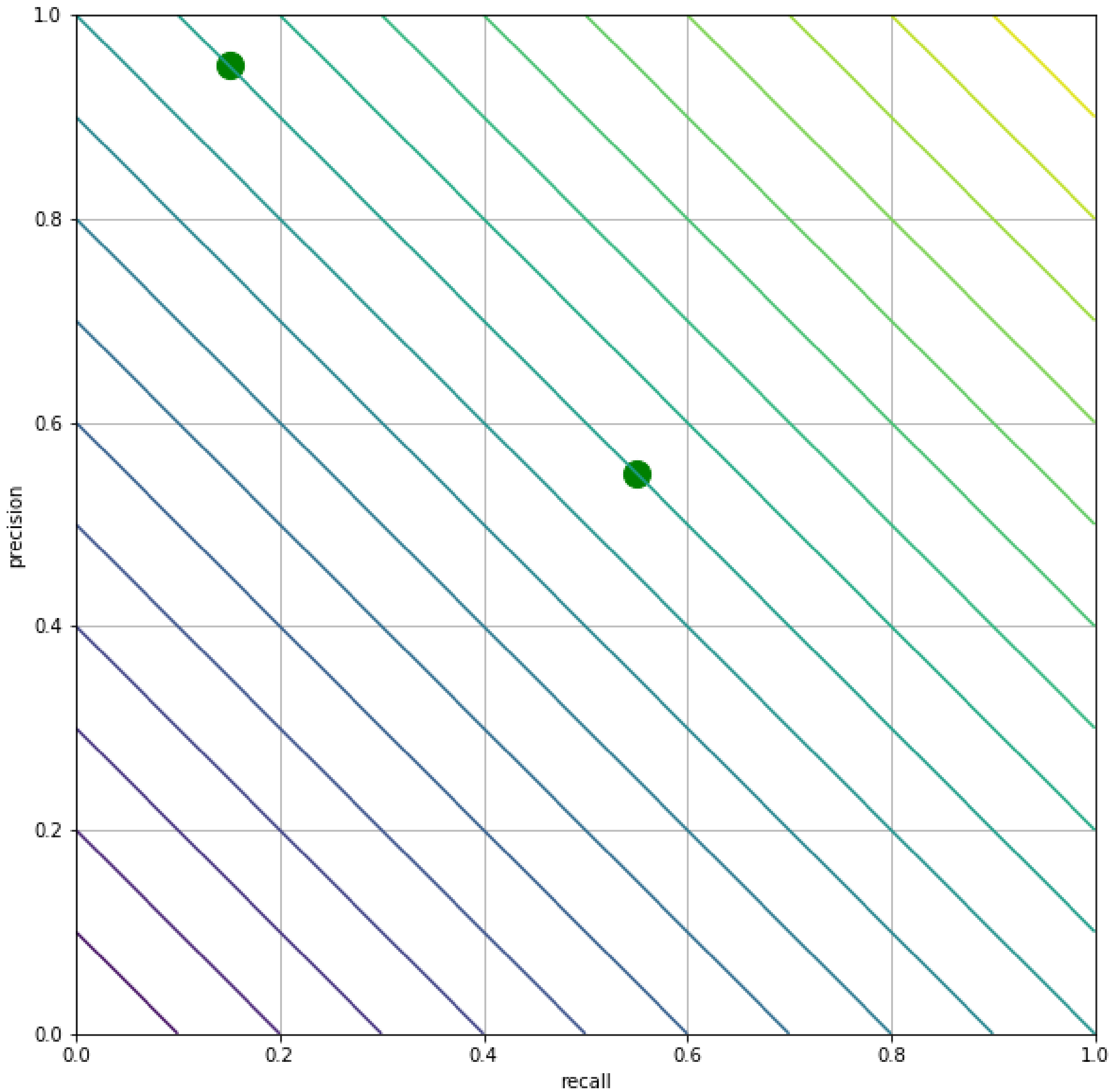
Поиск единой метрики качества

Арифметическое среднее:

$$A = \frac{\text{precision} + \text{recall}}{2}$$

In [33]:

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('recall')
ax.set_ylabel('precision')

x = np.linspace(0, 1, num=100)
y = np.linspace(0, 1, num=100)
recall, precision = np.meshgrid(x, y)

z = (precision + recall) / 2

h = plt.contour(x, y, z, levels = 20)
plt.axis('scaled')
x_points = np.array([0.55, 0.15])
plt.scatter(x_points, 1.1 - x_points, s=200, c="g")

ax.grid(True)

fig.set_size_inches(10, 10)
plt.show()
```

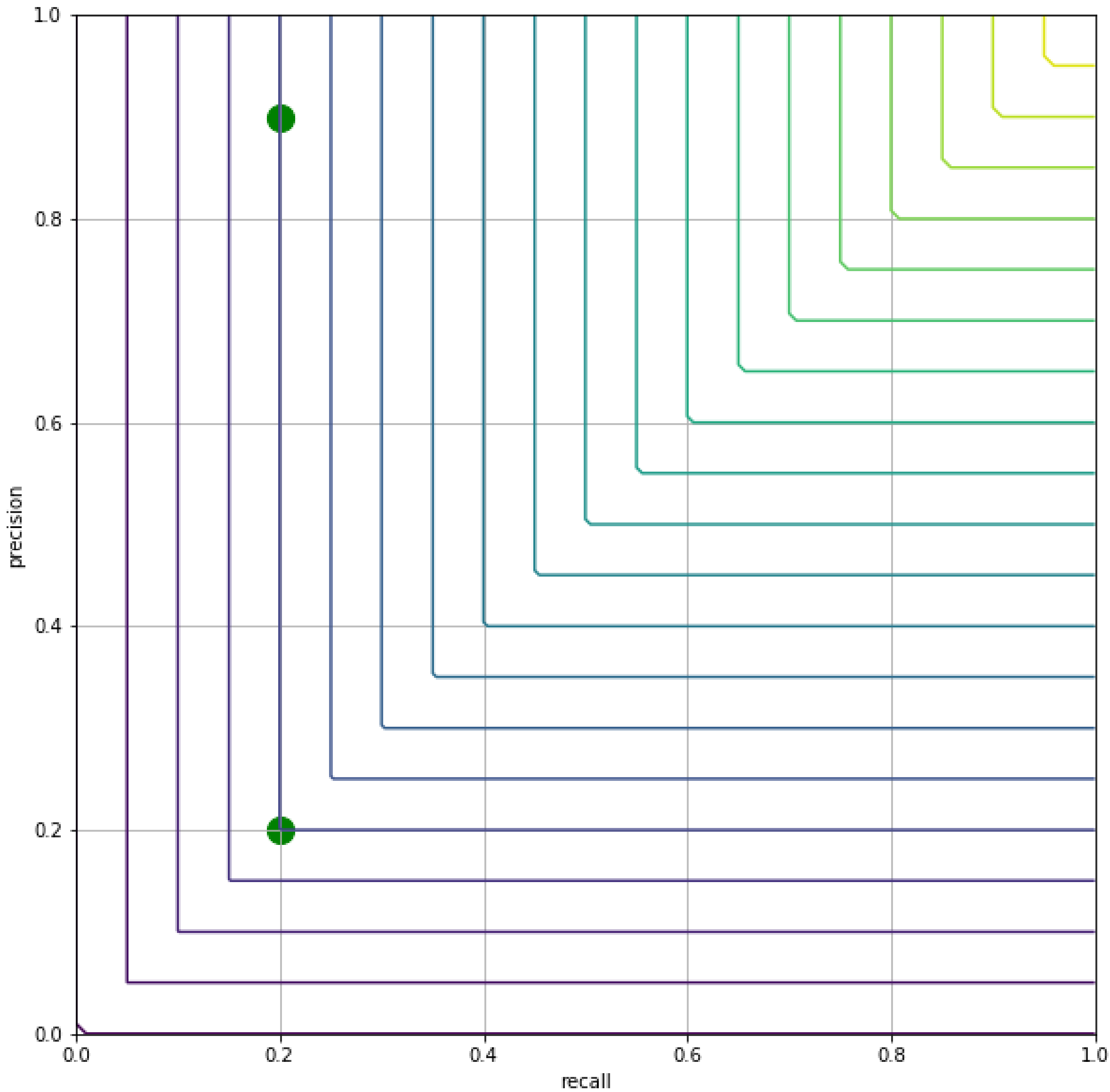


Минимум:

$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$

In [34]:

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('recall')
ax.set_ylabel('precision')

x = np.linspace(0, 1, num=100)
y = np.linspace(0, 1, num=100)
recall, precision = np.meshgrid(x, y)

z = np.minimum(precision, recall)

h = plt.contour(x, y, z, levels = 20)
plt.axis('scaled')
x_points = np.array([0.2, 0.2])
plt.scatter(x_points, np.array([0.2, 0.9]), s=200, c="g")

ax.grid(True)

fig.set_size_inches(10, 10)
plt.show()
```

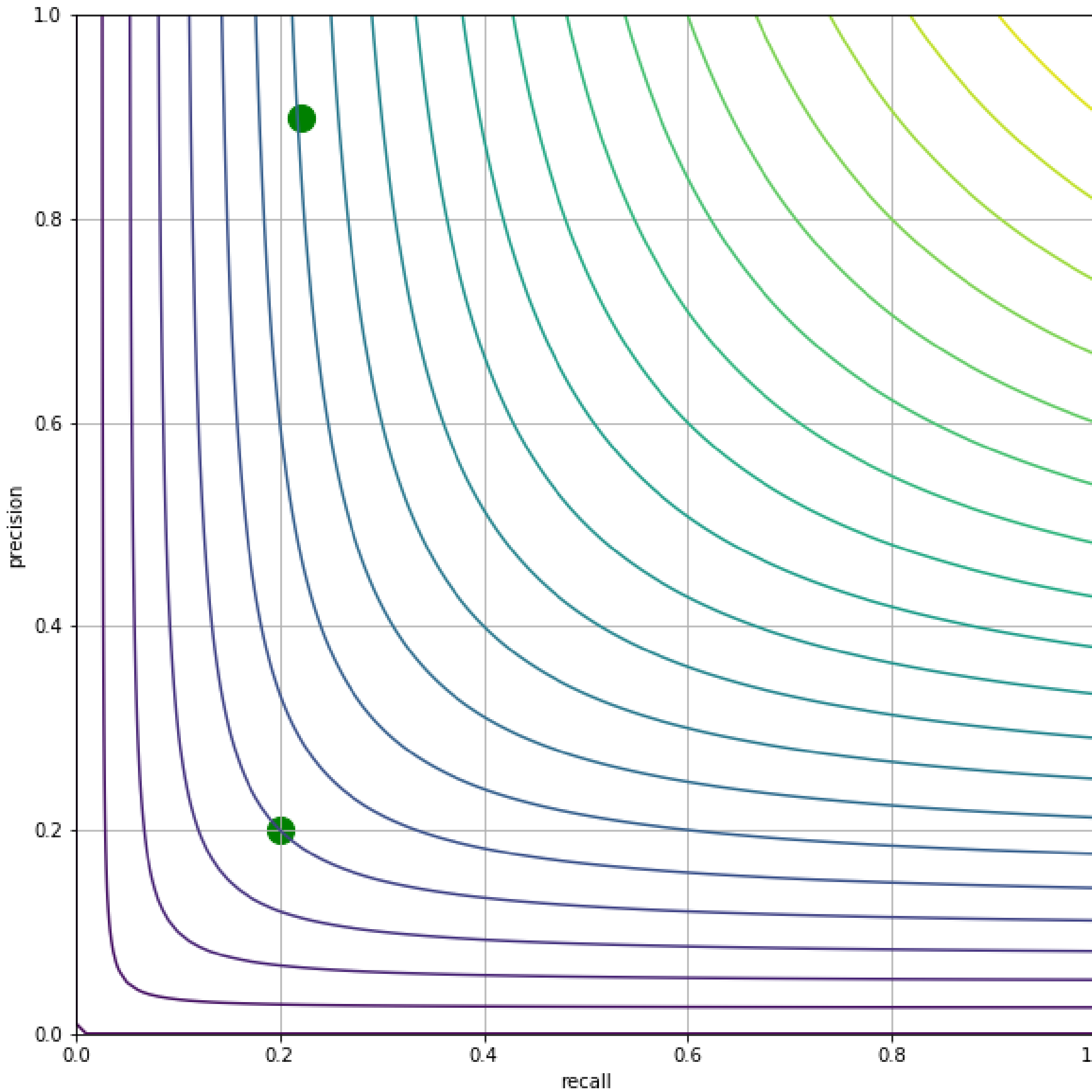


F-мера:

$$F = \frac{2 * \text{precision} * \text{recall}}{\text{precision} + \text{recall}} = \frac{2}{1/\text{precision} + 1/\text{recall}}$$

In [37]:

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('recall')
ax.set_ylabel('precision')

x = np.linspace(0, 1, num=100)
y = np.linspace(0, 1, num=100)
recall, precision = np.meshgrid(x, y)

z = (2 * precision * recall) / (precision + recall + 1e-5)

h = plt.contour(x, y, z, levels = 20)
plt.axis('scaled')
x_points = np.array([0.2, 0.22])
plt.scatter(x_points, np.array([0.2, 0.9]), s=200, c="g")

ax.grid(True)

fig.set_size_inches(10, 10)
plt.show()
```



F_β-мера:

$$F_\beta = \frac{(1+\beta^2)PR}{\beta^2 P + R}$$

Вопрос 1: За что отвечает коэффициент β?

Случай алгоритма, возвращающего вероятность

Пусть $b(x_i) = P(y_i == 1)$

наш старый алгоритм $a(x)$ можно получить из $b(x)$ и $th \in [0, 1]$ следующим образом:

$$a(x) = [b(x) > th]$$

Интересно оценивать качество алгоритма независимо от влияния порога.

PR-кривая

- Отсортируем объекты по возрастанию оценки $b(x)$:

$$b(x_{(1)}) \leq \dots \leq b(x_{(\ell)})$$

- Переберем все пороги классификации, начав с максимального:

$$t_\ell = b(x_{(\ell)})$$

$$\dots$$

$$t_1 = b(x_{(1)})$$

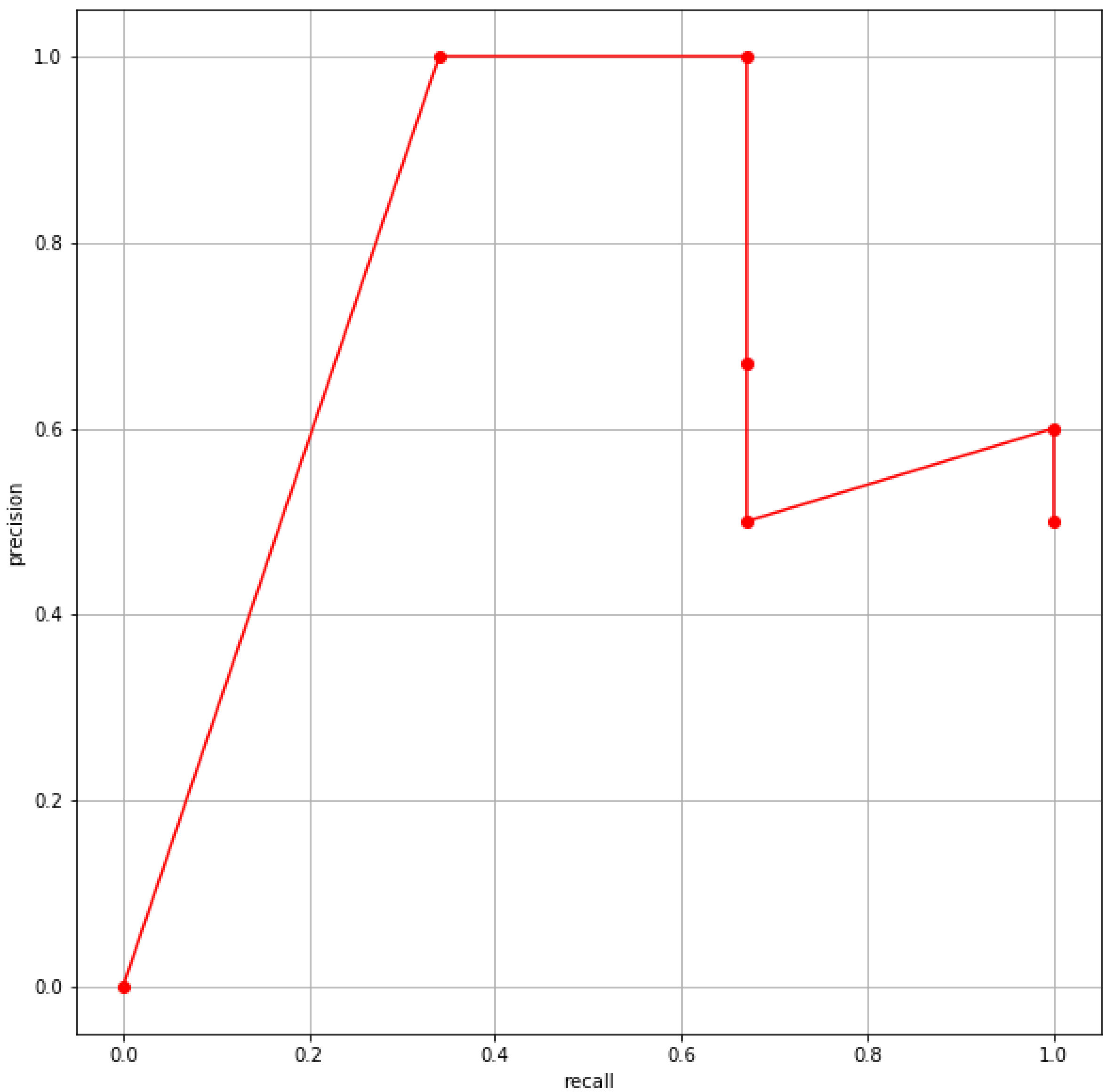
$$t_0 = b(x_{(1)}) - \varepsilon$$

- Для каждого порога посчитаем точность и полноту
- Нанесем соответствующую точку в осях «полнота - точность»
- Соединим точки, получив Precision-Recall-кривую

Пример

$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

In [1]:
```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('recall')
ax.set_ylabel('precision')

recall_points = np.array([0.0, 0.34, 0.67, 0.67, 0.67, 1.0, 1.0])
precision_points = np.array([0.0, 1.0, 1.0, 0.67, 0.5, 0.6, 0.5])

ax.plot(recall_points, precision_points, 'ro-')

plt.axis('scaled')

ax.grid(True)

fig.set_size_inches(10, 10)
plt.show()
```



Вопрос 2: Почему такие значения и график?

Свойства PR-кривой

- Левая точка: всегда (0, 0) — (все объекты относим к классу 0)
- Правая точка: (1, $\ell_+/\ell)$, ℓ_+ — число объектов класса 1 в выборке
- Если выборка идеально разделима, то кривая пройдет через точку (1, 1)
- Чем больше площадь под кривой, тем лучше
- Хорошо подходит для измерения качества при сильном дисбалансе классов

ROC-кривая

ROC – «reciever operating characteristic», «рабочая характеристика приёмника»

- по оси X: False Positive Rate, доля ошибочных положительных классификаций

$$\mathrm{FPR} = \frac{\mathrm{FP}}{\mathrm{FP}+\mathrm{TN}} = \frac{\sum_{i=1}^{l}[y_i=-1][a(x_i)=+1]}{\sum_{i=1}^{l}[y_i=-1]}$$

  1 - FPR называется *специфичностью* алгоритма
- по оси Y: True Positive Rate, доля правильных положительных классификаций

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP}+\mathrm{FN}} = \frac{\sum_{i=1}^{l}[y_i=+1][a(x_i)=+1]}{\sum_{i=1}^{l}[y_i=+1]}$$

  TPR называется чувствительностью алгоритма (== Recall)

ROC-кривая. Схема построения

- Отсортируем объекты по возрастанию оценки $b(x)$

  $b(x_{(1)}) \leq \dots \leq b(x_{(\ell)})$
- Переберем все пороги классификации, начав с максимального

$t_\ell = b(x_{(\ell)})$

$\dots$

$t_1 = b(x_{(1)})$

$t_0 = b(x_{(1)}) - \varepsilon$

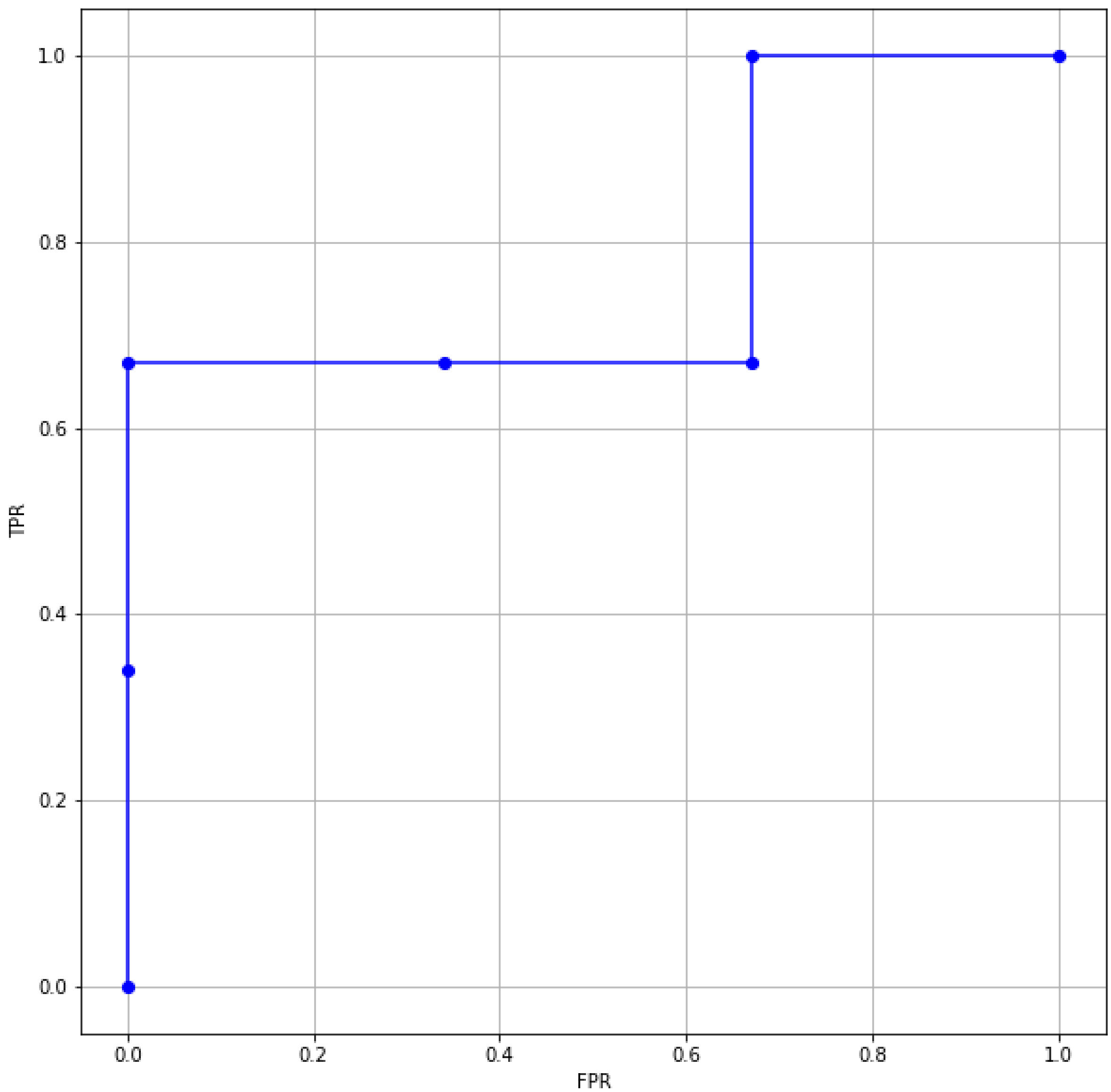
- Для каждого порога посчитаем TPR и FPR
- Нанесем соответствующую точку в осях «TPR - FPR»
- Соединим точки, получив ROC-кривую

Пример (числа те же)

$b(x)$	0.14	0.23	0.39	0.52	0.73	0.90
y	0	1	0	0	1	1

In [42]:

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

fig, ax = plt.subplots()

ax.set_xlabel('FPR')
ax.set_ylabel('TPR')

FPR_points = np.array([0.0, 0.0, 0.0, 0.34, 0.67, 0.67, 1.0])
TPR_points = np.array([0.0, 0.34, 0.67, 0.67, 0.67, 1.0, 1.0])

ax.plot(FPR_points, TPR_points, 'bo-')

plt.axis('scaled')

ax.grid(True)

fig.set_size_inches(10, 10)
plt.show()
```



Свойства ROC-кривой

- Левая точка: всегда (0, 0) (все объекты относим к классу 0)
- Правая точка: (1, 1) (все объекты относим к классу 1)
- Если выборка идеально разделима, то кривая пройдет через точку (0, 1)
- Чем больше площадь под кривой (AUC, Area Under the Curve), тем лучше
- Интерпретация: AUC-ROC равна вероятности того, что случайно взятый объект класса 1 получит оценку выше, чем случайно взятый объект класса 0
- Имеем проблемы при сильном дисбалансе классов

Алгоритм эффективного построения ROC-кривой

Вход: выборка X^ℓ, дискриминантная функция $b(x)$

Выход: $\{(FPR_i, TPR_i)\}_{i=0}^{\ell}$, AUC — площадь под ROC-кривой

$\ell_y := \sum_{i=1}^{\ell}[y_i = y]$ для всех $y \in Y$

упорядочить выборку X^ℓ по убыванию значений $b(x_i)$

поставить первую точку в начало координат:

$(\mathrm{FPR}_0, \mathrm{TPR}_0) := (0, 0); \mathrm{AUC} := 0$

для $i := 1, \dots, \ell$

если $y_i = -1$ **то**

$\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_-}; \mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1}$

$\mathrm{AUC} := \mathrm{AUC} + \frac{1}{\ell_-}\mathrm{TPR}_i$

иначе

$\mathrm{FPR}_i := \mathrm{FPR}_{i-1}; \mathrm{TPR}_i := \mathrm{TPR}_{i-1} + \frac{1}{\ell_+}$

Градиентная максимизация AUC

$b(x) = g(x_i, w) - w_0$

Модель: $a(x_i, w, w_0) = \operatorname{sign}(g(x_i, w) - w_0)$

AUC – это доля правильно упорядоченных пар (x_i, x_j):

$$\mathrm{AUC}(w) = \frac{1}{\ell_-}\sum_{i=1}^{\ell}[y_i = -1]\mathrm{TPR}_i =$$

$$= \frac{1}{\ell_-\ell_+}\sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=1}^{\ell}[y_i < y_j][g(x_i, w) < g(x_j, w)] \to \max_w$$

Явная максимизация аппроксимированного AUC:

$$1 - \mathrm{AUC}(w) \leq Q(w) = \sum_{i,j: y_i < y_j} \mathcal{L}\underbrace{(g(x_j, w) - g(x_i, w))}_{M_{ij}(w)} \to \min_w,$$

где $\mathcal{L}(M)$ — убывающая функция отступа, $M_{ij}(w)$ — новое понятие отступа для пар объектов

Пример дисбаланса классов

- 100 объектов класса 1
- 1.000.000 объектов класса 0
- Ранжирование: 50.000 объектов класса 0, затем 100 объектов класса 1, затем все остальные объекты класса 0

Метрики качества

- AUC-ROC: 0.95
- AUC-PRC: 0.001

Интуитивное объяснение почему так

- Выберем порог, при котором первые 50.095 объектов относятся к классу 1
- TPR = 0.95, FPR = 0.05
- precision = 0.0019, recall = 0.95

Метрика log-loss

Проблема

ROC и PR инвариантны относительно монотонных преобразований дискриминантной функции $g(x, w)$

Возможное решение

Критерий логарифма правдоподобия (log-loss):

$$L(w) = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1] \log g(x, w) + [y_i = -1] \log(1 - g(x, w)) \to \max_{w}$$

Точность и полнота многоклассовой классификации. Микроусреднение

Для каждого класса $y \in Y$

TP_y — верные положительные

FP_y — ложные положительные

FN_y — ложные отрицательные

Точность и полнота с микроусреднением по всем классам:

Precision: $P = \frac{\sum_y \mathrm{TP}_y}{\sum_y (\mathrm{TP}_y + \mathrm{FP}_y)}$

Recall: $R = \frac{\sum_y \mathrm{TP}_y}{\sum_y (\mathrm{TP}_y + \mathrm{FN}_y)}$

Микроусреднение не чувствительно к ошибкам на малочисленных классах

Точность и полнота многоклассовой классификации. Макроусреднение

Для каждого класса $y \in Y$

TP_y — верные положительные

FP_y — ложные положительные

FN_y — ложные отрицательные

Точность и полнота с макроусреднением (сначала внутри каждого класса):

Precision: $P = \frac{1}{|Y|} \sum_y \frac{\mathrm{TP}_y}{(\mathrm{TP}_y + \mathrm{FP}_y)}$

Recall: $R = \frac{1}{|Y|} \sum_y \frac{\mathrm{TP}_y}{(\mathrm{TP}_y + \mathrm{FN}_y)}$

Макроусреднение чувствительно к ошибкам на малочисленных классах

Многократная поблочная кросс-проверка

Контроль t раз по q блокам (t*q - fold CV) — стандарт «де факто» для тестирования методов обучения.

Выборка X^L разбивается t раз случайным образом на q блоков

$$X^L = X_{s_1}^{l_1} \cup \dots \cup X_{s_q}^{l_q}, s = 1, \dots, t, l_1 + \dots + l_q = L$$

$$\mathrm{CV}_{t*q}(\mu, X^L) = \frac{1}{t} \sum_{s=1}^{t} \frac{1}{q} \sum_{n=1}^{q} Q_\mu(X^L / X_{s_n}^{l_n}, X_{s_n}^{l_n})$$

Преимущества t*q-fold CV:

- увеличением t можно улучшать точность оценки (компромисс между точностью и временем вычислений)
- каждый объект участвует в контроле ровно t раз
- оценивание доверительных интервалов (95% при t = 40)

Обобщающая способность модели

Сложность модели: размерность Вапника-Червоненкиса (комбинаторная размерность)

VC-размерность класса функций `F` — наибольшее количество точек, которое может быть разделено функциями семейства, вне зависимости от конфигурации множества точек.

Иными словами, VC-размерность — мера гибкости алгоритма классификации независимо от его семейства.

Вапник В.Н., Червоненкис А.Я. Теория распознавания образов. — М.: Наука, 1974.

Bias and Variance

X^ℓ — тренировочная выборка размерности ℓ

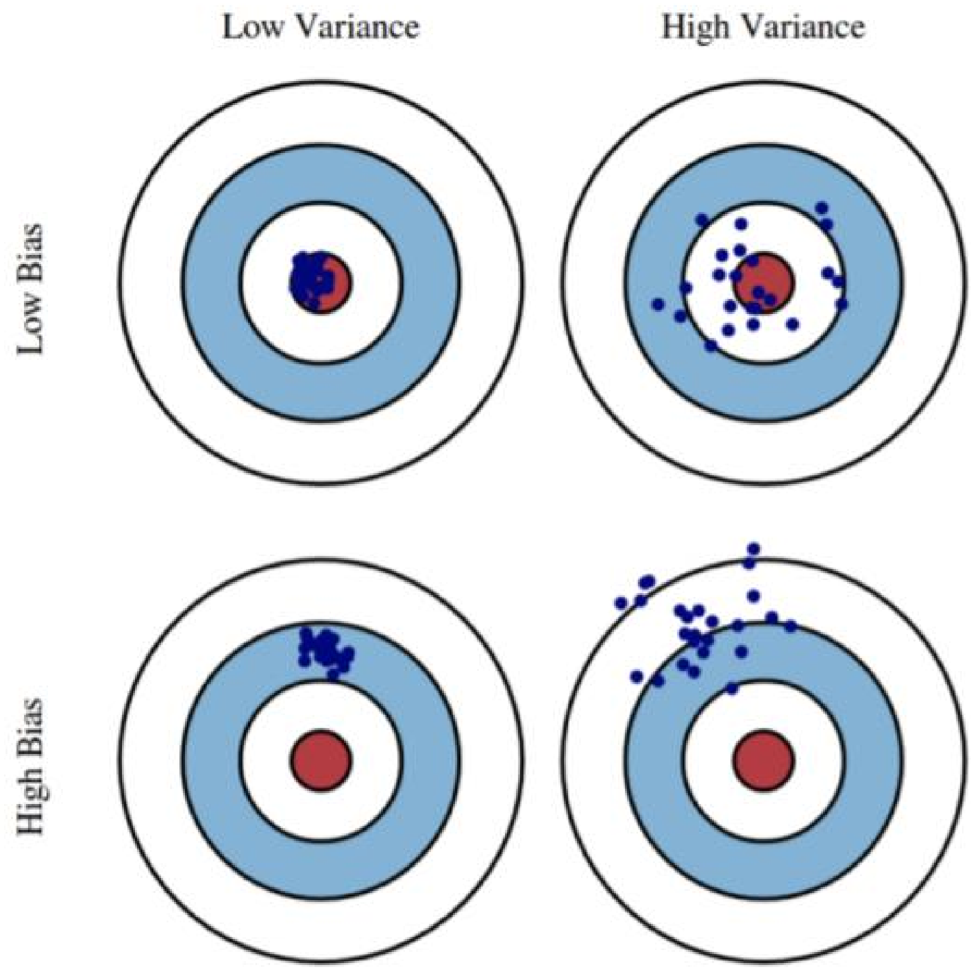
$\hat{a}(x) = \hat{a}$ — алгоритм, построенный по тренировочной выборке X^ℓ

$a(x) = a$ — закон природы

$y = a + \varepsilon, \varepsilon \sim N(0, \sigma)$ — реальные ответы

$$E_{X^\ell}[(\hat{a} - y)^2] = E[(\hat{a} - a - \varepsilon)^2] =$$
$$E[((\hat{a} - E[\hat{a}]) - \varepsilon - (a - E[\hat{a}]))^2] = \{\text{все смешанные произведения зануляются}\}$$
$$= E[((\hat{a} - E[\hat{a}])^2] + E[\varepsilon^2] + E[(a - E[\hat{a}])^2] =$$
$$= \mathrm{Var}[\hat{a}] + \sigma^2 + \mathrm{Bias}[\hat{a}]^2$$

Bias and Variance наглядно



Hastie, Trevor, et al. «The elements of statistical learning: data mining, inference and prediction.»

Как влиять на bias-variance tradeoff

- Увеличение числа примеров для обучения обычно исправляют high variance, но не high bias
- Меньшее число факторов исправляют high variance, но не high bias
- Увеличение числа факторов исправляют high bias, но не high variance
- Добавление степени к полиному и взаимодействующих факторов исправляют high bias, но не high variance

Оценка при обучении

Оценка прозрачного ящика

- $Pr\left(\text{test error} \leq \text{training error}
  - \sqrt{\frac{1}{\ell}\left[\text{VC} \left(\log \left(\frac{2\ell}{\text{VC}}\right) + 1\right)
  - \log \left(\frac{\eta}{4}\right) \right]} \right) = 1 - \eta$

  $\eta \in (0, 1)$ — уровень значимости

  [Архивная презентация К.В. Воронцова 2011 (http://www.machinelearning.ru/wiki/images/archive/4/4f/20140317171831%21Voron-ML-Modeling-slides.pdf)](http://www.machinelearning.ru/wiki/images/archive/4/4f/20140317171831%21Voron-ML-Modeling-slides.pdf), [интересное свежее интервью К.В. Воронцова (https://www.youtube.com/watch?v=_P2N5W-c9rQ&t=2805s)](https://www.youtube.com/watch?v=_P2N5W-c9rQ&t=2805s).
- Альтернативный подход оценки при обучении — PAC-Bayes bounds

  [https://en.wikipedia.org/wiki/Probably_approximately_correct_learning (https://en.wikipedia.org/wiki/Probably_approximately_correct_learning)](https://en.wikipedia.org/wiki/Probably_approximately_correct_learning)

Задача выбора метода обучения

Дано: X — пространство объектов; Y — множество ответов

$X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка, $y_i = y^*(x_i)$

$A_t = \{a : X \to Y\}$ — модели алгоритмов, $t \in$ T

$\mu_t : (X * Y)^\ell \to A_t$ — методы обучения, $t \in$ T

Найти: метод μ_t с наилучшей *обобщающей* способностью.

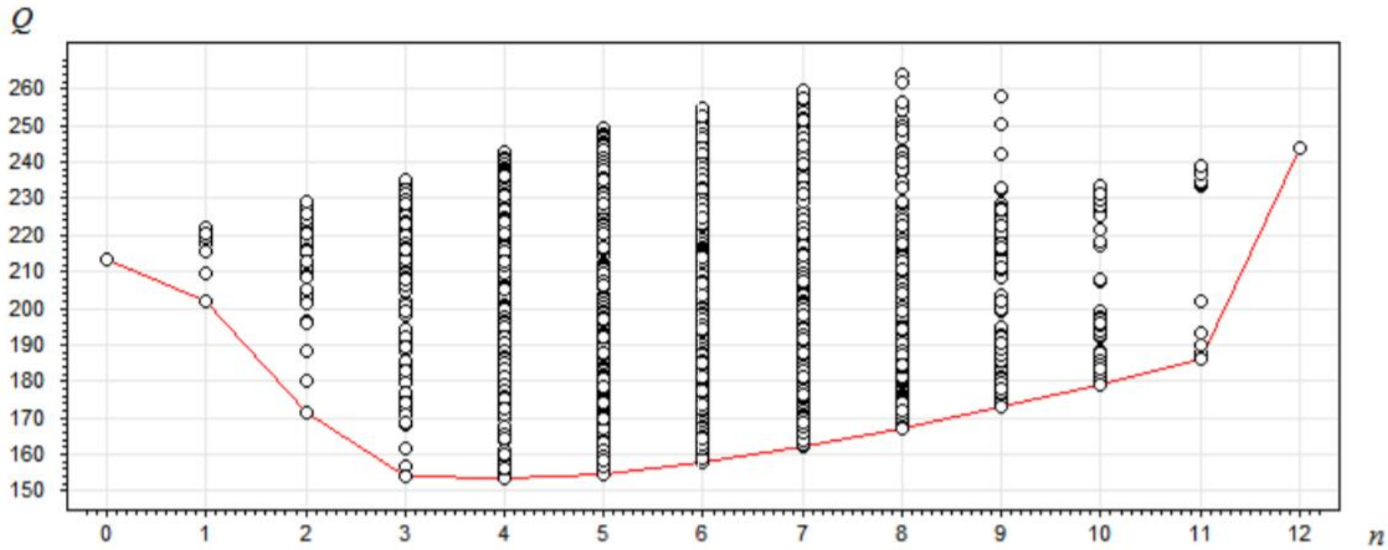
Частные случаи:

- выбор лучшей модели A_t (model selection)
- выбор метода обучения μ_t для заданной модели A (в частности, оптимизация гиперпараметров)
- отбор признаков (features selection):

  $F = \{f_j : X \to D_j : j = 1, \dots, n\}$ — множество признаков;

  метод обучения μ_J использует только признаки $J \subset F$.

Алгоритм полного перебора (Full Search)



Вход: множество F, критерий Q, параметр d

1: $Q* := Q(\emptyset)$ — инициализация

1. **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:
2. найти лучший набор сложности j:

$$J_j = \arg \min_{J:|J|=j} Q(J)$$

3. **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j* = j; Q^* := Q(J_j)$
4. **если** $j - j^* \geq d$ **то вернуть** J_{j^*}

Вопрос 3: Преимущества и недостатки полного перебора?

Алгоритм жадного добавления (Add)

Вход: множество F, критерий Q, параметр d

1: $J_0 = \emptyset, Q* = Q(\emptyset)$ — инициализация

2: **для всех** $j = 1, \ldots, n$, где j — сложность наборов:

3: найти признак, наиболее выгодный для добавления:

$$f^* = \arg\min_{f \in F/J_{j-1}} Q(J_{j-1} \cup \{f\})$$

4: добавить этот признак в набор:

$$J_j = J_{j-1} \cup \{f^*\}$$

5: **если** $Q(J_j) < Q^*$ **то** $j* = j; Q^* := Q(J_j)$

6: **если** $j - j^* \geq d$ **то вернуть** J_{j^*}

Алгоритм жадного добавления (Add)

Преимущества:

- работает быстро — $O(n^2)$, точнее $O(n(j^* + d))$
- возможны быстрые инкрементные алгоритмы
- пример — *шаговая регрессия* (step-wise regression)

Недостатки:

- Add склонен включать в набор лишние признаки.

Способы устранения:

- Del — последовательное жадное удаление
- Add-Del — чередование добавлений и удалений
- поиск в ширину

Алгоритм поочерёдного добавления и удаления (Add-Del)

$J_0 = \emptyset, Q* = Q(\emptyset), t = 0$ — инициализация

повторять

пока $|J_t| < n$ добавлять признаки (Add):

$t = t + 1$ — началась следующая итерация

$f^* = \arg\min\limits_{f \in F/J_{t-1}} Q(J_{t-1} \cup \{f\}),\;\; J_t = J_{t-1} \cup \{f^*\}$

если $Q(J_t) < Q^*$ **то** $t^* = t, Q^* = Q(J_t)$

если $t - t^* \geq d$, **то прервать цикл**

пока $|J_t| > 0$ удалять признаки (Del):

$t = t + 1$ — началась следующая итерация

$f^* = \arg\min\limits_{f \in J_{t-1}} Q(J_{t-1}/\{f\}),\;\; J_t = J_{t-1}/f^*$

если $Q(J_t) < Q^*$, **то** $t^* = t,\; Q^* = Q(J_t)$

если $t - t^* \geq d$ **то прервать цикл**

пока значения критерия $Q(J_{t^*})$ уменьшаются,

вернуть J_{t^*}

Алгоритм поочерёдного добавления и удаления (Add-Del)

Преимущества:

- как правило, лучше, чем Add и Del по отдельности
- возможны быстрые инкрементные алгоритмы, пример — шаговая регрессия (step-wise regression)

Недостатки:

- работает дольше, оптимальность не гарантирует

Поиск в ширину (breadth-first search, BFS)

Он же многорядный итерационный алгоритм МГУА (метод группового учёта аргументов).

Философия — принцип неокончательных решений Габора: принимая решения, следует оставлять максимальную свободу выбора для принятия последующих решений.

Усовершенствуем алгоритм Add: на каждой j-й итерации будем строить не один набор, а множество из B_j наборов, называемое j-м рядом:

$$R_j = \{J_j^1 \dots J_j^{B_j}\},\ J_j^b \subset F,\ |J_j^b| = j,\ b = 1, \dots, B_j,$$

где $B_i \leq B$ — параметр ширины поиска.

Поиск в ширину (breadth-first search, BFS)

Вход: множество F, критерий Q, параметры d, B

1: первый ряд состоит из всех наборов длины 1:

$R_1 = \{\{f_1\} \dots \{f_n\}\},\ Q^* = Q(\emptyset)$ — инициализация

2: **для всех** $j = 1, \dots, n$, где j — сложность наборов:

3: отсортировать ряд $R_j = \{J_j^1, \dots, J_j^{B_j}\}$ по возрастанию

критерия: $Q(J_j^1) \leq \dots Q(J_j^{B_j})$

4: **если** $B_j > B$ **то**

$R_j = \{J_j^1 \dots J_j^B\}$ — B лучших наборов ряда

5: **если** $Q(J_j^1) < Q^*$ **то** $j* = j; Q^* := Q(J_j^1)$

6: **если** $j - j^* \geq d$ **то вернуть** $J_{j^*}^1$

7: породить следующий ряд

$R_{j+1} = \{J \cup \{f\} | J \in R_J, f \in F/J\}$

Эволюционный алгоритм поиска (идея и терминология)

$J \subset F$ — индивид (в МГУА «модель»)

$R_t = \{J_t^1 \dots J_t^{B_t}\}$ — поколение (в МГУА – «ряд»)

$\beta = (\beta_j)_{j=1}^n, \beta_j = [f_j \in J]$ – хромосома, кодирующая J

Бинарная операция скрещивания $\beta = \beta' * \beta''$:

$$\beta_j = \begin{cases} \beta'_j, \text{с вероятностью} p' \\ \beta''_j, \text{с вероятностью} p'' \end{cases}$$

Унарная операция мутации $\beta = \sim\beta'$:

$$\beta_j = \begin{cases} 1 - \beta'_j, \text{с вероятностью} p_m \\ \beta'_j, \text{с вероятностью} 1 - p_m \end{cases}$$

где параметр p_m — вероятность мутации.

Эвристики для управления процессом эволюции

- Увеличивать вероятности перехода признаков от более успешного родителя к потомку.
- Накапливать оценки информативности признаков. Чем более информативен признак, тем выше вероятность его включения в набор во время мутации.
- Применение совокупности критериев качества.
- Скрещивать только лучшие индивиды (элитаризм).
- Переносить лучшие индивиды в следующее поколение.
- В случае стагнации увеличивать вероятность мутаций.
- Параллельно выращивается несколько изолированных популяций (островная модель эволюции).

Резюме

- Качество можно измерять, относясь к модели как к чёрному и прозрачному ящику
- Для большей уверенности в результатах экспериментов лучше использовать статистические тесты нежели просто поточечные сравнения
- Полезно понимать, откуда берётся `underfit и overfit`
- Гарантии на качество работы моделей при эксплуатации можно получать исходя из теоретических оценок «мощности» алгоритма
- Измеряя качество, можно улучшать модели, подбирая метод обучения, семейство решающих функций либо наборы признаков