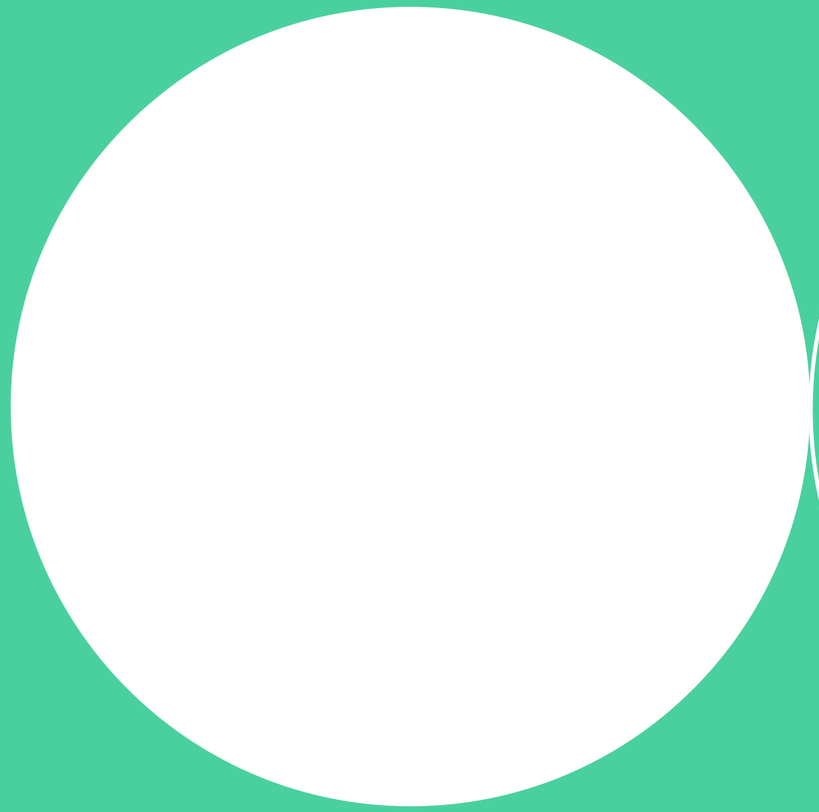
Метрики качества модели и переобучение

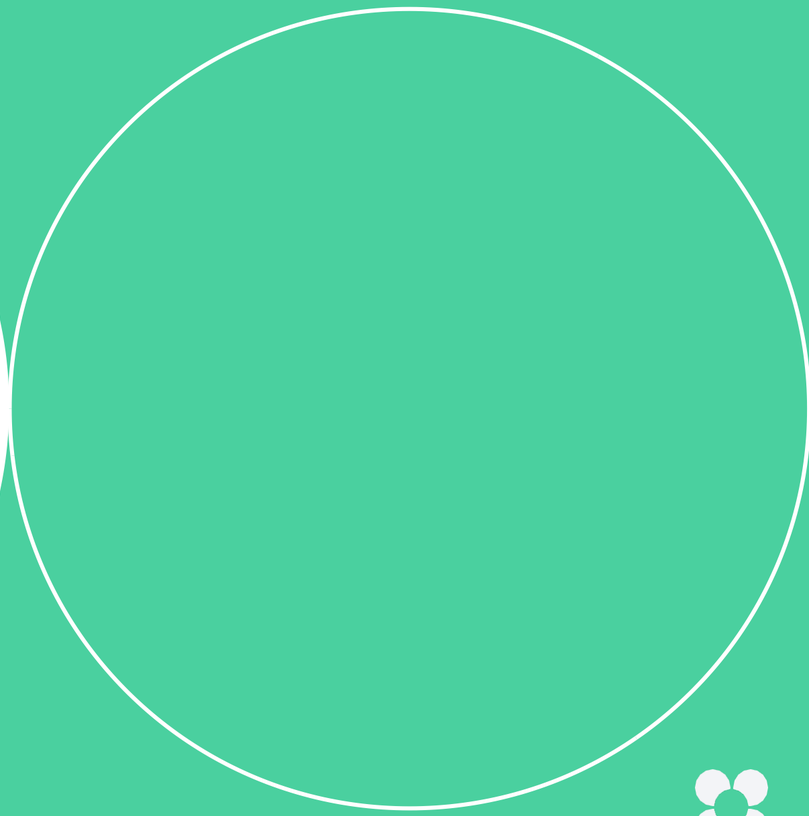
Анна Аксенова

О спикере:

- Data Scientist SBER:
- NLP-Research HSE, DeepPavlov
- 4 года в преподавании

Цели занятия





В конце занятия вы:

1. Будете знать как проводить кросс-валидацию и для чего она нужна
2. Узнаете различные метрики для оценки качества классификации и регрессии и поймете как их выбирать
3. Узнаете что такое переобучение и как с ним бороться

Обучающая, тестовая выборка

Проблема при обучении моделей

Модель может хорошо работать при обучении, однако сильно терять в качестве на новых данных (большая ошибка обобщения).

Обучающая выборка

Содержит значения признаков и целевой переменной.

На обучающей выборке строим модель.

Тестовая выборка

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

Оцениваем качество различных вариантов модели.

Разбиваем обучающую выборку

Разбиваем обучающую выборку на 2 части.
На одной будем тренировать модель (минимизировать ошибку обучения), на другой – проверять (минимизировать ошибку обобщения) (т. е. использовать в качестве тестовой, только с известной целевойпеременной)

```
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 )
```

Практика

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

Оценка качества модели

Регрессия
MSE, MAE и R2

Метрики регрессии

Средняя абсолютная ошибка

$$MAE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|y_i - \hat{y}|$$

Средняя квадратичная ошибка

$$MSE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y})^2$$

Квадратный корень средней квадратичной ошибки

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{y})^2}$$

Коэффициент детерминации - это доля дисперсии зависимой переменной, объясняемая рассматриваемой моделью.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$$

https://forecasting.svetunkov.ru/etextbook/forecasting_toolbox/models_quality/

Классификация 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

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

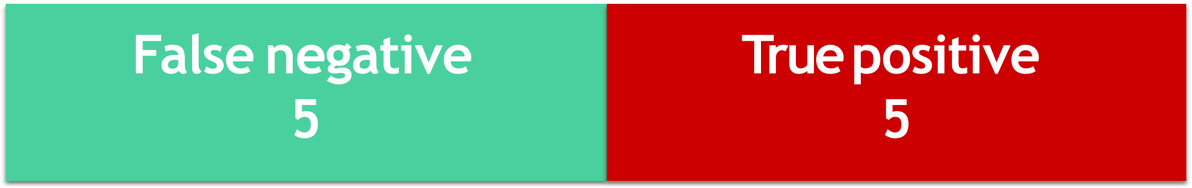
Почему точности не достаточно

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	10
Predicted negative	5	90

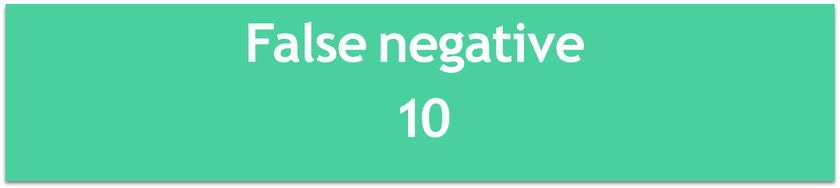
Accuracy – доля правильно предсказанных от всех вариантов

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

Почему точности не достаточно

100 обычных писем

10 спам-писем



Возьмем модель, которая считает все письма обычными

Почему точности не достаточно

	Actual positive	Actual negative
Predicted positive	0	0
Predicted negative	10	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 другихклассов

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 классвообще

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

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

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

Практика

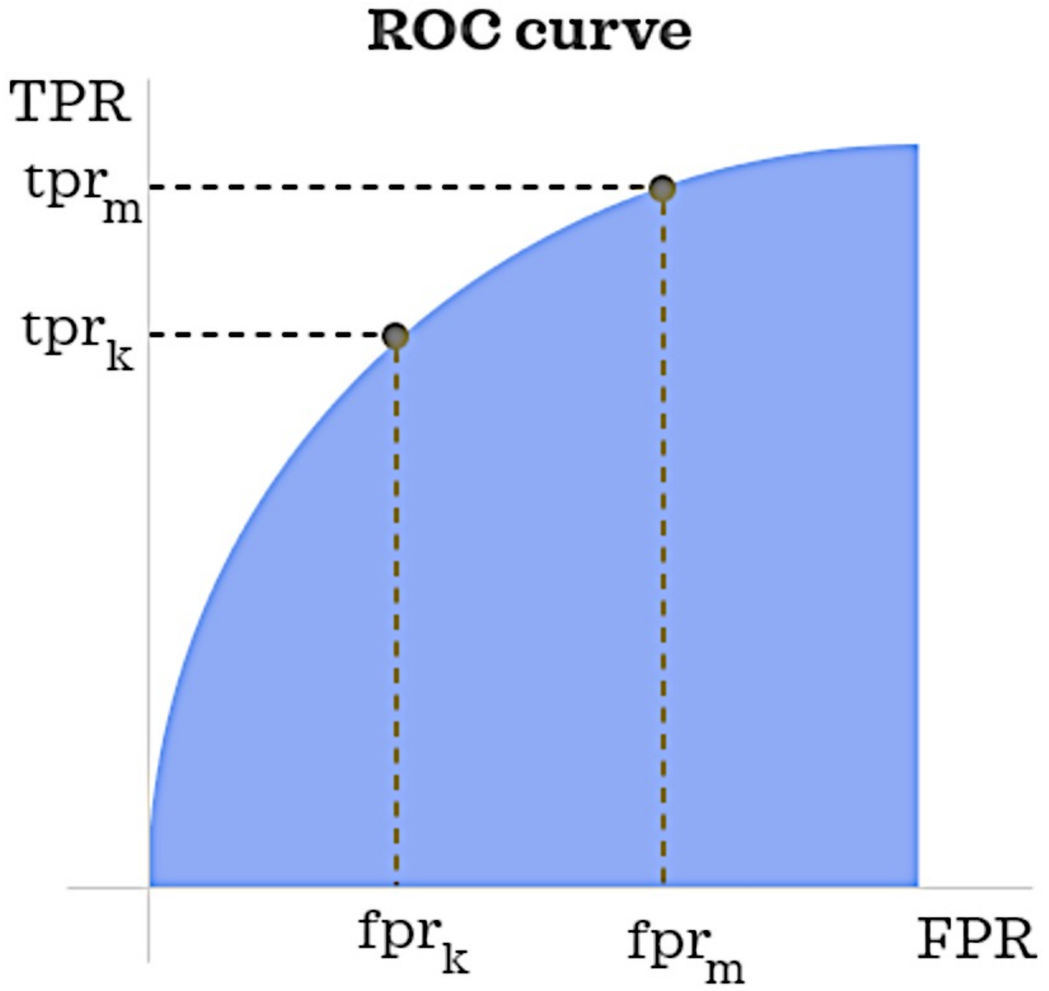
LOGRES_AFFAIR.IPYNB

Area under curve

Receiver Operating Characteristic Area under the curve
ROC AUC

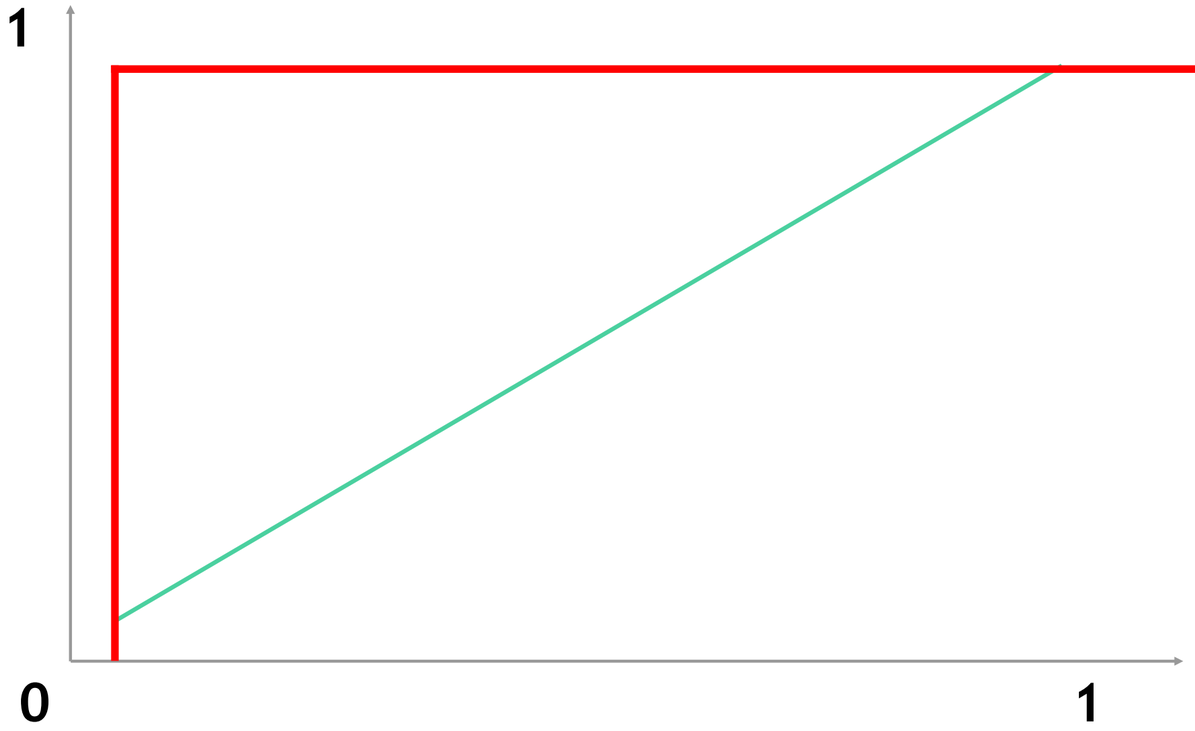
Кривая ROC показывает нам взаимосвязь между показателем *ложных положительных результатов (FPR)* и *истинно положительным показателем (TPR)* для разных *пороговых значений*.

$$FPR = \frac{FP}{FP + TN} \qquad TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$



https://towardsdatascience.com/roc-curve-explained-50acab4f7bd8
https://towardsdatascience.com/roc-curve-and-auc-from-scratch-in-numpy-visualized-2612bb9459ab

Идеальный случай



Модель предсказываета бсолютно верно

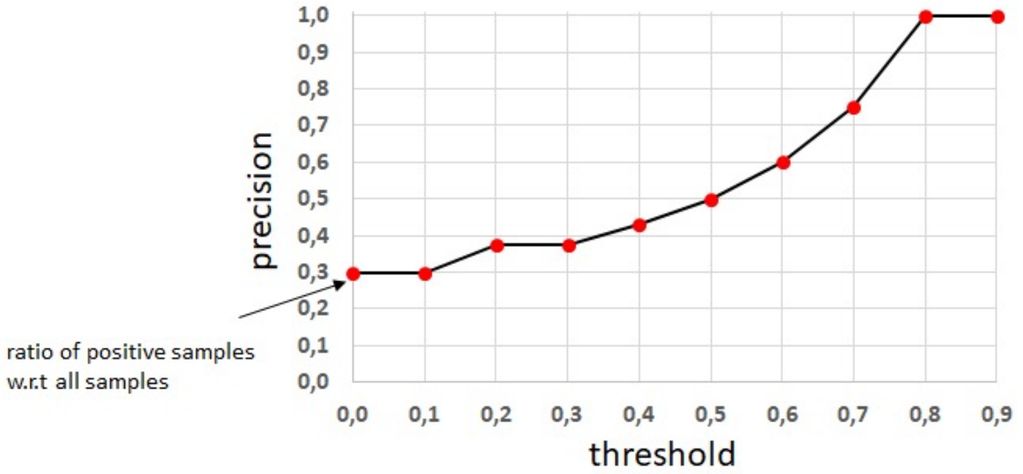
TPR = 1

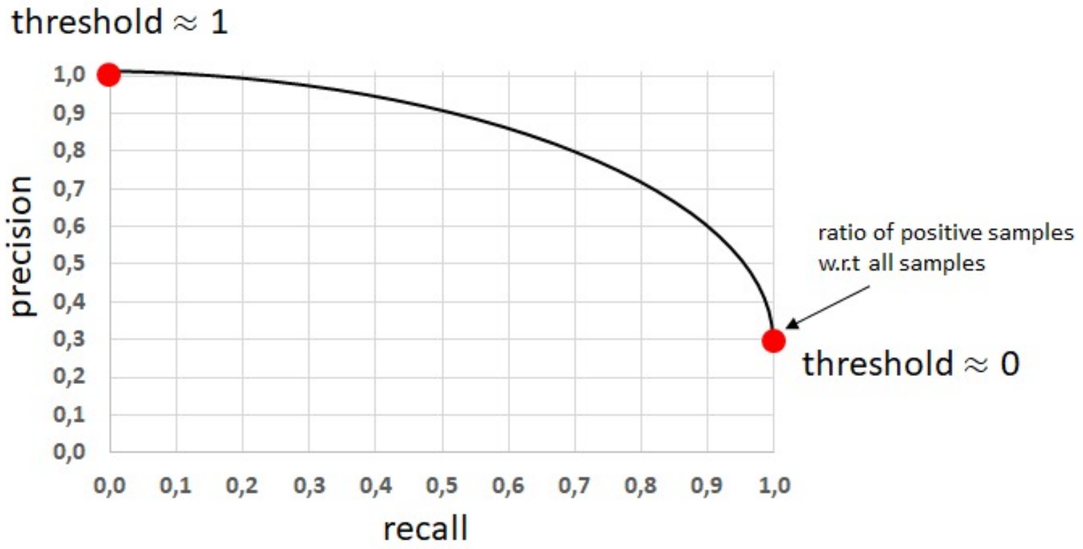
FPR = 0

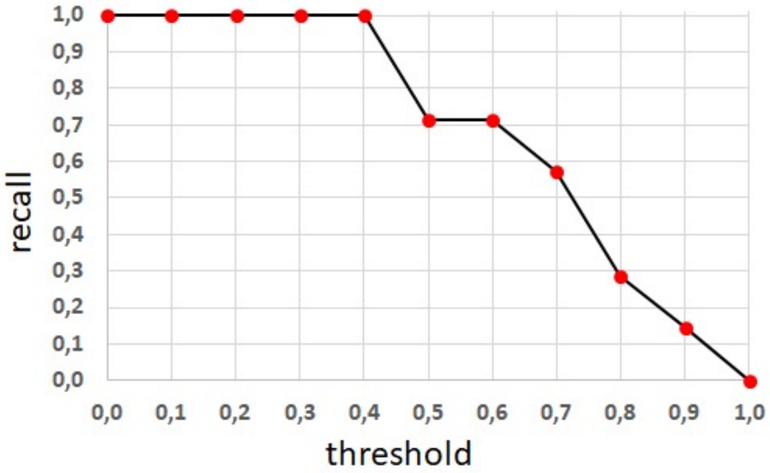
случайные предсказания

Precision Recall Area under the curve
PR AUC

Кривая PR показывает нам взаимосвязь между показателем *Precision (точность)* и Recall (полнота) для разных *пороговых значений*.

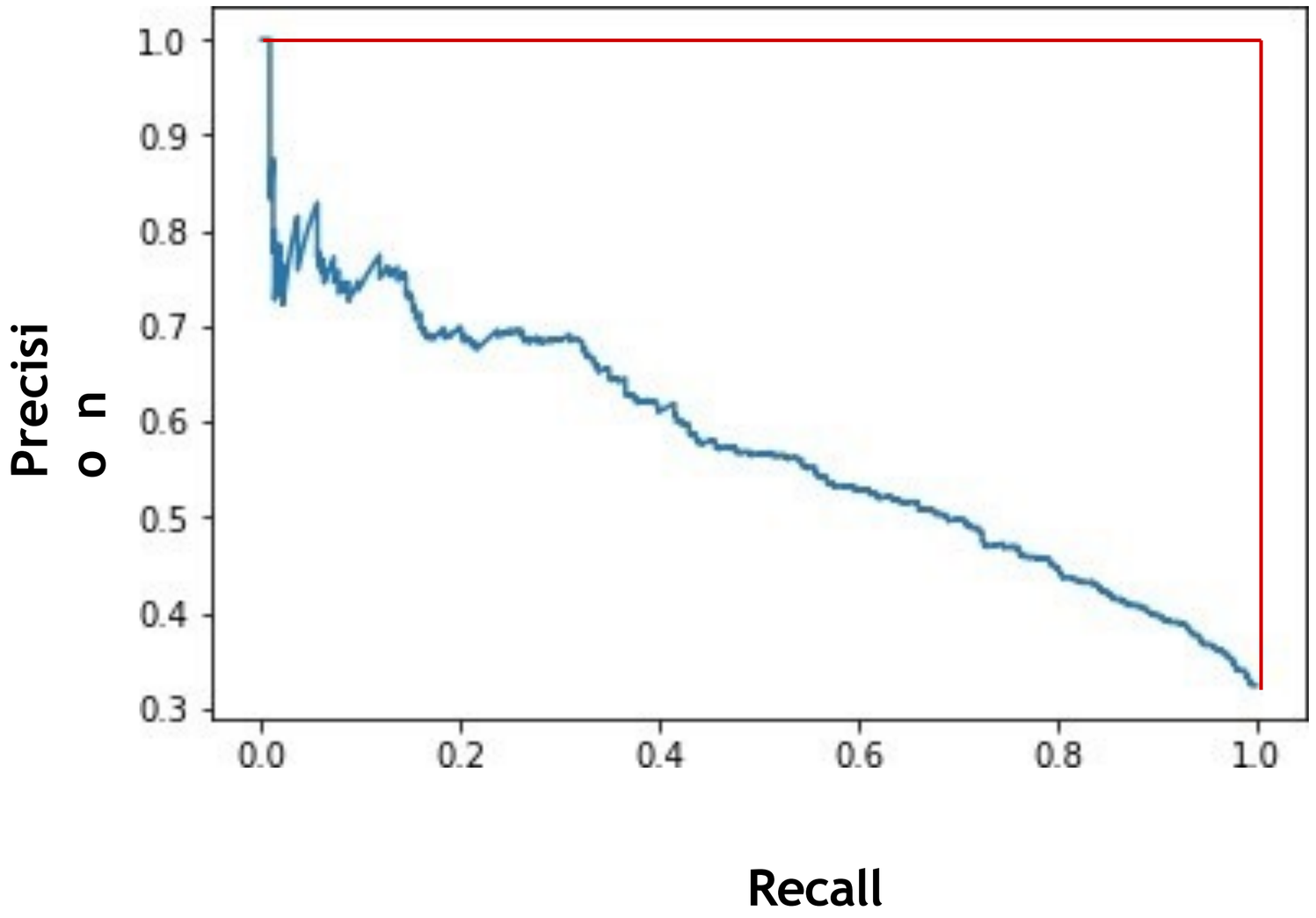






https://towardsdatascience.com/gaining-an-intuitive-understanding-of-precision-and-recall-3b9df37804a7

Кривая Precision — Recall



Модель тем лучше, чем выше площадь подкривой

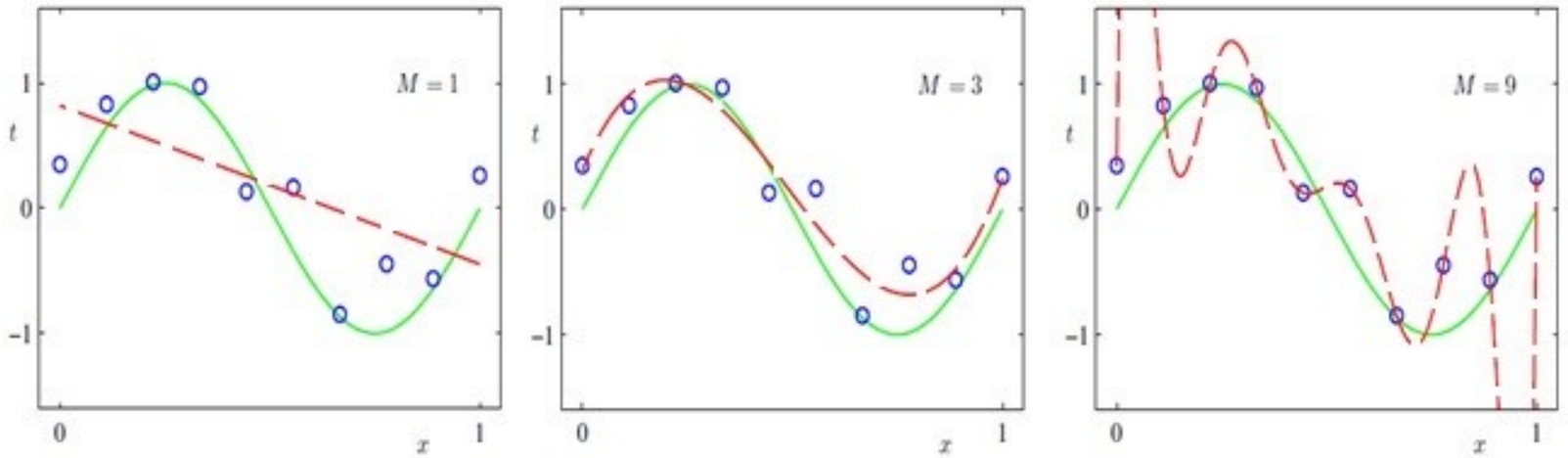
Практика

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

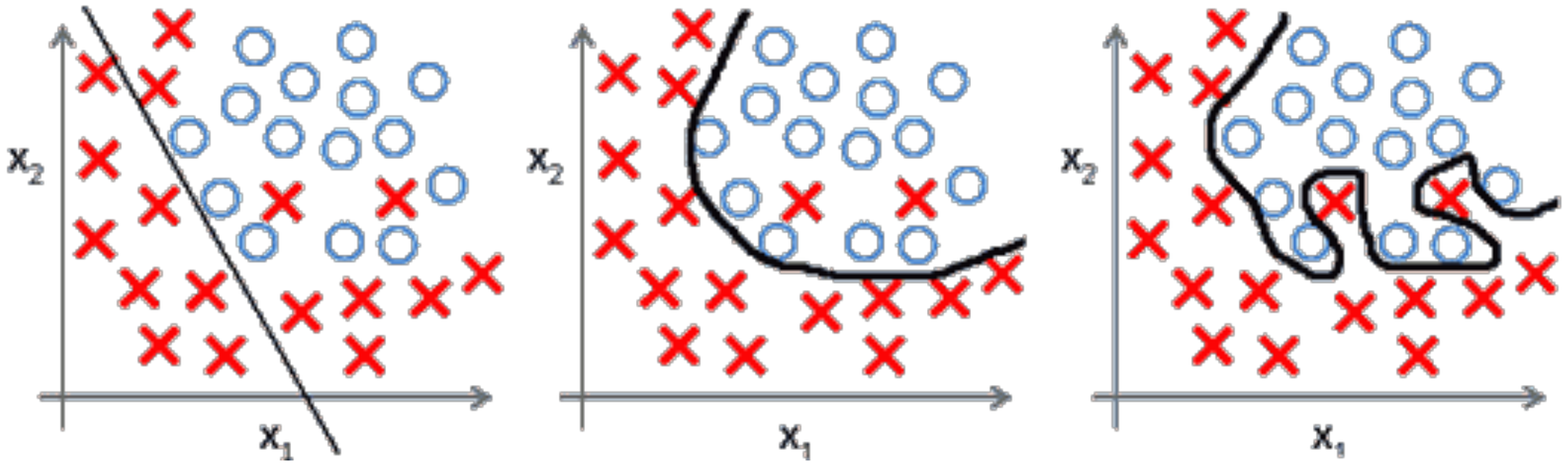
Борьба с переобучением

Переобучение и недообучение

Регрессия

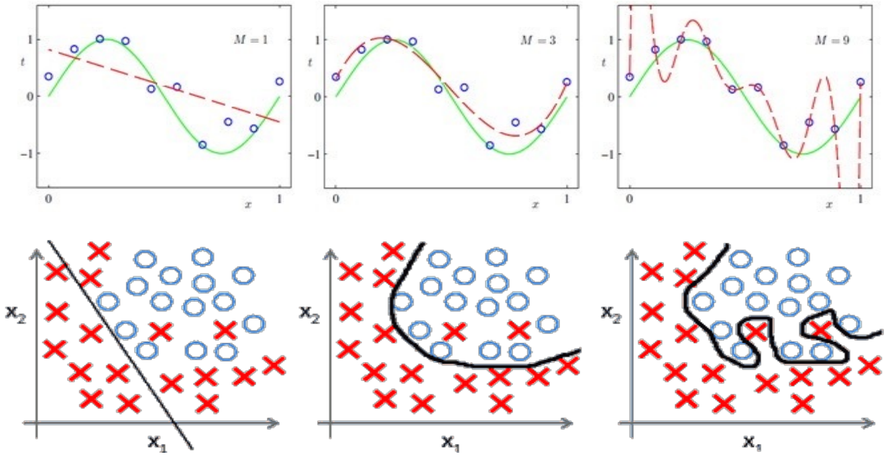


Классификация



Переобучение и недообучение

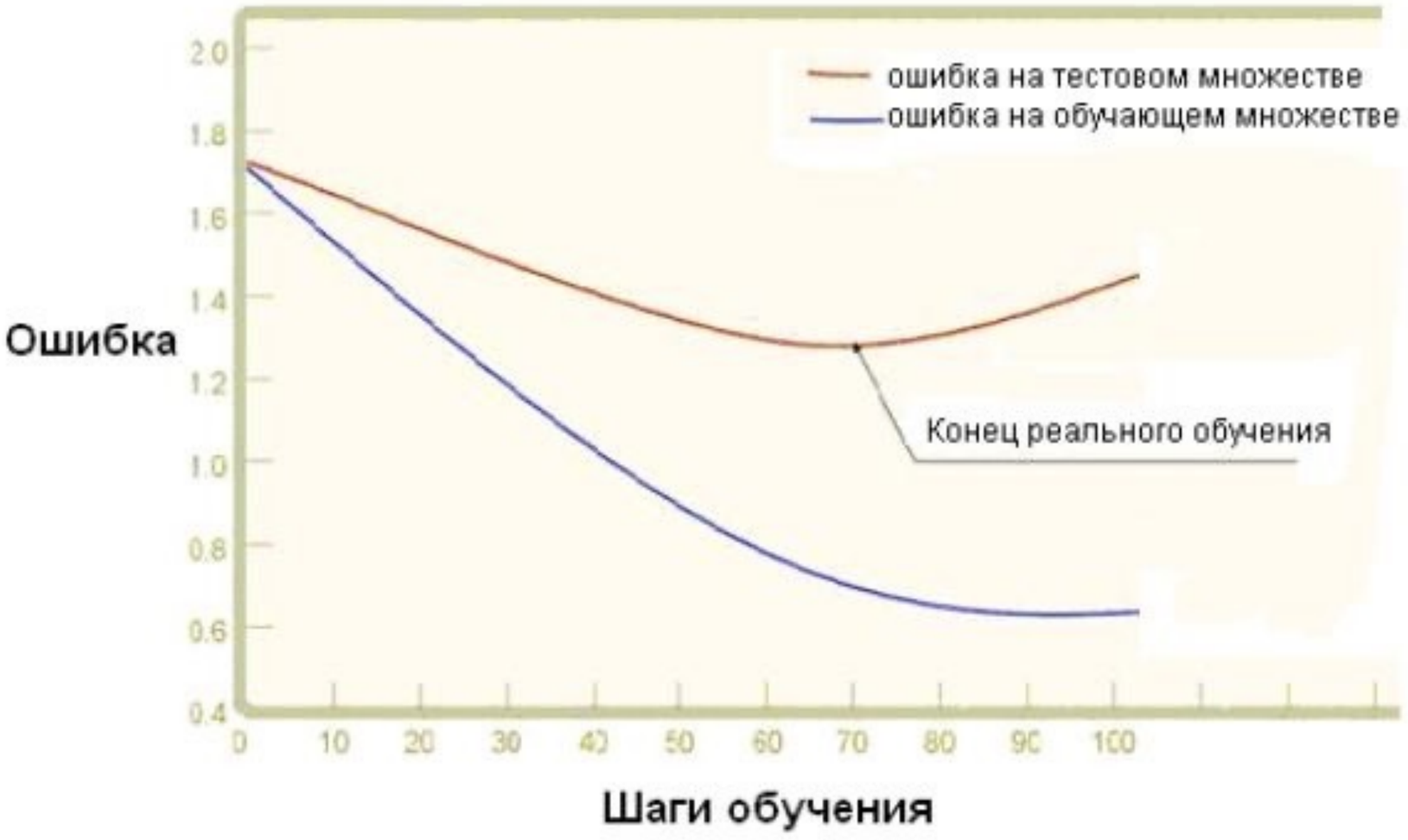
Переобучение (overfitting) – явление, когда ошибка на тестовой выборке заметно больше ошибки на обучающей.



Недообучение (underfitting) – явление, когда ошибка на обучающей выборке достаточно большая, часто говорят «не удаётся настроиться на выборку».

Сложность (complexity) модели алгоритмов – оценивает, насколько разнообразно семейство алгоритмов в модели с точки зрения их функциональных свойств (например, способности настраиваться на выборки). Повышение сложности (т.е. использование более сложных моделей) решает проблему недообучения и вызывает переобучение.

Переобучение и недообучение

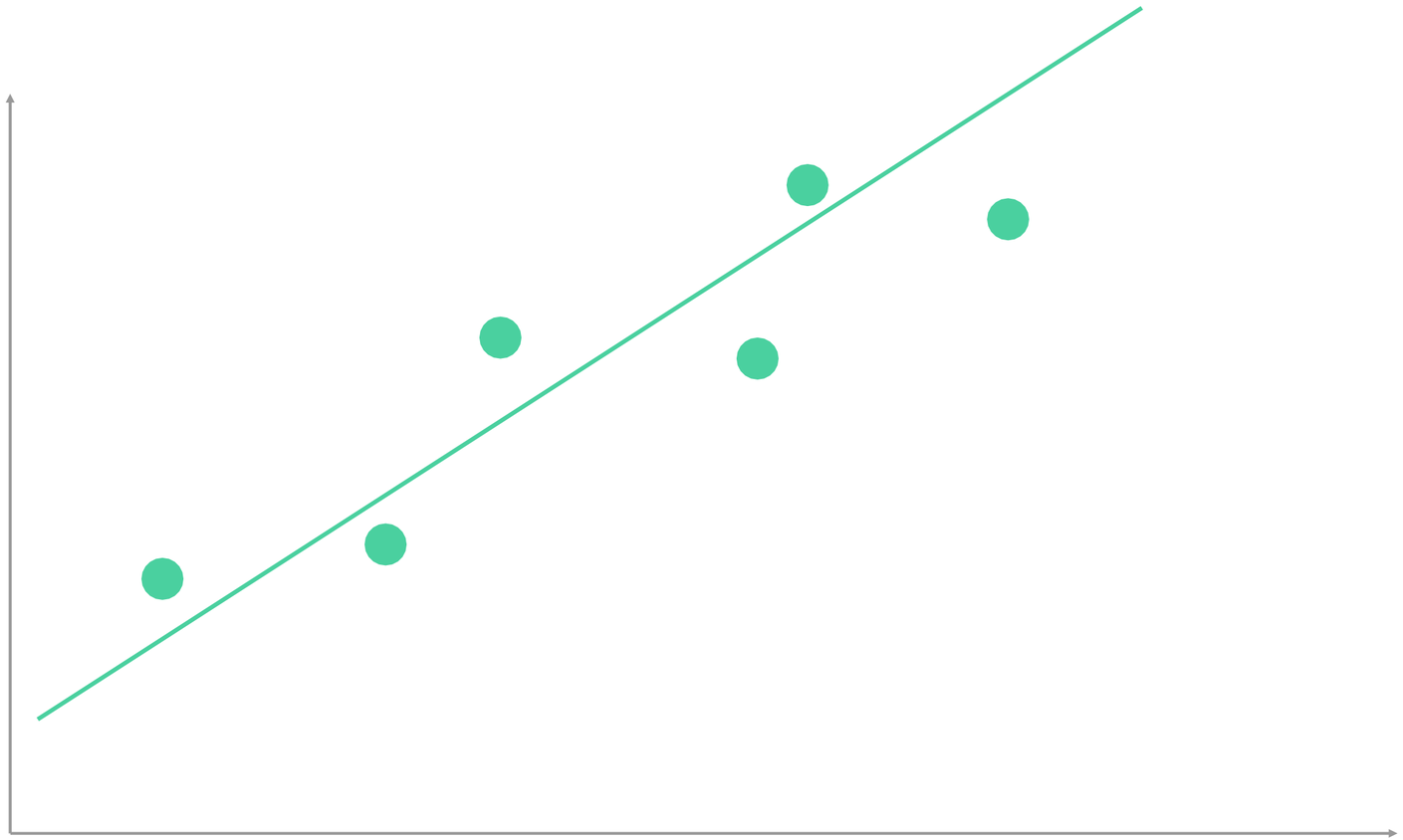


Пример переобучения

Имеются данные из 6 точек и 6 точек новых данных

Пример переобучения

Строим простую модель

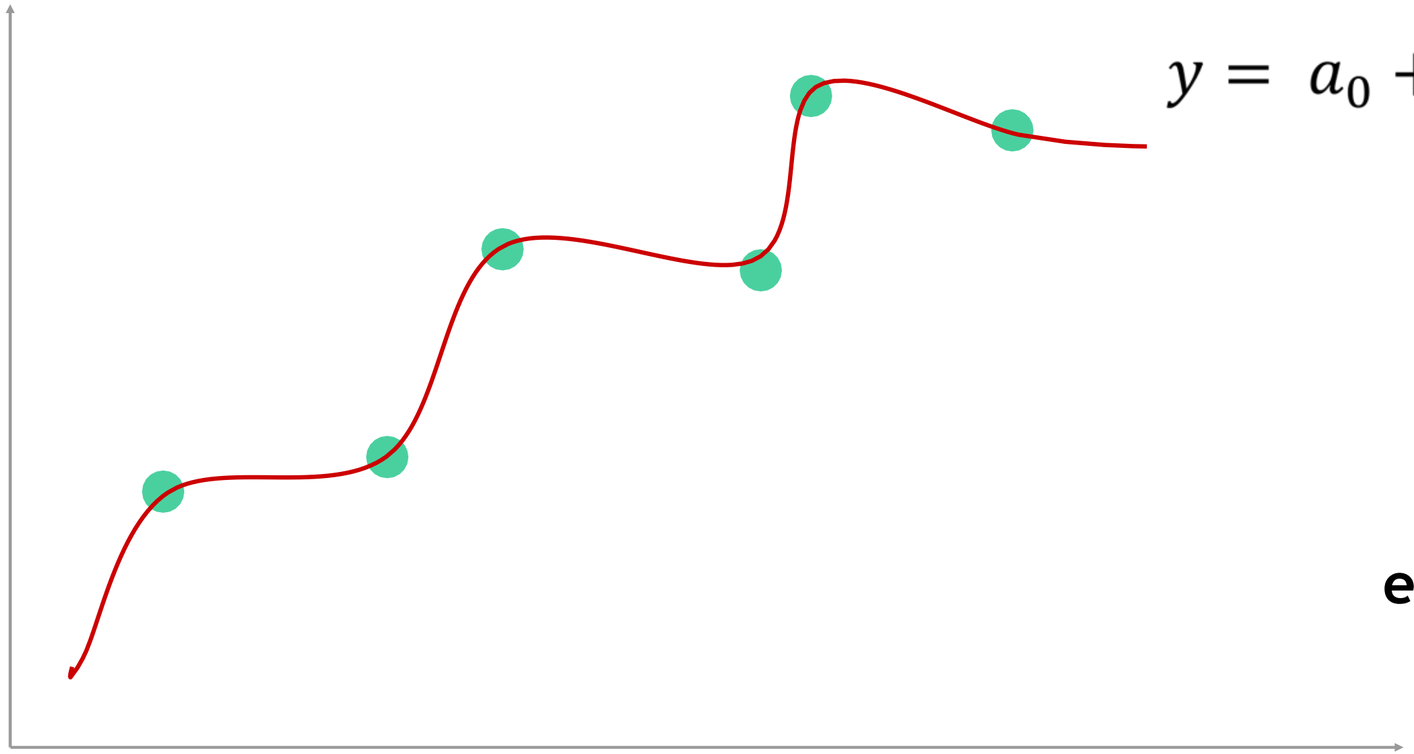


y = kx + b;
ошибка > 0

e1 - ошибка на новых данных >0

Пример переобучения

Строим сложную модель



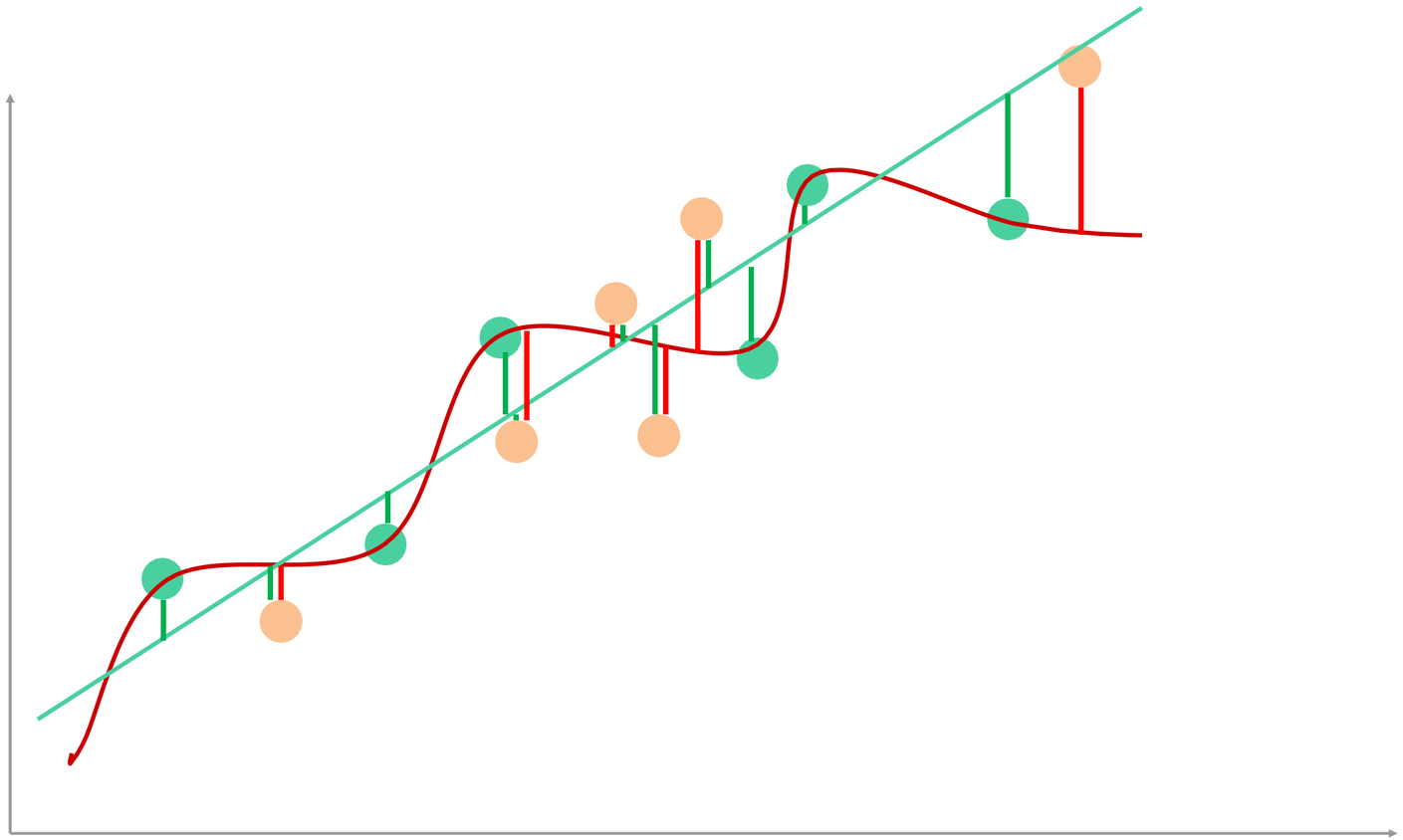
$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5$$

ошибка =0. Хорошо?

e2 - ошибка на новых данных >0

Пример переобучения

На тестовых данных получаем большую ошибку



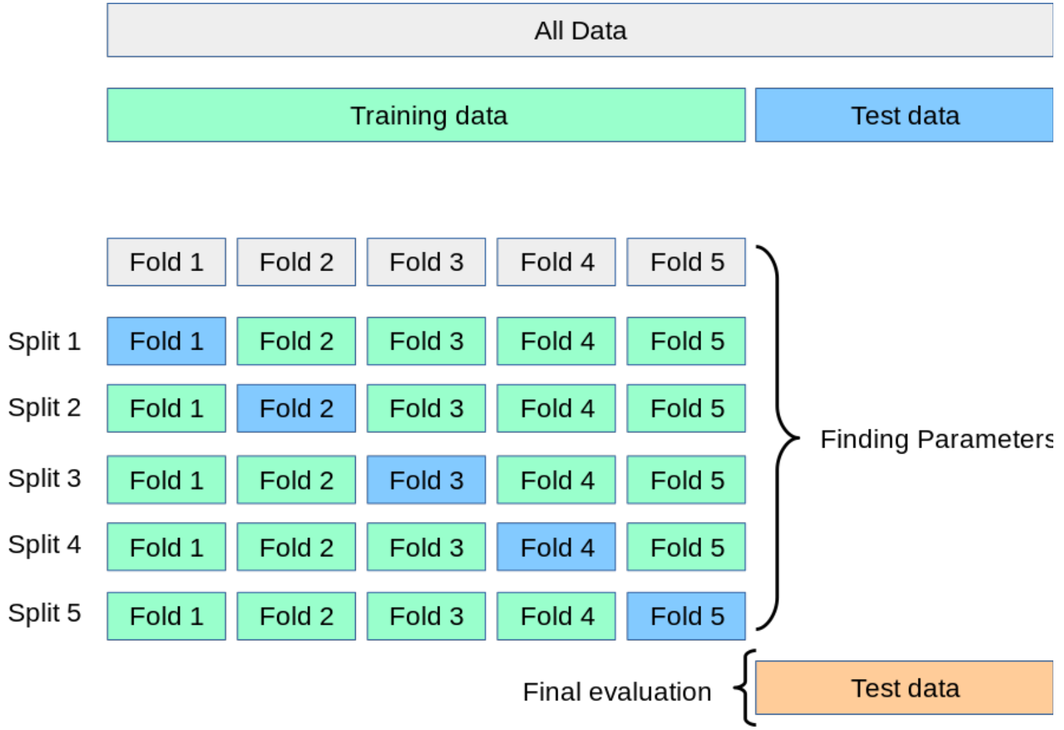
e1 - ошибка на новых данных > 0

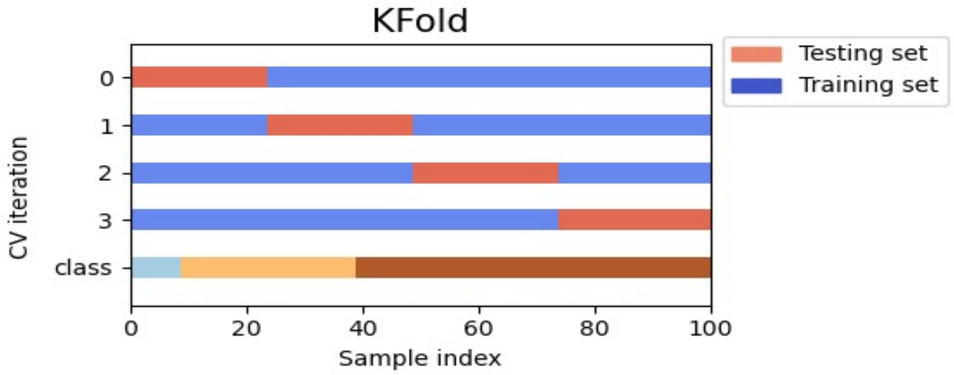
e2 - ошибка на новых данных >0

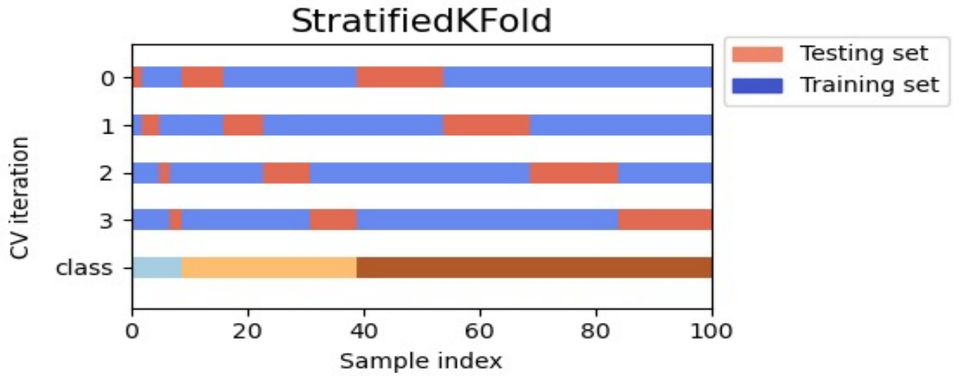
e2 > e1

Кросс-валидация
k-fold cross validation

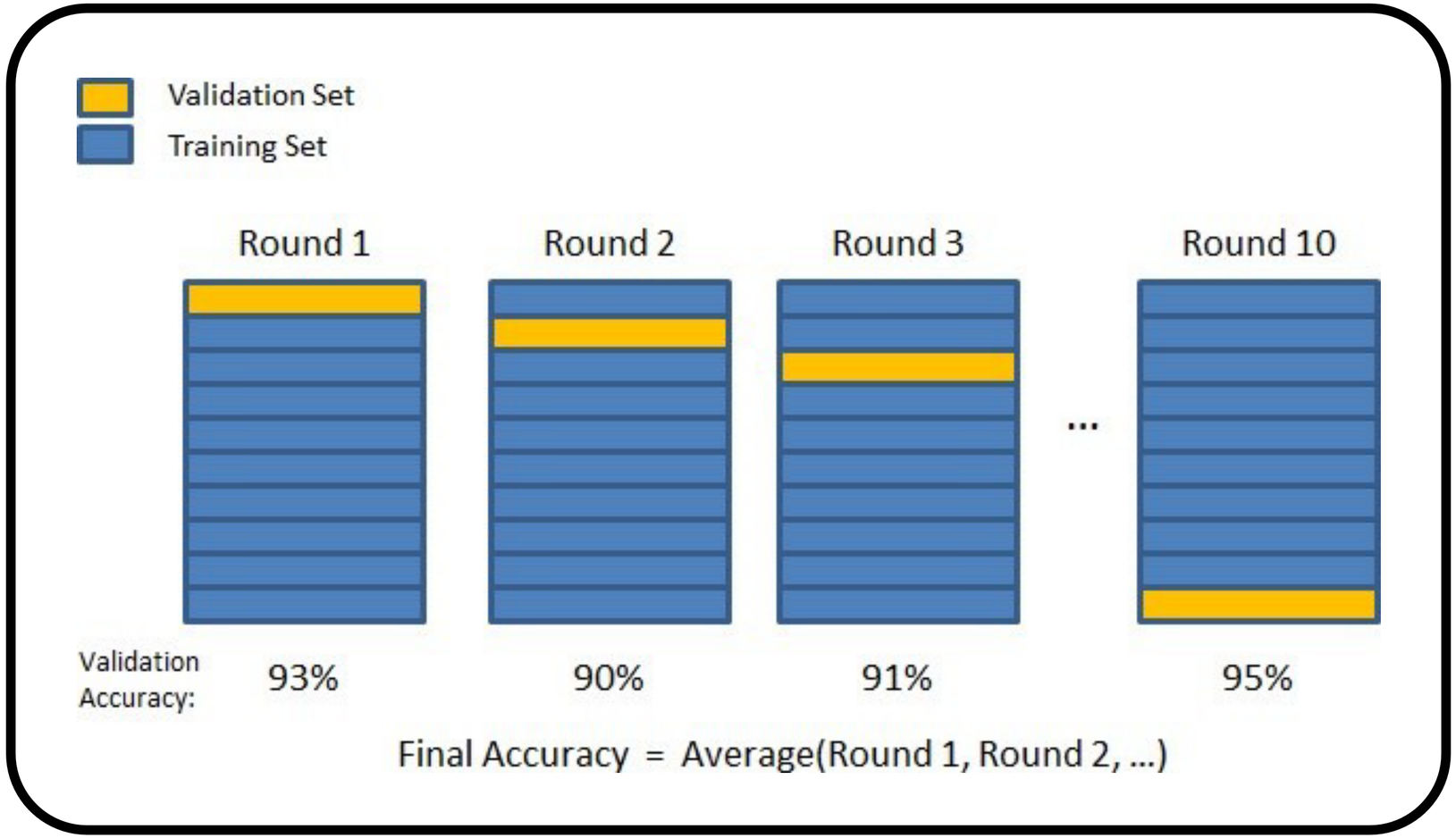
Кросс-валидация или **скользящий контроль** — процедура эмпирического оценивания обобщающей способности алгоритма.







Кросс-валидация
k-fold cross validation



Практика

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

Смещение и разброс

Ошибка прогноза

Ошибку можем разложить на слагаемые:

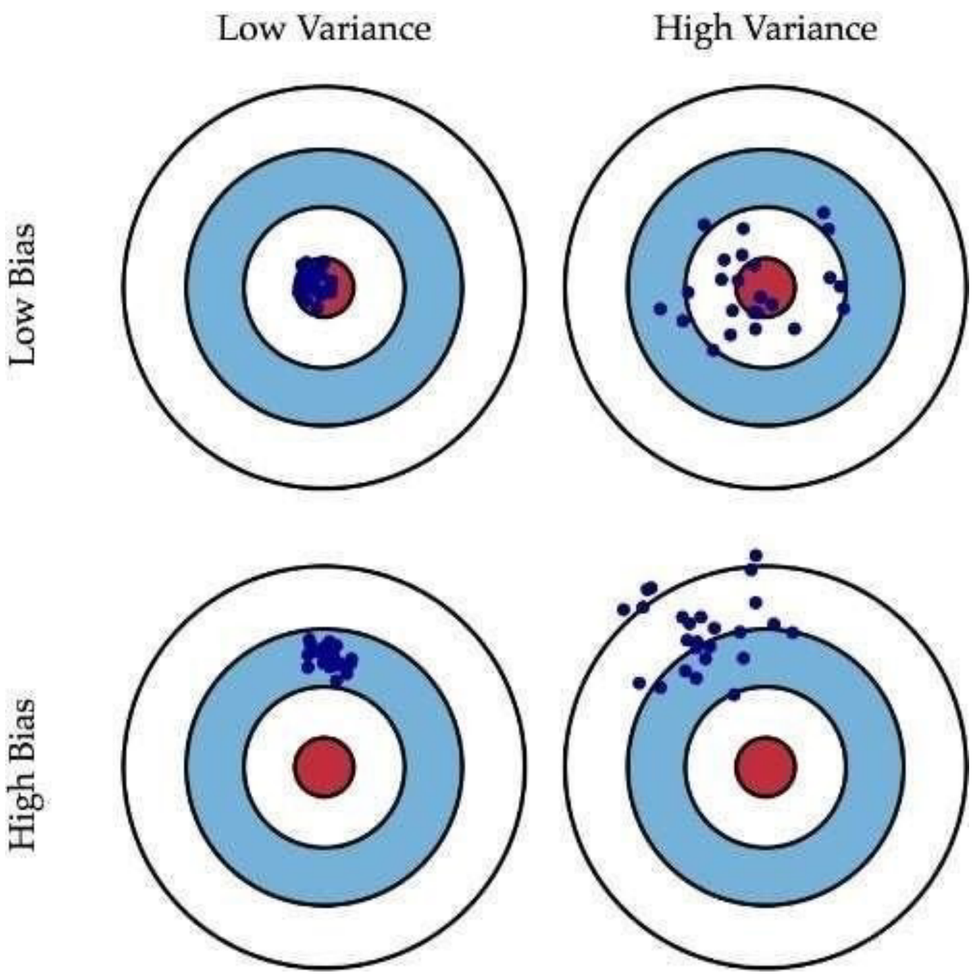
- **Bias – средняя ошибка прогноза. Характеризует способность модели алгоритмов настраиваться на целевую зависимость.**

- **Variance – изменение ошибки при обучении на разных наборах данных. Характеризует разнообразие алгоритмов, которые могут быть реализованы моделью данного типа.**

- **Неустранимая ошибка**

https://habrahabr.ru/company/ods/blog/323890/#razlozhenie-oshibki-na-smeschenie-i-razbros-bias-variance-decomposition

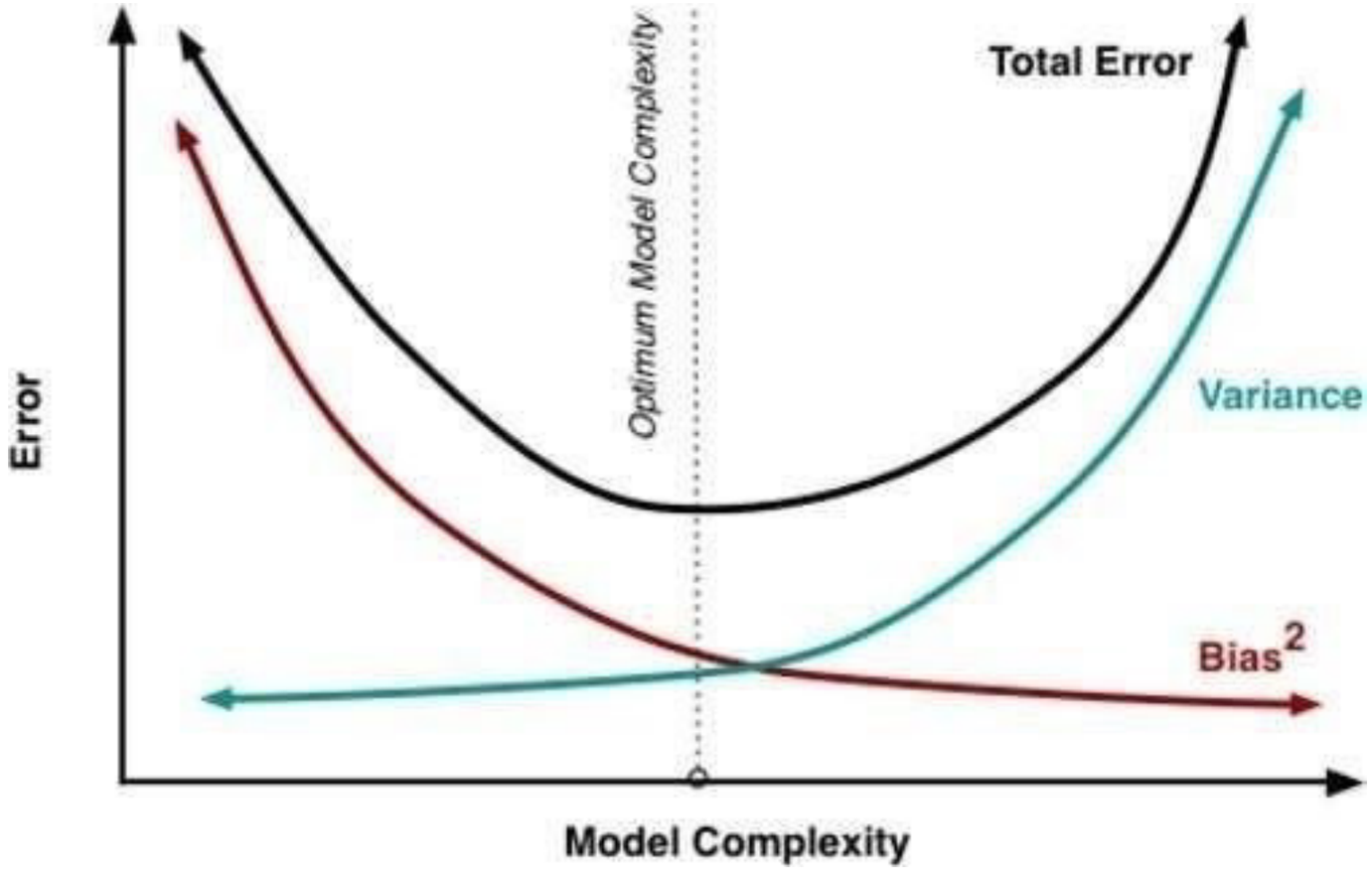
Ошибка прогноза



Сложная модель (учитывает много признаков) – увеличивает разброс ошибки

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

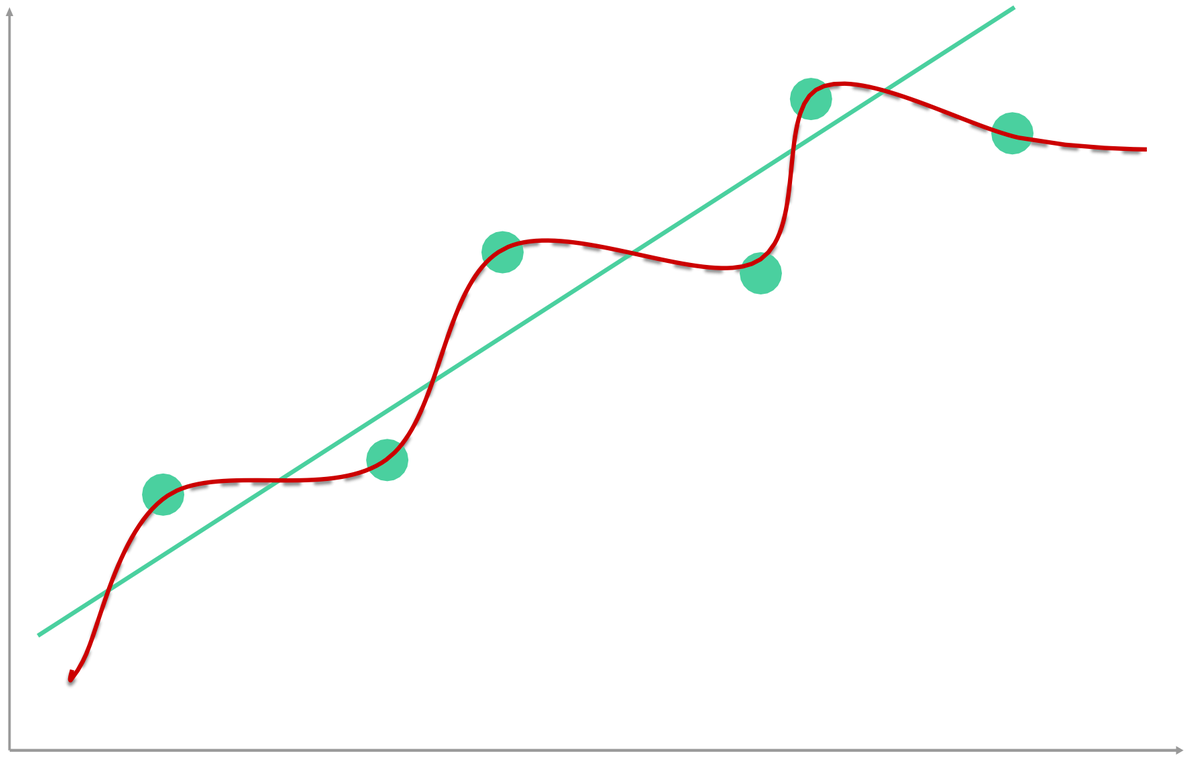
Оптимальный вариант



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

L1 и L2 регуляризация

Прошлый пример переобучения



Переберем модели, увеличивая степень функции

$$y = a_0 + a_1 x$$

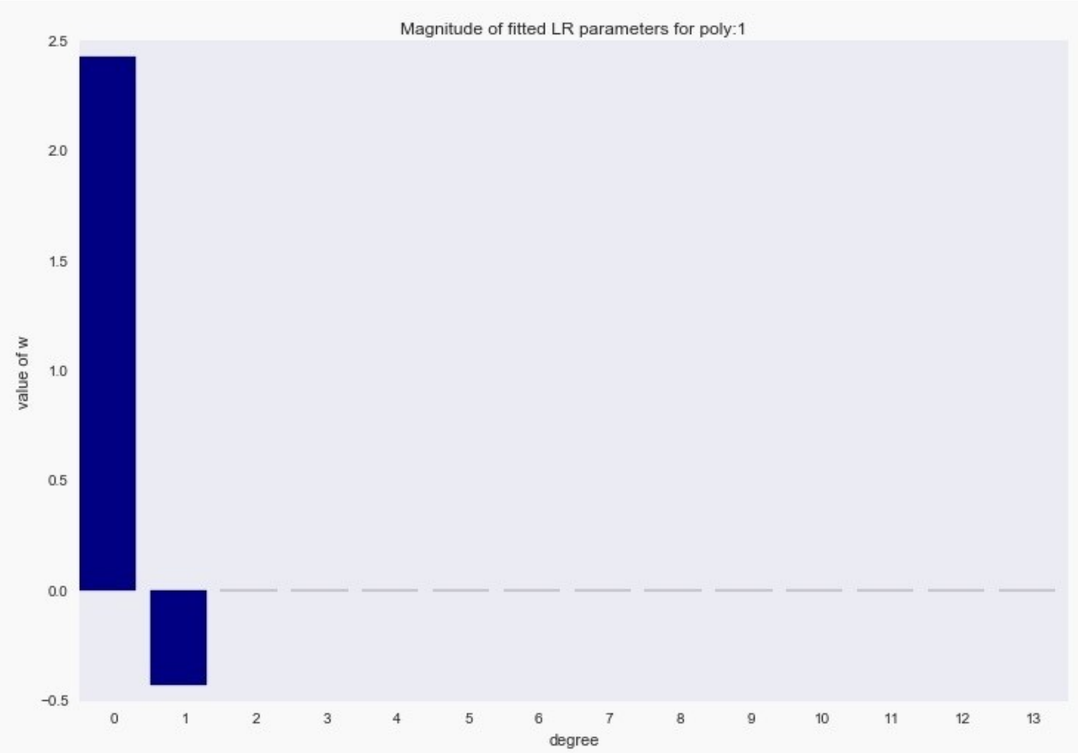
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

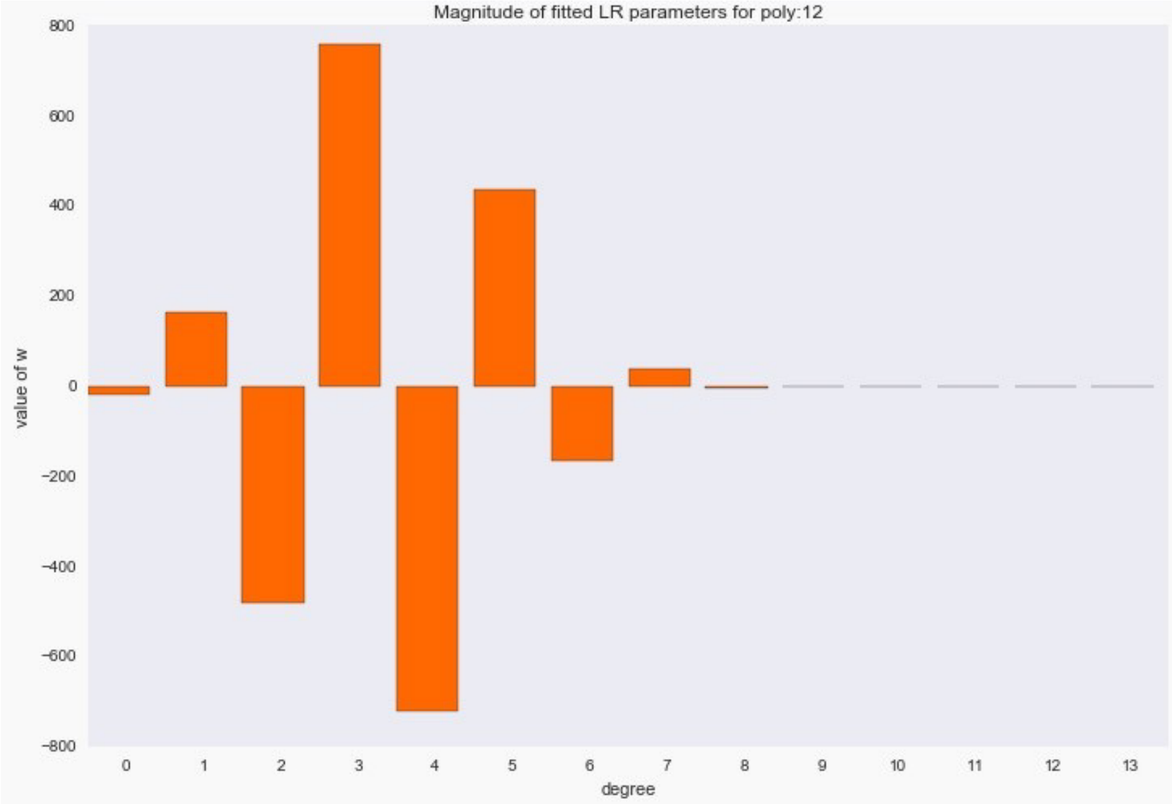
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

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

Как будут варьироваться?

При увеличении и степени полинома вариация коэффициентов быстро растет





Корреляция признаков

Рост коэффициентов от корреляции между признаками

Имеем линейную модель в которой есть коррелированные переменные x_1 x_2

$$\dots + w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + \cdots$$

$$k \cdot x_1 = x_2$$

Тогда одну переменную можно выразить через другую и коэффициент *c* может быть любым

$$\dots + w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + \cdots =$$
$$= \cdots + (w_1 + c \cdot k) \cdot x_1 + (w_2 - c) \cdot x_2 + \cdots$$

Надо уменьшить разброс коэффициентов

Имеем модель целевой переменной y и коэффициентамиа

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

Штраф за сложность

Основные варианты регуляризации

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

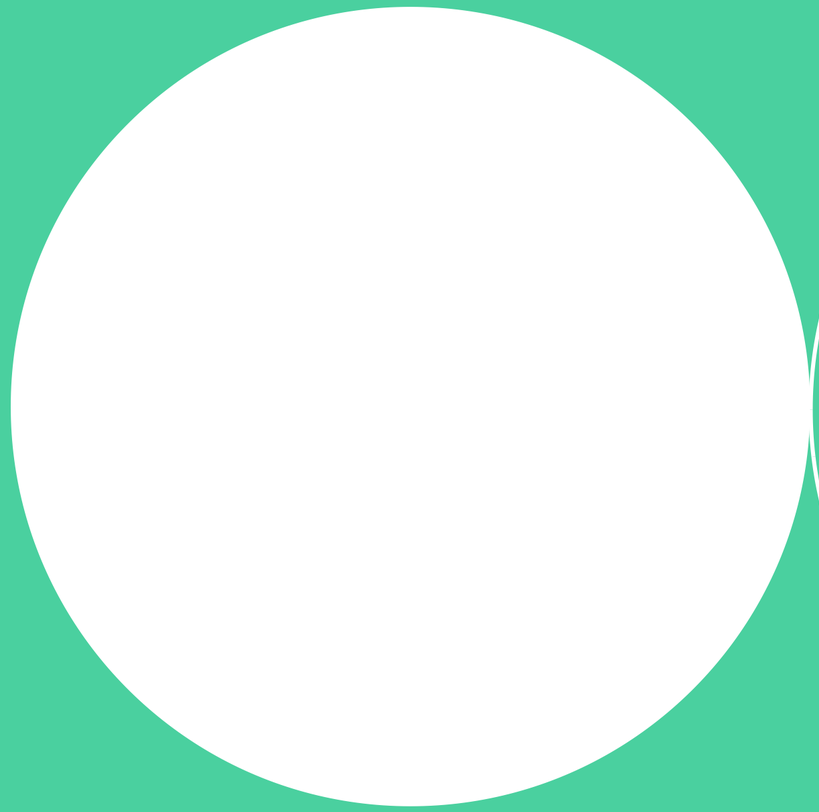
$$L_2 = \sum_i (y_{\text{факт}} - Xa)^2 + \lambda \sum_i a_i{}^2$$

Практика

LOGRES_AFFAIR.IPYNB

регулизация.ipynb

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 L1и L2 регуляризации.

Полезные материалы

Полезные материалы

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

1. О разнице между L1и L1регуляризацией
   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!