Занятие 8. Метрики и валидация

Гирдюк Дмитрий Викторович

23 ноября 2024

СПбГУ, ПМ–ПУ, ДФС

Задача обучения с учителем

- Постановка задачи обучения с учителем (supervised learning): необходимо предсказать значение целевой переменной $y \in Y$ объекта по набору его признаков $\boldsymbol{x} \in X$.
- Среда описывается совместным распределением $f_{X,Y}(\boldsymbol{x}, y)$, а выборкой из нее является набор пар $\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{x}^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^{N}$.
- Результирующая модель возвращает значение y по признакам $\boldsymbol{x}$: $y = h(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta})$.
- Классификация:
    - $Y = \{0, 1\}$ – бинарная (binary)
    - $Y = \{1, 2, \ldots, K\}$ – многоклассовая (multiclass)
    - $Y = \{0, 1\}^K$ – многозначная (multi-label)
- Регрессия:
    - $Y = R$ – одномерная (ordinal)
    - $Y = R^K$ – многомерная (multiple)

Оценка качества моделей

- Как понять, что наша модель работает хорошо?
- У нас есть функция потерь/целевая функция, которую мы получаем при сведении задачи построения модели к задаче математической оптимизации.
- Есть и метрики, которые позволяют адекватно оценить результаты работы модели на основе предсказанных меток и известных истинных значений.
- В задачах регрессии многие метрики могут выступать в роли функций потерь. Но чаще всего метрики $\neq$ функции потерь.

Метрики в задаче регрессии: MSE, RMSE, R^2

- RSS (Residual Sum of Squares)

$$RSS = \sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right)^2$$

- MSE и RMSE (Root Mean Squared Error)

$$MSE = \frac{1}{N} RSS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right)^2, \; RMSE = \sqrt{MSE}$$

- Коэффициент детерминации R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right)}{\sum_{i=1}^{N} \left(y^{(i)} - \overline{y} \right)} = 1 - \frac{RSS}{TSS}$$

где $\overline{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y^{(i)}$.

Метрики в задаче регрессии: MAE, MAPE, SMAPE

- MAE (Mean Average Error)

$$MAE = \sum_{i=1}^{N} \left| y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right|$$

- Относительные метрики: MAPE и SMAPE (Symmetric Mean Absolute Percentage Error)

$$MAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\left| y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right|}{|y^{(i)}|}$$

$$SMAPE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{2 \left| y^{(i)} - h(\boldsymbol{x}^{(i)}) \right|}{|y^{(i)} + h(\boldsymbol{x}^{(i)})|}$$

SMAPE решает вопрос с нулем в знаменателе MAPE.

Метрики в задаче регрессии: замечания

- Все метрики выше естественным образом допускают обобщение путем добавления весовых коэффициентов для наблюдений.
- MSE, RMSE, MAE могут быть использованы в качестве целевой функции.
- MAPE по сути есть MAE, в котором у наблюдений есть весовые коэффициенты $\frac{1}{|y^{(i)}|}$.

Метрики в задаче бинарной классификации

- Метрики в задаче классификации весьма разнообразны. И чаще всего их нельзя использовать в качестве целевой функции.
- Здесь и далее предполагаем, что у нас есть модель $h(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta})$, которая возвращает метки предсказанных классов $\{0, 1, \ldots, K\}$.
- Начнем с задачи бинарной классификации $(K = 1)$, анализ результатов которой проводят на основе матрицы ошибок (consfusion matrix).

		Predicted condition	
	Total population = P + N	Positive (PP)	Negative (PN)
Actual condition	Positive (P)	True positive (TP)	False negative (FN)
	Negative (N)	False positive (FP)	True negative (TN)

Accuracy

- Accuracy – доля правильно предсказанных объектов

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

- Что будет с метрикой при дисбалансе классов?
- Разная значимость FP и FN (медицинская диагностика).

		Predicted condition	
	Total population = P + N	**Positive (PP)**	**Negative (PN)**
Actual condition	**Positive (P)**	**True positive (TP)**	**False negative (FN)**
	Negative (N)	**False positive (FP)**	**True negative (TN)**

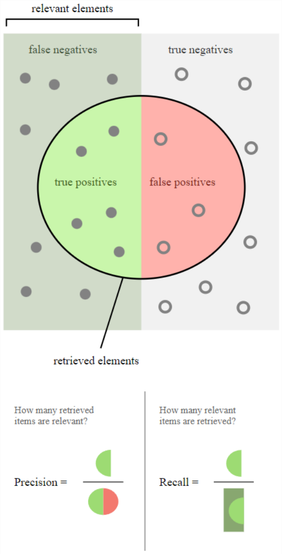
Precision и Recall

- Точность (Precision) – доля правильно предсказанных положительных объектов среди всех отнесенных к положительным.

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

- Полнота (Recall) – доля правильно предсказанных положительных объектов среди всех положительных объектов.

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



F_β-меры

- Работать сразу с двумя метриками не очень удобно, потому precision и recall объединяют с помощью F_1-меры

$$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{Precision} + \frac{1}{Recall}} = 2\frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall}$$

- Или F_β, если precision и recall не должны иметь одинаковую степень важности

$$F_\beta = (1 + \beta^2)\frac{Precision \times Recall}{Recall + \beta^2 Precision}$$

		Predicted condition	
	Total population = P + N	**Positive (PP)**	**Negative (PN)**
Actual condition	**Positive (P)**	**True positive (TP)**	**False negative (FN)**
	Negative (N)	**False positive (FP)**	**True negative (TN)**

Пороги в задаче классификации

- Вернемся ненадолго к модели $h(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta})$. Как именно, например, в логистической регрессии мы получаем метки классов?
- Мы сравниваем полученные оценки вероятностей с некоторым порогом p_{thd}, по умолчанию с 0.5.
- Вообще говоря, никто не мешает нам в каждой задаче задавать собственный порог, т.е. порог может выступать в роли гиперпараметра модели.
- Понятно, что выбор порога имеет достаточно важное значение, ведь от него зависят итоговые метки, а от них – значения интересующих нас метрик.

ROC-кривая

- Рассмотрим еще 2 метрики качества бинарной классификации.
- True Positive Rate, TPR, синоним полноты (Precision), рассмотренной ранее.

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

- False positive Rate, FPR

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

- Увеличивая порог p_{thd}, мы относим к положительным меньше наблюдений, но и количество неправильно классифицированных положительных объектов уменьшается.
- Кривая, у которой по оси ординат TPR, а по оси абсцисс FPR, называется ROC-кривой (Receiver Operating Characteristic).

Пример ROC-кривой

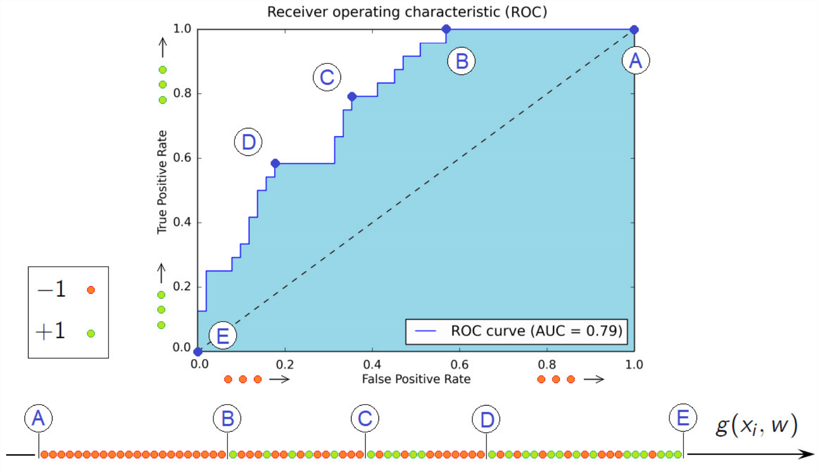


Рис. 1: ROC-кривая [1]

Построение ROC-кривой [2]

id	оценка	класс
1	0.5	0
2	0.1	0
3	0.2	0
4	0.6	1
5	0.2	1
6	0.3	1
7	0.0	0

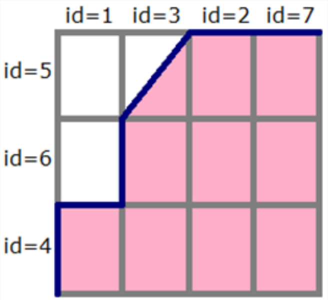
Табл. 1

id	оценка	класс
4	0.6	1
1	0.5	0
6	0.3	1
3	0.2	0
5	0.2	1
2	0.1	0
7	0.0	0

Табл. 2

id	> 0.25	класс
4	1	1
1	1	0
6	1	1
3	0	0
5	0	1
2	0	0
7	0	0

Табл. 3



ROCAUC

- Понятно, что чем больше площадь (Area Under the Curve) под ROC-кривой, тем лучше классификатор справляется со своей задачей.
- Из способа построения ROC-кривой и вычисления ее площади следует идея того, когда именно стоит применять ROCAUC – в задачах, где важнее не то, как хорошо выполянется предсказание на отдельных объектах, а то, где важнее правильный порядок предсказания.

Многоклассовая классификация

- Кратко о том, что делать, если классов больше 2.
- Многие метрики бинарной классификации обобщаются на многоклассовый случай, но есть детали.
- Для каждого класса можно посчитать свою собственную матрицу ошибок, а затем есть два варианта: мы либо усредняем все значения в матрице (микроусреднение), либо усредняем значения метрик по всем классам (макроусреднение).
- Первое слабо чувствительно к классам с небольшим числом наблюдений, второе наоборот.

Способы оценки качества моделей i

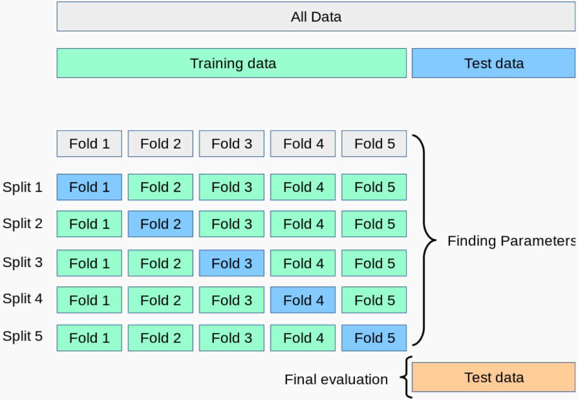
- Мы поговорили о метриках, используемых для оценки качества моделей в задачах обучения с учителем.
- Теперь рассмотрим вопрос того, какие существуют процедуры для проведения этой оценки.
- Замечание: оставим за скобками всевозможные ”внутренние критерии” – оценки качества на данных, напрямую используемых для обучения. Сюда входят такие вещи (с ними, возможно, познакомят на практике по статистике) как информационный критерий Акаике (AIC), байесовский информационный критерий (BIC) и др.
- С одной из процедур мы уже знакомы: разделение обучающей выборки на **тренировочную**, **валидационную** и **тестовую** (метод hold-out).

Способы оценки качества моделей ii

- Тренировочный датасет используем для обучения модели. Валидационный – для подбора гиперпараметров модели или оптимизационного алгоритма (или даже гиперпараметров процесса трансформации данных). А на тестовом датасете производим окончательную оценку обобщающей способности нашей модели.
- Но есть проблема, при таком подходе приличная часть данных откладывается. Альтернативы?

Кросс-валидация

- Кросс-валидация (перекрестная проверка, cross-validation) – общий способ оценки обобщающей способности модели, состоящий в ресемплировании данных и использовании их как для тренировки модели, так и для проверки.



Примеры кросс-валидация

- Скользящий контроль (Leave-one-out) – тренируем модель на всех данных кроме одного наблюдения, на котором проводим проверку. Усредняем значения метрики для каждого объекта. Трудоемко, высокая дисперсия.
- Кросс-валидация по k блокам (k-fold cross-validation) – разбиваем данные на k частей, последовательно используем $k-1$ часть для обучения, оставшуюся для проверки, итоговые значения усредняем. Менее трудоемко чем скользящий контроль, но существенно зависим от разбиения.
- Кросс-валидация по k блокам j раз ($t \times k$-fold cross-validation). Аналогично предыдущему, но процедуру производим t раз. Компромисс между трудоемкостью и точностью.
- В scikit-learn реализовано достаточно много разнообразных схем произведения разбиения (например, с учетом стратификации по группирующему признаку).

Дилемма смещения–дисперсии

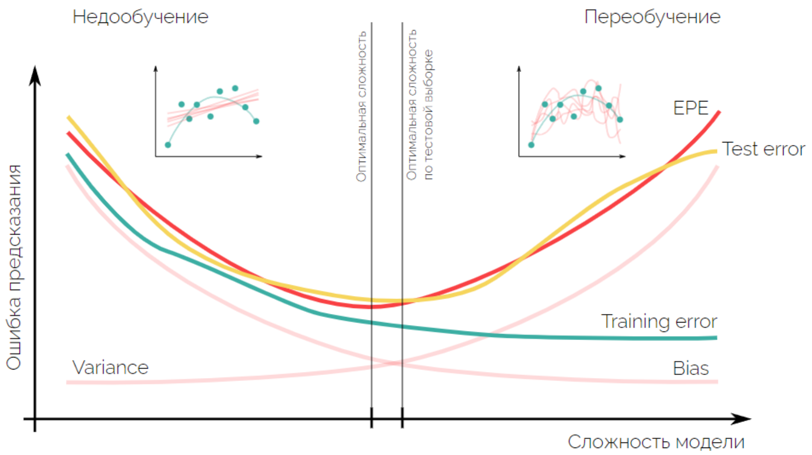


Иллюстрация дилеммы смещения-дисперсии.

Использованные источники i

1. *Воронцов К.* **Презентация по методам оценки качества из курса лекций Воронцова К.В.** URL: http://www.machinelearning.ru/wiki/images/a/a2/08-Voron-ML-Quality-slides.pdf.
2. *Дьяконов А.* **AUC ROC (площадь под кривой ошибок).** URL: https://alexanderdyakonov.wordpress.com/2017/07/28/auc-roc-%D0%BF%D0%BB%D0%BE%D1%89%D0%B0%D0%B4%D1%8C-%D0%BF%D0%BE%D0%B4-%D0%BA%D1%80%D0%B8%D0%B2%D0%BE%D0%B9-%D0%BE%D1%88%D0%B8%D0%B1%D0%BE%D0%BA/.