Введение в анализ данных

Лекция 7.5

Измерение ошибки в регрессии и классификации

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2021

Функции потерь в задачах регрессии

Среднеквадратичная ошибка

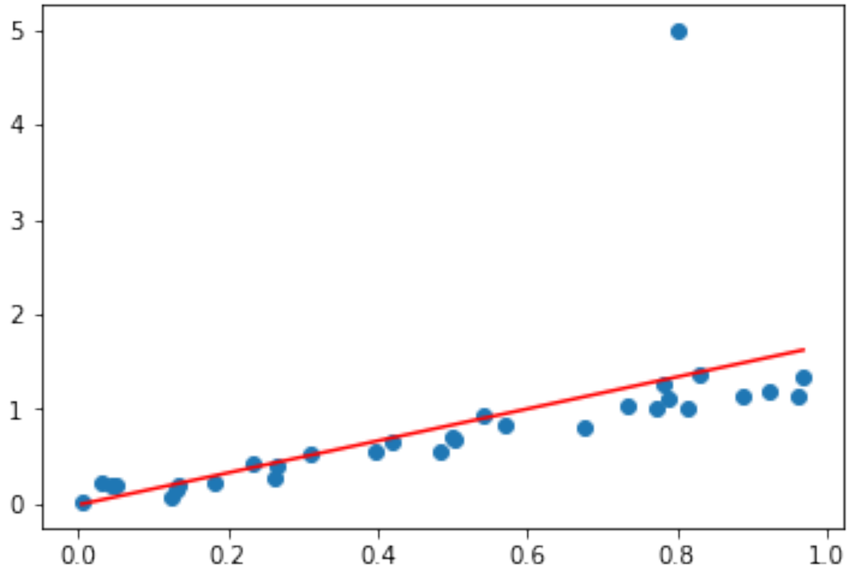
- Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y, a) = (a - y)^2$$

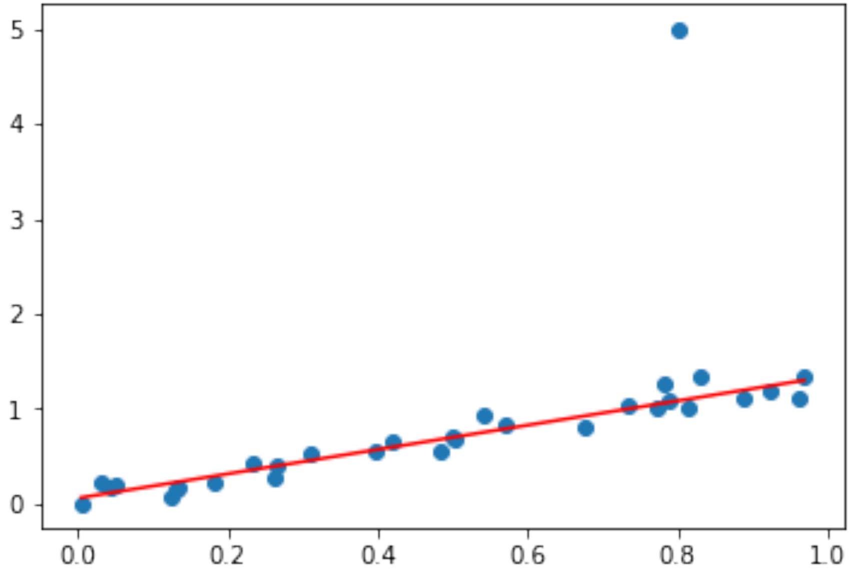
- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

Выбросы



С учётом выброса



Без учёта выброса

Обучение на среднеквадратичную ошибку

Выбросы

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	$\boldsymbol{(a(x)-y)^2}$
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	8649
6	7	1

$$MSE \approx 1236$$

Выбросы

$a(x)$	y	$(a(x)-y)^2$
4	1	9
5	2	9
6	3	9
7	4	9
8	5	9
10	100	8100
10	7	9

$$MSE \approx 1164$$

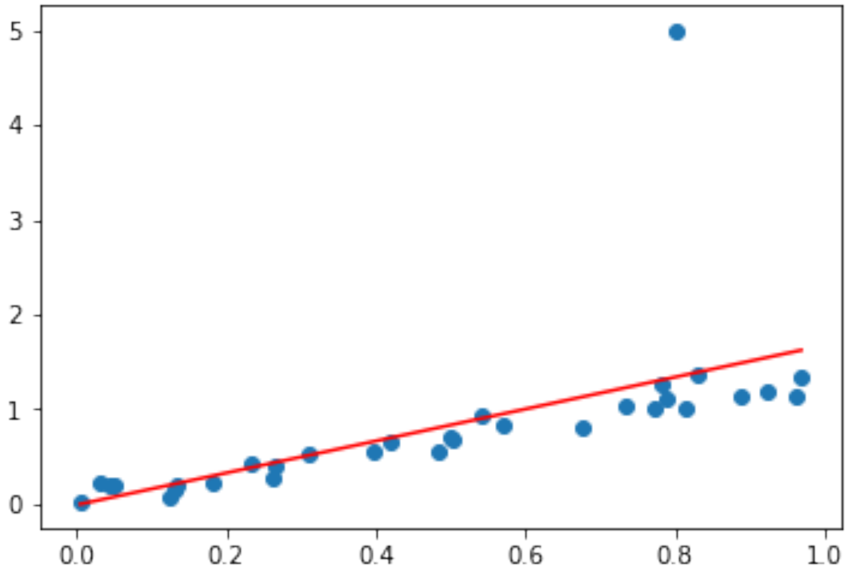
Средняя абсолютная ошибка

$$L(y, a) = |a - y|$$

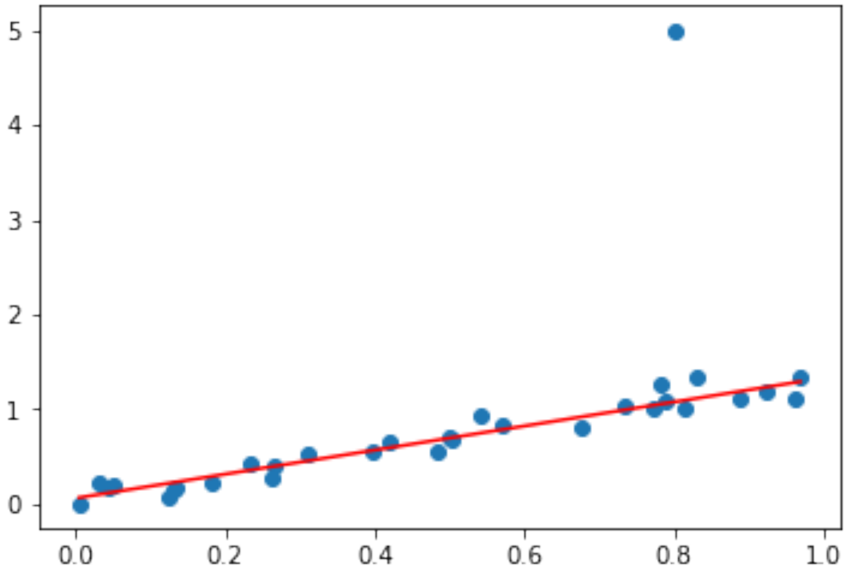
- Функционал ошибки — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

Выбросы



Обучение на MSE



Обучение на MAE

Выбросы

$a(x)$	y	$\lvert a(x) - y \rvert$
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	93
6	7	1

$$MAE \approx 14.14$$

Выбросы

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	$\boldsymbol{\lvert a(x) - y \rvert}$
4	1	3
5	2	3
6	3	3
7	4	3
8	5	3
10	100	90
10	7	3

$$MAE \approx 15.43$$

Функция потерь Хубера

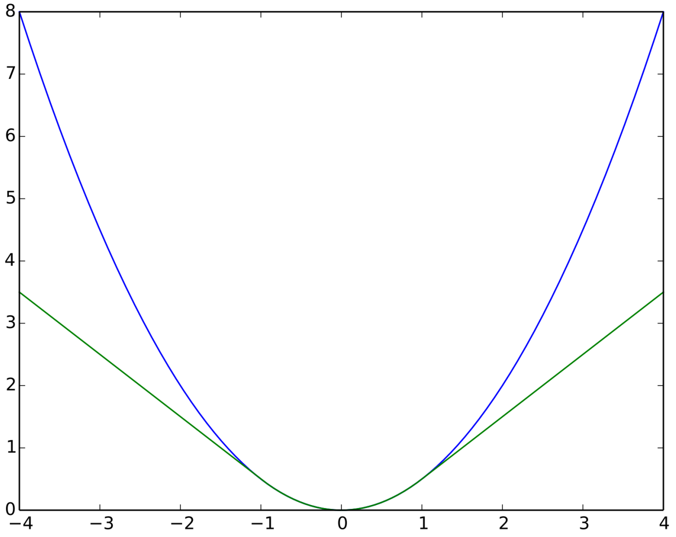
$$L_H(y, a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y-a)^2, & |y-a| < \delta \\ \delta\left(|y-a| - \frac{1}{2}\delta\right), & |y-a| \geq \delta \end{cases}$$

- Функционал ошибки:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell} L_H\big(y_i, a(x_i)\big)$$

Функция потерь Хубера

$$L_H(y, a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y-a)^2, & |y-a| < \delta \\ \delta\left(|y-a| - \frac{1}{2}\delta\right), & |y-a| \geq \delta \end{cases}$$



MAPE

- Mean Absolute Percentage Error (средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \left|\frac{y - a}{y}\right|$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left|\frac{a(x_i) - y_i}{y_i}\right|$$

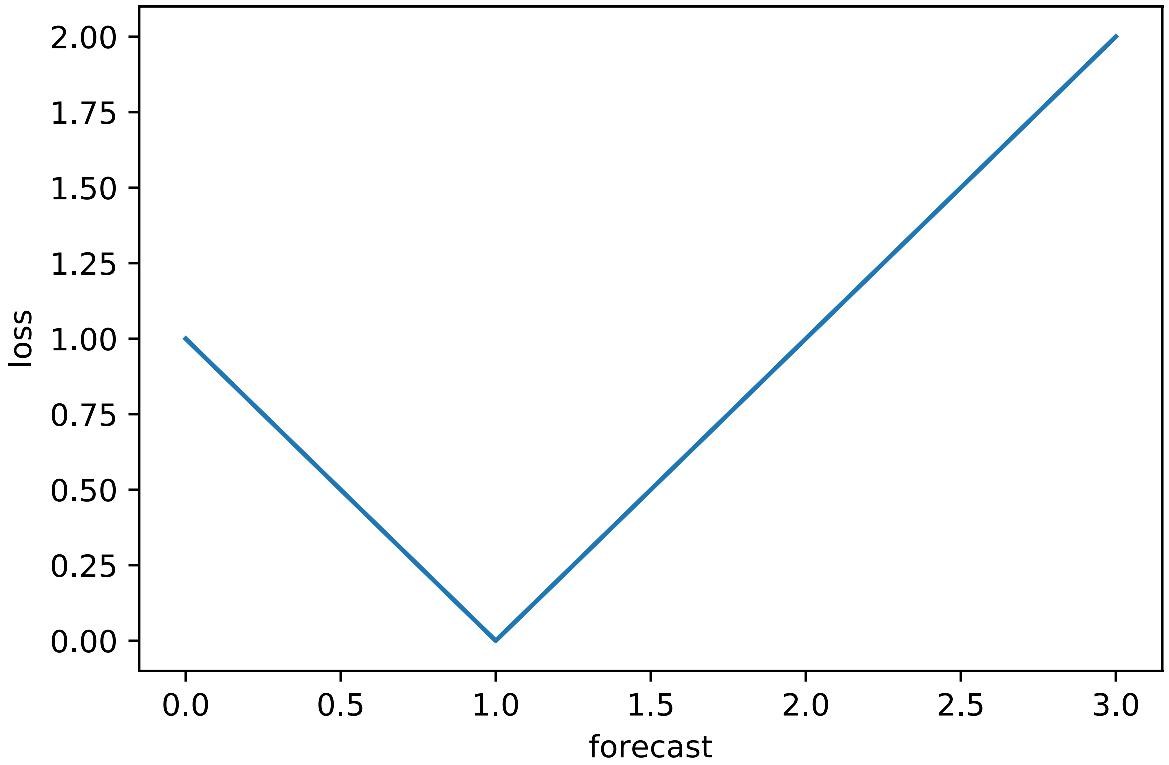
MAPE

$$L(y,a) = \left|\frac{y-a}{y}\right|$$

- Особенности (при $a \geq 0$):
- Недопрогноз штрафуется максимум на единицу
- Перепрогноз может быть оштрафован любым числом
- Несимметричная функция потерь (отдаёт предпочтение недопрогнозу)

MAPE

$$L(y, a) = \left|\frac{y - a}{y}\right|$$



SMAPE

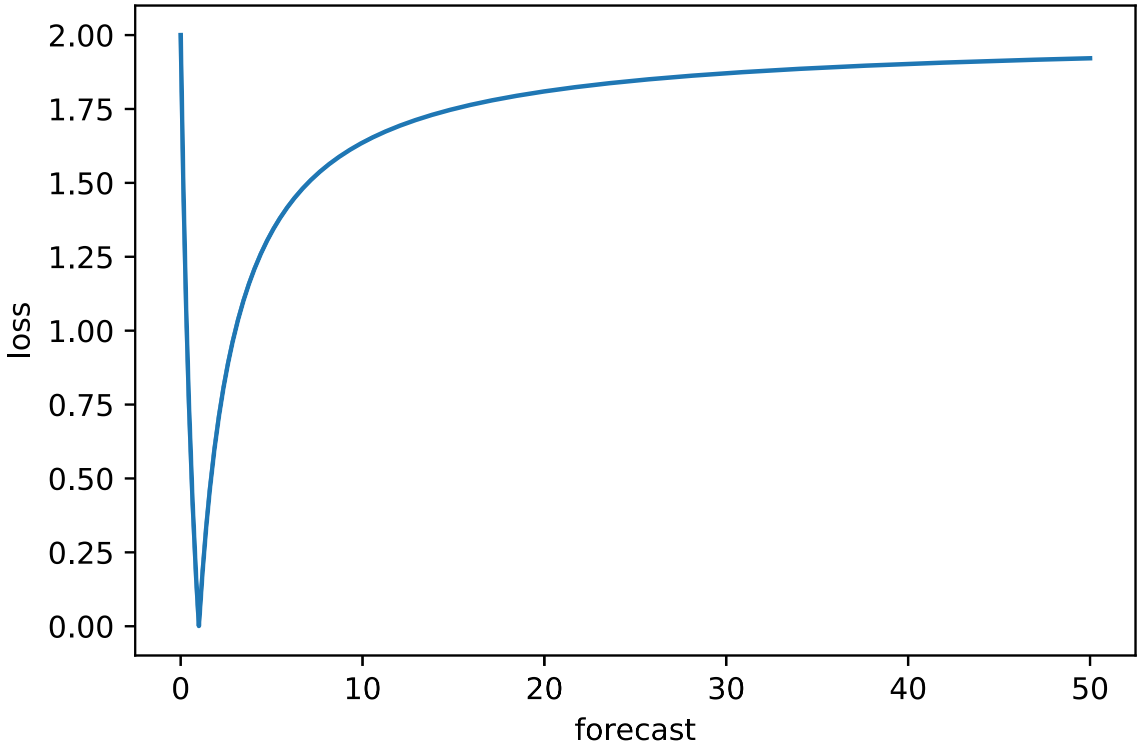
- Symmetric Mean Absolute Percentage Error (симметричный средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \frac{|y - a|}{(|y| + |a|)/2}$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|y_i - a(x_i)|}{(|y_i| + |a(x_i)|)/2}$$

SMAPE

$$L(y,a) = \frac{|y-a|}{(|y|+|a|)/2}$$



Метрики качества классификации

Качество классификации

- Доля неправильных ответов:

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) \neq y_i]$$

Качество классификации

- Доля правильных ответов (accuracy):

$$\frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i]$$

Несбалансированные выборки

- Несбалансированная выборка — объектов одного класса существенного больше
- Пример: предсказание кликов по рекламе
- Пример: медицинская диагностика
- Пример: предсказание оттока клиентов
- Пример: специализированный поиск

Несбалансированные выборки

- Пример:
  - Класс -1: 950 объектов
  - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?

Несбалансированные выборки

- Пример:
  - Класс -1: 950 объектов
  - Класс +1: 50 объектов
- $a(x) = -1$
- Доля правильных ответов: 0.95
- Почему результат нас не устраивает?
- Модель не несёт экономической ценности
- Цены ошибок неравнозначны

Несбалансированные выборки

- q_0 — доля объектов самого крупного класса
- Для разумных алгоритмов:

$$\text{accuracy} \in [q_0, 1]$$

- Если получили большой accuracy — посмотрите на баланс классов

Улучшение метрики

- Два алгоритма
- Доли правильных ответов: r_1 и r_2
- Абсолютное улучшение: $r_2 - r_1$
- Относительное улучшение: $\frac{r_2 - r_1}{r_1}$

Улучшение метрики

- $r_1 = 0.8$
- $r_2 = 0.9$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 12.5\%$

- $r_1 = 0.5$
- $r_2 = 0.75$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 50\%$

- $r_1 = 0.001$
- $r_2 = 0.01$
- $\frac{r_2 - r_1}{r_1} = 900\%$

Цены ошибок

- Пример: кредитный скоринг
- Модель 1:
  - 80 кредитов вернули
  - 20 кредитов не вернули
- Модель 2:
  - 48 кредитов вернули
  - 2 кредита не вернули
- Кто лучше?

Цены ошибок

- Что хуже?
  - Выдать кредит «плохому» клиенту
  - Не выдать кредит «хорошему» клиенту
- Доля верных ответов не учитывает цены ошибок

Матрица ошибок

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	True Positive (TP)	False Positive (FP)
$a(x) = -1$	False Negative (FN)	True Negative (TN)

Матрица ошибок

- Модель $a_1(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- Модель $a_2(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

Точность (precision)

- Можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?

$$\text{precision}(a, X) = \frac{TP}{TP + FP}$$

Точность (precision)

- Модель $a_1(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{precision}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{precision}(a_2, X) = 0.96$

Полнота (recall)

- Как много положительных объектов находит классификатор?

$$\text{recall}(a, X) = \frac{TP}{TP + FN}$$

Полнота (recall)

- Модель $a_1(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	80	20
$a(x) = -1$	20	80

- $\text{recall}(a_1, X) = 0.8$

- Модель $a_2(x)$:

	$\boldsymbol{y = 1}$	$\boldsymbol{y = -1}$
$a(x) = 1$	48	2
$a(x) = -1$	52	98

- $\text{recall}(a_2, X) = 0.48$

Антифрод

- Классификация транзакций на нормальные и мошеннические
- Высокая точность, низкая полнота:
  - Редко блокируем нормальные транзакции
  - Пропускаем много мошеннических
- Низкая точность, высокая полнота:
  - Часто блокируем нормальные транзакции
  - Редко пропускаем мошеннические

Кредитный скоринг

- Неудачных кредитов должно быть не больше 5%
- Ограничение: $\mathrm{precision}(a, X) \geq 0.95$
- Максимизируем полноту

Медицинская диагностика

- Надо найти не менее 80% больных
- Ограничение: $\text{recall}(a, X) \geq 0.8$
- Максимизируем точность

Несбалансированные выборки

- $\text{accuracy}(a, X) = 0.99$
- $\text{precision}(a, X) = 0.33$
- $\text{recall}(a, X) = 0.1$

	$y = 1$	$y = -1$
$a(x) = 1$	10	20
$a(x) = -1$	90	10000

Совмещение точности и полноты

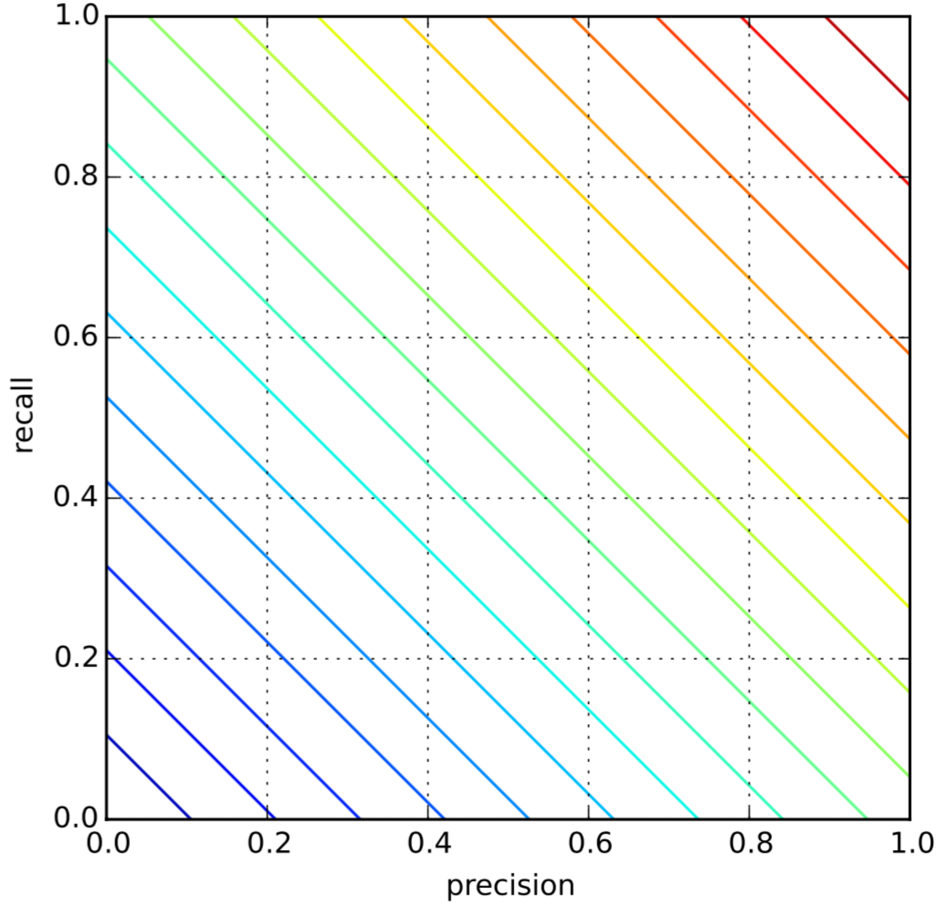
Точность и полнота

- Точность — можно ли доверять классификатору при $a(x) = 1$?
- Полнота — как много положительных объектов находит $a(x)$?

- Оптимизировать две метрики одновременно очень неудобно
- Как объединить?

Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

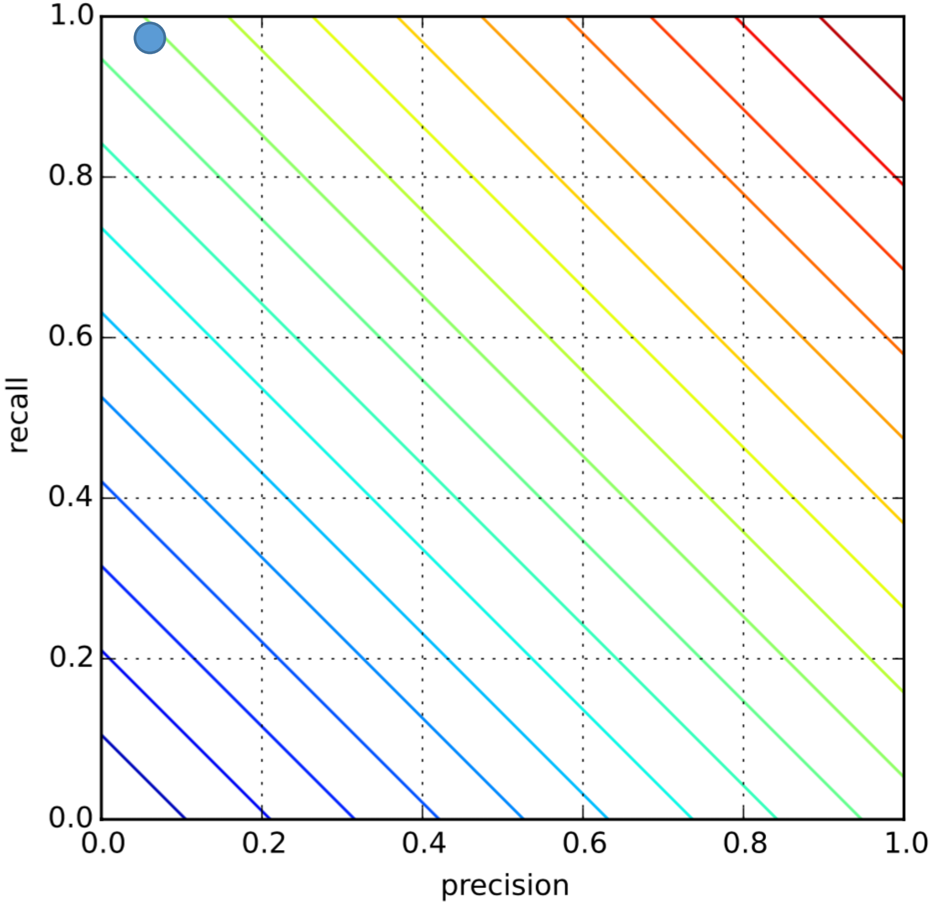


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

- $\text{precision} = 0.1$
- $\text{recall} = 1$
- $A = 0.55$

- Плохой алгоритм

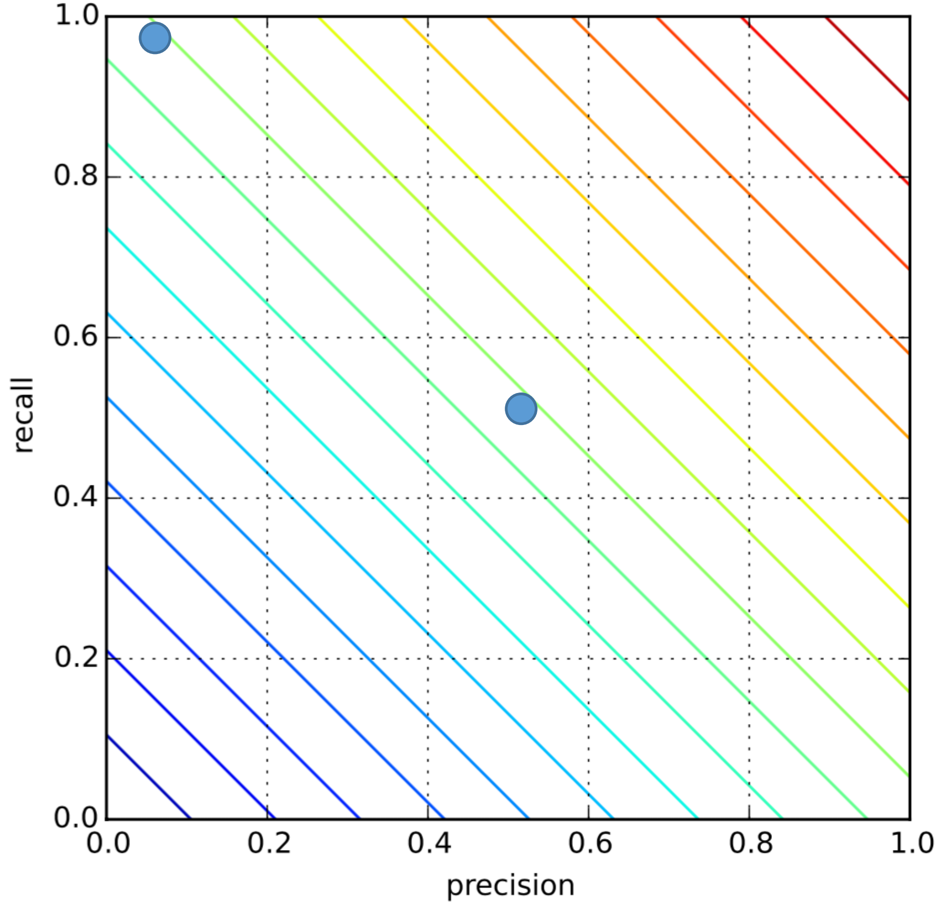


Арифметическое среднее

$$A = \frac{1}{2}(\text{precision} + \text{recall})$$

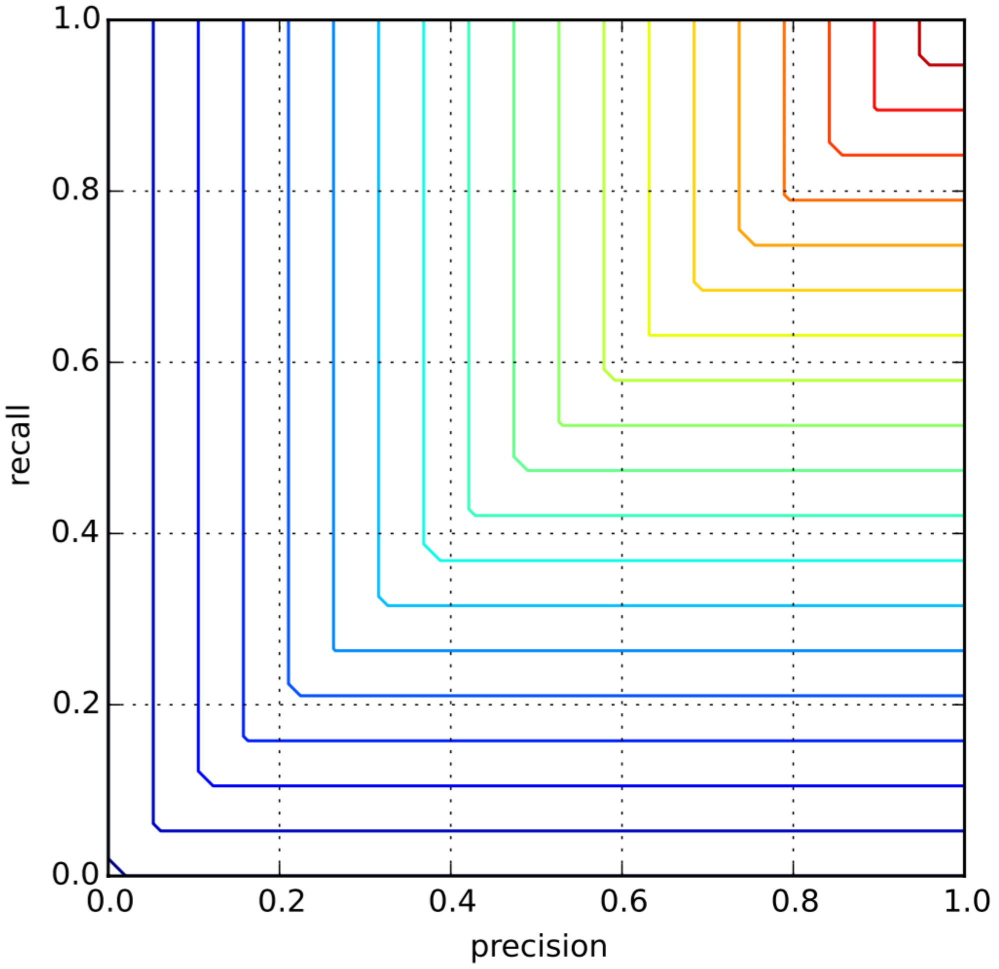
- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $A = 0.55$

- Нормальный алгоритм
- Но качество такое же, как у плохого



Минимум

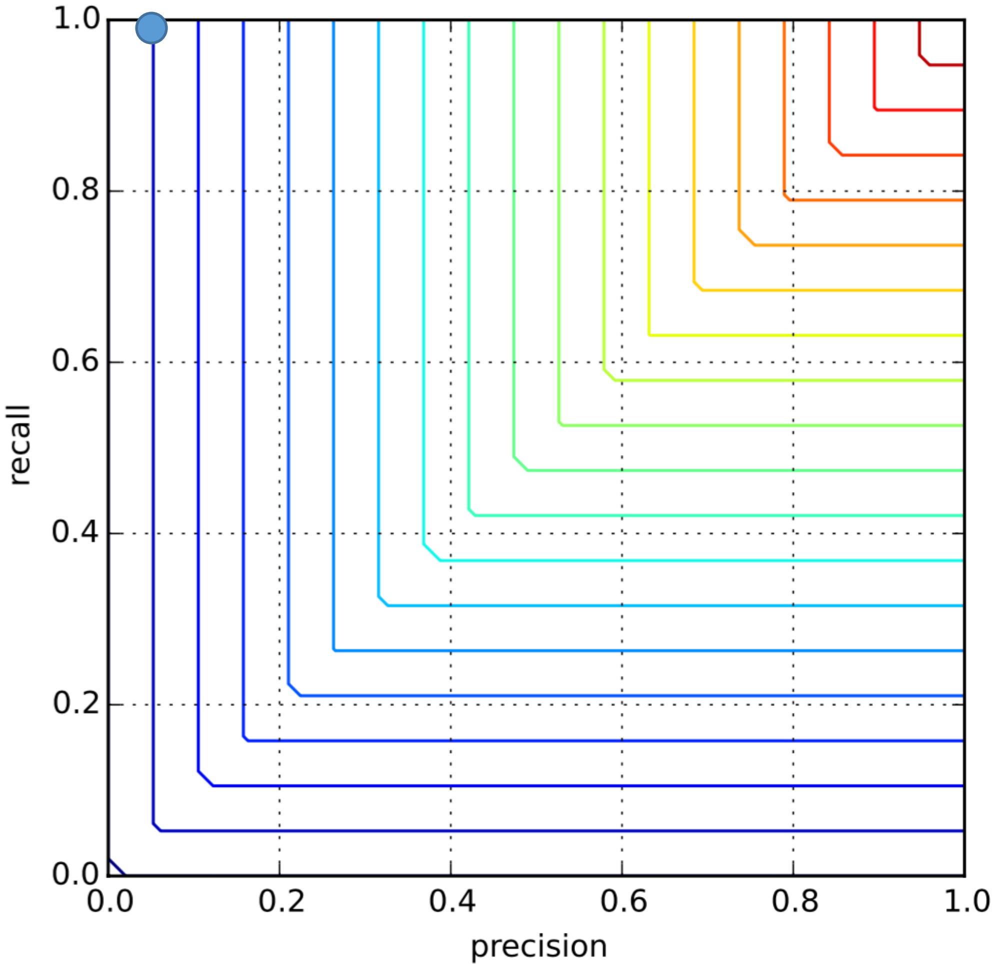
$$M = \min(\text{precision}, \text{recall})$$



Минимум

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

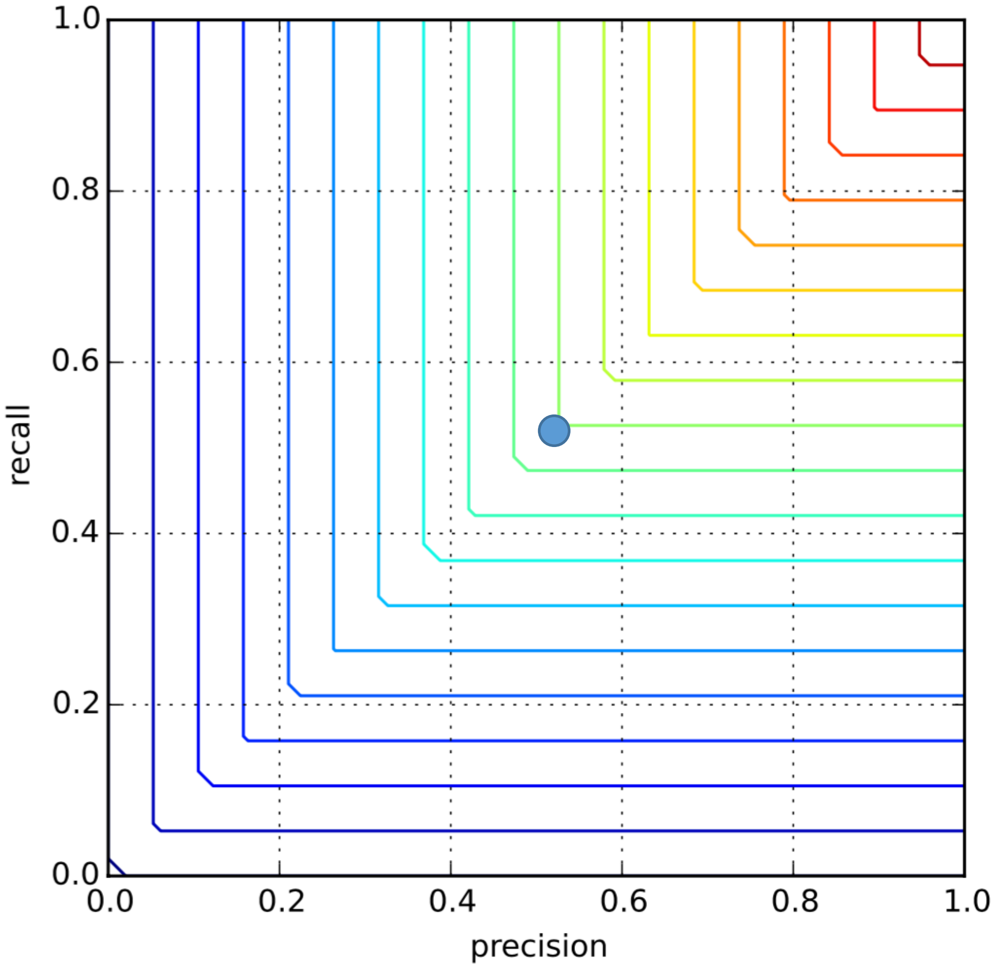
- $\text{precision} = 0.05$
- $\text{recall} = 1$
- $M = 0.05$



Минимум

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

- $\text{precision} = 0.55$
- $\text{recall} = 0.55$
- $M = 0.55$



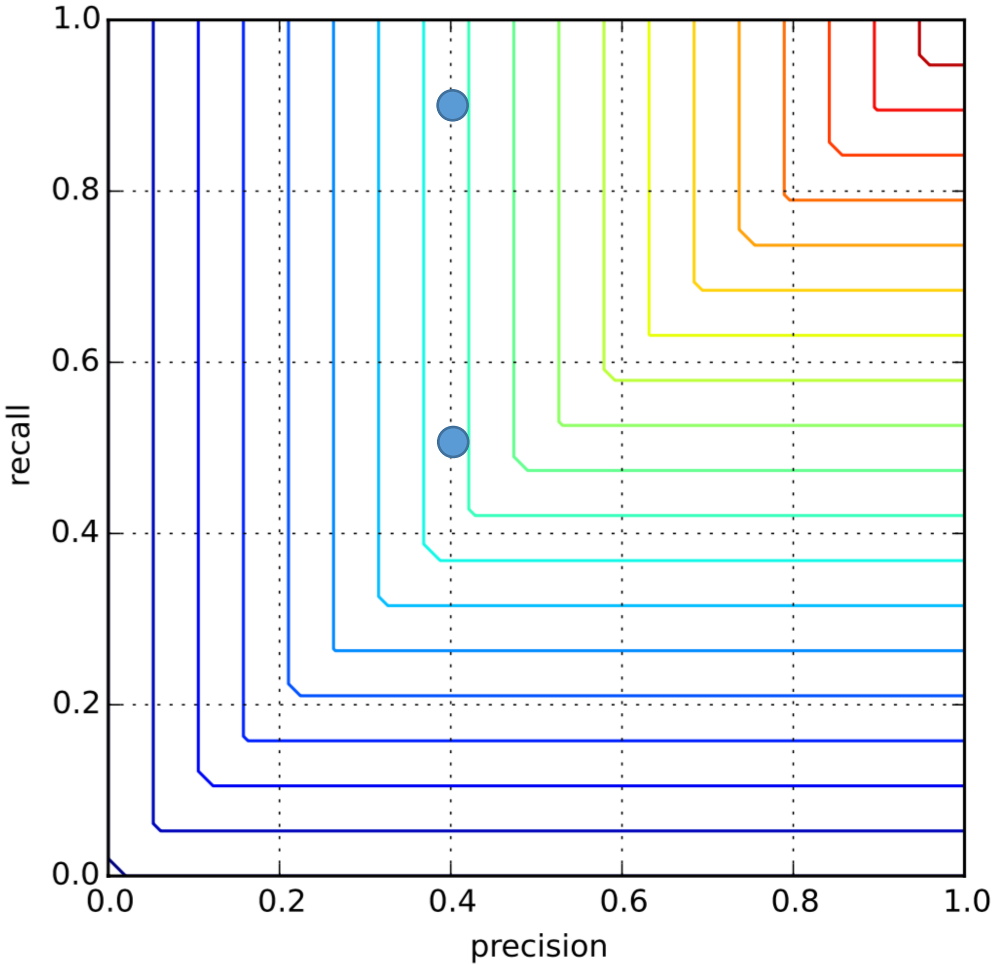
Минимум

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

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $M = 0.4$

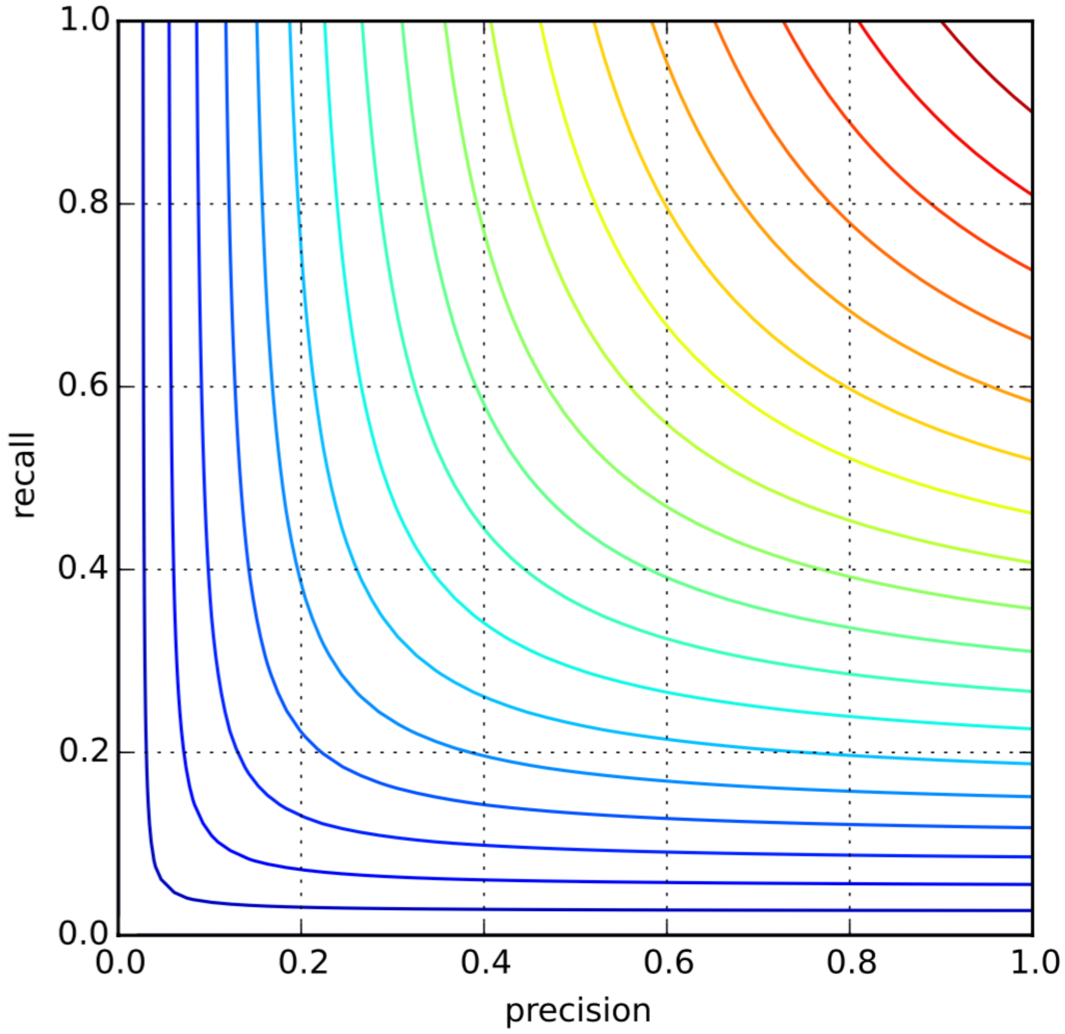
- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.4$

- Но второй лучше!



F-мера

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

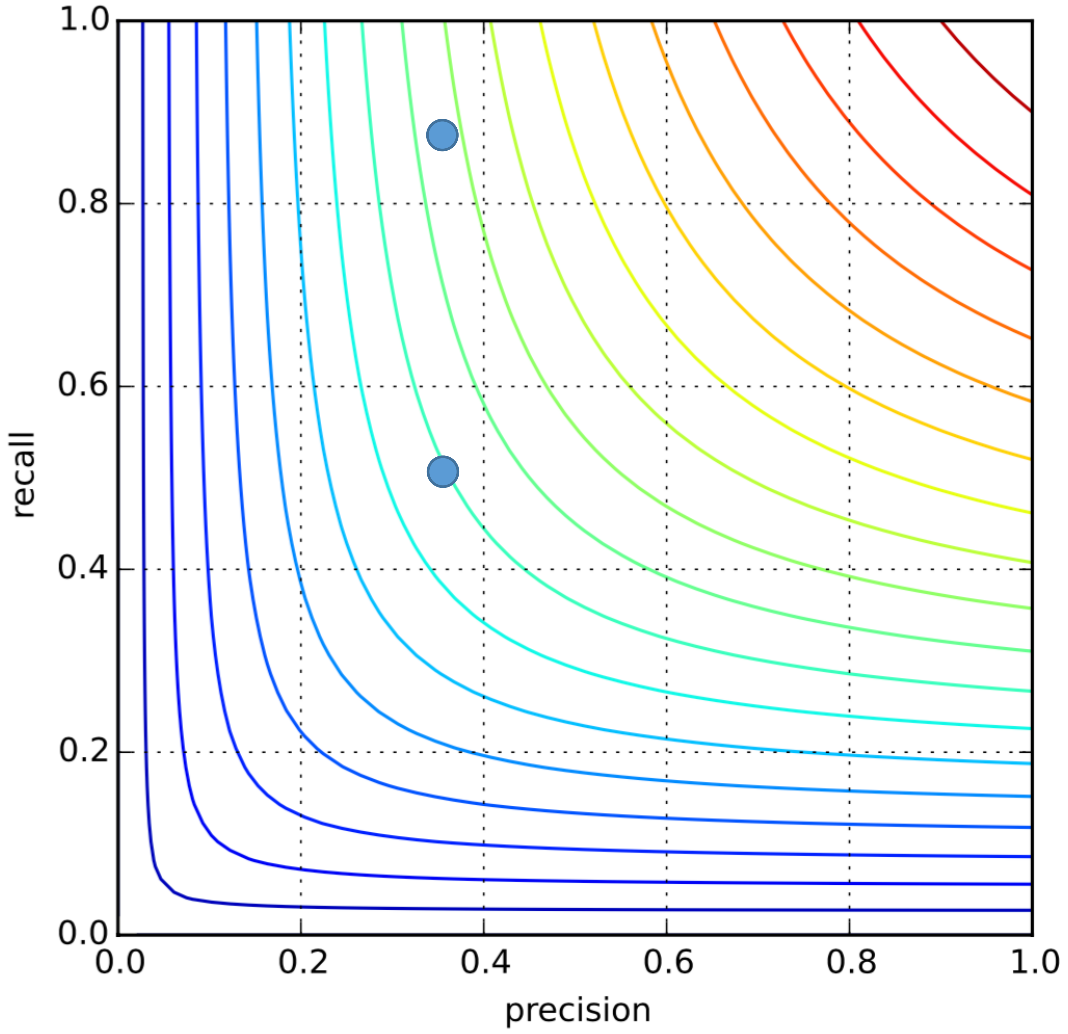


F-мера

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

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.5$
- $F = 0.44$

- $\text{precision} = 0.4, \text{recall} = 0.9$
- $M = 0.55$



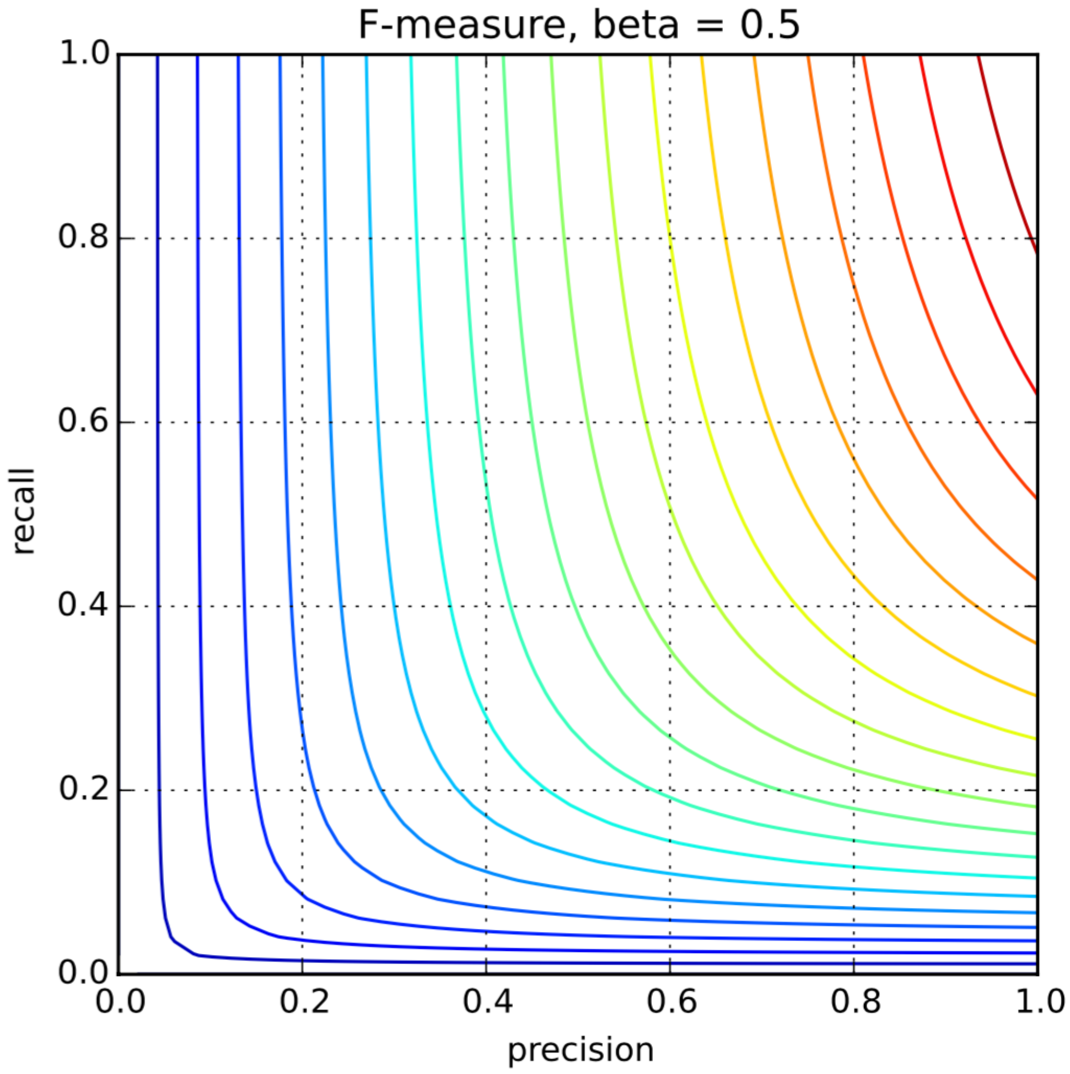
F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

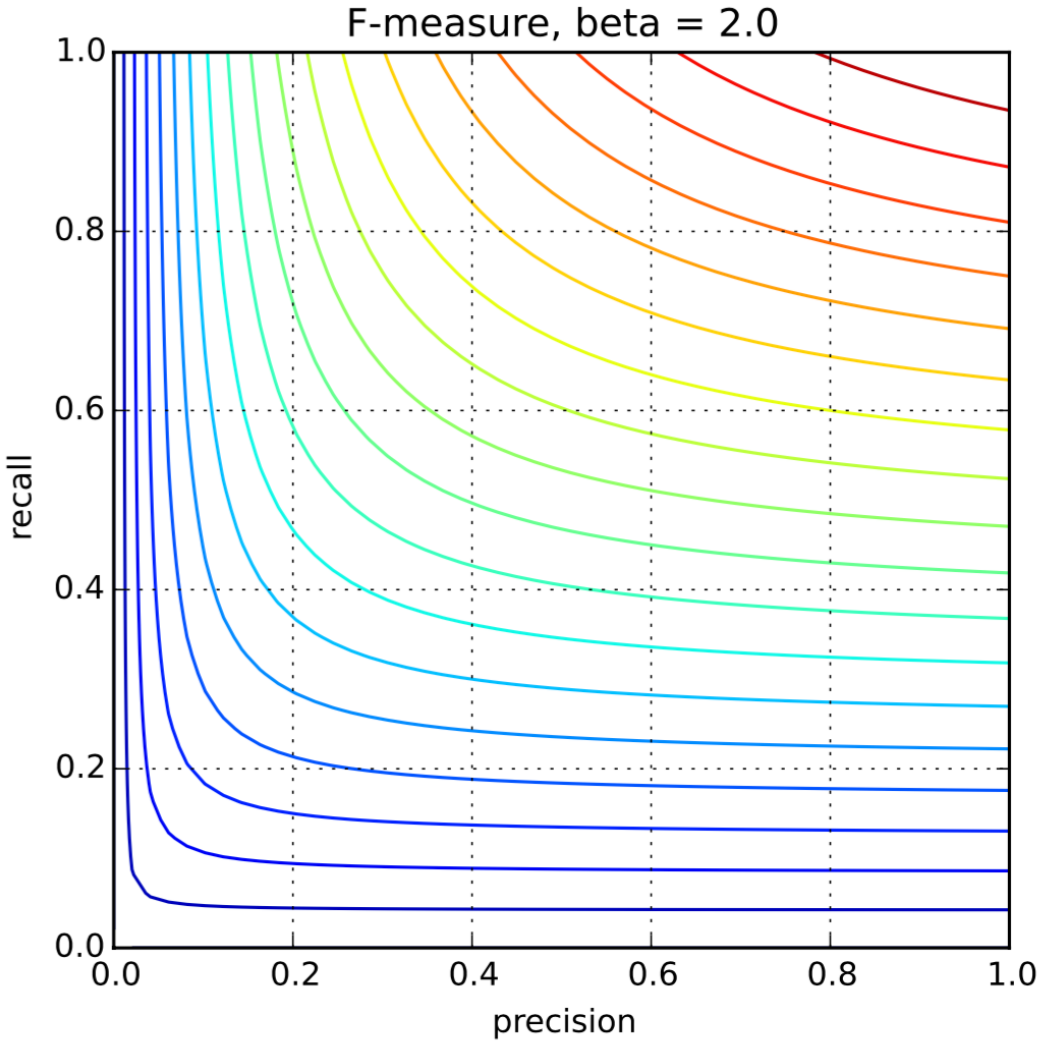
- $\beta = 0.5$
- Важнее точность



F-мера

$$F_\beta = (1+\beta^2)\frac{\text{precision} * \text{recall}}{\beta^2 * \text{precision} + \text{recall}}$$

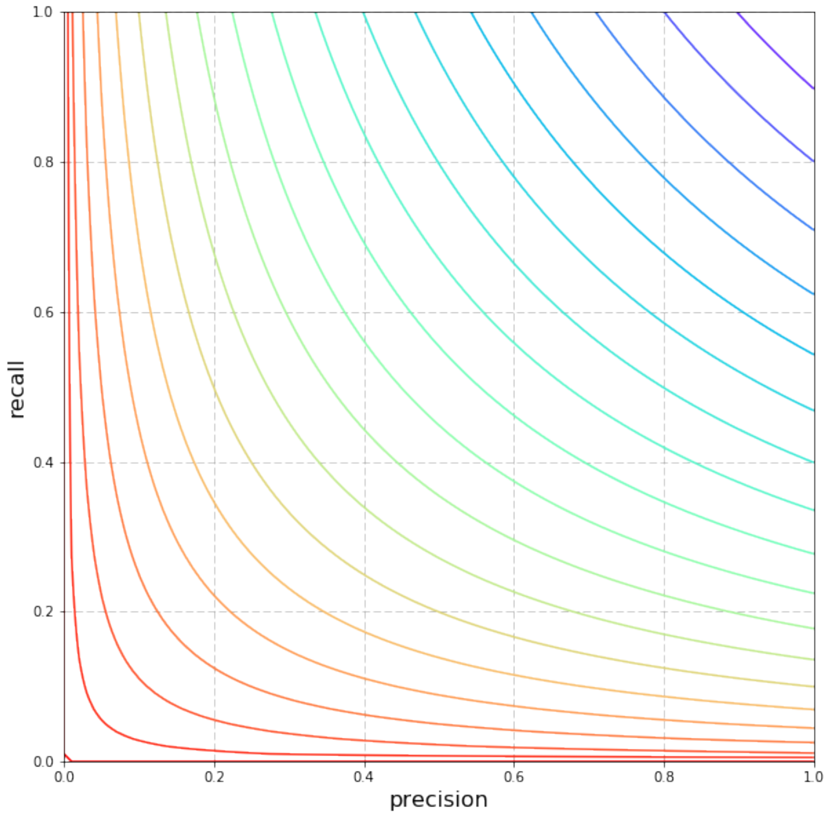
- $\beta = 2$
- Важнее полнота

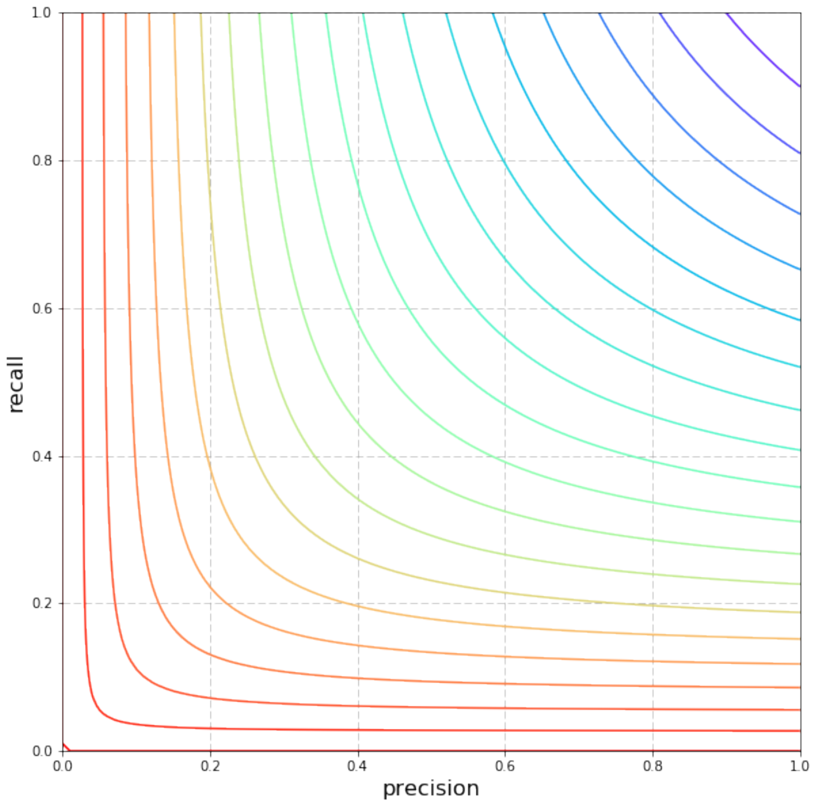


Геометрическое среднее

$$G = \sqrt{\text{precision} * \text{recall}}$$

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





Геометрическое среднее

$$\mathrm{G} = \sqrt{\mathrm{precision} * \mathrm{recall}}$$

$$F = \frac{2 * \mathrm{precision} * \mathrm{recall}}{\mathrm{precision} + \mathrm{recall}}$$

- $\mathrm{precision} = 0.9$
- $\mathrm{recall} = 0.1$
- $G = 0.3$

- $\mathrm{precision} = 0.9$
- $\mathrm{recall} = 0.1$
- $F = 0.18$