Машинное обучение (Machine Learning)

Неопределенность и калибровка в машинном обучении

Уткин Л.В.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Aleatoric uncertainty

- Aleatoric uncertainty (AU) - стохастическая неопределенность - представляет собой объективную случайность, присущую задаче.
- Примеры - перекрытие классов, шум данных, разброс, неизвестные факторы.
- Она же - вариабельность, изменчивость.
- AU принципиально неустранима и не зависит от познающего субъекта.

Aleatoric uncertainty (пример)

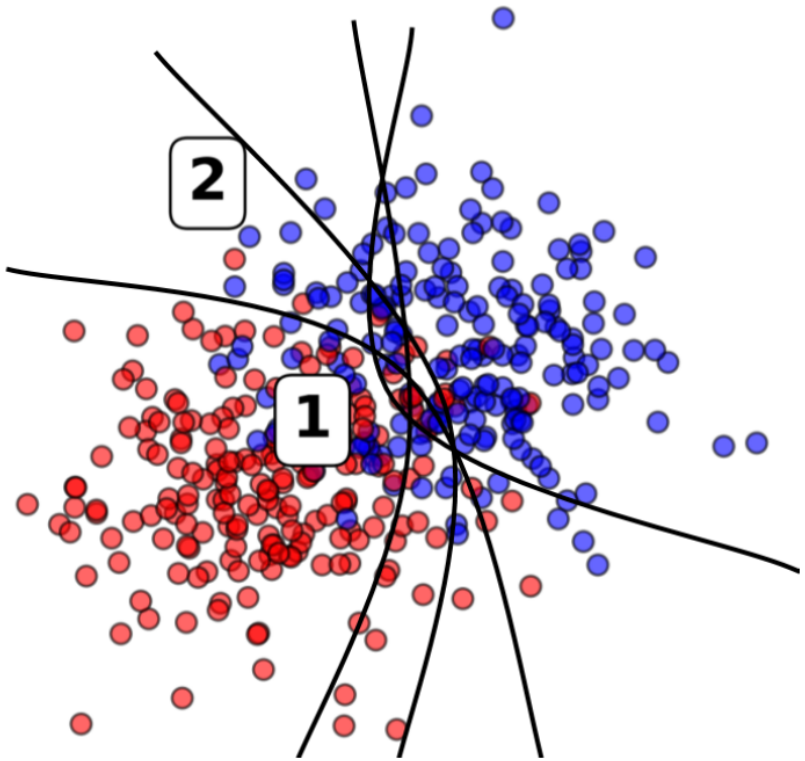
- Типичный пример - подбрасывание монеты: процесс генерации данных в экспериментах такого типа имеет стохастический компонент, который не может быть уменьшен какой-либо дополнительной информацией.
- Следовательно, даже лучшая модель этого процесса сможет дать только вероятности двух возможных исходов, орла и решки, но не даст однозначного ответа.

Aleatoric uncertainty в машинном обучении

- В МО AU интерпретируется как неопределенность из-за неоднозначности или шума в данных.
- В задаче классификации это означает наличие перекрывающихся классов.
- AU НЕ может быть уменьшена наблюдением большего числа примеров из одного источника, а только добавлением допол-ных признаков, улучшением качества признаков и другими процедурами, делающими классы разделимыми.
- Увеличение данных не приводит к снижению AU.
- В медицинских моделях часто сталкиваемся с определенной степенью AU, так как у нас нет полной информации для предсказания будущих событий.

Aleatoric uncertainty (иллюстрация)

область 1 - имеется перекрытие классов



–

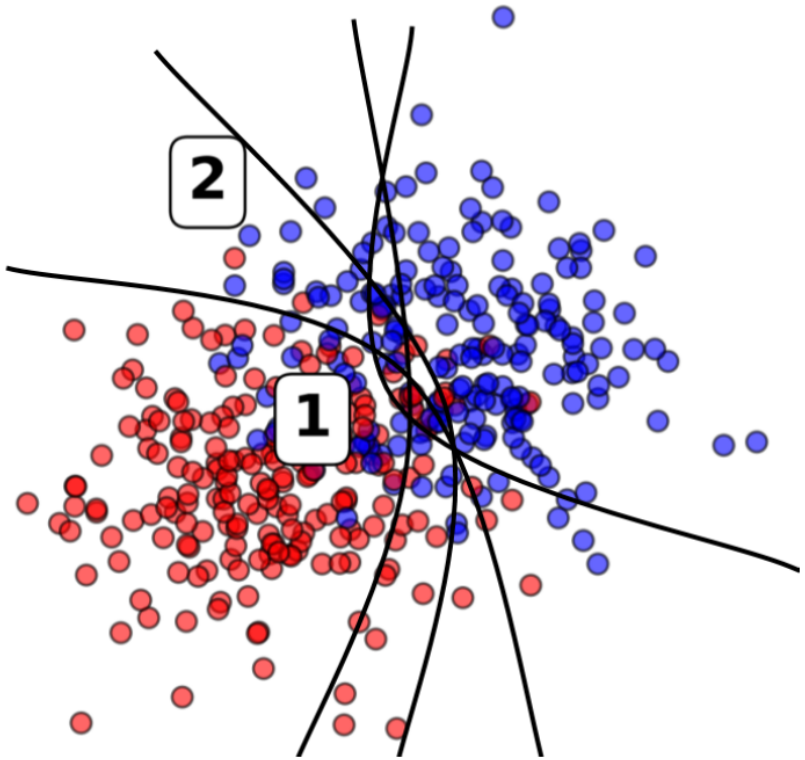
- Epistemic uncertainty (EU)эпистемическая неопределенность обусловлен фактором субъективным - недостаточностью (неполнотой, неточностью, неоднозначностью) имеющихся знаний о свойствах изучаемого объекта.
- EU можно интерпретировать как неопределенность из-за отсутствия знаний об оптимальной модели, вызванное отсутствием данных наблюдения.
- EU высока в регионах, где отсутствуют обучающие данные.

Epistemic uncertainty (пример)

- Эпистемическую неопределенность можно разделить на
  - неопределенность в отношении параметров модели
  - неопределенность в отношении структуры модели (или класса гипотез).
- Ее можно устранить путем наблюдения большего количества данных, поэтому ее также называют уменьшаемой неопределенностью.
- Пока о пациенте не известно ничего важного, врач не будет знать истинного диагноза. Собирая все больше и больше информации в виде медицинских анализов и т. д., это незнание будет исчезать шаг за шагом.

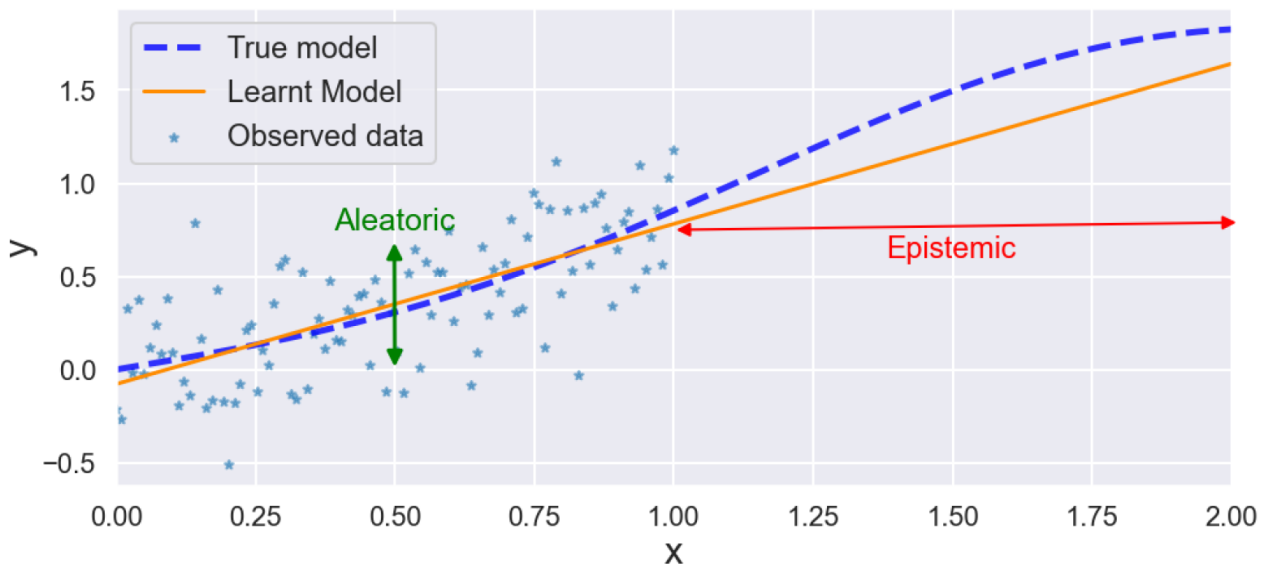
Epistemic uncertainty в машинном обучении (иллюстрация)

2 - неопределенность из-за отсутствия знаний об оптимальной модели (разделяющей функции).



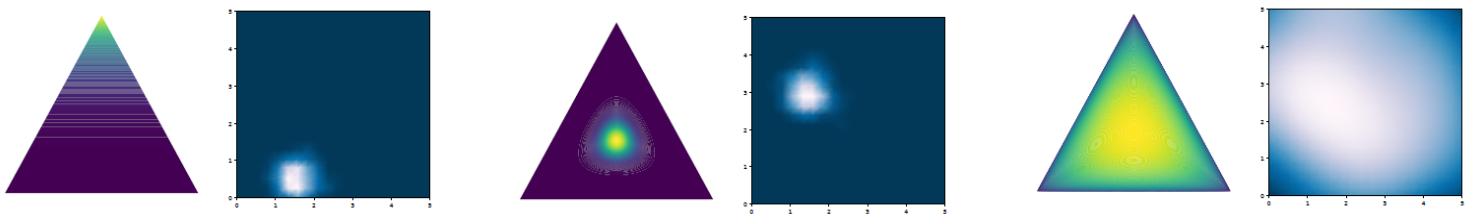
Два типа неопределенности (пример)

- AU - разброс наблюдаемых данных о модели, которая является хорошим приближением к истинной модели в области, в которой мы наблюдали данные.
- EU - модель становится худшим приближением к истинной функции по мере того, как мы удаляемся от наблюдаемых данных при > 1



Два типа неопределенности (еще пример)

Классификация (симплекс) и регрессия (квадрат)



(1) (2) (3)

1 - AU и EU низкие (достоверные прогнозы с низкой дисперсией)
2 - AU высока, EU низка (предсказания концентрируются вокруг центра симплекса или областей с большой дисперсией)
3 - AU и EU высоки

Пример с монетой (1)

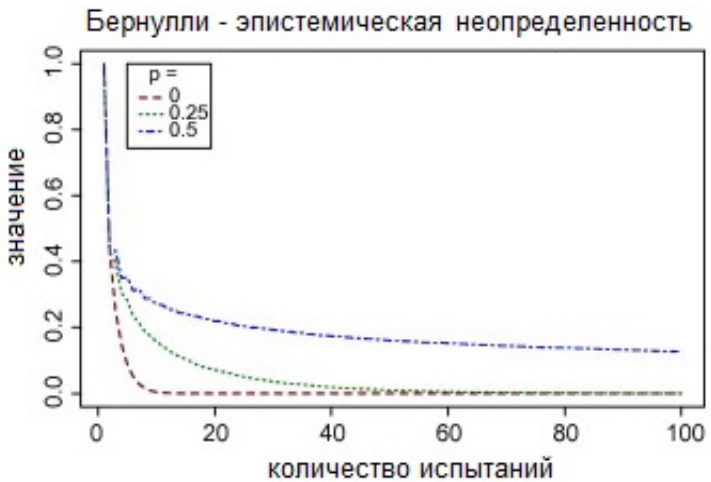
- Последовательность экспериментов Бернулли: монета с неизвестной вер-тью орла $p \in [0; 1]$ подбрасывается много раз и после броска задача в том, чтобы предсказать исход следующего броска.
- Предсказание следующего исхода является неопределенным:
  - вначале это EU, т.к. о p ничего не известно;
  - с течением времени о p узнаем все больше и больше, так что EU становится все меньше;
  - в пределе бесконечного объема выборки EU полностью исчезнет, так как p можно оценить по частоте событий с произвольной точностью;
  - оставшаяся неопределенность - AU.

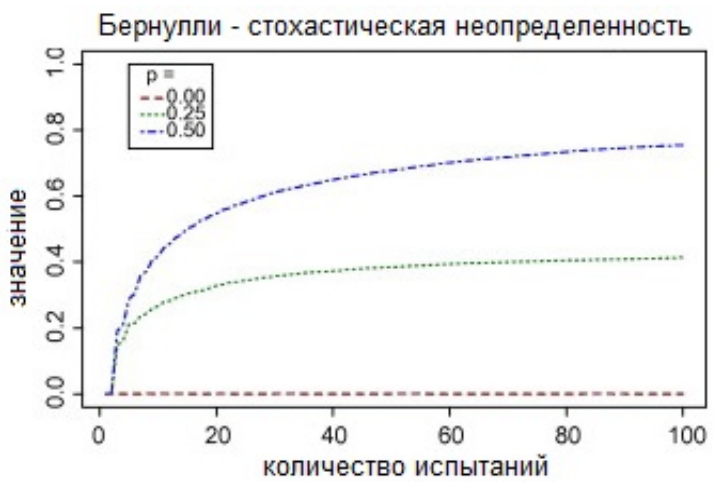
Пример с монетой (2)

- После N испытании и K “орлов” функция правдоподобия

$$L(p) = \binom{N}{K} \cdot p^K \cdot (1-p)^{N-K}.$$

- Неопределенность двух типов (средняя по большому кол-ву повторений) в зависимости от N.





Пример с монетой (3)

- Чем ближе p к $1/2$, тем медленнее исчезает EU и тем больше AU, которая в конечном итоге остается.
- Случай $p = 1/2$ особенный, так как он соответствует “полной неопределенности”. Вначале полностью EU становится полностью AU при $N \to \infty$.
- Важно, общая величина неопределенности не уменьшается (кривая AU медленно сходится к 1): даже точное знание p не помогает предсказать исход следующего испытания.
- Для $p \neq 1/2$ иначе, так как даже приблизительное знание p поможет сделать лучше, чем случайное угадывание.

Достоверность предсказания (1)

- Классификация: есть обучающие данные $(\mathbf{X}, \mathbf{y})$, $\mathbf{x}_i \in \mathbf{X}$ - вектор признаков, $y_i \in \mathbf{Y}$ - класс.
- Цель: найти функцию $\psi(\mathbf{X})$ (классификатор, модель), которая отображает новый пример $\mathbf{x}_0$ в оценку $\widehat{y}_0$, т.е. оценить y_0 для $\mathbf{x}_0$ с учетом $\psi(\mathbf{X})$ из обучающих данных $\mathbf{X}$.
- Для $\mathbf{x}_0$ *оцениваем достоверность предсказания* как

$$C\left(\widehat{y}_0 = y_0 \mid \mathbf{x}_0, \psi(\mathbf{x}_0), \mathbf{X}\right) = \widehat{p}_0,$$

где $\widehat{p}_0$ - оценка достоверности предсказания $\widehat{y}_0$.

Достоверность предсказания (2)

- Для $\mathbf{x}_0$ *оцениваем достоверность предсказания* как

$$C\left(\widehat{y}_0 = y_0 \mid \mathbf{x}_0, \psi(\mathbf{x}_0), \mathbf{X}\right) = \widehat{p}_0,$$

  где $\widehat{p}_0$ - оценка достоверности предсказания $\widehat{y}_0$.
- Модель оценивания достоверности учитывает насколько информативными являются обучающие данные при попытке классифицировать пример $\mathbf{x}_0$. Пример учета этого - ядро $K(\mathbf{x}_0, \mathbf{X})$ как мера сходства между точкой $\mathbf{x}_0$ и $\mathbf{X}$.
- Если $\mathbf{x}_0$ не похож на то, что было в $\mathbf{X}$, мы не можем быть уверены в $\widehat{y}_0$.

Калибровка (1)

- Калибровка модели оценки достоверности C - это степень, с которой оценки соответствуют эмпирической точности классификатора, т.е. если модель C оценивает вероятность в 75%, это должно быть правильным примерно в 75% случаев.
- Модель C *идеально калибрована*, если это верно для всех оцениваемых вероятностей, $p \in [0, 1]$. Если это не так, то мы говорим, что модель либо *слишком достоверна (over-confident)*, либо *недостаточно достоверна (under-confident)*: т.е. если модель C оказывается верной реже, чем $\widehat{p}_0$, то говорят, что она over-confident, и наоборот.
- Формально:

$$\Pr\left(\widehat{y}_i = y_i \mid \widehat{p}_i = p_i\right) = p \in [0, 1].$$

Калибровка (2)

- Т.к. истинная вероятность является неизвестной случайной величиной, обычно невозможно точно ее вычислить, поэтому стандартный метод заключается в преобразовании непрерывного доверительного пространства в набор из n дискретных интервалов, B_n (например, $[0, 5, 0, 6, 0, 7, 0, 8, 0, 9, 1.]$) и сравнении средней оценки достоверности $\overline{p}$ каждого интервала с эмпирической точностью интервала, т.е.

$$Acc(B_n) = \frac{1}{|B_n|} \sum_{i \in B_n} \delta_{\widehat{y}_i, y_i},$$

где

$$\delta_{\widehat{y}_i, y_i} = \begin{cases} 1, & \widehat{y}_i = y_i, \\ 0, & \text{иначе}, \end{cases} \qquad C(B_n) = \frac{1}{|B_n|} \sum_{i \in B_n} \overline{p}_i$$

Калибровка (3)

- Модель C идеально калибрована, если $C(B_n) = Acc(B_n)$ для каждого B_n.
- Показатель ошибки калибровки: ожидаемая ошибка калибровки (ECE). Эта метрика измеряет разницу между прогнозируемыми оценками достоверности и эмпирической точностью каждого интервала. Эти остатки затем объединяются в сумму, взвешенную по количеству баллов в каждой ячейке:

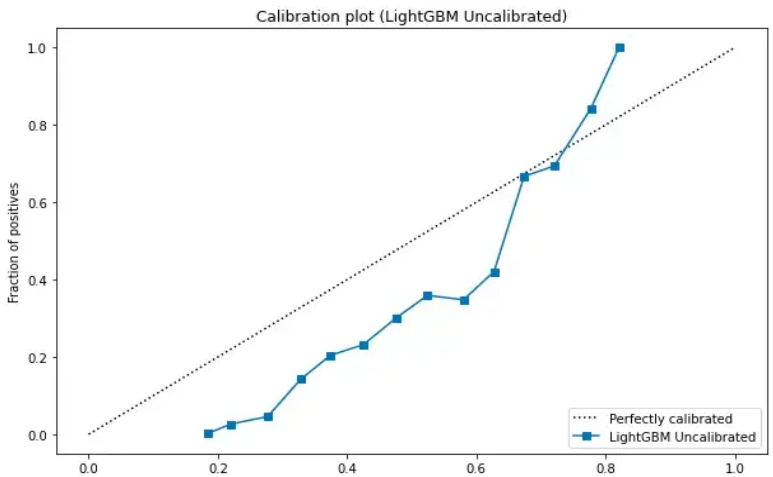
$$ECE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} |C(B_i) - Acc(B_i)| \cdot |B_i|$$

Кривые достоверности (1)

- Кривая достоверности (надежности) - визуальный метод, позволяющий определить, откалибрована ли наша модель.
- Разбиваем $[0; 1]$ на интервалы (пусть 0.1).
- Пусть есть 5 примеров в первом интервале, т. е. есть 5 точек (0.05, 0.05, 0.02, 0.01, 0.02), чей диапазон предсказания модели лежит между 0 и 0.1.
- По оси X откладываем среднее значение этих прогнозов, т.е. 0.03, а по оси Y откладываем эмпирические вероятности, т.е. $Acc(B_1)$. Если из 5 точек для одной точки $\delta_{\widehat{y}_i, y_i} = 1$, то $Acc(B_1) = 1/5$. Следовательно, координаты нашей первой точки равны $(0.03, 0.2)$.

Кривые достоверности (2)

- Повторяем процедуру для всех интервалов и соединяем точки, чтобы сформировать линию.
- Сравниваем с линией $y = x$ и оценивам калибровку:
  - когда точки находятся выше этой линии, модель занижает истинную вероятность,
  - если ниже линии, модель завышает истинную вероятность.



- Модель слишком достоверна примерно до 0.6, а затем недостаточно достоверна после 0.8.

Гистограммный метод для бинарной классификации (1)

- Все неоткалиброванные прогнозы $\widehat{p}_i$ делятся на интервалы $B_1, ..., B_M$.
- Каждому интервалу присваивается калиброванная оценка θ_m, т.е., если $\widehat{p}_i$ ставится в соответствие B_m, то $\widehat{q}_i = \theta_m$.
- Во время тестирования, если предсказание $\widehat{p}_{te}$ попадает в B_m, то откалиброванное предсказание $\widehat{q}_{te} = \theta_m$.
- Точнее, для подходящего выбора M сначала определяем границы интервалов $0 = a_1 \leq a_2 \leq ... \leq a_M + 1 = 1$, где B_m определяется интервалом $(a_m, a_m + 1]$.

Гистограммный метод для бинарной классификации (2)

- Значения θ_i выбираются так, чтобы минимизировать квадратичные потери по интервалам:

$$\min_{\theta_1,\ldots,\theta_M} \sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{1}\left(a_m \leq \widehat{p}_i < a_m + 1\right)\left(\theta_m - y_i\right)^2 .$$

- При фиксированных границах интервалов решение приводит к θ_m, которые соответствуют среднему количеству “правильных” примеров класса в интервале B_m.

Изотонная регрессия для бинарной классификации

- Идея - найти кусочно-постоянную функцию f: $\widehat{q}_i = f(\widehat{p}_i)$ или минимизировать потери $\sum_{i=1}^{n}(f(\widehat{p}_i) - y_i)^2$.
- Это соответствует

$$\min_{\substack{M \\ \theta_1,\ldots,\theta_M \\ a_1,\ldots,a_{M+1}}} \sum_{m=1}^{M}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{1}\left(a_m \leq \widehat{p}_i < a_m + 1\right)\left(\theta_m - y_i\right)^2.$$

при ограничениях

$$0 = a_1 \leq a_2 \leq \ldots \leq a_{M+1} = 1,$$
$$\theta_1 \leq \theta_2 \leq \ldots \leq \theta_M.$$

- Здесь $\theta_1, \ldots, \theta_M$ - значения функции f

Масштабирование Платта (Platt et al., 1999)

- Параметрический подход к калибровке, в отличие от других подходов.
- Невероятностные предсказания классификатора используются в качестве признаков модели логистической регрессии, которая обучается на тестовом наборе для получения вероятностей.
- В нейронных сетях масштабирование Платта определяет скалярные параметры $a, b \in \mathbb{R}$ и выдает $\widehat{q}_i = \sigma(az_i + b)$ в качестве калиброванной вероятности, где $z_i \in \mathbb{R}$ невероятностный выход сети.

Гистограммный метод (обобщение на K>2)

- Один из способов обобщения - рассматривать задачу как K задача “один против всех”.
- Для $k = 1, ..., K$ формируем задачу бинарной калибровки, где метка $\mathbf{1}(y_i = k)$ и предсказанная вероятность

$$\sigma_{Soft\,\max}(\mathbf{z}_i)^{(k)} = \frac{\exp(z_i{}^{(k)})}{\sum_{j=1}^{K} \exp(z_i{}^{(j)})}.$$

- Это дает нам K калибровочных моделей, каждая для определенного класса. При тестирования мы получаем ненормированный вектор вероятностей $[\widehat{q}_i^{(1)}, ..., \widehat{q}_i^{(K)}]$, $\widehat{q}_i^{(k)}$ - калиброванная вероятность для класса k.

Гистограммный метод (обобщение на K>2)

- Это дает нам K калибровочных моделей, каждая для определенного класса. При тестирования мы получаем ненормированный вектор вероятностей $[\widehat{q}_i^{(1)}, ..., \widehat{q}_i^{(K)}]$, $\widehat{q}_i^{(k)}$ - калиброванная вероятность для класса k.
- Предсказание нового класса $\widehat{y}_i'$ - argmax вектора, а новая вероятность $\widehat{q}_i'$ - максимальное значение вектора, нормализованного делением на $\widehat{q}_i^{(1)} + ... + \widehat{q}_i^{(K)}$.
- Это обобщение может быть применено к другим методам

Масштабирование температуры

- Простейшее обобщение масштабирования Платта
- Использует один скалярный параметр (температура) $T > 0$ для всех классов.
- Если дан вектор $\mathbf{z}_i$, новое доверительное предсказание равно

$$\widehat{q}_i = \sigma_{Soft\,\max}(\mathbf{z}_i / T)^{(k)}.$$

- Если $T \to \infty$, то $\widehat{q}_i \to 1/K$. Если $T = 1$, то $\widehat{q}_i = \widehat{p}_i$. Если $T \to 0$, то $\widehat{q}_i = 1$.
- Т.к. параметр T не изменяет максимум функции softmax, предсказание класса $\widehat{y}_i'$ остается неизменным, т.е., масштабирование температуры не влияет на точность модели.

Вопросы

?