«Машинное обучение»

Контроль качества и выбор модели

Александр Дьяконов

12 октября 2021 года

План

Проблема выбора модели (в широком смысле)

Способы контроля

отложенный / скользящий / перекрёстный / бутстреп / по времени

Где используется выбор CV-контроля

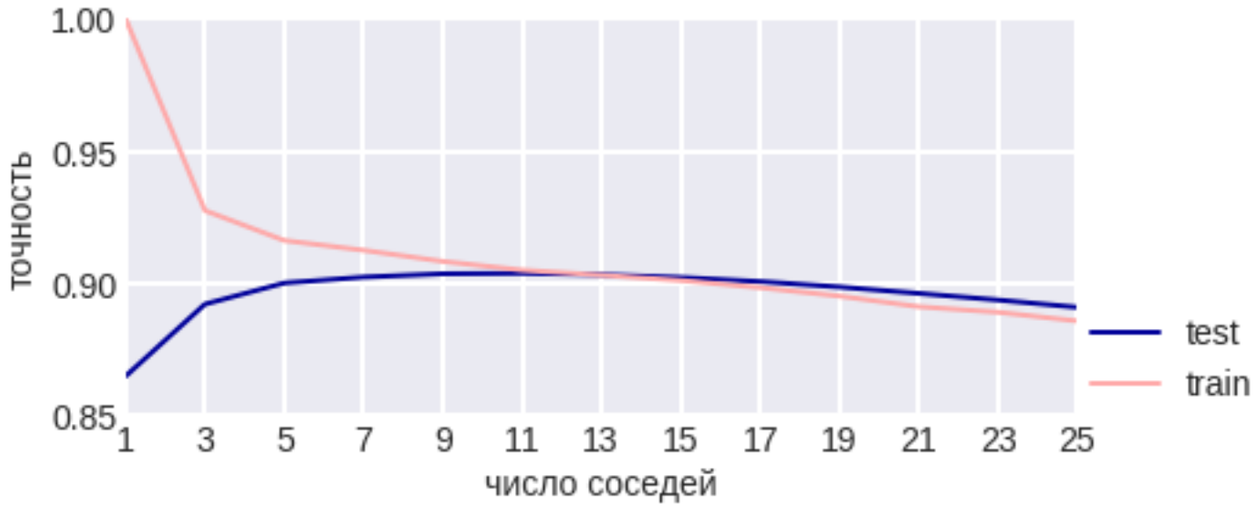
Проблема контроля качества

Ошибка на обучении (train error) и ошибка на контроле (test error) – как правило очень различаются!

Как оценить качество / ошибку алгоритма?

model performance / model error

Нужен способ оценить качество работы (в будущем) алгоритма



Термины

Модель (Model) – параметрическое семейство алгоритмов

алгоритм (параметры, **гиперпараметры**)

(обычные) параметры (model parameters) – настраиваются в результате обучения

гиперпараметры (hyperparameters) – выбираются до обучения экспертно / настраиваются переборно

Моделей очень много… (но конечное число)

- kNN
- NearCentroid
- SVM
- Linear
- NN

…

Алгоритмов тоже… (∞)

1NN, 3NN, 5NN, …

SVM(C=0.27), SVM(C=0.15), …

Проблема выбора модели (Model Selection)

Выбор модели в широком смысле – «пайплайна»

(выбирается с наименьшей ошибкой, см. дальше):

- **выбор модели алгоритмов**
- **выбор гиперпараметров**
- **выбор признаков**
- **выбор способа предобработки данных**

(заполнения пропусков, детектирования и удаления выбросов и т.п.)

MS может быть и для обучения без учителя!

Способы контроля / что используется для MS

Как выбрать «пайплайн»? – очевидно, надо смотреть на качество…

но уже видели, что train error нам не поможет

- **отложенный контроль (held-out data, hold-out set)**
- **скользящий контроль (cross-validation)**
- **бутстреп (bootstrap)**
- **контроль по времени (Out-of-time-контроль)**

Общая схема / термины

Обучающая выборка – Training Set

обучение модели (настройка её параметров)

Валидационная выборка – Validation Set

выбор пайплайна (модели / гиперпараметров / признаков)

иногда: локальный контроль

Тестовая выборка – Test Set

оценка качества алгоритма

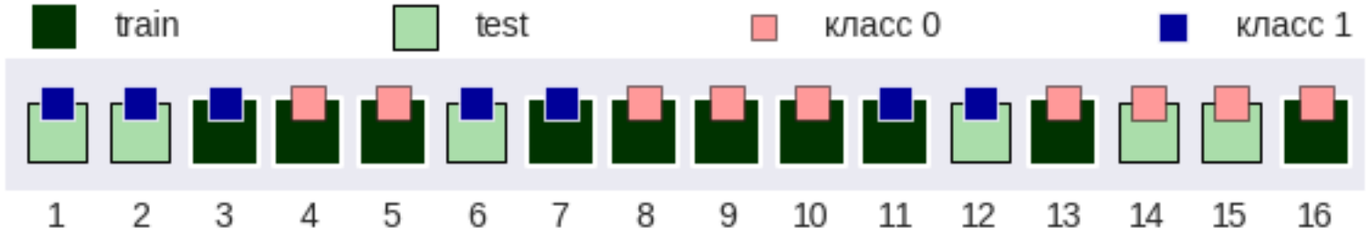
иногда: итоговая оценка

Отложенный контроль (held-out / validation data)

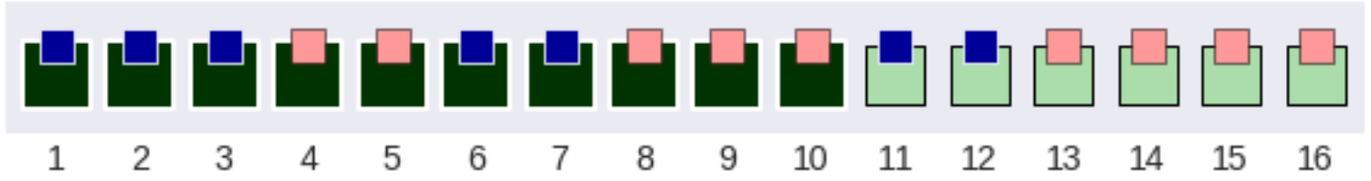
Выборку делим на две части:

- **обучение** – здесь обучение алгоритма
- **отложенный контроль** – здесь оценка качества / выбор алгоритма с наименьшей ошибкой

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.33, random_state=41)
```



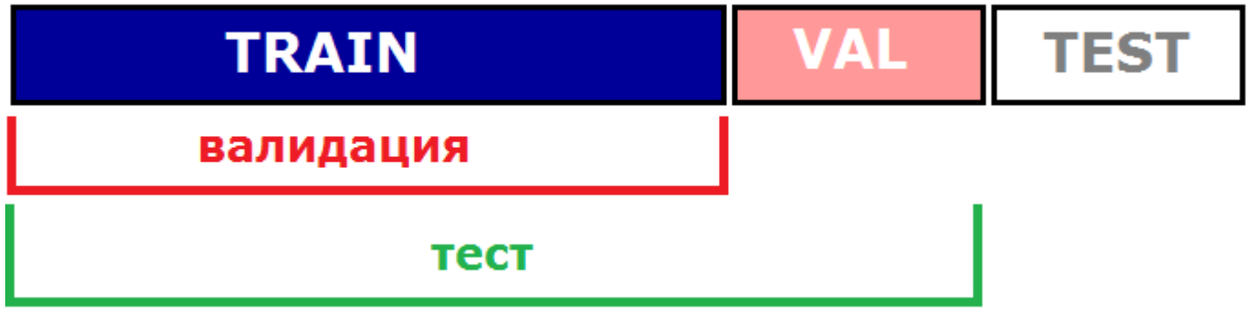

```
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y, test_size=0.33, shuffle=False)
```



Отложенный контроль (held-out / validation data)

Оценка ошибки зависит от конкретной выбранной валидационной (отложенной) выборки,
часто сильно меняется при другом выборе

Если переобучить алгоритм для всех данных, то мы не знаем оценку его ошибки
(в каком-то смысле, неустранимый недостаток)



Отложенный контроль (held-out / validation data)

В какой пропорции делить…

(обычно ~20% от выборки, это не тестовые данные!!!)

Большое обучение

- алгоритм больше похож на обученный по всем данным
- обучающая выборка более репрезентативная

Большой контроль

- оценка качества более надёжна

Random Subsampling Cross-Validation

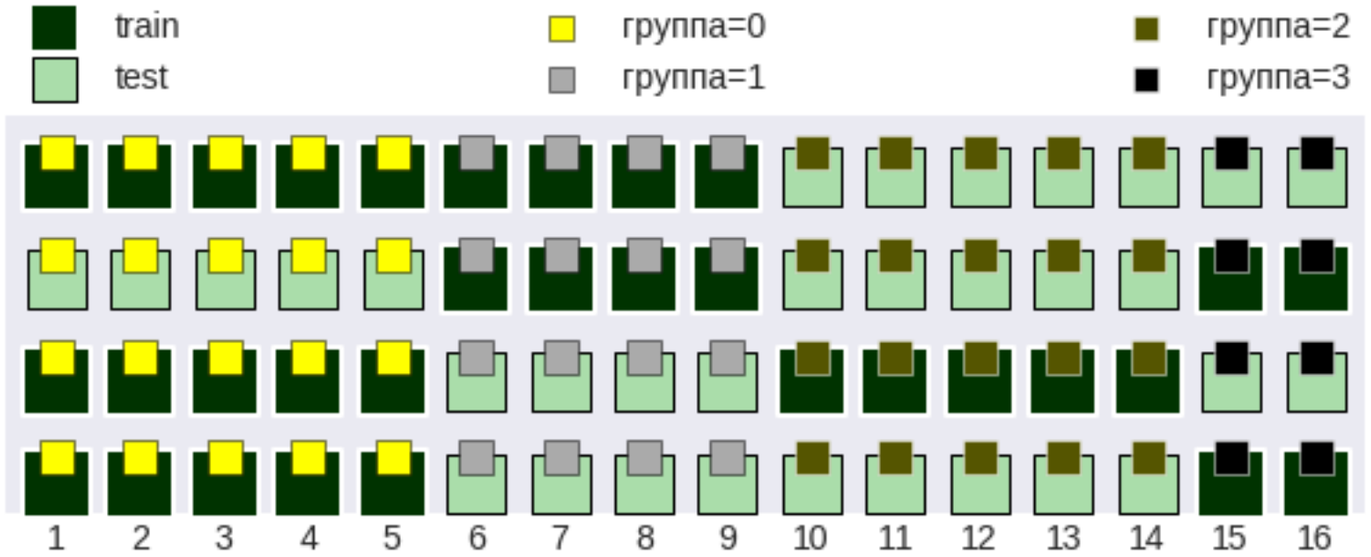
***k* раз случайно выбираем отложенный контроль,**
усредняем ошибки на всех отложенных выборках

```
sklearn.model_selection.ShuffleSplit(n_splits=4,
                                      test_size=0.3,
                                      train_size=None,
                                      random_state=None)
```

Random Subsampling Cross-Validation: без разбиения групп

```
sklearn.model_selection.GroupShuffleSplit(n_splits=4,
                                          test_size=0.3,
                                          train_size=None,
                                          random_state=None)

for t, (itrain, itest) in enumerate(cv.split(x, groups=g)):
    ...
```

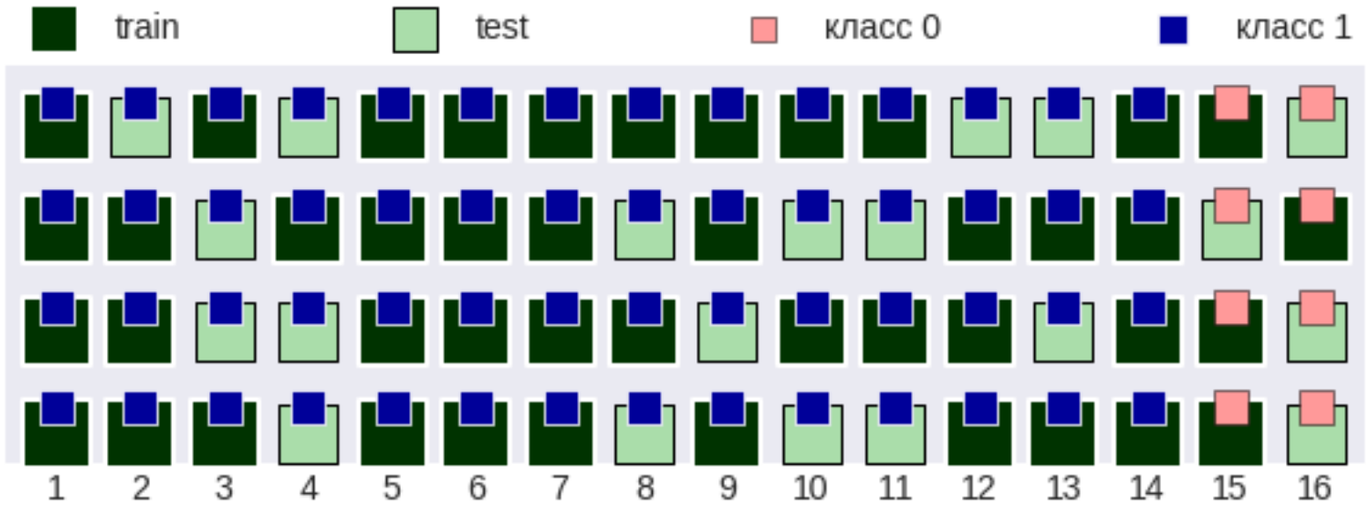


вопрос: когда это нужно?

Random Subsampling Cross-Validation: сохраняя пропорции классов

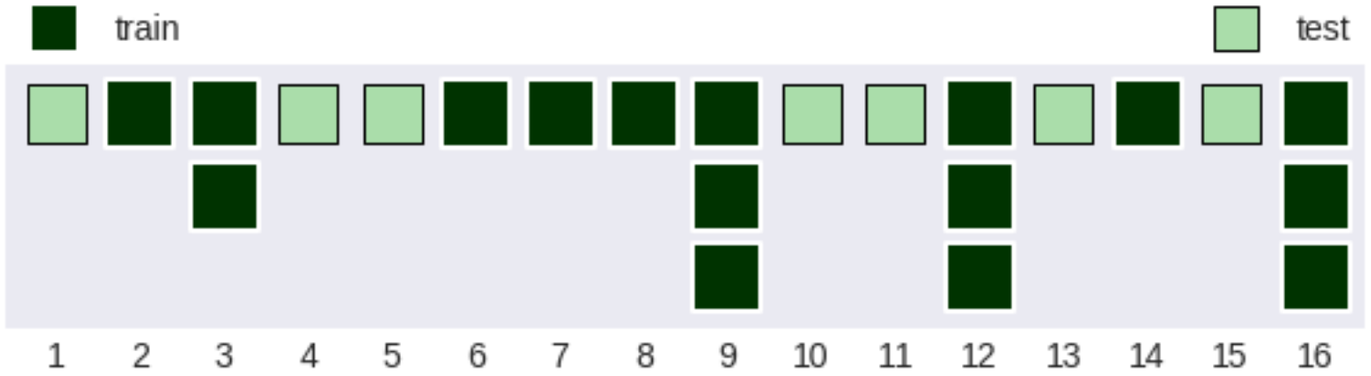
```
sklearn.model_selection.StratifiedShuffleSplit(n_splits=4,
                                               test_size=0.3,
                                               train_size=None,
                                               random_state=None)

for t, (itrain, itest) in enumerate(cv.split(x, groups=y)):
    ...
```



Бутстреп (Bootstrap)

с помощью выбора с возвращением
формируется подвыборка полного объёма *m*,
на которой производится обучение модели
на остальных объектах (которые не попали в обучение) – контроль




```
i_train = [9, 16, 14, 9, 7, 12, 3, 12, 9, 8, 3, 2, 16, 12, 6, 16]
i__test =  [1, 4, 5, 10, 11, 13, 15]
```

Бутстреп (Bootstrap)

В контроль попадает примерно

$$\left(1-\frac{1}{m}\right)^m \approx e^{-1} \approx 0.37 = 37\%$$ **выборки.**

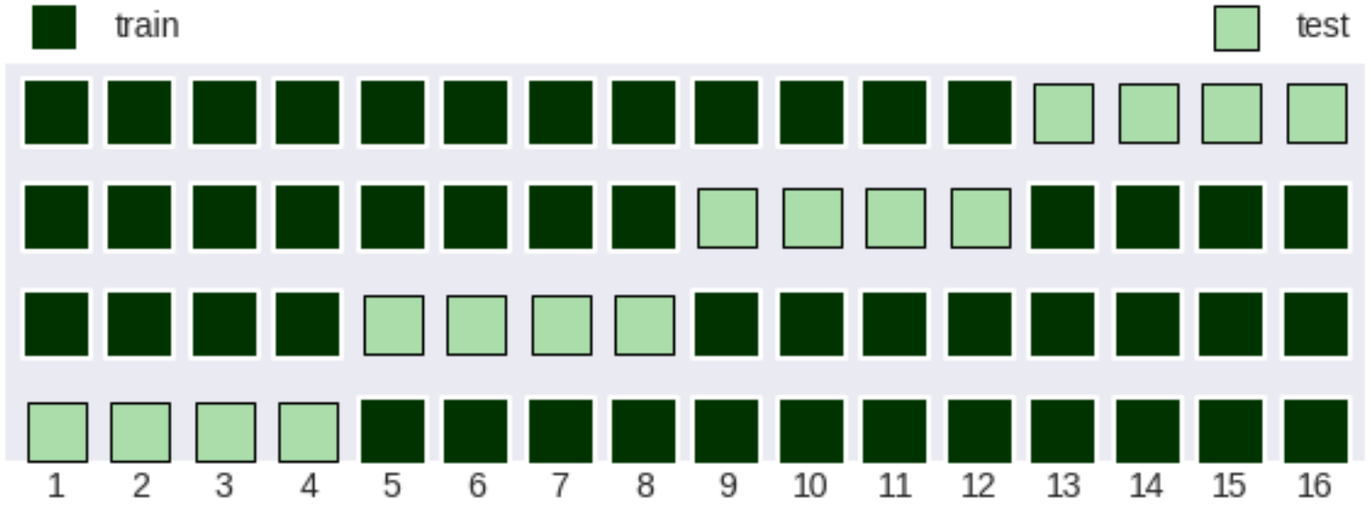
+ модель учится на выборке того же объёма, что и итоговая
(которую мы обучим по всей выборке)
– использует не все данные
– есть дубликаты

+ с точки зрения распределения бутстреп-выборка похожа на исходную

Перекрёстная проверка по фолдам (k-fold cross-validation)

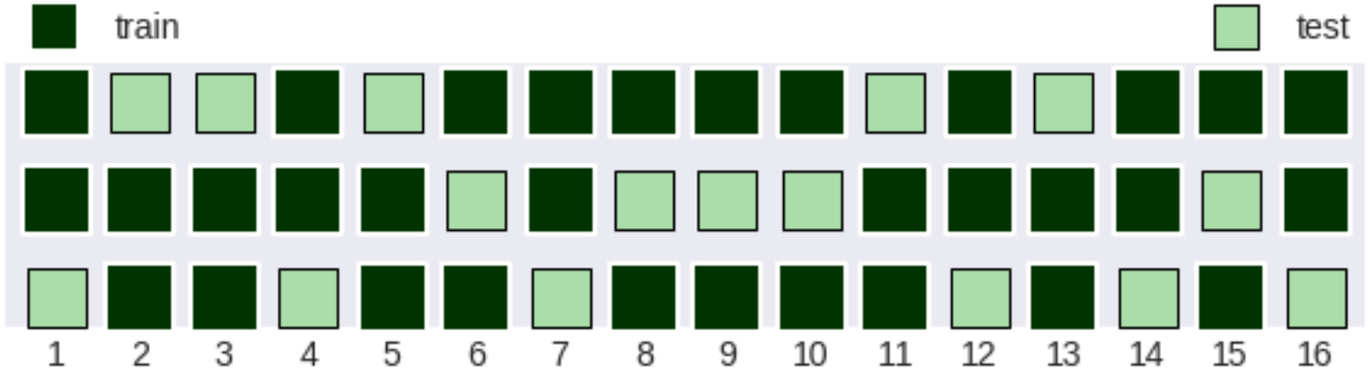
- **Разделить выборку на *k* примерно равных частей**
- **цикл по *i* = 1…*k***
  - ***i*-я часть – для валидации, объединение остальных – для обучения**
- **усреднить *k* ошибок, вычисленных на разных итерациях цикла на валидациях**
  (можно использовать дисперсию для оценки доверия к полученному качеству)

```
sklearn.model_selection.KFold(n_splits='warn',
                              shuffle=False,
                              random_state=None)
```



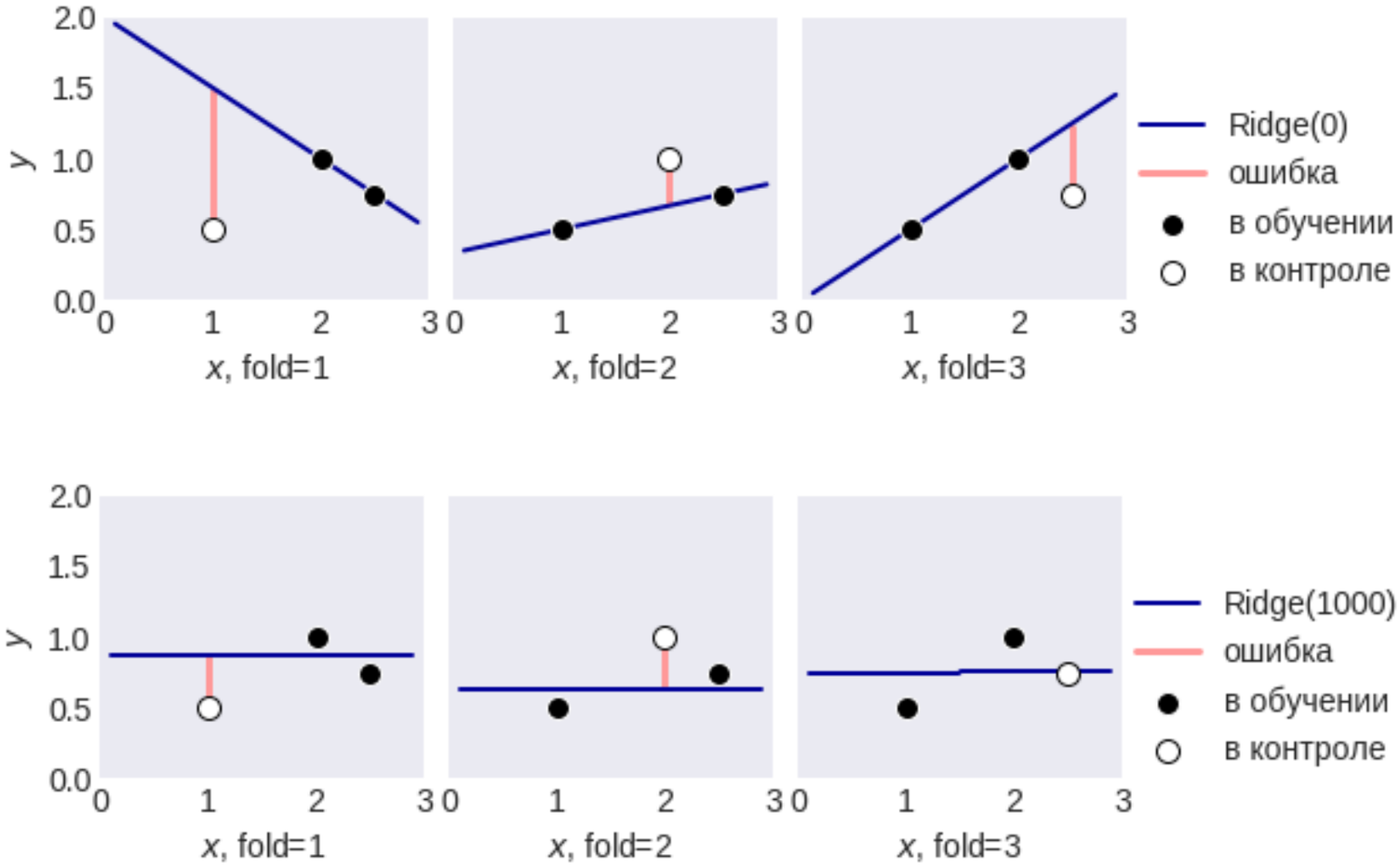
Перекрёстная проверка по фолдам (k-fold cross-validation): с перемешиванием

```
sklearn.model_selection.KFold(n_splits=3, shuffle=True, random_state=None)
```



k-fold CV = k-fold cross-validation

Перекрёстная проверка по фолдам: иллюстрация



Перекрёстная проверка по фолдам: тонкости

«k примерно равных частей»

в последней части может быть меньше объектов, чем в остальных, если k не делит нацело объём выборки

Обычно выбирают k=10

При больших k…

+ надёжнее оценка качества

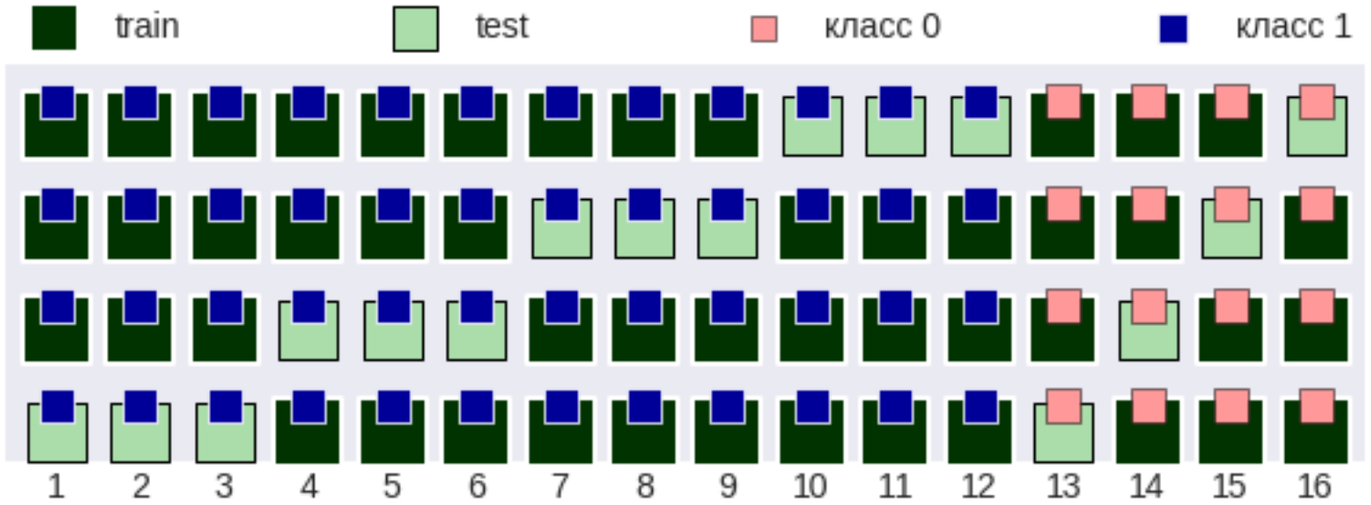
+ обучающая выборка больше походит на все данные

– время контроля возрастает (линейно)!

– не любое качество адекватно оценивается на маленьких подвыборках

Перекрёстная проверка по фолдам: сохранение пропорций классов

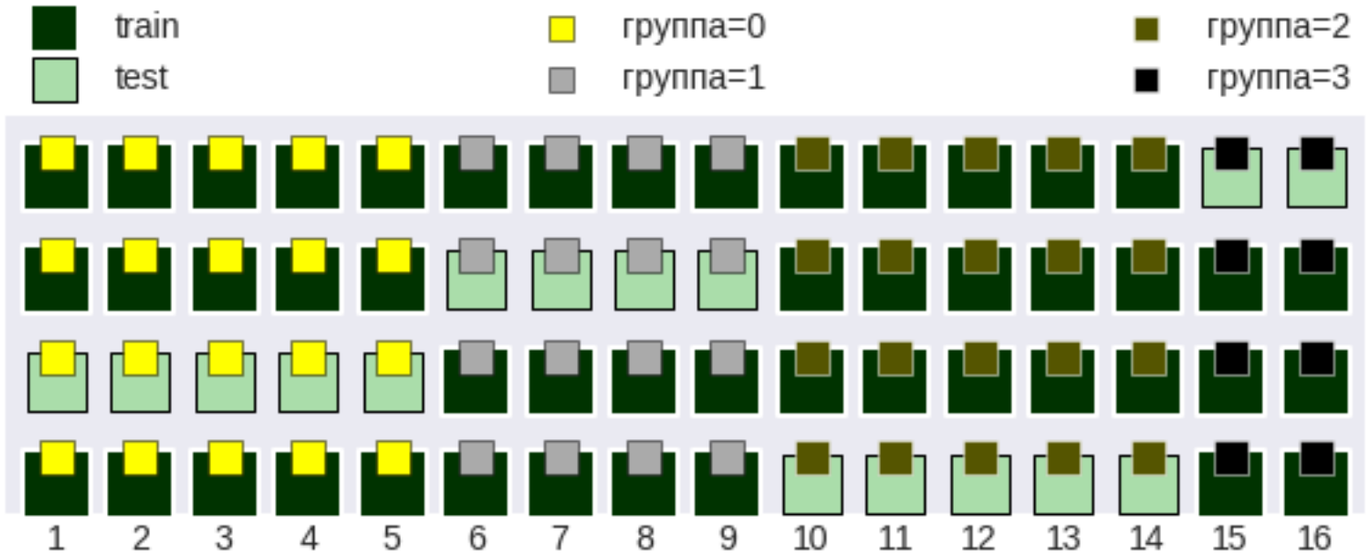
```
sklearn.model_selection.StratifiedKFold(n_splits='warn',
                                        shuffle=False,
                                        random_state=None)
```



перемешиваем: `shuffle=True`

Перекрёстная проверка по фолдам: не разбиваем группы

```
sklearn.model_selection.GroupKFold(n_splits='warn')
```



есть `sklearn.model_selection.PredefinedSplit` **– разбиение индуцированное группами**

Leave-one out cross-validation (LOOCV)

k*-fold при *k*=*m

`sklearn.model_selection.LeaveOneOut`

показаны только первые 4 разбивки…

– может слишком долго вычисляться

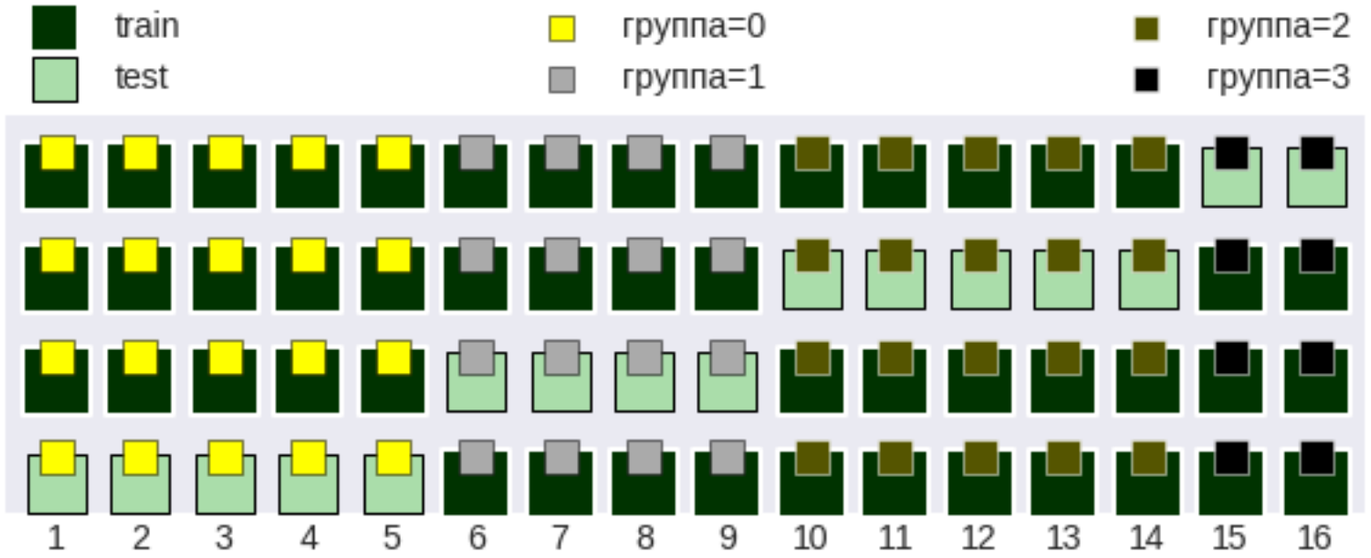
+ хорошая для теории

ещё есть `sklearn.model_selection.LeavePOut` **– всевозможные *P*-ки**

Контроль по группам: LeaveOneGroupOut

LeaveOneGroupOut: Контроль по одной группе

```
from sklearn.model_selection import LeaveOneGroupOut
```



тонкость:

при оценки ошибки можно (нужно)

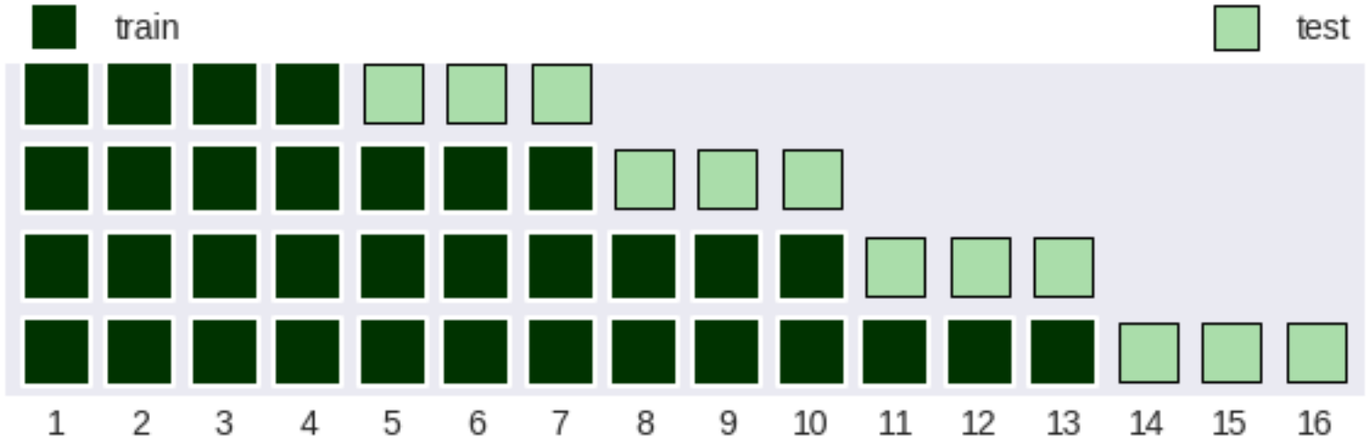
учитывать мощность групп

$$e = \sum_{t=1}^{k} \frac{m_t}{m} e_t$$

Контроль по времени (Out-of-time-контроль)

TimeSeriesSplit: разбиения временных рядов (Time series cross-validation)

```
sklearn.model_selection.TimeSeriesSplit(n_splits=5, # сколько делить
                                        max_train_size=None, # сколько делить
                                        test_size=None, # n_samples // (n_splits + 1)
                                                        # если gap=0
                                        gap=0) # сколько "откусывать" в конце
                                               # по умолчанию не используется
```



– часто не получится сделать много контролей (слишком маленькая предыстория)

\+ можно организовать «под контекст» (на следующий день, неделю, месяц)

Схемы с повторениями: «сделать несколько раз»

```
model_selection.RepeatedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=0)

model_selection.RepeatedStratifiedKFold(n_splits=2, n_repeats=2, random_state=0)
```

```
import numpy as np
from sklearn.model_selection import RepeatedStratifiedKFold
X = np.array([[1, 2], [3, 4], [1, 2], [3, 4]])
y = np.array([0, 0, 1, 1])
rskf = RepeatedStratifiedKFold(n_splits=2, n_repeats=2,
                               random_state=36851234)
for train_index, test_index in rskf.split(X, y):
    print("TRAIN:", train_index, "TEST:", test_index)
    X_train, X_test = X[train_index], X[test_index]
    y_train, y_test = y[train_index], y[test_index]
```

```
TRAIN: [1 2] TEST: [0 3]
TRAIN: [0 3] TEST: [1 2]
TRAIN: [1 3] TEST: [0 2]
TRAIN: [0 2] TEST: [1 3]
```

Где используется выбор CV-контроля

- **оценка качества модели**

было выше – оцениваем качество

- **настройка гиперпараметров**

перебор значений гиперпараметров

- **получение «честных» ответов на обучении**

как бы алгоритм отвечал,
если бы не обучался на этих объектах

- контроль алгоритмов
- ансамблирование (метапризнаки)

- **построение кривых зависимостей качества от параметров**
  - validation curves (от значений)
  - learning curves (от объёма выборки)

- **предобработка данных** (кодирование категорий) **будет**

Минутка кода: оценка модели с помощью выбранного контроля

```
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from sklearn.model_selection import ShuffleSplit
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

logreg = LogisticRegression()
cv = ShuffleSplit(n_splits=3, test_size=0.1,
                  train_size=None, random_state=None)
cross_val_score(logreg, X, y, cv=cv)
```

У этих функций много параметров…

Они (функции) «понимают» друг друга

Если не указываем скорер – используется встроенный (в модель)

Есть аналогичная функция, которая сохраняет ещё время обучения и работы:

`sklearn.model_selection.cross_validate`

Перестановочный тест для оценки неслучайности результата:

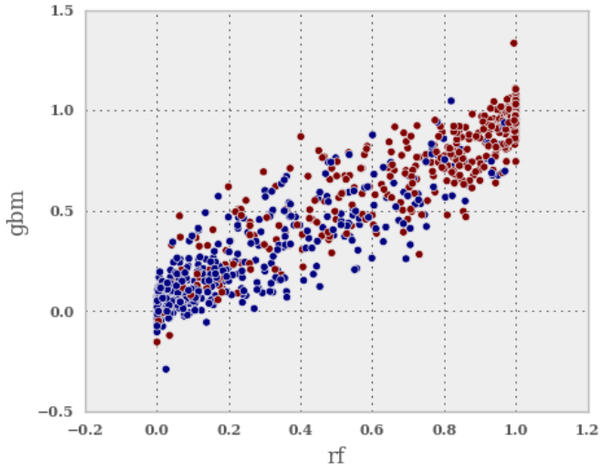
`sklearn.model_selection.permutation_test_score`

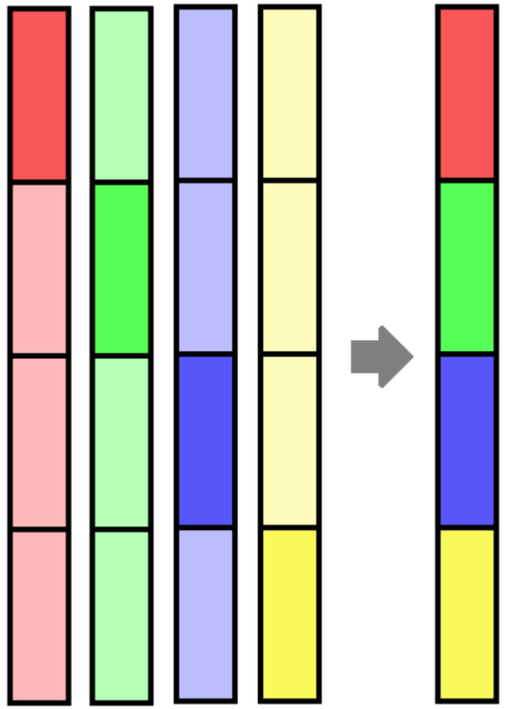
Ответы алгоритма с помощью выбранного контроля: минутка кода

```
from sklearn.model_selection import cross_val_predict
from sklearn.model_selection import KFold
cv = KFold(n_splits=10, shuffle=True, random_state=1)

# ответы rf на CV
a_rf = cross_val_predict(rf, X, y, cv=cv)
# ответы gbm на CV
a_gbm = cross_val_predict(gbm, X, y, cv=cv)

plt.scatter(a_rf, a_gbm, c=y)
plt.xlabel('rf')
plt.ylabel('gbm')
```

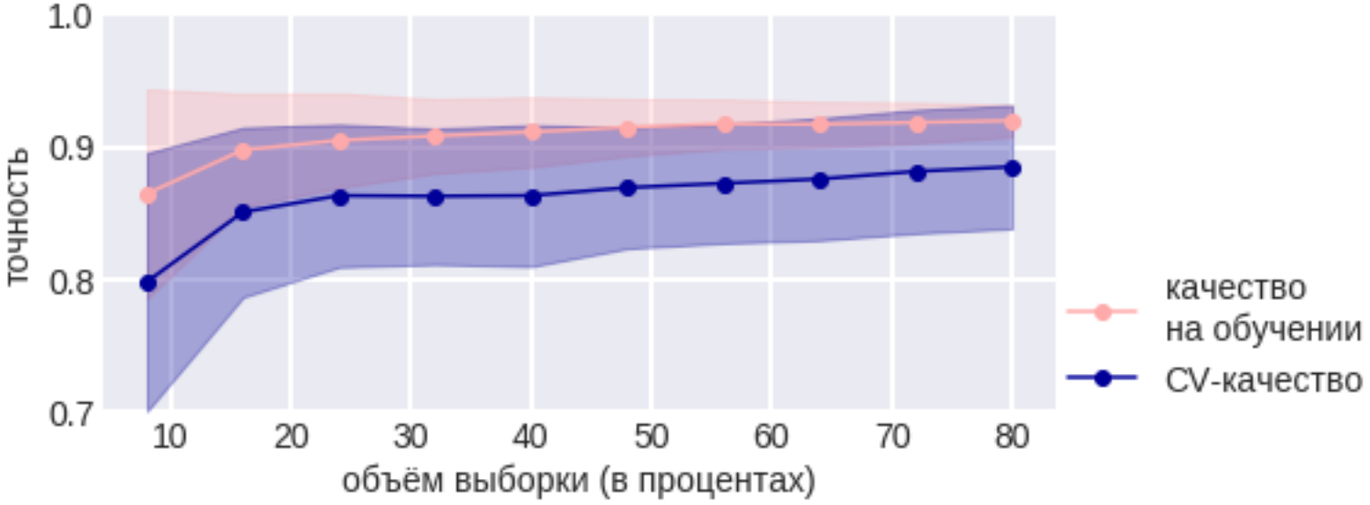




Кривые обучения (Learning Curves)

Делим данные на обучение и контроль (м.б. очень много раз)
Обучаемся на k% от обучающей выборки для разных k
Строим графики ошибок/качества на train/CV от k

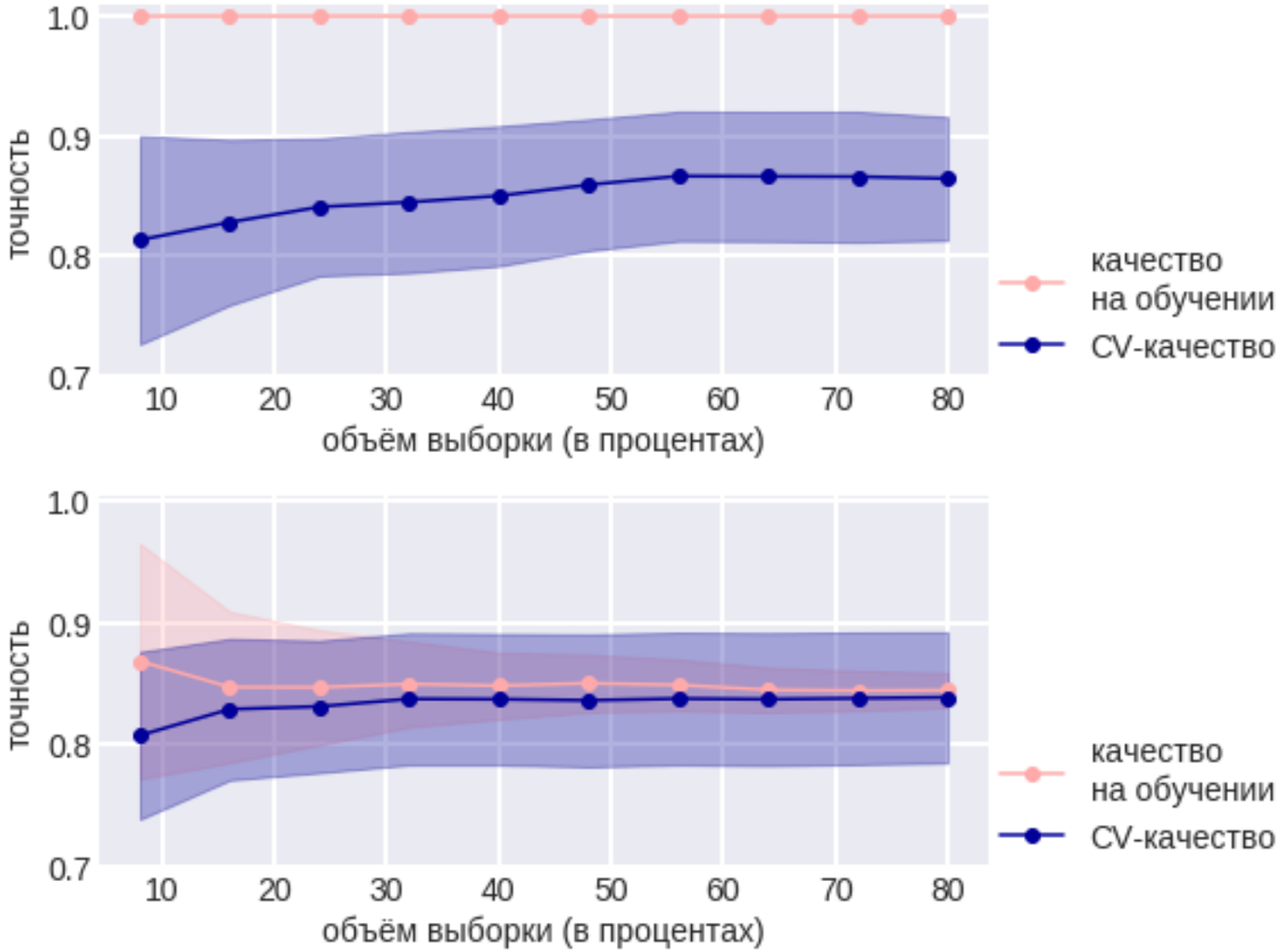
```
model_selection.learning_curve
train_sizes, train_scores, test_scores = learning_curve(estimator, X, y, cv=cv,
                                                        n_jobs=n_jobs, train_sizes=train_sizes)
```



Есть зазор между обучением и CV

Тонкость: 100% – вся выборка, но здесь `test_size=0.2`

Кривые обучения (Learning Curves)



Переобучение:
100% качество на обучении!
1NN?

Нет выгоды от объёма!

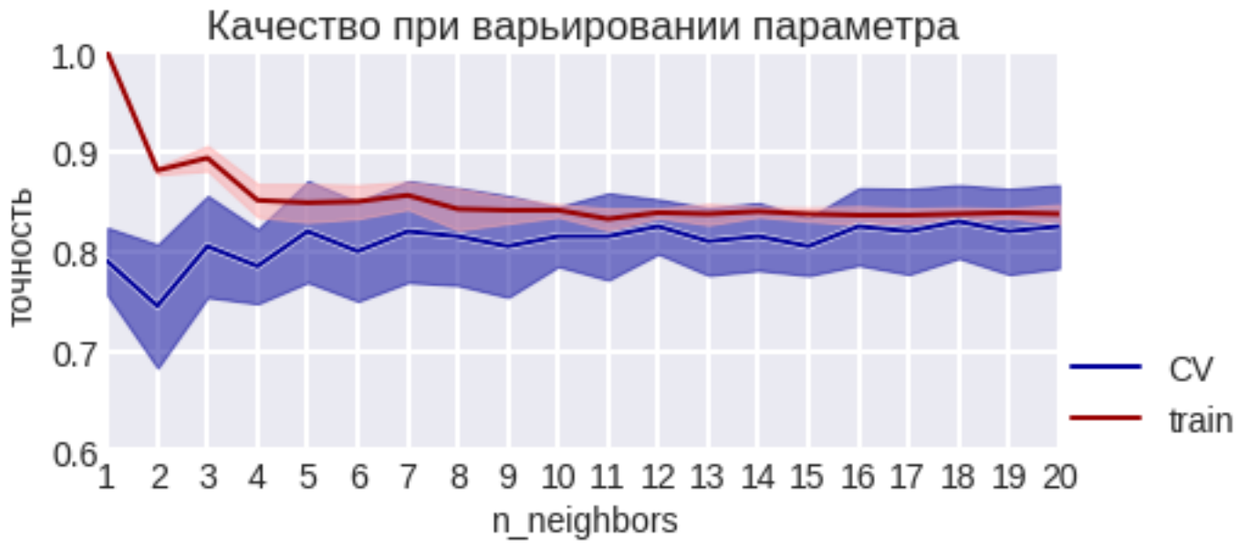
Полная согласованность между обучением и CV,
но качество низкое

малая сложность модели

Качество от параметров

Валидационная кривая (Validation Curve) показывает зависимость качества / ошибки при выбранной схеме контроля от значений гиперпараметров.

`sklearn.model_selection.validation_curve`



Настройка параметров (вообще) *

градиентные методы
(gradient-based)

Метаоптимизация

Байесовская оптимизация
(Bayesian model-based optimization)

Перебор

Ручной перебор (Manual)

(Квази)полный перебор (Grid search)

Стохастические методы

Случайный поиск (Random search)

Эволюционные алгоритмы (evolutionary)

Перебор значений гиперпараметров

Делим данные на обучение и контроль (м.б. очень много раз)

При разных значениях параметров обучаемся и проверяем качество

```
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
parameters = {'metric':('euclidean', 'manhattan', 'chebyshev'),
              'n_neighbors':[1, 3, 5, 7, 9, 11] , scoring='roc_auc'}
clf = GridSearchCV(estimator, parameters, cv=5)
clf.fit(X, y)
clf.cv_results_['mean_test_score']
```

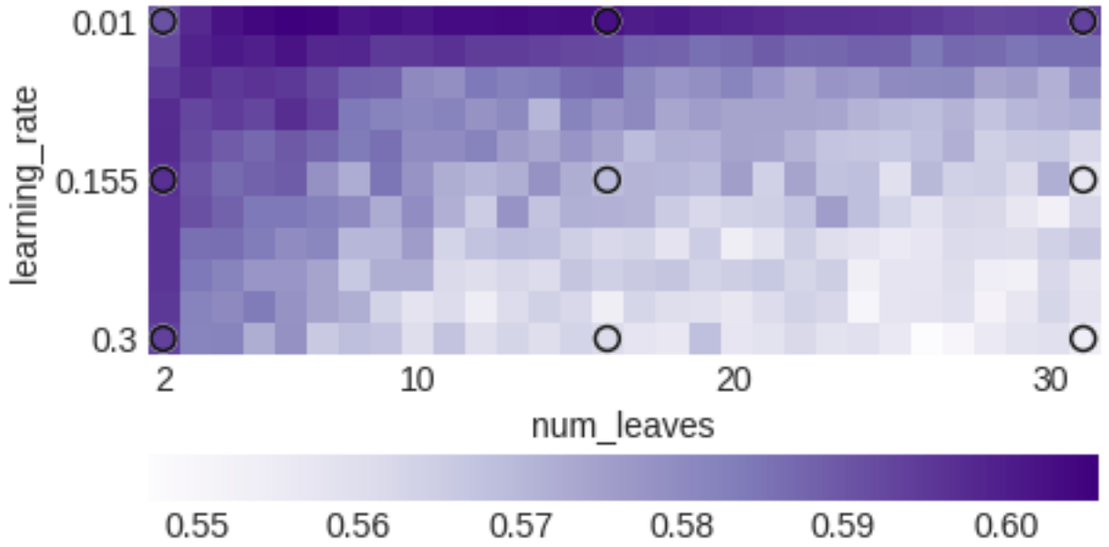
	$k=1$	$k=3$	$k=5$	$k=7$	$k=9$	$k=11$
euclidean	76.0	77.0	79.0	78.5	80.5	82.5
manhattan	74.0	74.0	79.0	79.5	80.5	81.0
chebyshev	76.5	78.5	80.0	80.0	81.0	81.5

Есть также случайный поиск `model_selection.RandomizedSearchCV`

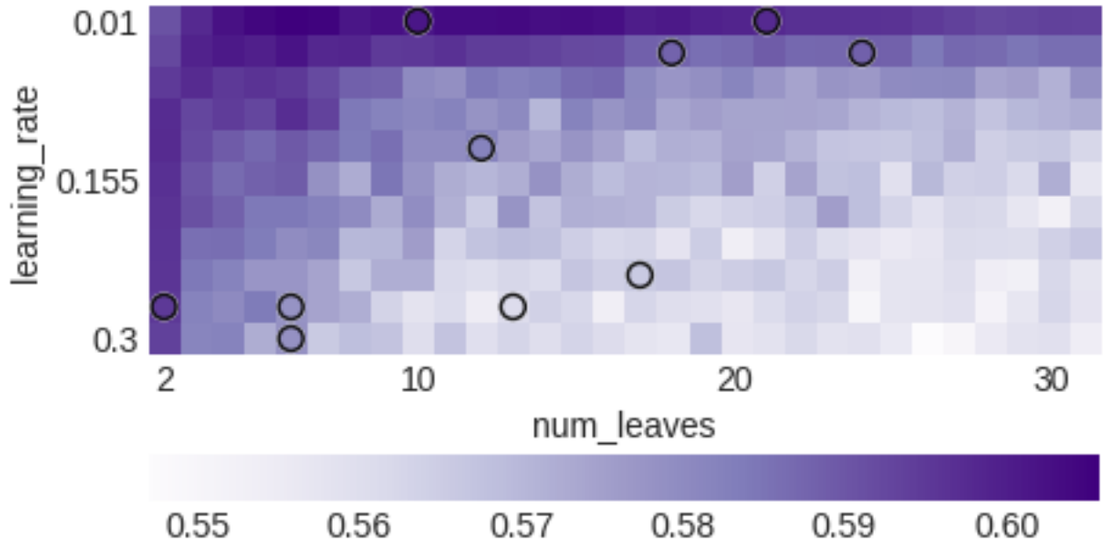
(тут есть «число итераций», можно передавать распределения параметров)

Перебор параметров: случайный поиск считают предпочтительным

GridSearchCV



RandomizedSearchCV




```
import lightgbm as lgb
model = lgb.LGBMClassifier(n_estimators=100, subsample=0.75, colsample_bytree=0.75)

from sklearn.model_selection import GridSearchCV
parameters = {'num_leaves': np.arange(2, 32),
              'learning_rate':np.linspace(0.01, 0.3, 11)}
clf = GridSearchCV(model, parameters, cv=5, scoring='roc_auc')
clf.fit(X, y)
```

Байесовская оптимизация *
(Bayesian model-based optimization)

Идея: есть априорная вероятностная модель целевой функции (функции ошибки – the objective function) – «surrogate probability model»

в отличие от функции ошибки она будет её приближением, её просто оптимизировать!

Способы представления SPM

Гауссовские процессы (Gaussian Processes)

Случайный лес (Random Forest Regressions)

Tree Parzen Estimators (TPE)

…

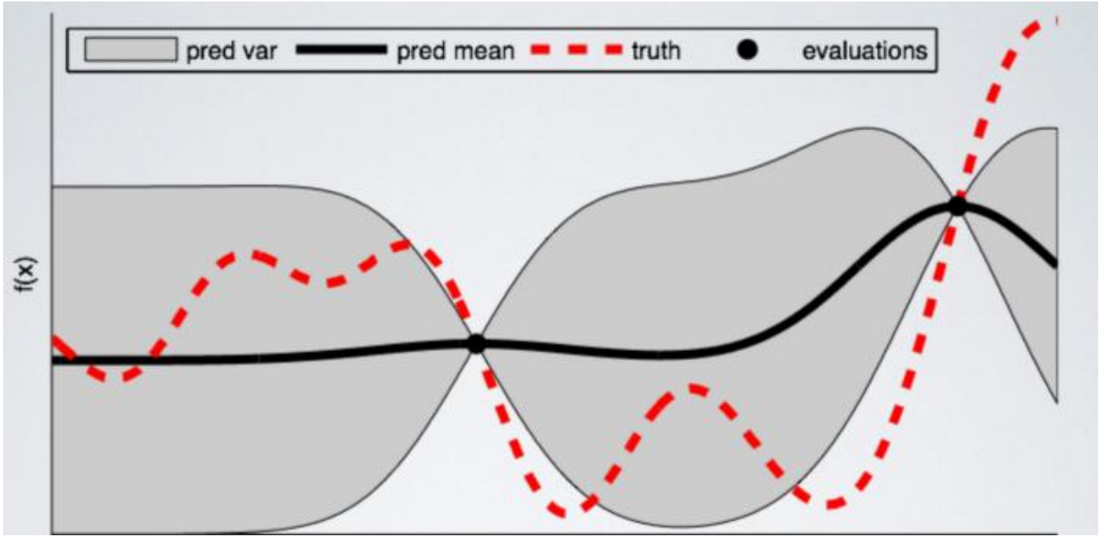
находим armax SPM / или точку для лучшего уточнения SPM

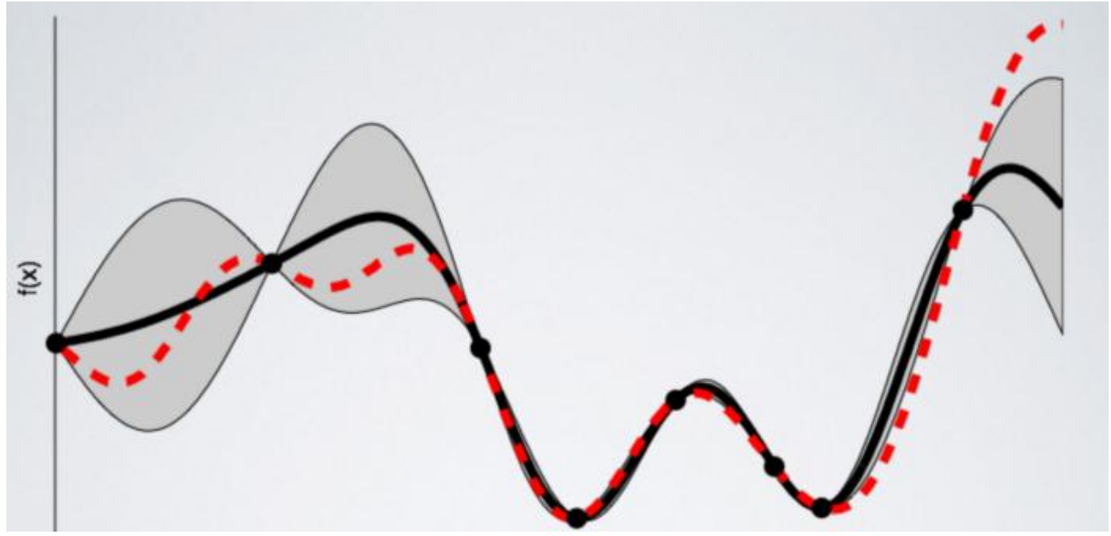
оцениваем значение в нём (ошибка при таких параметрах)

уточняем SPM

https://www.iro.umontreal.ca/~bengioy/cifar/NCAP2014-summerschool/slides/Ryan_adams_140814_bayesopt_ncap.pdf

Байесовская оптимизация *





Algorithm 1 Sequential Model-Based Optimization

Input: $f, \mathcal{X}, S, \mathcal{M}$
$\mathcal{D} \leftarrow \text{INITSAMPLES}(f, \mathcal{X})$
for $i \leftarrow |\mathcal{D}|$ **to** T **do**
  $p(y \mid \mathbf{x}, \mathcal{D}) \leftarrow \text{FITMODEL}(\mathcal{M}, \mathcal{D})$
  $\mathbf{x}_i \leftarrow \arg\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} S(\mathbf{x},\ p(y \mid \mathbf{x}, \mathcal{D}))$
  $y_i \leftarrow f(\mathbf{x}_i)$ ▷ Expensive step
  $\mathcal{D} \leftarrow \mathcal{D} \cup (\mathbf{x}_i, y_i)$
end for

Байесовская оптимизация: что можно почитать… *

«Bayesian Optimization Primer»

https://app.sigopt.com/static/pdf/SigOpt_Bayesian_Optimization_Primer.pdf

Пример HyperOpt

https://github.com/WillKoehrsen/hyperparameter-optimization/blob/master/Introduction%20to%20Bayesian%20Optimization%20with%20Hyperopt.ipynb

«Algorithms for Hyper-Parameter Optimization»

https://papers.nips.cc/paper/4443-algorithms-for-hyper-parameter-optimization.pdf

ссылки на библиотеки и код

https://www.jeremyjordan.me/hyperparameter-tuning/

Минутка кода: как получить параметры модели

```
model.get_params()
{'boosting_type': 'gbdt',
 'class_weight': None,
 'colsample_bytree': 0.75,
 'importance_type': 'split',
 'learning_rate': 0.1,
 'max_depth': -1,
 'min_child_samples': 20,
 'min_child_weight': 0.001,
 'min_split_gain': 0.0,
 'n_estimators': 100,
 'n_jobs': -1,
 'num_leaves': 31,
 'objective': None,
 'random_state': None,
 'reg_alpha': 0.0,
 'reg_lambda': 0.0,
 'silent': True,
 'subsample': 0.75,
 'subsample_for_bin': 200000,
 'subsample_freq': 0}
```

Итог

Правильная организация контроля – важная часть решения задачи

CV для

- **контроля качества / выбора модели**
- **настройка гиперпараметров**
- **формирования ответов на обучении**
- **ансамблировании будет**
- **предобработки (пропуски, категориии, …) будет**

Кривые качества

- **validation curves (от значений)**
- **learning curves (от объёма выборки)**

https://raw.githubusercontent.com/Dyakonov/IML/master/2020/IML2020_06scikitlearn_01.pdf

– есть код для различных организаций контроля