Лекция 5. Оценка качества моделей

Основы интеллектуального анализа данных

Полузёров Т. Д.

БГУ ФПМИ

Дано

Имеется выборка объектов $X = (x_1, ..., x_\ell), X \in \mathbb{X}$ и соответствующие им метки $Y = (y_1, ..., y_\ell), Y \in \mathbb{Y}$.

Построена модель $a : \mathbb{X} \to \mathbb{Y}$ по данным $D^\ell = (X, Y)$ с помощью метода обучения $\mu : \mathbb{X} \times \mathbb{Y} \to \mathbb{A}$ – минимизации эмперического риска

$$Q(a, D^\ell) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mathcal{L}(y_i, a(x_i, \theta)) \to \min_\theta$$

где $\mathcal{L} : \mathbb{Y} \times \mathbb{Y} \to \mathbb{R}$ - функция ошибки модели на объекте

Насколько адекватно работает модель **на других объектах** из $\mathbb{X}$?

Обобщающая способность

Обобщающая способность алгоритма a

$$G(a) = E_{\mathbb{X}}\{\mathcal{L}(y, a(x))\}$$

На практике используется эмпирическая оценка

$$\hat{G}(a) = Q(a, \acute{D}) = \frac{1}{|\acute{D}|}\sum_{i=1}^{|\acute{D}|}\mathcal{L}(y_i, a(x_i))$$

показывает среднюю ошибку модели a, обученной по выборке D, на других данных $\acute{D} \in (\mathbb{X} \times \mathbb{Y})$.
При $|\acute{D}| \to \infty$, согласно закону больших чисел, $\hat{G} \to G$.

Метод отложенной выборки

Случайное разбиение выборки $D = D_{train} \sqcup D_{test}$.
Обучение на D_{train}, а оценка на D_{test}.

$$\hat{G}(a) = Q(\mu(D_{train}), D_{test})$$

- Обычно пропорции train - 80%, test- 20%
- Для задачи классификации случайное разбиение сохраняющее пропорции классов – **стратифицированное**
- Вычислительно эффективно – всего 1 обучение
- Может быть нестабильной оценкой

Функция потерь $\neq$ метрика качества

Имея алгоритм a хочется оценить его реальный бизнес эффект. Метрика $\mathcal{M}$ отражает целевой эффект от модели a. Может порождаться иерархия метрик.

Пример иерархии метрик для задачи рекомендаций фильмов:

1. Доход сервиса – глобальная цель
2. Среднее число просматриваемых фильмов в неделю – косвенный показатель релевантности рекомендаций
3. Точность классификации <кликнет - не кликнет> – можно рассчитать по имеющимся данным
4. Функция потерь ($\mathcal{L}$) – по ней и строим модель a

Функция потерь как апроксимация метрики

Метрика $\mathcal{M}$ - внешний, объективный показатель качества алгоритма.
Функция потерь $\mathcal{L}$ - математически удобная функция, которая служит лишь для построения алгоритма.

- Глобальная задача стоит в оптимизации метрики, а функция потерь выступает как прокси.
- В некоторых задачах они могут совпадать - тогда метрика оптимизируется напрямую.
- Прямые верхнеуровневые метрики бывает невозможно измерить в моменте, поэтому используются косвенные

Online и Offline метрики

Online - метрики, которые рассчитываются по уже работающей системе.
Offline - рассчитываются до введения в эксплуатацию, могут быть рассчитаны по имеющимся данным.

На этапе построении моделей и их сравнения доступны только оффлайн метрики. $(X, Y) \in (\mathbb{X}, \mathbb{Y})$, $\mathcal{M} : \mathbb{Y} \times \mathbb{Y} \to \mathbb{R}$

Доля ошибочных классификаций

Доля ошибочных классификаций (Accuracy):

$$Accuracy(y, \hat{y}) = \frac{1}{\ell} \sum_{i}^{N} [y_i = \hat{y}_i]$$

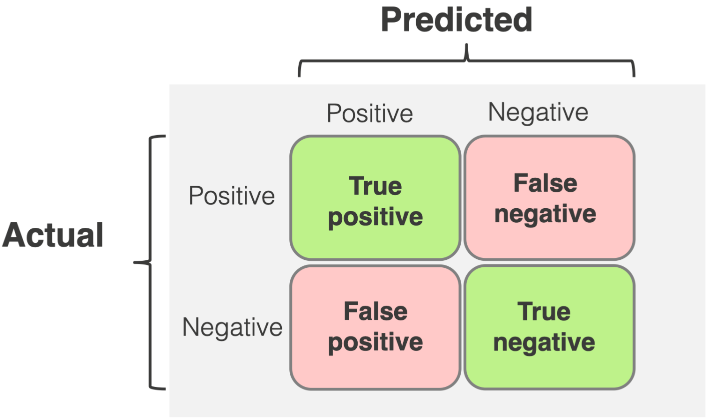
Или сопряженная с ней **доля ошибочных классификаций** (Error Rate):

$$ErrorRate = 1 - Accuracy$$

- неприменима при сильном диссбалансе классов
- не учитываеь величину ошибки на объектах разных классов

Матрица ошибок

Матрица ошибок (Confusion Matrix) – кросс-таблица из истинных меток и прогнозов.



Элементы матрицы ошибок

True/False - допустил ли классификатор ошибку
Positive/Negative - ответ классификатора

- TP - верно определенный положительный класс
- TN - верный негативный класс
- FP - ложное срабатывание (ошибочная положительная классификация)
- FN - пропуск объекта(ошибочное не срабатывание)

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

Метрики по матрице ошибок

Ошибка 1-го рода(False Positive Rate, FPR).
Вероятность ложного срабатывания:

$$P(\hat{y} = +1 | y = -1) = \frac{FP}{FP + TN}$$

Ошибка 2-го рода(False Negative Rate, FNR).
Вероятность пропуска:

$$P(\hat{y} = -1 | y = +1) = \frac{FN}{FN + TP}$$

Точность и полнота

Точность – доля верных классификаций при срабатывании

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

Полнота – доля всех положительных объектов на которых сработал классификатор

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

Усреднение точности и полноты

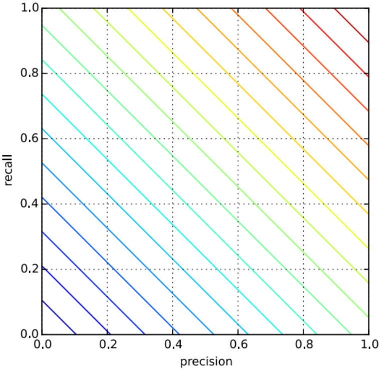
Одновременно учитывать Precision и Recall можно с помощью среднего гармонического:

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

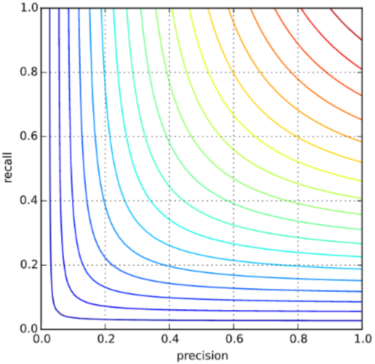
Важность одной из метрик можно учесть с помощью коэффициента β

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

Линии уровня



Среднее арифметическое



Среднее гармоническое

Порог классификации

Классификаторы вида $a(x, t) = \operatorname{sign}(f(x) - t)$ допускают настройку порога отсечения t.

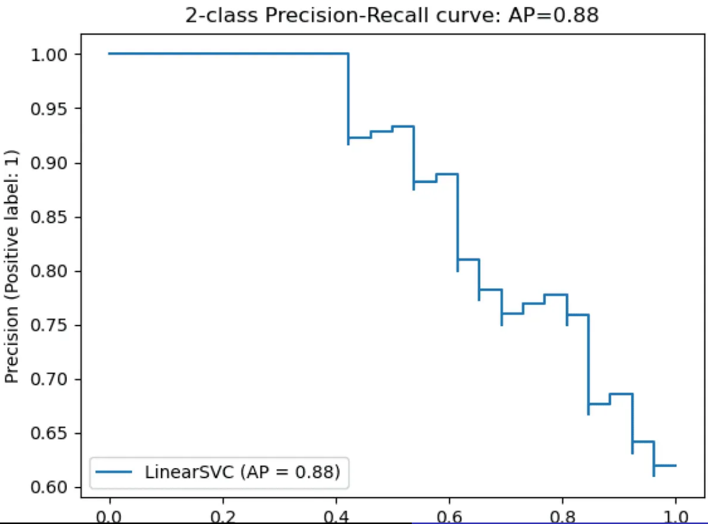
При $t \to -\infty$:

1. все объекты классифицируются в **положительный** класс
2. $Recall = 1$
3. $Precision =$ доле положительных объектов в выборке

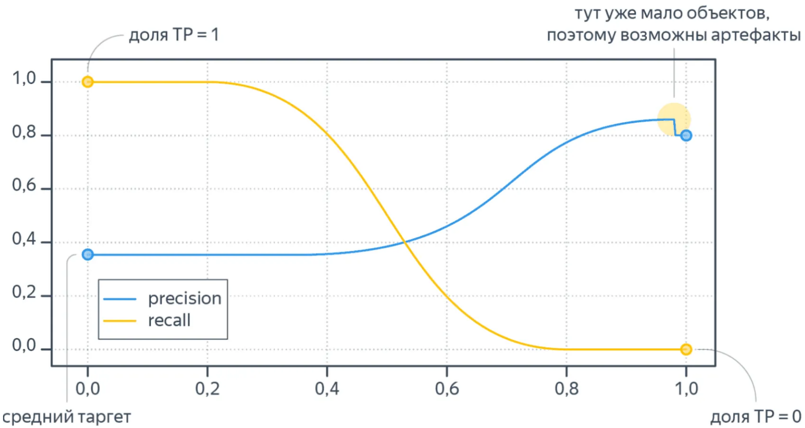
При $t \to +\infty$:

- все объекты классифицируются в **отрицательный** класс
- $Recall = 0$
- $Precision$ - не определен

Precision-Recall кривая



Зависимость от порога



Оптимизация порога

Перебирая порог t можно добиться **любого значения** $Recall \in [0,1]$. При этом будет достигаться некоторый $Precision$.

Оптимизация $Precision - Recall$ соотношения происходит так:

1. Строится алгоритм базовый алгоритм $b : \mathbb{X} \to \mathbb{R}$
2. по отдельной валидационной выборке строятся кривые порога t
3. определяется оптимальное соотношение Precision и Recall при t^*
4. фиксируется итоговый алгоритм $a(x) = \operatorname{sign}\left(b(x) - t^*\right)$

Средняя точность

Существует ряд метрик отражающих общее качество модели, инвариантно относительно порога t.

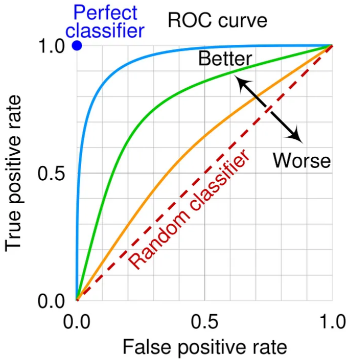
$$AveragePrecision = \int_0^1 p(r)dr$$

где $p(r)$ - значение $Precision$ при $Recall = r$.

Эта метрика соответствует площади под P-R кривой.

ROC-кривая

TPR (True Positive Rate) - полнота (Recall)
FPR (False Positive Rate) - доля отрицательных объектов на которых ложно сработал классификатор



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

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

Алгоритм построения ROC

1. сортируем объекты по уверенности классификатора
2. стартуем из точки (0, 0) и перебираем объекты выборки
3. делаем шаг в
   - вверх, если объект правильно классифицирован
   - право, если допущена ошибка

Классика

Стандартный набор метрик в задачах регрессии

1. Средний квадрат ошибки

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

2. Иногда MSE приводят к той же размерности что и ответы

$$RMSE = \sqrt{MSE}$$

3. Средняя абсолютная ошибка

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

Относительные ошибки

Mean Absolute Percentage Error

$$MAPE = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i|}$$

Symmetric MAPE

$$SMAPE = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{2|y_i - \hat{y}_i|}{y_i + \hat{y}_i}$$

Weighted Average PE

$$WAPE = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{\sum_{i=1}^{\ell} |y_i|}$$

Подбор гиперпараметров

Параметры в модели бывают двух типов:

1. Параметры - те, что настраиваются в ходе решения $Q \to \min$
2. Гиперпараметры - фиксируются до обучения

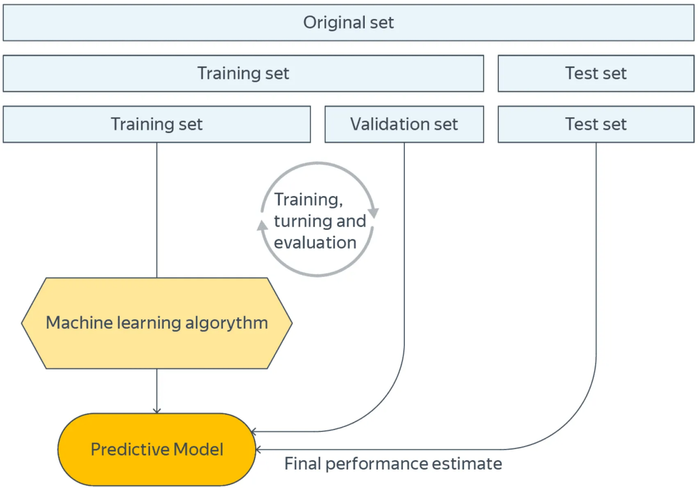
Пример:

$$a_d(x, \omega) = \omega_0 + \omega_1 x + \ldots + \omega_d x^d$$

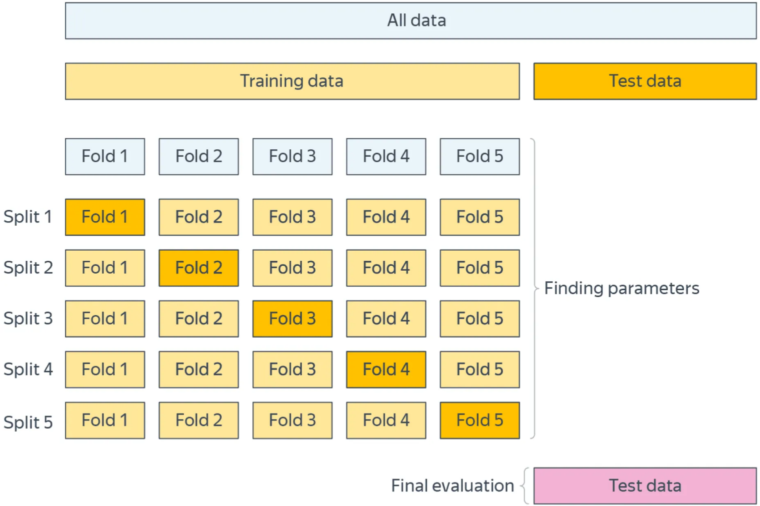
ω - параметры, а d - гиперпараметр

Как определить оптимальные значения гиперпараметров?

Отложенные выборки



Кросс-валидация



Заключение

- Метрики служат для сравнения обученных моделей
- Метрики должны отражать бизнес требования
- Функция потерь – математическое приближение бизнес метрики
- Обучение модели, подбор гиперпараметров и оценка качества - на разных наборах данных