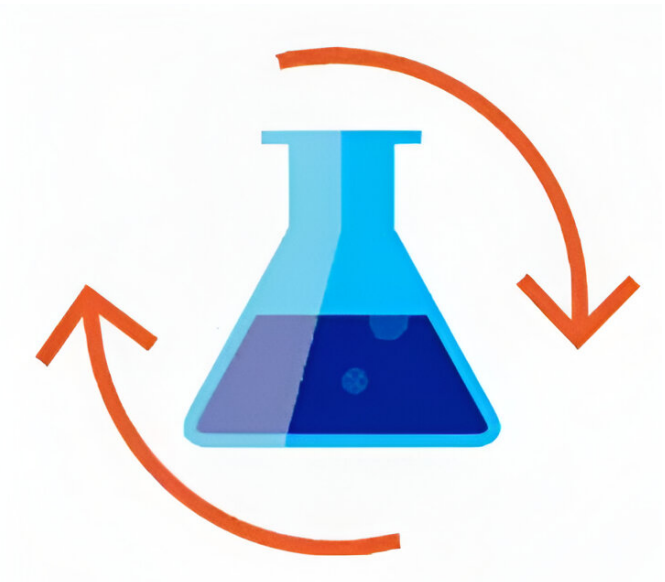
Препроцессинг и контроль качества моделей

Виктор Китов

victorkitov.github.io



Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Препроцессинг данных

Препроцессинг данных включает:

- заполнение пропусков
- детекцию и обработку выбросов
- кодирование признаков
- преобразование признаков
- отбор признаков / снижение размерности
- преобразование отклика

Перед работой с данными:

- визуализировать зависимость y от самых значимых признаков
  (график, scatter-plot с раскраской)
- визуализировать распределение в первых 2х, 3х главных компонентах
  (с раскраской)

Заполнение пропусков

- Самый простой способ - удалить объекты с пропусками.
  - потеряем много информации, если таких много
- Заполнение:
  - для вещественных:
    - средним/медианой
    - аномально большим или малым значением (для деревьев решений)
  - для категориальных
    - самой частой категорией
    - новой категорией "пропуск"
- Более точно - предсказывать пропущенные признаки, используя располагаемые.

Другие преобразования

Детекция выбросов:

- Строить распределения каждого признака, удалять объекты с аномальными значениями.
- Либо по правилу непринадлежности значения $(\mu + k\sigma, \mu + k\sigma)$, $k \sim 4$.

Преобразование отклика:

- преобразуем $y \to g(y)$ и обучаем модель на $\{x_n, g(y_n)\}_n$
- применяем модель, прогноз $g^{-1}(\widehat{y})$
- популярно: $g(y) = \ln y$
- для поиска $g(\cdot)$:
  - строим scatter-plot зависимости y от значимых признаков.
  - либо подбираем $g(\cdot)$, чтобы $g(y) \sim \mathcal{N}(0, 1)$

Содержание

Признаки

- Можно использовать вещественные признаки и бинарные.
- Вещественные можно дискретизовать
  - Пример: возраст, зарплата. По-разному обработаем каждый сегмент.
- Как представить категориальные признаки?

Признаки

- Можно использовать вещественные признаки и бинарные.
- Вещественные можно дискретизовать
  - Пример: возраст, зарплата. По-разному обработаем каждый сегмент.
- Как представить категориальные признаки?
  - номером категории (плохо)
  - счетчиком встречаемости категории
  - в виде бинарных (one-hot encoding)
  - в виде вещественных (mean value encoding, cyclic encoding)

One-hot кодирование (one-hot encoding)

Row Number	Direction
1	North
2	North-West
3	South
4	East
5	North-West
	North-West
	East
	South

Row Number	Direction_N	Direction_S	Direction_W	Direction_E	Direction_NW
1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	1	0	0	0
4	0	0	0	1	0
5	0	0	0	0	1
	0	0	0	0	1
	0	0	0	1	0
	0	1	0	0	0

One-hot кодирование (one-hot encoding)

Row Number	Direction
1	North
2	North-West
3	South
4	East
5	North-West
	North-West
	East
	South

Row Number	Direction_N	Direction_S	Direction_W	Direction_E	Direction_NW
1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	1	0	0	0
4	0	0	0	1	0
5	0	0	0	0	1
	0	0	0	0	1
	0	0	0	1	0
	0	1	0	0	0

Какие могут быть проблемы у этого метода?

Кодирование средним (mean encoding)

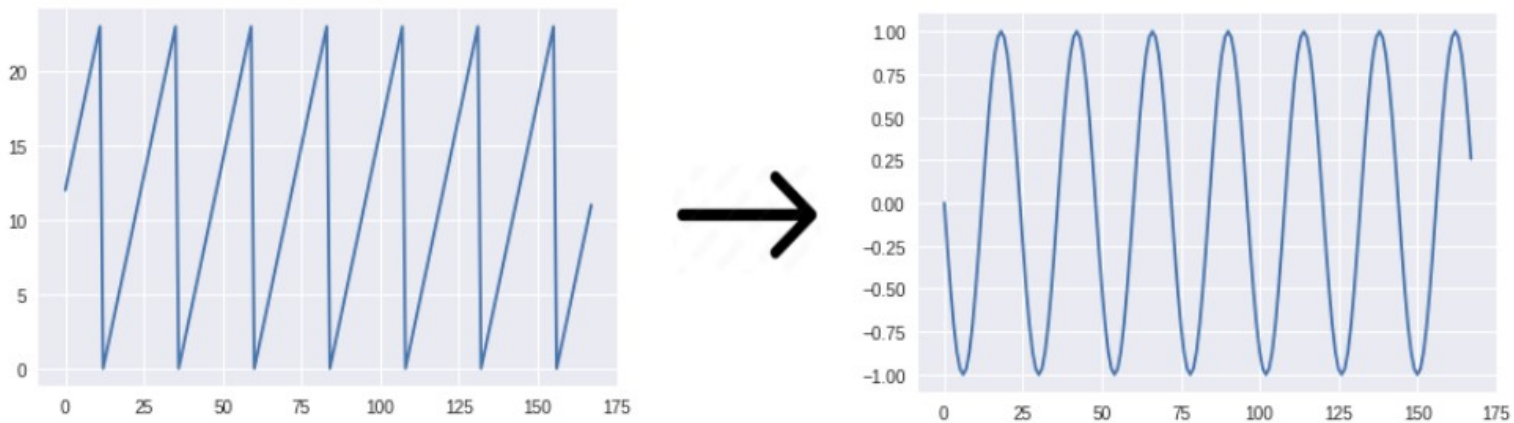
- можно делать по вещественному признаку
- если делаем по y, то на отдельной выборке!

id	job	job_mean	target
1	Doctor	0,50	1
2	Doctor	0,50	0
3	Doctor	0,50	1
4	Doctor	0,50	0
5	Teacher	1	1
6	Teacher	1	1
7	Engineer	0,50	0
8	Engineer	0,50	1
9	Waiter	1	1
10	Driver	0	0

Циклическое кодирование (cyclic encoding)

- Некоторые признаки принимают циклические значения
  - номер месяца, день месяца, час дня
  - для часа 0,1,2,...23. Но $23 \approx 0$!
- Используем циклическое кодирование:

$$x \to \left[\sin\left(\frac{2\pi \cdot x}{\max(x)}\right); \cos\left(\frac{2\pi \cdot x}{\max(x)}\right)\right]$$



Первая компонента при кодировании часа в сутках.

Содержание

Генерация признаков

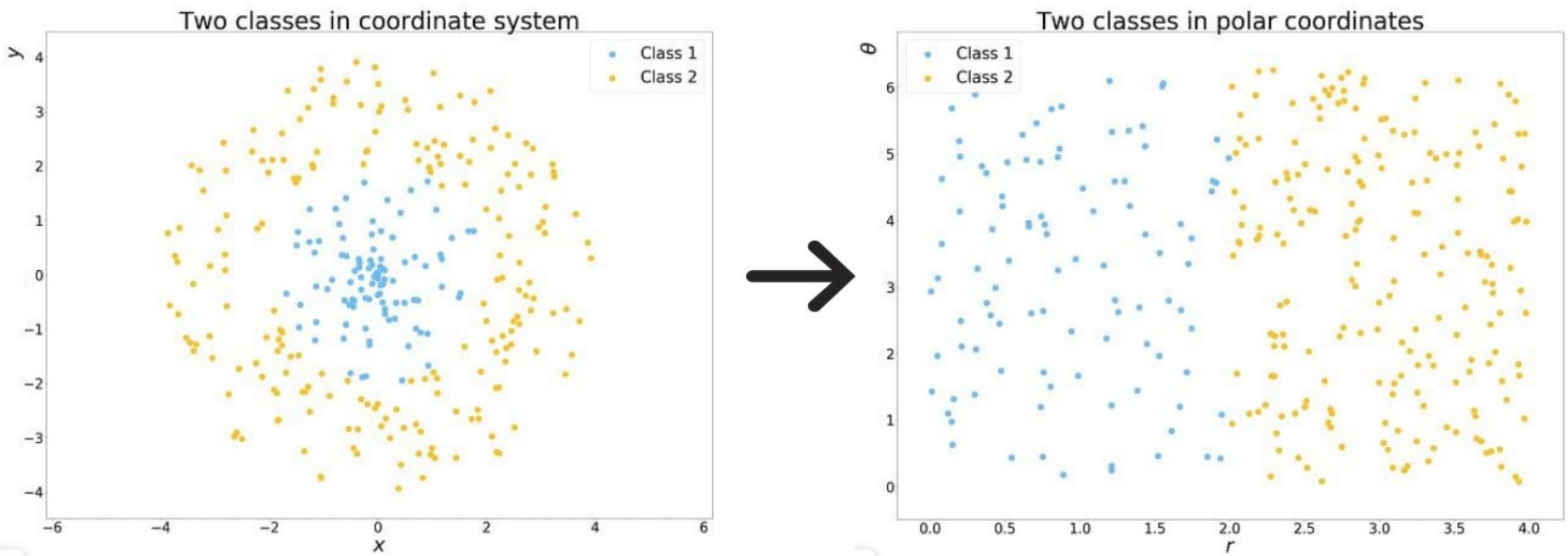
- Генерация признаков (feature engineering) - создание трансформаций из уже известных признаков.
- Хорошая новые признаки существенно повышают качество!
  - см. kaggle соревнования
- Хорошие признаки м.быть свои для каждой модели:
  - линейные трансформации для метрических методов
  - метрические признаки для линейных моделей

Пример генерации признаков

- Трансформация признаков[1]:

$$(x, y) \to (r, \rho)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \rho = \arctan \frac{y}{x}$$



[1] Источник.

Популярные трансформации признаков

Популярные преобразования признаков.

$\phi_k(x)$	**примеры**
$\left(x^i\right)^2, \sqrt{x^i}$, $\ln x^i$	учитываем нелинейное влияние расстояния до метро на стоимость квартиры
$\mathbb{I}\left\{x^i \in [a,b]\right\}$	принадлежит ли клиент определенному возрасту? (совершеннолетний, но не пенсионер)
$x^i\mathbb{I}[x^i \leq a]$, $x^i\mathbb{I}[x^i > a]$	учесть изменения влияния x^i при $x^i > a$
$\left(x^i\right)\left(x^j\right)$	длина x ширина участка = площадь
x^i/x^j	стоимость квартиры/метраж = стоимость одного метра
$F_{x^i}(x^i)$	приводим признак к равномерному распределению ($F(\cdot)$ - ф-ция распределения)

Популярные трансформации признаков

Использование метрических признаков (метод перестаёт быть линейным, нужна численная оптимизация).

$\phi_k(x)$	**примеры**
$\langle x,z\rangle/(\|x\|\,\|z\|)$	угол между объектом и репрезентативым объектом z
$\|x-z\|^2$	расстояние от объекта до репрезентативного объекта z (чаще используют близость)

Содержание

Токены в текстах

Требуется представить текст вектором $\in \mathbb{R}^D$. Пусть D - #уникальных слов.

- $x_w = \mathbb{I}[w$ встретился в документе$]$
- $x_w = TF_w = \#[w$ встретился в документе$]$
- $x_w = TF_w IDF_w$, $IDF_w = \frac{N}{N_w}$
  - N - # документов
  - N_w - # документов, содержащих w хотя бы раз.

Формирование словаря уникальных слов

- в простейшем случае: все уникальные слова языка
- можно ограничить словами предметной области
- можно в разных формах или нормализованной
  - единственное число, именительный падеж, начальная форма глагола.
- убрать слишком частые слова и слишком редкие
  - с редкими - осторожно, многие информативны!
- убрать неинформативные "стоп-слова" из словаря
  - а, но, если, конечно, зато, или, ...

Токены в текстах

- можно добавить биграммы/триграммы:
  - мне фильм не понравился -> 'мне фильм', 'фильм не', 'не понравился'.
  - мне фильм не понравился -> 'мне фильм не', 'фильм не понравился'.
- Но биграм/триграм много.

Токены в текстах

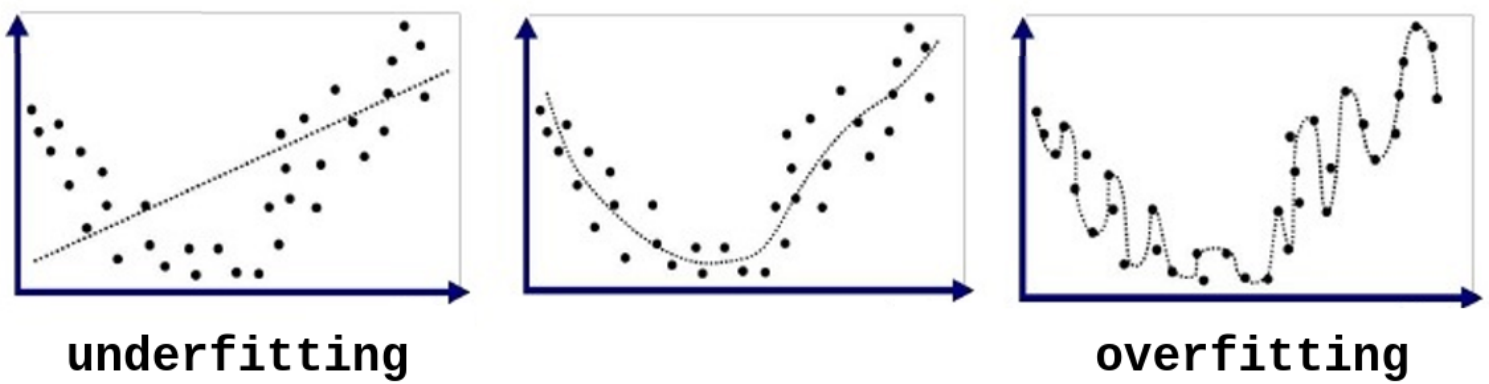
- можно добавить биграммы/триграммы:
  - мне фильм не понравился -> 'мне фильм', 'фильм не', 'не понравился'.
  - мне фильм не понравился -> 'мне фильм не', 'фильм не понравился'.
- Но биграм/триграм много.
- Поэтому можно добавить только коллокации (неслучайно часто совстречающиеся слова)
  - Запустили линейную регрессию. Линейная регрессия показала точность... -> 'линейная регрессия'

$$\frac{p(w_1 w_2)}{p(w_1)p(w_2)} > threshold$$

Содержание

Проблемы недообучения и переобучения

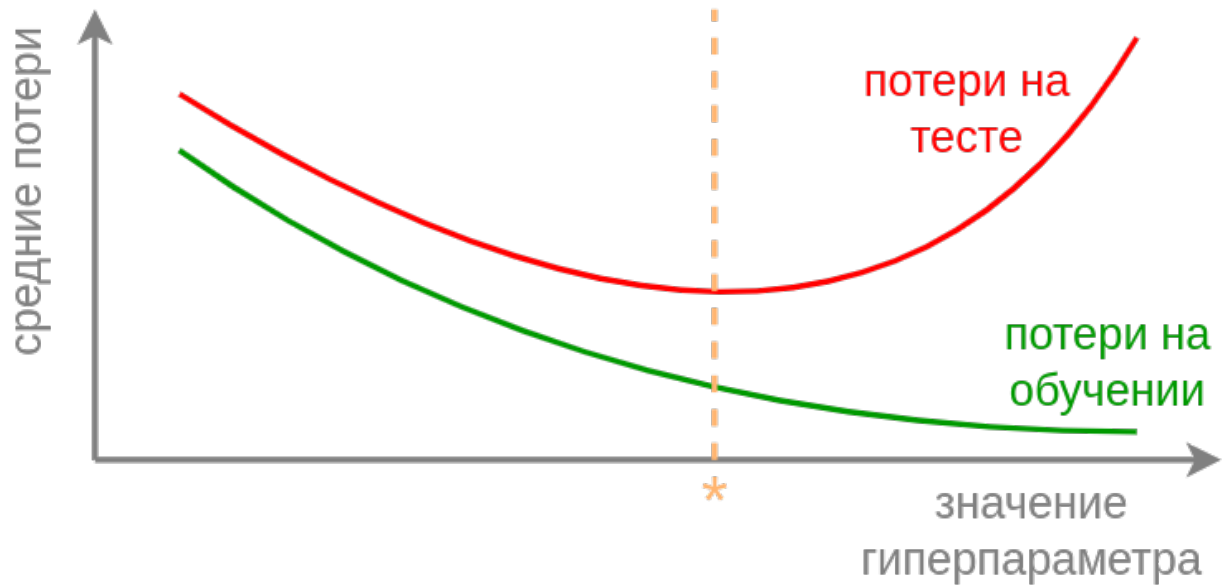
- Недообучение: модель слишком простая для реальных данных.
  - не улавливает тонких закономерностей
- Переобучение: модель слишком сложная для реальных данных.
  - настраивается на шум в измерениях



Вид переобучения

Зависимость потерь от гиперпараметра

- например, K в K-NN, λ в регрессии.

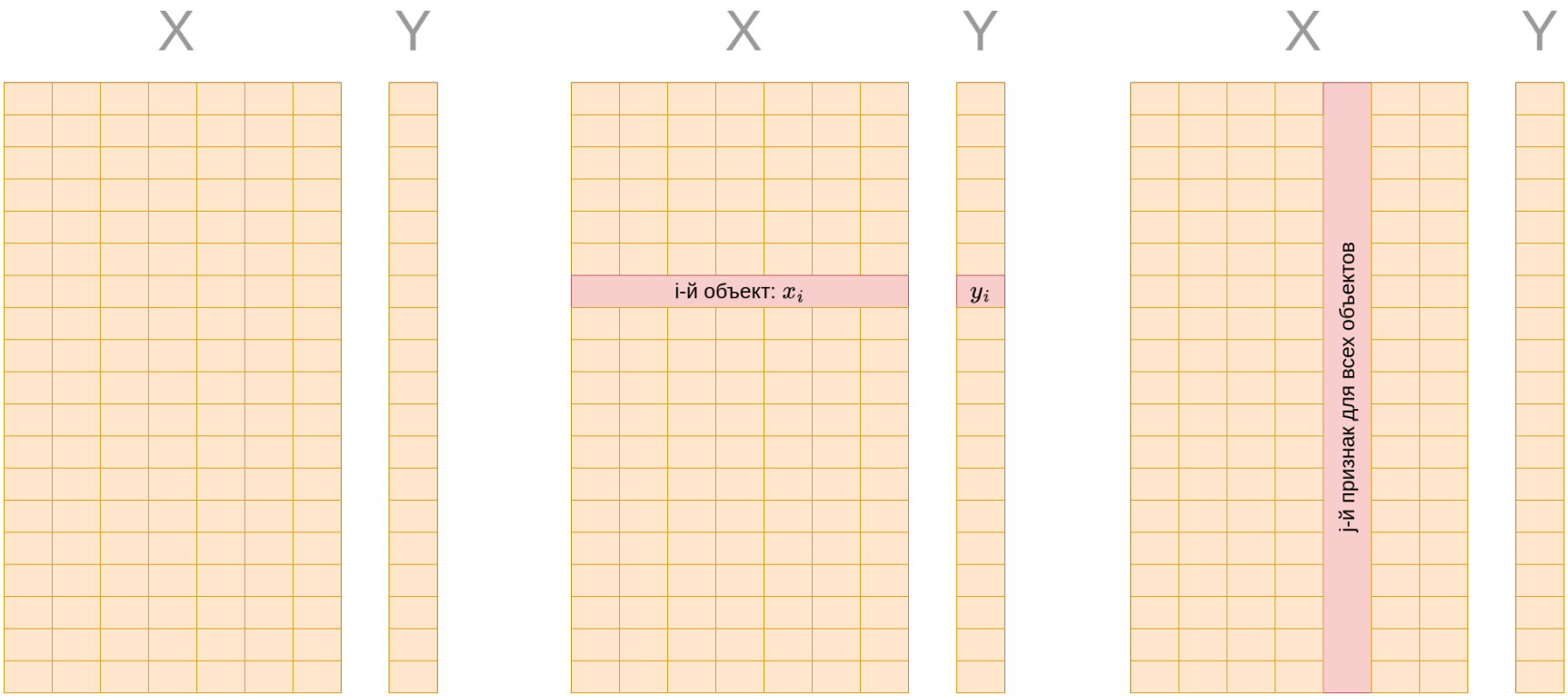


- до $*$: недообучение
- после $*$: переобучение

Содержание

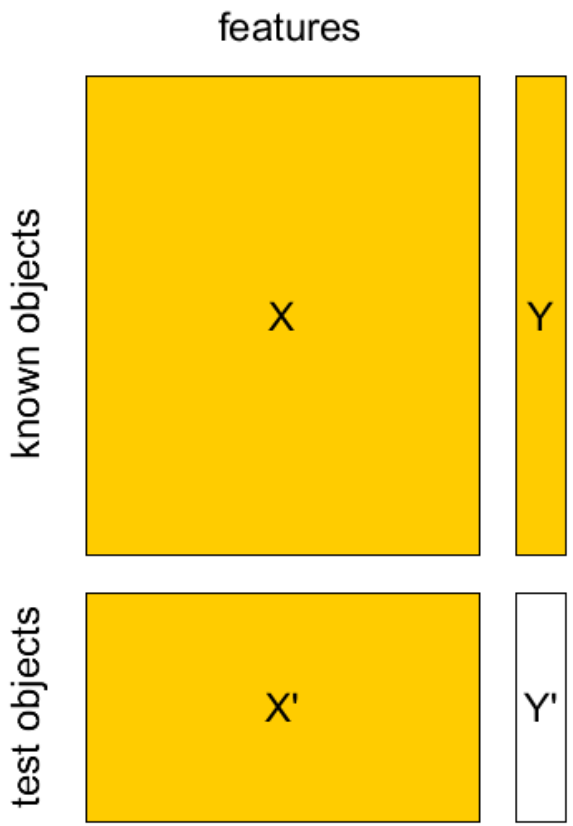
Обучающая выборка

Обучающая выборка (training set): $(x_1, y_1), ...(x_N, y_N)$, задаётся матицей объекты-признаки (design matrix) $X \in \mathbb{R}^{N \times D}$, и вектором откликов (targets) $Y = [y_1, ...y_M]^T$.



Обучающая и тестовая выборка

- Обучающая выборка X, Y: $(x_1, y_1), ...(x_M, y_M)$
- Тестовая выборка X', Y': $(x'_1, y'_1), ...(x'_K, y'_K)$



Критерий оптимизации параметров модели

- Необходимо минимизировать теоретический риск:

$$\int \int \mathcal{L}(f_w(\mathrm{x}), y) p(\mathrm{x}, y) d\mathrm{x} dy \to \min_w$$

[2]Предполагаем что объекты независимы и одинаково распределены.

Критерий оптимизации параметров модели

- Необходимо минимизировать теоретический риск:

$$\int \int \mathcal{L}(f_w(\mathrm{x}), y) p(\mathrm{x}, y) d\mathrm{x} dy \to \min_w$$

- Но мы можем минимизировать только эмпирический риск[2]:

$$L(w|X, Y) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathcal{L}(f_w(\mathrm{x}_n),\ y_n)$$

- Параметры находим из условия:

$$\widehat{w} = \arg\min_w L(w|X, Y)$$

[2]Предполагаем что объекты независимы и одинаково распределены.

Эмпирический риск на тестовой выборке

- Как связаны $L(\widehat{w}|X,Y)$ и $L(\widehat{w}|X',Y')$?

Эмпирический риск на тестовой выборке

- Как связаны $L(\widehat{w}|X,Y)$ и $L(\widehat{w}|X',Y')$?
- В типичной ситуации

$$L(\widehat{w}|X,Y) < L(\widehat{w}|X',Y')$$

- Эффект растет с ростом переобучения.
- Как получить реалистичную оценку $L(\widehat{w}|X',Y')$?

Эмпирический риск на тестовой выборке

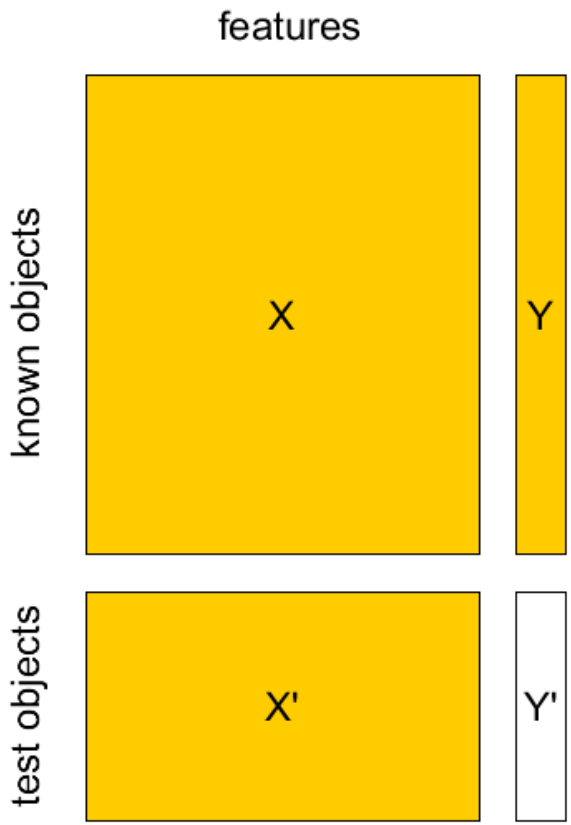
- Как связаны $L(\widehat{w}|X,Y)$ и $L(\widehat{w}|X',Y')$?
- В типичной ситуации

$$L(\widehat{w}|X,Y) < L(\widehat{w}|X',Y')$$

- Эффект растет с ростом переобучения.
- Как получить реалистичную оценку $L(\widehat{w}|X',Y')$?
  - на отдельной *валидационной выборке* (hold-out)
  - кросс-проверка, кросс-валидация (cross-validation)
  - скользящий контроль (leave-one-out)

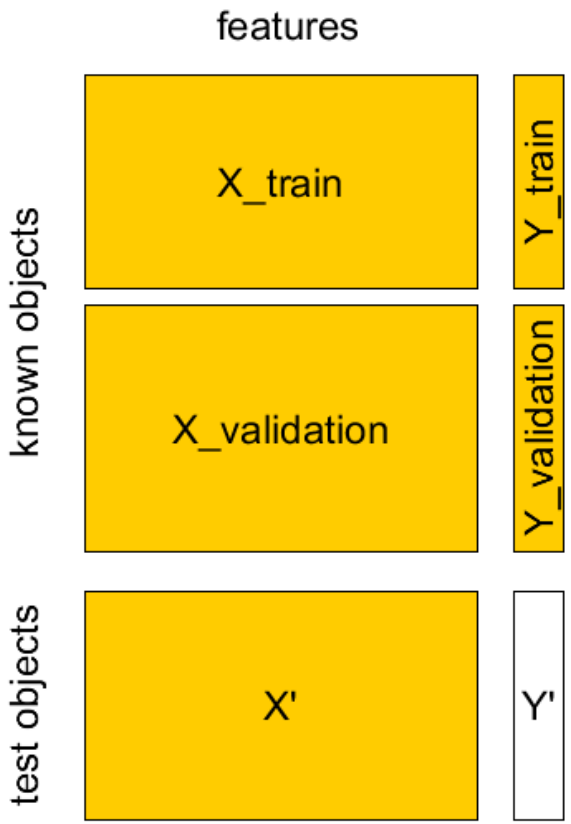
Отдельная валидационная выборка

- Обучающая выборка X, Y: $(x_1, y_1), ...(x_M, y_M)$
- Тестовая выборка X', Y': $(x'_1, y'_1), ...(x'_K, y'_K)$



Отдельная валидационная выборка

Разделим обучающую выборку на ту, где будем обучать модель и оценивать случайно:



Комментарии

- I_{train}, I_{val} - индексы объектов обучающей/валидационной выборки.
- Настройка параметров по

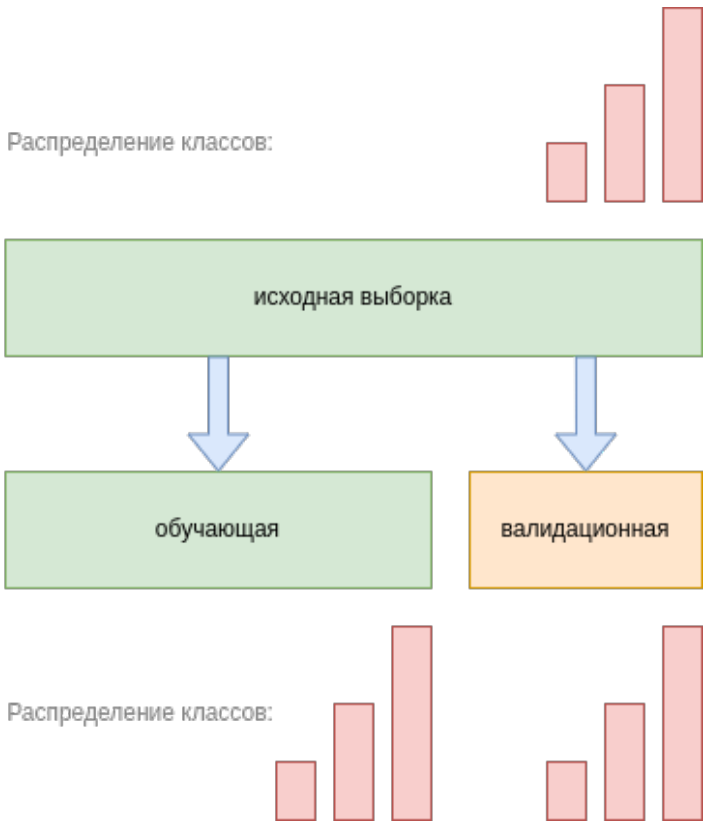
$$L(w|X_{train}, Y_{train}) = \frac{1}{|I_{train}|} \sum_{i \in I_{train}} \mathcal{L}(f_w(x_i), y_i) \to \min_w$$

- Оценка модели:

$$L(w|X_{val}, Y_{val}) = \frac{1}{|I_{val}|} \sum_{i \in I_{val}} \mathcal{L}(f_w(x_i), y_i)$$

Стратификация

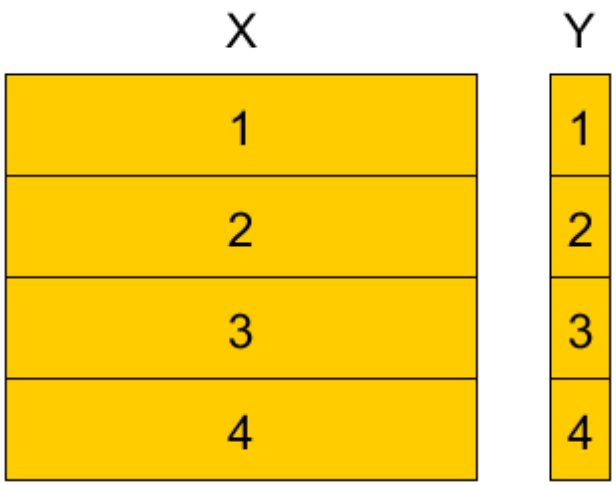
Стратификация (stratification) - сохранение с сохранением априорного распределения классов / дискретного признака.



5 Оценка качества на тесте

- Отдельная валидационная выборка
- Кросс-валидация

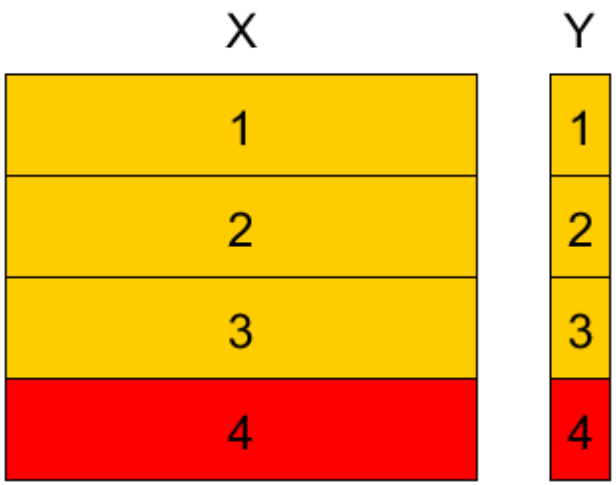
Пример: 4x блоковая кросс-валидация



Разделим обучающую выборку на K частей (блоков) ($K = 4$).

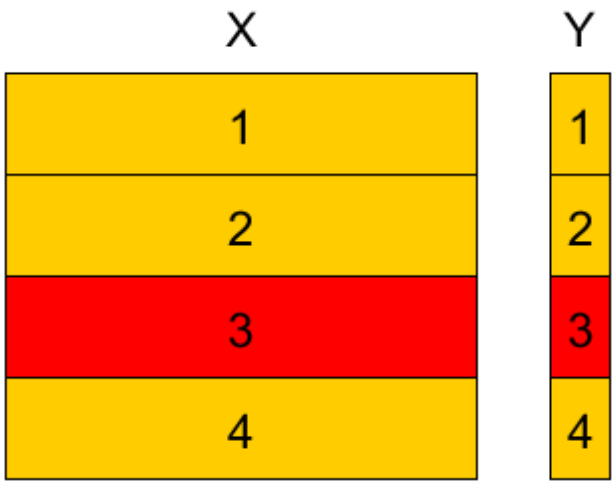
- перед разбиением важно перемешать объекты
- используется предположение независимости объектов

Пример: 4x блоковая кросс-валидация



Блоки 1,2,3 для обучения, а блок 4 - для прогнозов.

Пример: 4x блоковая кросс-валидация

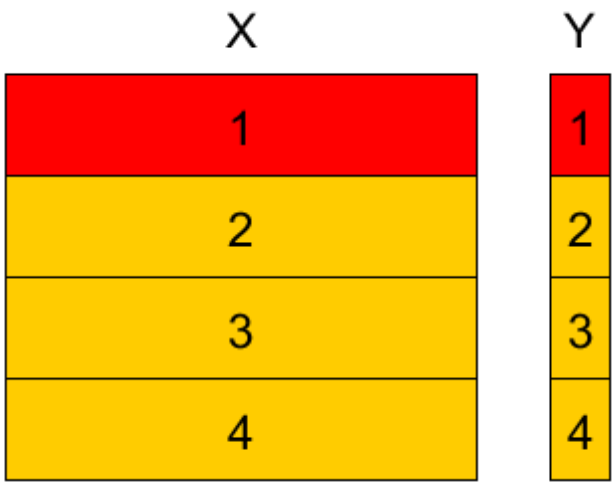


Блоки 1,2,4 для обучения, а блок 2 - для прогнозов.

Пример: 4x блоковая кросс-валидация

Блоки 1,3,4 для обучения, а блок 2 - для прогнозов.

Пример: 4x блоковая кросс-валидация



Блоки 2,3,4 для обучения, а блок 1 - для прогнозов.

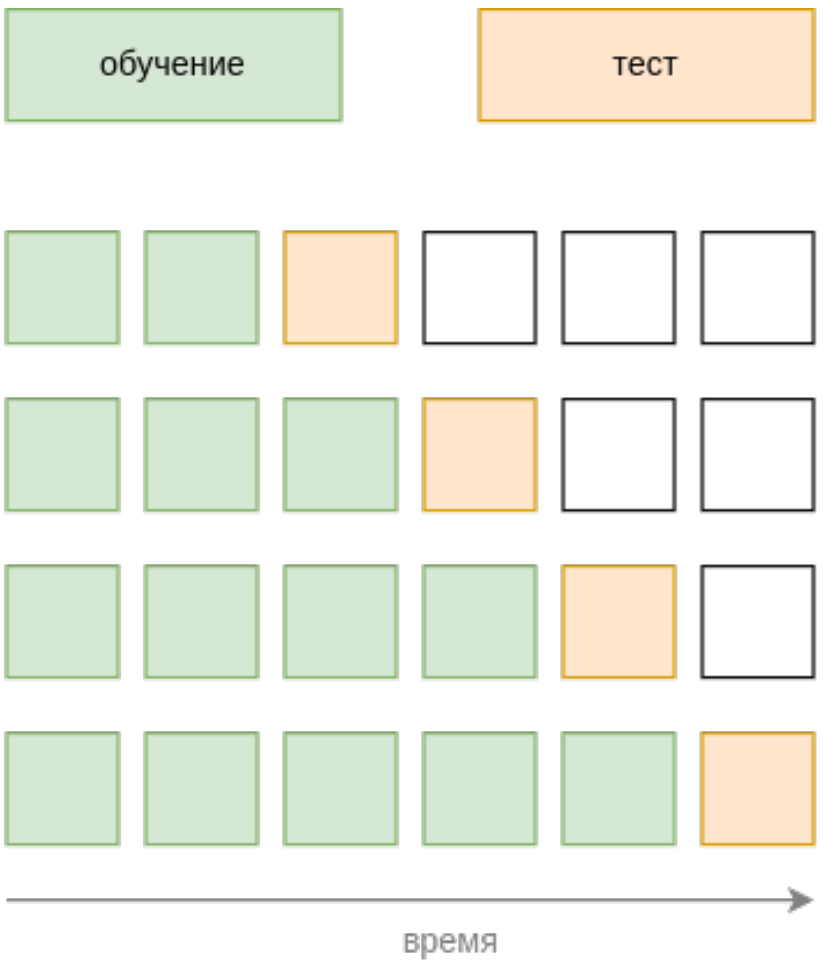
Варианты применения

- Частный случай - скользящий контроль (leave-one-out): $K = N$[3].
- Обычно $K \in [3, 10]$.
- ShuffleSplit: усреднение качества на валидации при K-кратном случайном разбиении на обучение и валидацию.
- После подбора гиперпараметров мы можем
  - настраивать модель с наилучшими гиперпараметрами на всех данных
  - либо строить прогноз как усреднение по уже настроенным K моделям.
    (медленнее, зато получаем $\widehat{y}$ и стд. отклонение!)
- точность 2х подходов нужно сверять эмпирически

[3] Для какого изученного метода его можно посчитать быстро?

Временной ряд

- Для временного ряда качество оценивается по прогнозам только вперёд без перемешивания:



Содержание

MSE, RMSE

Средне-квадратичная ошибка (mean squared error, MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\hat{y}(x_n) - y_n)^2$$

Корень из средне-квадратичной ошибки (root mean squared error, RMSE)

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\hat{y}(x_n) - y_n)^2}$$

RMSE лучше MSE, т.к. измеряет ошибку в той же размерности, что и y.

Коэффициент детерминации

- Коэффициент детерминации R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\hat{y}(x_n) - y_n)^2}{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(y_n - \overline{y})^2}$$

- R^2 принимает значения
  - от $-\infty$ (худший прогноз)
  - до 1 (удеальный прогноз)
  - 0 - качество прогноза равно константе

MSE

- Средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}|\hat{y}(x_n) - y_n|$$

- Настройка по MAE устойчивее к выбросам, чем MSE.

MSE

- Средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}|\hat{y}(x_n) - y_n|$$

- Настройка по MAE устойчивее к выбросам, чем MSE.

- Средняя процентная ошибка
(mean absolute percentage error, MAPE):

$$\text{MAPE} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{|\hat{y}(x_n) - y_n|}{|y_n|},\ \text{MAPE'} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{|\hat{y}(x_n) - y_n|}{\max\{|y_n|, a\}}$$

- $a > 0$ - малая константа, чтобы не делить на ноль.

WAPE

- Взвешенная средняя процентная ошибка (weighted average percentage error, WAPE):

$$\text{WAPE} = \frac{1}{N}\frac{\sum_{n=1}^{N}|\hat{y}(x_n) - y_n|}{\sum_{n=1}^{N}|y_n|}$$

- Это микроусреднение по откликам, а не макроусреднение, как в MAPE.
- Полезна при прогнозировании спроса на товары, когда существует много наблюдений, когда товар вообще не покупался.

Доля плохих прогнозов

- Доля плохих прогнозов:

$$\text{BadFreq} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{I}\{|\hat{y}(x_n) - y_n| > h\}$$

- Доля плохих относительных прогнозов:

$$\text{RelBadFreq} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{I}\left\{\frac{|\hat{y}(x_n) - y_n|}{|y_n|} > h\right\}$$