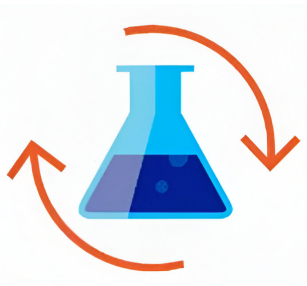


# Преоброцессинг и контроль качества моделей

Виктор Китов

[victorkitov.github.io](https://victorkitov.github.io)

Курс поддержан  
фондом  
'Интеллект'



Победитель  
конкурса VK среди  
курсов по IT



## Преоброцессинг данных

Преоброцессинг 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  $y \rightarrow g(y)$  и обучаем модель на  $\{x_n, g(y_n)\}_n$
- применяем модель, прогноз  $g^{-1}(\hat{y})$
- 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

- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков
- 3 Представление текстов
- 4 Переобучение и недообучение
- 5 Оценка качества на тесте
- 6 Оценка качества регрессии

# Признаки

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

# Признаки

- Можно использовать вещественные признаки и бинарные.
- Вещественные можно дискретизовать
  - Пример: возраст, зарплата. По-разному обрабатываем 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		Row Number	Direction_N	Direction_S	Direction_W	Direction_E	Direction_NW
1	North	→	1	1	0	0	0	0
2	North-West		2	0	0	0	0	1
3	South		3	0	1	0	0	0
4	East		4	0	0	0	1	0
5	North-West		5	0	0	0	0	1
	North-West			0	0	0	0	1
	East			0	0	0	1	0
	South			0	1	0	0	0



# One-hot кодирование (one-hot encoding)

Row Number	Direction		Row Number	Direction_N	Direction_S	Direction_W	Direction_E	Direction_NW
1	North	→	1	1	0	0	0	0
2	North-West		2	0	0	0	0	1
3	South		3	0	1	0	0	0
4	East		4	0	0	0	1	0
5	North-West		5	0	0	0	0	1
	North-West			0	0	0	0	1
	East			0	0	0	1	0
	South			0	1	0	0	0

Какие могут быть проблемы у этого метода?

## Кодирование средним (mean encoding)

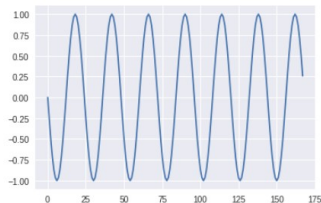
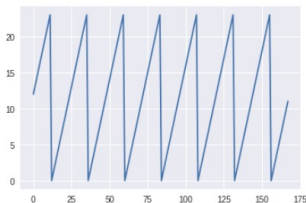
- можно делать по вещественному признаку
- если делаем по y, то на отдельной выборке!

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:

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



Первая компонента при кодировании часа в сутках.

# Содержание

- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков**
- 3 Представление текстов
- 4 Переобучение и недообучение
- 5 Оценка качества на тесте
- 6 Оценка качества регрессии

# Генерация признаков

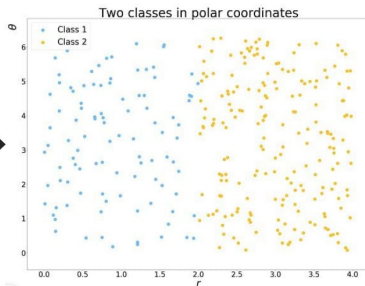
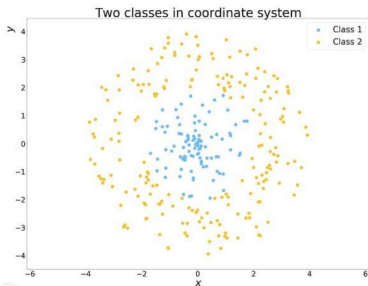
- Генерация признаков (feature engineering) - создание трансформаций из уже известных признаков.
- Хорошая новые признаки существенно повышают качество!
  - см. kaggle соревнования
- Хорошие признаки м.быть свои для каждой модели:
  - линейные трансформации для метрических методов
  - метрические признаки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

## Пример генерации признаков

- Трансформация признаков<sup>1</sup>:

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

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



<sup>1</sup>Источник.

# Популярные трансформации признаков

## Популярные преобразования признаков.

$\phi_k(x)$	примеры
$(x^i)^2, \sqrt{x^i}, \ln x^i$	учитываем нелинейное влияние расстояния до метро на стоимость квартиры
$\mathbb{I}\{x^i \in [a, b]\}$	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 $x^i > a$
$(x^i)(x^j)$	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 репрезентативным объектом $z$
$\ x - z\ ^2$	расстояние от объекта до репрезентативного объекта $z$ (чаще используют близость)



# Содержание

- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков
- 3 Представление текстов**
- 4 Переобучение и недообучение
- 5 Оценка качества на тесте
- 6 Оценка качества регрессии

# Токены в текстах

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

- $x_w = \mathbb{I}[w \text{ встретился в документе}]$
- $x_w = TF_w = \# [w \text{ встретился в документе}]$
- $x_w = TF_w IDF_w, IDF_w = \frac{N}{N_w}$ 
  - $N$  -  $\#$  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 встречающиеся слова)
  - Запустили линейную регрессию. Линейная регрессия показала точность... -> 'линейная регрессия'

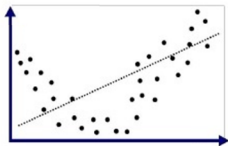
$$\frac{p(w_1 w_2)}{p(w_1)p(w_2)} > threshold$$

# Содержание

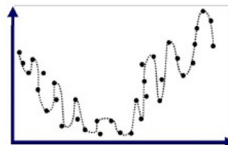
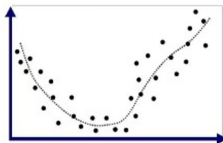
- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков
- 3 Представление текстов
- 4 Переобучение и недообучение**
- 5 Оценка качества на тесте
- 6 Оценка качества регрессии

# 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



недообучение,  
простая модель

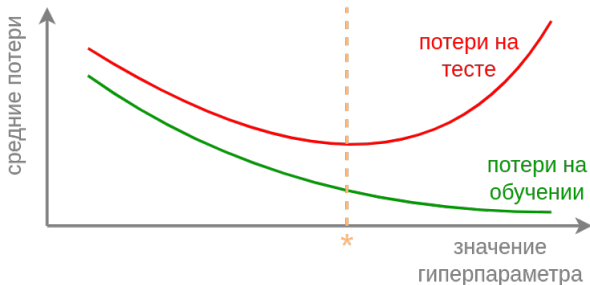


переобучение,  
сложная модель

## Вид переобучения

Зависимость потерь от гиперпараметра

- например,  $K$  в  $K$ -NN,  $\lambda$  в регрессии.



- до \*: недообучение
- после \*: переобучение

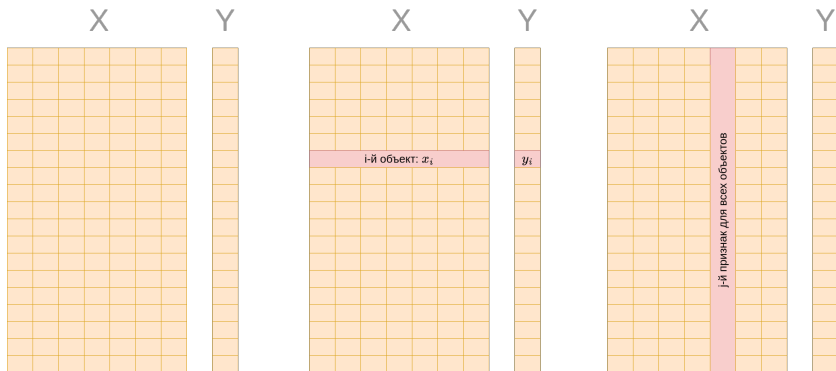


# Содержание

- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков
- 3 Представление текстов
- 4 Переобучение и недообучение
- 5 **Оценка качества на тесте**
  - Отдельная валидационная выборка
  - Кросс-валидация
- 6 Оценка качества регрессии

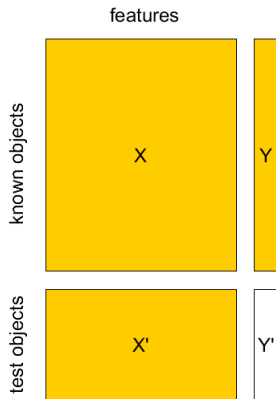
## Обучающая выборка

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



## Обучающая и тестовая выборка

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



## Критерий оптимизации параметров модели

- Необходимо минимизировать **теоретический риск**:

$$\int \int \mathcal{L}(f_w(x), y) p(x, y) dx dy \rightarrow \min_w$$

---

<sup>2</sup>Предполагаем что объекты независимы и одинаково распределены.

## Критерий оптимизации параметров модели

- Необходимо минимизировать **теоретический риск**:

$$\int \int \mathcal{L}(f_w(x), y) p(x, y) dx dy \rightarrow \min_w$$

- Но мы можем минимизировать только **эмпирический риск**<sup>2</sup>:

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

- Параметры находим из условия:

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

---

<sup>2</sup>Предполагаем что объекты независимы и одинаково распределены.

## Эмпирический риск на тестовой выборке

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

## Эмпирический риск на тестовой выборке

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

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

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

## Эмпирический риск на тестовой выборке

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

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

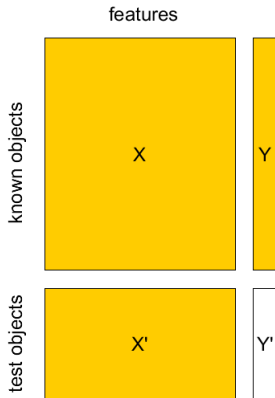
- Эффект растет с ростом переобучения.
- Как получить реалистичную оценку  $L(\hat{w}|X', Y')$ ?
  - на отдельной *валидационной выборке* (hold-out)
  - кросс-проверка, кросс-валидация (cross-validation)
  - скользящий контроль (leave-one-out)



- 5 Оценка качества на тесте
  - Отдельная валидационная выборка
  - Кросс-валидация

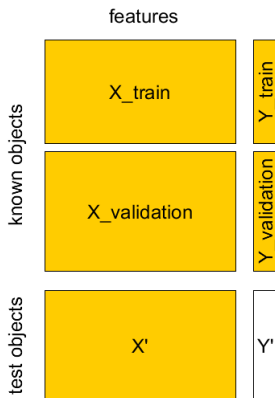
## Отдельная валидационная выборка

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



## 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

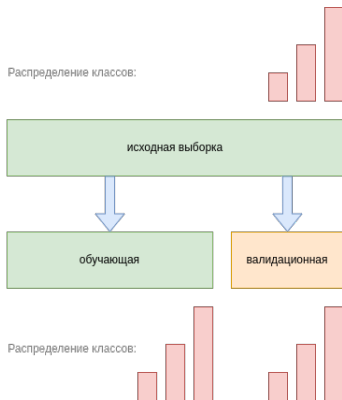
$$L(w|X_{train}, Y_{train}) = \frac{1}{|I_{train}|} \sum_{i \in I_{train}} \mathcal{L}(f_w(x_i), y_i) \rightarrow \min_w$$

- 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) - разбиение с сохранением априорного распределения классов / дискретного признака.



- 5 Оценка качества на тесте
  - Отдельная валидационная выборка
  - Кросс-валидация

## Пример: 4х блоковая кросс-валидация

X	Y
1	1
2	2
3	3
4	4

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

- перед разбиением важно перемешать объекты
- используется предположение независимости объектов

## Пример: 4х блоковая кросс-валидация

X	Y
1	1
2	2
3	3
4	4

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



## Пример: 4х блоковая кросс-валидация

X	Y
1	1
2	2
3	3
4	4

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

## Пример: 4х блоковая кросс-валидация

X	Y
1	1
2	2
3	3
4	4

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

## Пример: 4х блоковая кросс-валидация

X	Y
1	1
2	2
3	3
4	4

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

## Варианты применения

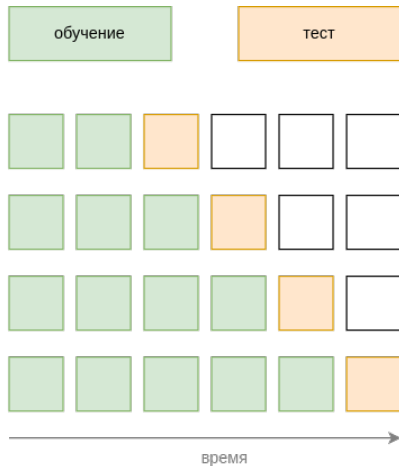
- Частный случай - скользящий контроль (leave-one-out):  
 $K = N^3$ .
- Обычно  $K \in [3, 10]$ .
- ShuffleSplit: усреднение качества на валидации при  $K$ -кратном случайном разбиении на обучение и валидацию.
- После подбора гиперпараметров мы можем
  - настраивать модель с наилучшими гиперпараметрами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

---

<sup>3</sup>Для какого изученного метода его можно посчитать быстро?

## Временной ряд

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



# Содержание

- 1 Кодирование признаков
- 2 Генерация признаков
- 3 Представление текстов
- 4 Переобучение и недообучение
- 5 Оценка качества на тесте
- 6 Оценка качества регрессии**

## 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  $R^2$ :

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

- $R^2$  принимает значения
  - от  $-\infty$  (худший прогноз)
  - до 1 (идеальный 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):

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

- $a > 0$  - 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:

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