Прикладные задачи анализа данных

Функции ошибки / функционалы качества

Дьяконов А.Г.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

Задача

Дано

Найти

Критерий

Построить алгоритм легко!

Чтобы улучшить… надо уметь оценивать.

~~Метрики~~

- **функции ошибки**
- **функционалы качества**

Функции ошибки / функционалы качества

Пожалуй, самое главное, при решении задачи…

а что такое решение!

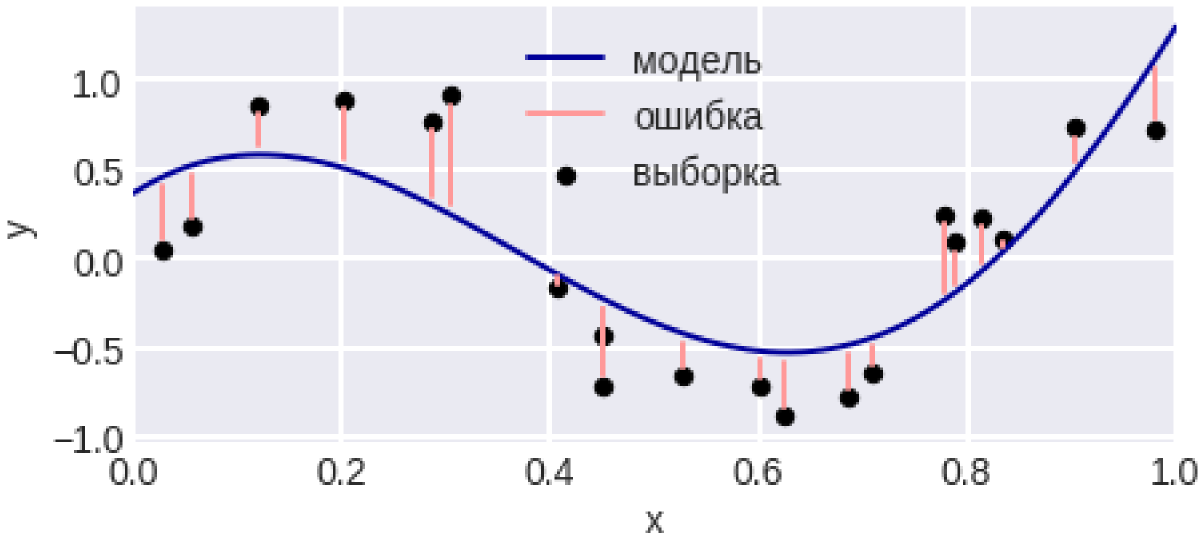
В анализе данных:

- **формализация ответа (формат)**
- **как ответ оценивается (критерий качества)**

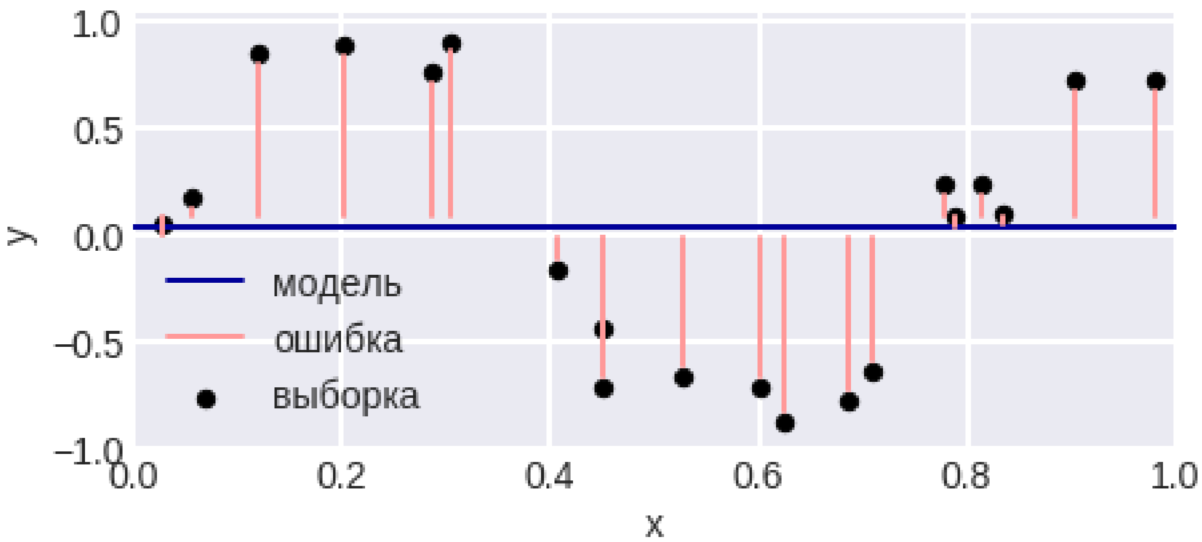
Случай из практики: задача про траектории зрачка

(задача с 3 классами, а не с двумя)

Задача регрессии



Задача регрессии

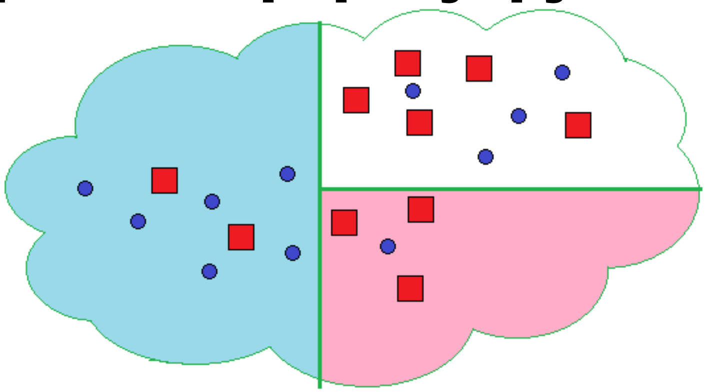


Будем дальше пытаться всё решать в классе констант

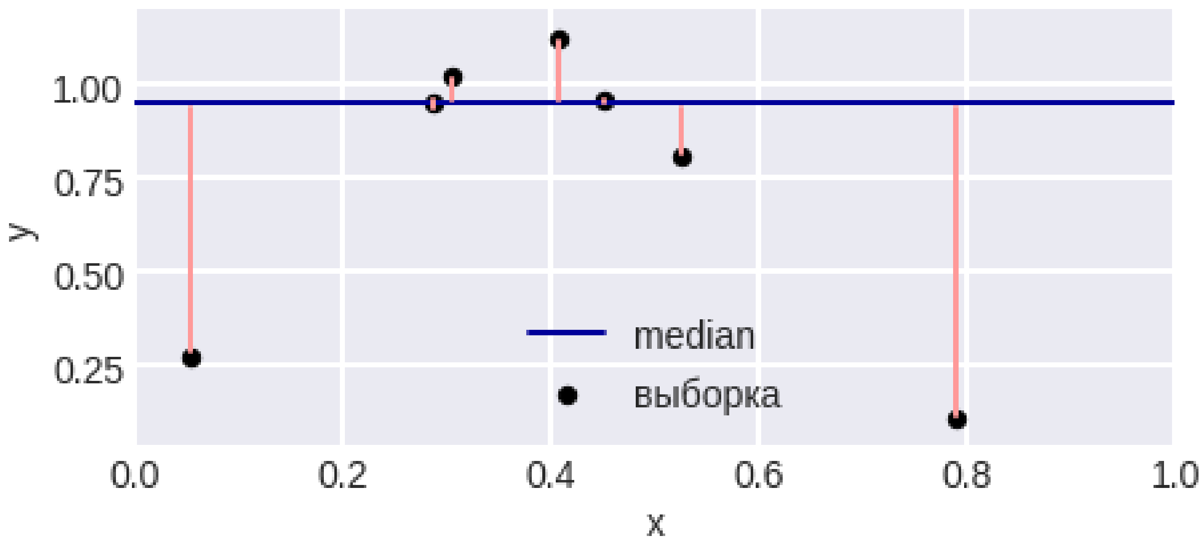
1. Простейшее решение

2. Примерно это и происходит в листьях обобщённых деревьев

3. Раскрывает природу функционалов



Средний модуль отклонения – Mean Absolute Error (MAE), Mean Absolute Deviation (MAD)



$$MAE = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | a_i - y_i |$$

Напоминание:

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | a - y_i | \to \min$$

$$a = \operatorname{median}(\{y_i\}_{i=1}^{q})$$

Это открывает смысл решений!

Средний модуль отклонения

Способы использования тайных знаний:

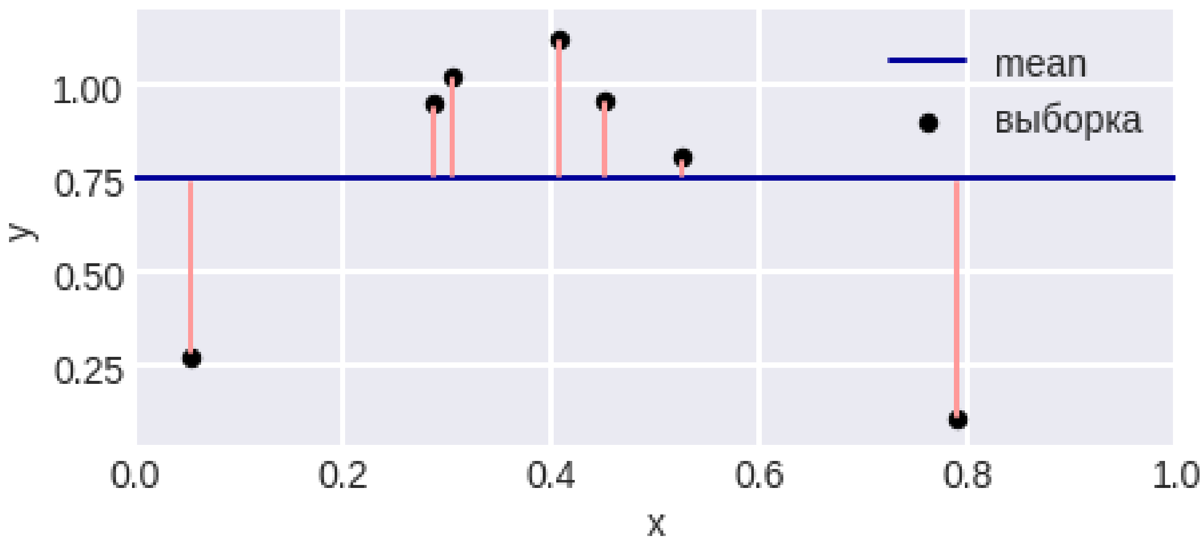
- **медиана, вместо усреднения, в ансамбле**
- **округление ответа (если целевой вектор целочисленный)**

Средний квадрат отклонения ~ Mean Squared Error (MSE)

$$MSE = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | a_i - y_i |^2$$

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | a - y_i |^2 \to \min$$

$$a = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} y_i$$



Root Mean Squared Error (RMSE)
или Root Mean Square Deviation (RMSD)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | a_i - y_i |^2}$$

Средний квадрат отклонения ~ Mean Squared Error (MSE)

Способы использования тайных знаний

- ничего не делать (в RF, GBM и т.д. всё равно усредняют)

- метод НСКО – классическая регрессия!

Обобщения

$$\sqrt[p]{\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} w_i \,|\, \varphi(a_i) - \varphi(y_i) \,|^p}$$

Рецепты

1. Преобразование целевого вектора $\varphi(y)$

2. Веса ~ вероятности появления объектов в сэмплировании

3. В случае нетривиальных p **– прямая настройка**

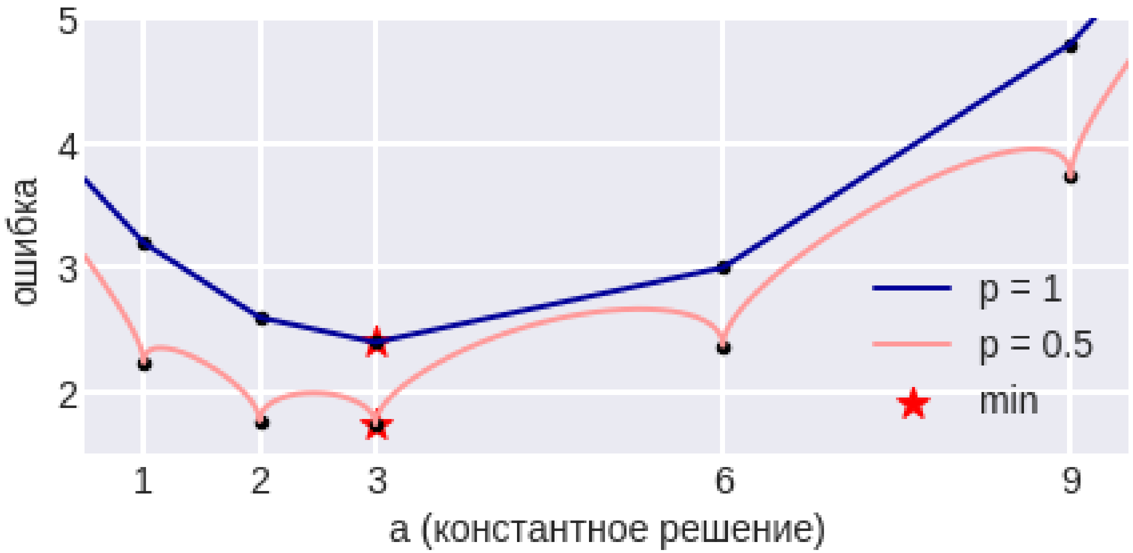
Прямая настройка – пример

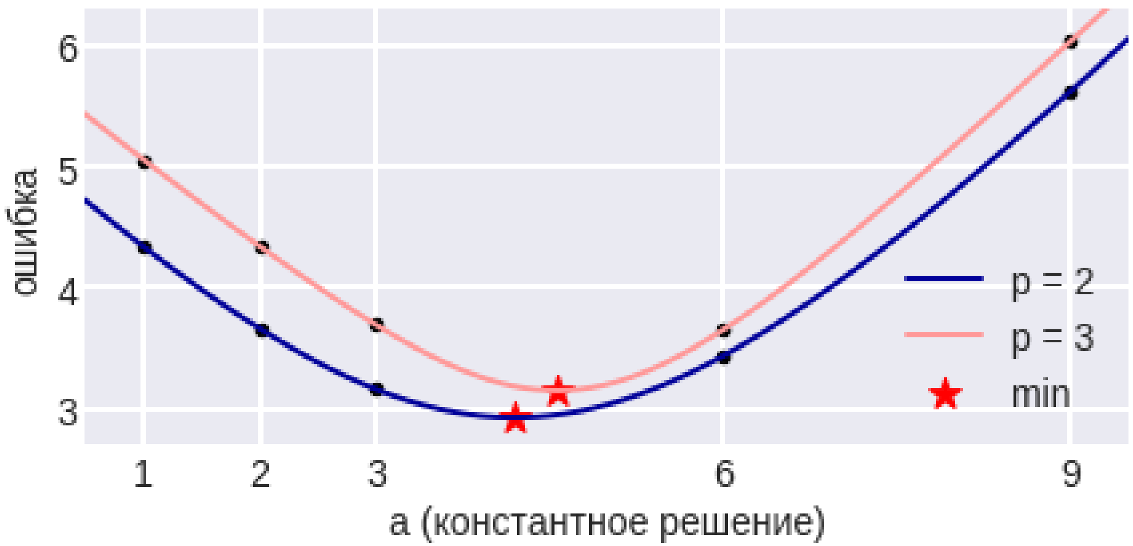
$$F(\underbrace{B}_{\text{стандартная оптимизация}} \cdot \underbrace{C_c}_{\text{простое РР}}) \to \min_c$$

Как в задаче CrowdFlower (выбор порогов)

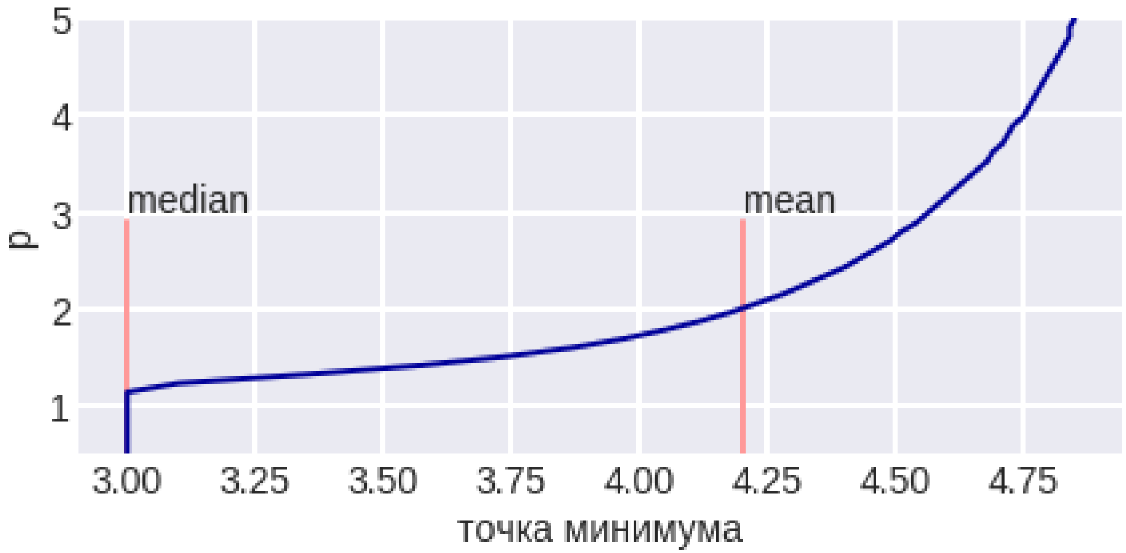
Есть обобщения, где берётся медиана, а не усреднение!

Про нетривиальные p





Как точка минимума зависит от степени



Symmetric mean absolute percentage error (SMAPE or sMAPE)

$$\mu = \frac{2}{q}\sum_{i=1}^{q}\frac{|y_i - a_i|}{y_i + a_i} = 100\% \cdot \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\frac{|y_i - a_i|}{(y_i + a_i)/2}$$

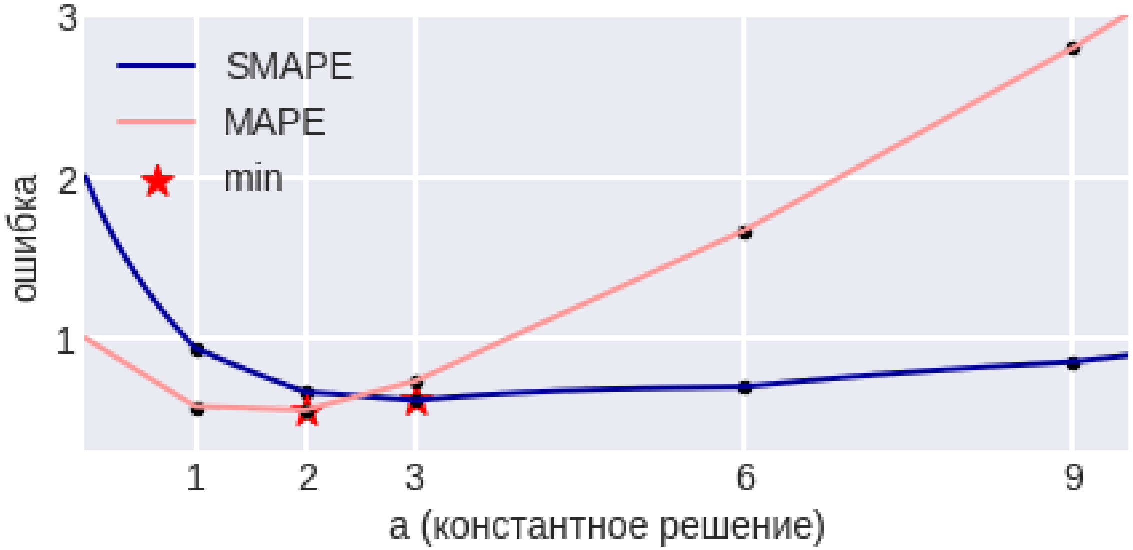
Когда надо интерпретировать погрешность как проценты

- плохо, если есть нули (и отрицательные значения)

Mean Absolute Percent Error (MAPE)

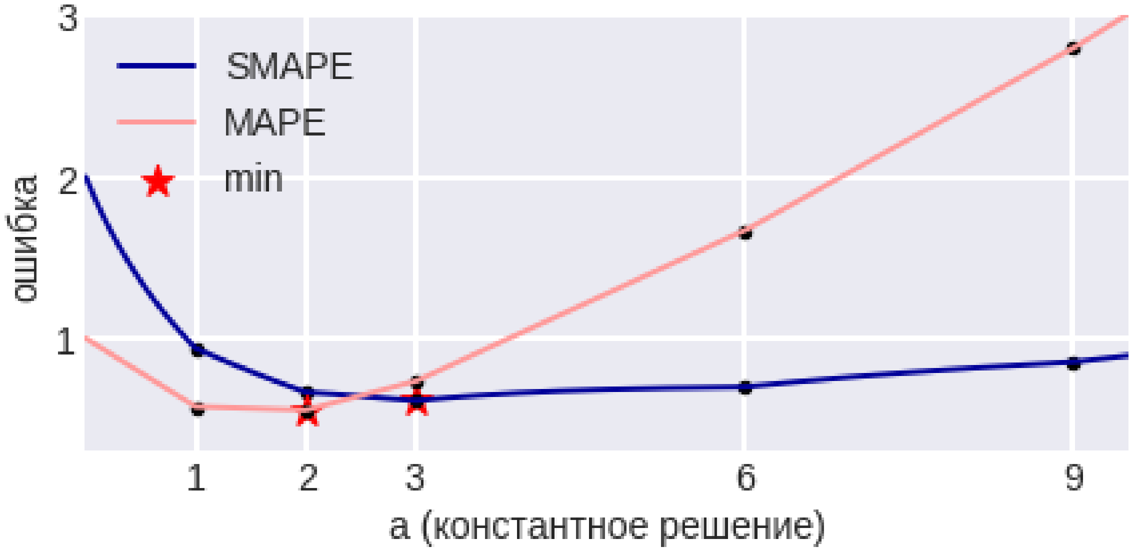
$$100\% \cdot \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\frac{|y_i - a_i|}{|y_i|}$$

Symmetric mean absolute percentage error (SMAPE or sMAPE)

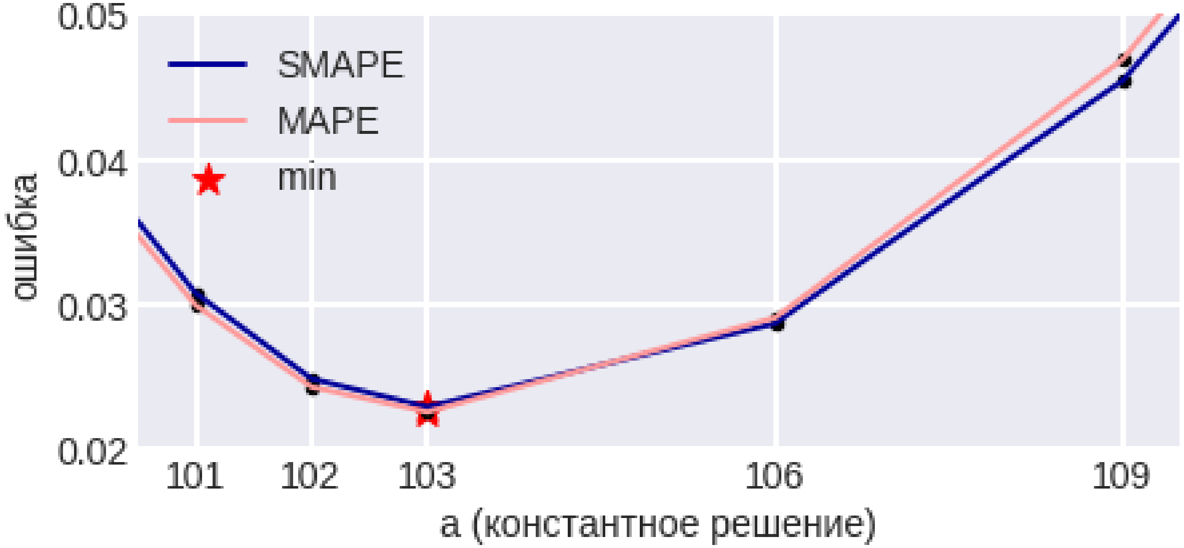


Что настораживает в этом графике?

Symmetric mean absolute percentage error (SMAPE or sMAPE)



Масштаб!



PMAD

$$PMAD = \frac{\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | y_i - a_i |}{\sum_{i=1}^{q} | y_i |}$$

Меры на сравнении с бенчмарком

Классная идея:
сделать простой алгоритм и смотреть ошибку относительно его.

$$r_i = e_i / e'_i$$

Mean Relative Absolute Error (MRAE)

$$MRAE = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | r_i |$$

Меры на сравнении с бенчмарком

а можно так…

$$REL\_MAE = \frac{\sum_{i=1}^{q} | y_i - a_i |}{\sum_{i=1}^{q} | y_i - a'_i |}$$

или Percent Better

$$PB(MAE) = \frac{1}{q} \sum_{i=1}^{q} I[| y_i - a_i | < | y_i - a'_i |]$$

Как выбрать бенчмарк в задачах прогнозирования?

Нормированные ошибки

Не зависят от шкалы…

$$q_t = \frac{e_t}{\frac{1}{q-1}\sum_{i=2}^{q} | y_i - y_{i-1} |}$$

Mean Absolute Scaled Error

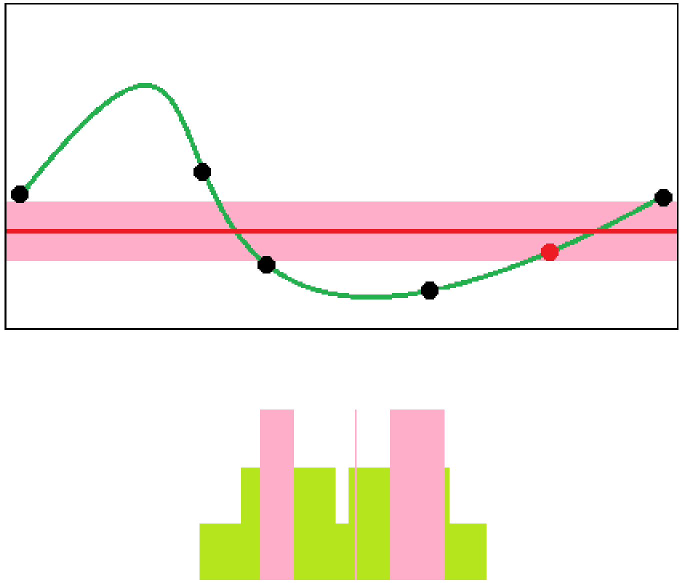
$$MASE = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} | q_i |$$

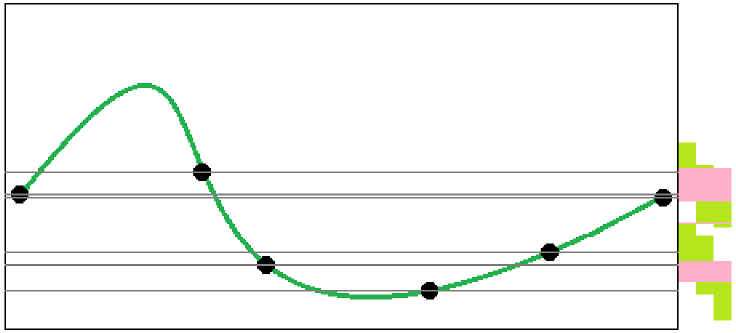
Какие ещё бывают функционалы в регрессии?

С точностью до порога

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} I[|y_i - a_i| < \varepsilon]$$

(это функционал качества) был в задаче Dunnhumby



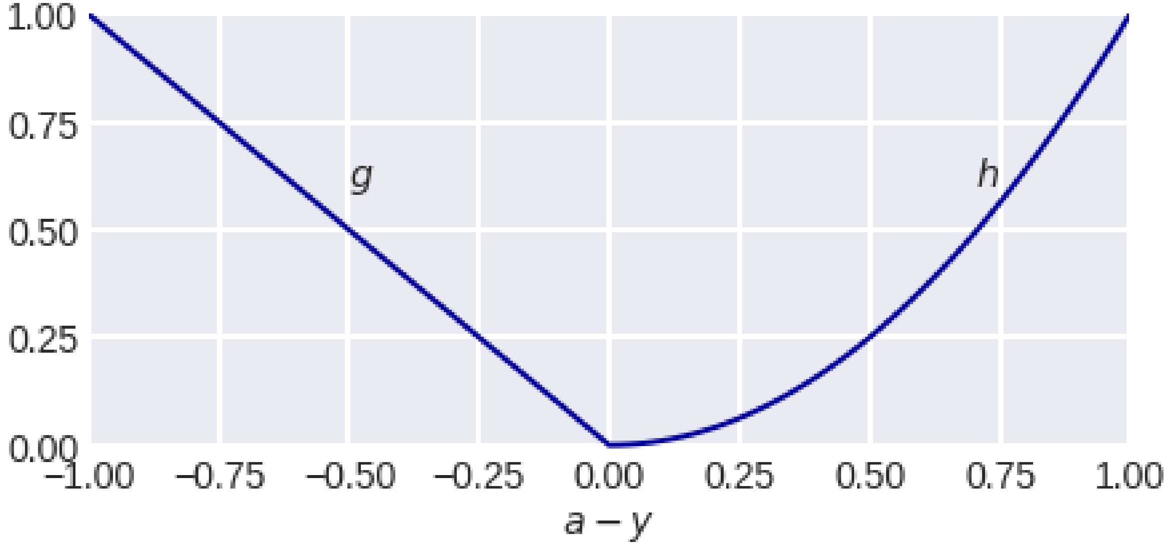


Минимизация графика ошибки (на вертикали)

Мы всегда его минимизируем – не только здесь!

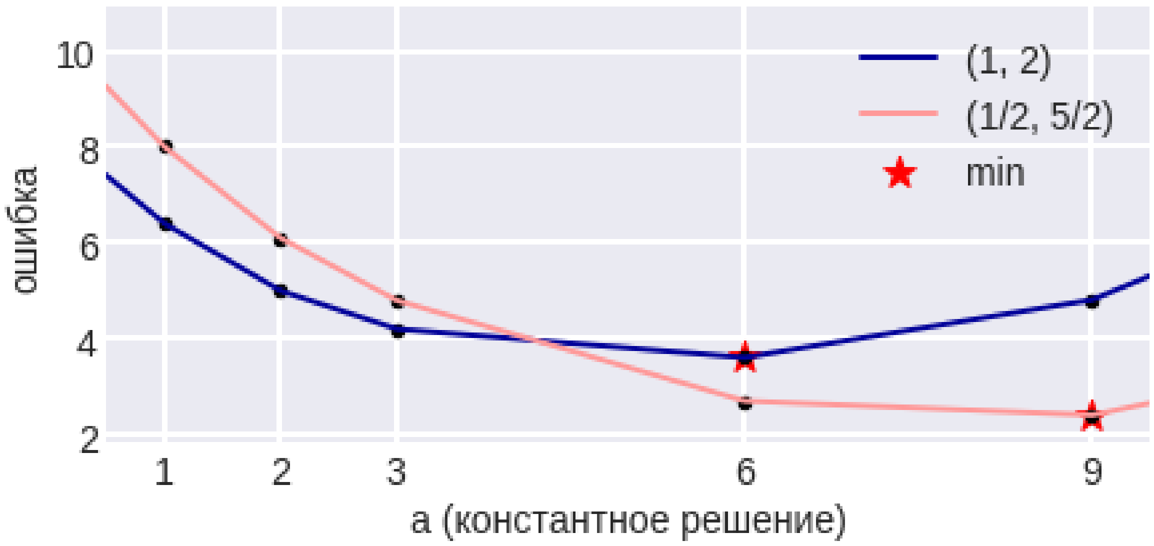
Несимметричные функции потерь

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\begin{cases} g(|y_i - a_i|), & y_i < a_i, \\ h(|y_i - a_i|), & y_i \geq a_i, \end{cases}$$



Зачем нужны такие функции?

Несимметричные функции потерь



$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\begin{cases} k_2\,|\,y_i - a_i\,|, & y_i < a_i, \\ k_1\,|\,y_i - a_i\,|, & y_i \geq a_i, \end{cases}$$

Совет

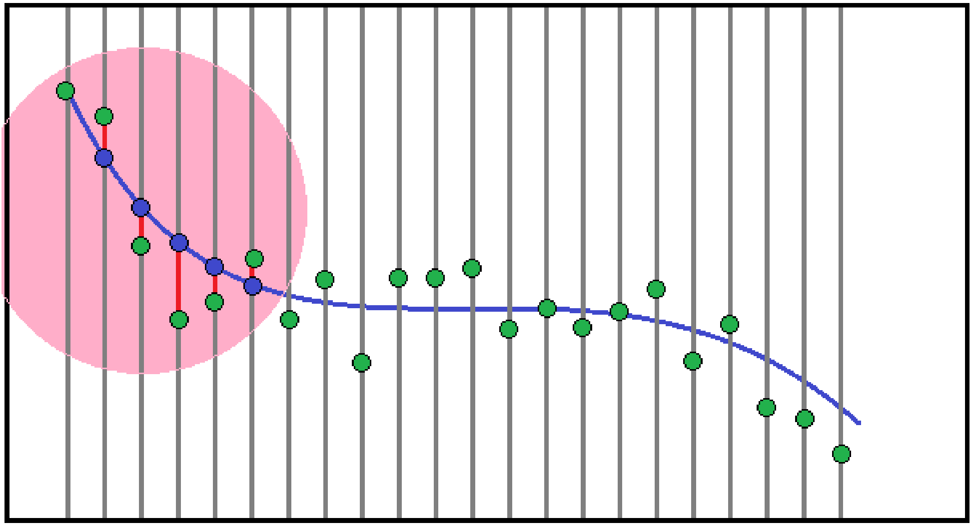
Функции ошибок иногда и классные признаки…

Пример: **в Casuality придумываем бенчмарки (восстановление одной переменной по другой), признаки – их относительные ошибки, т.к. абсолютные брать нельзя**

Почему?

Совет

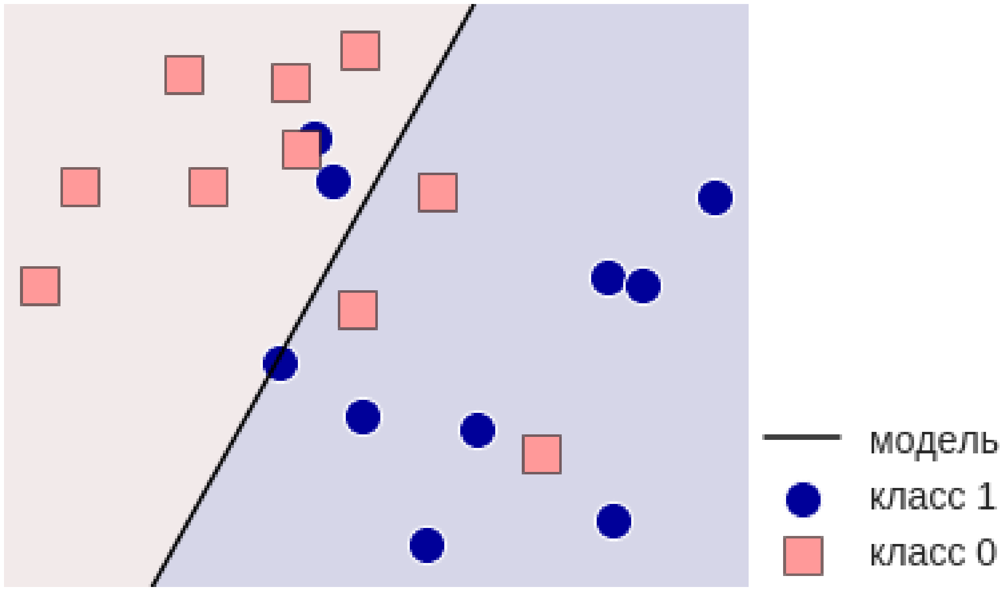
Аналогично во многих задачах с сигналами…



Признак – не только коэффициенты в приближении, но и ошибка приближения!

~ отклонение от типичного поведения

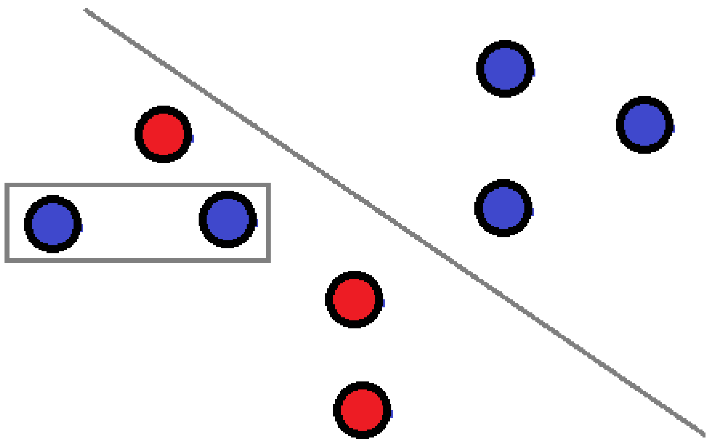
Задача классификации



Обычная точность – Accuracy, Mean Consequential Error

$$MCE = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} I[a_i = y_i]$$

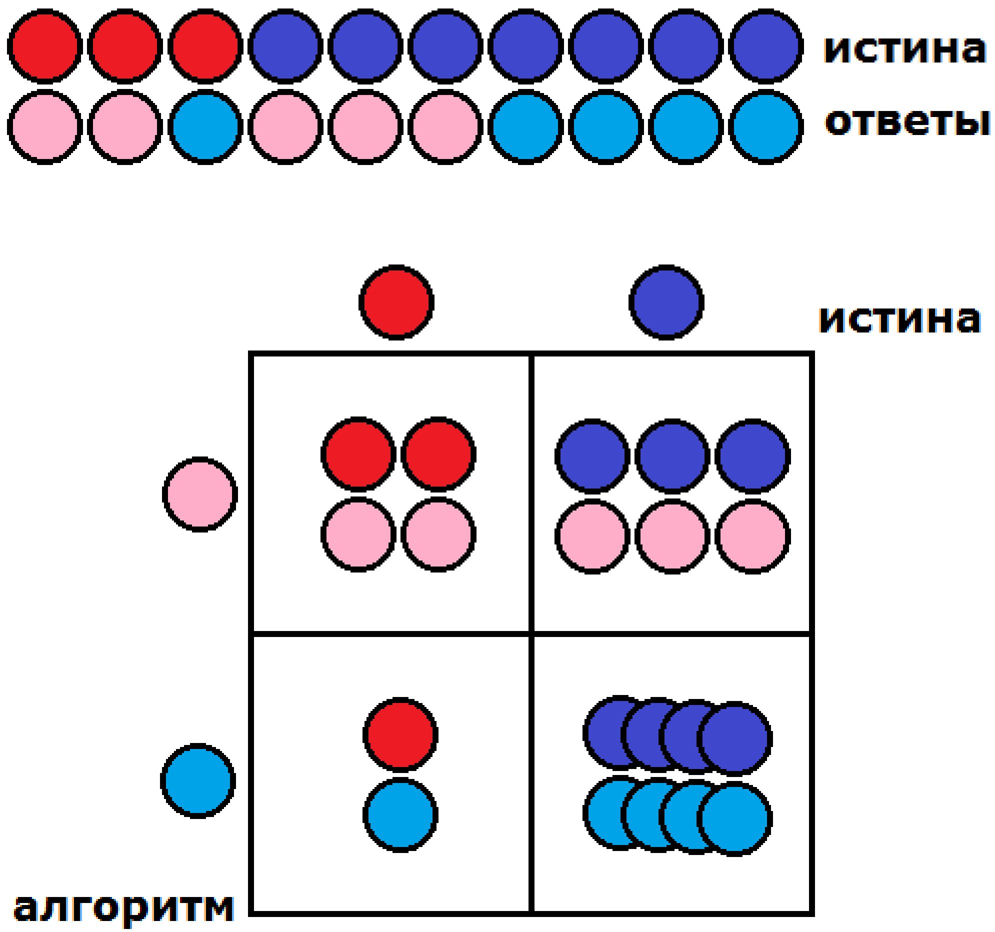
- **первое, что приходит в голову**
- **не учитывает разную мощность классов**



y = [0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,0,0,0]

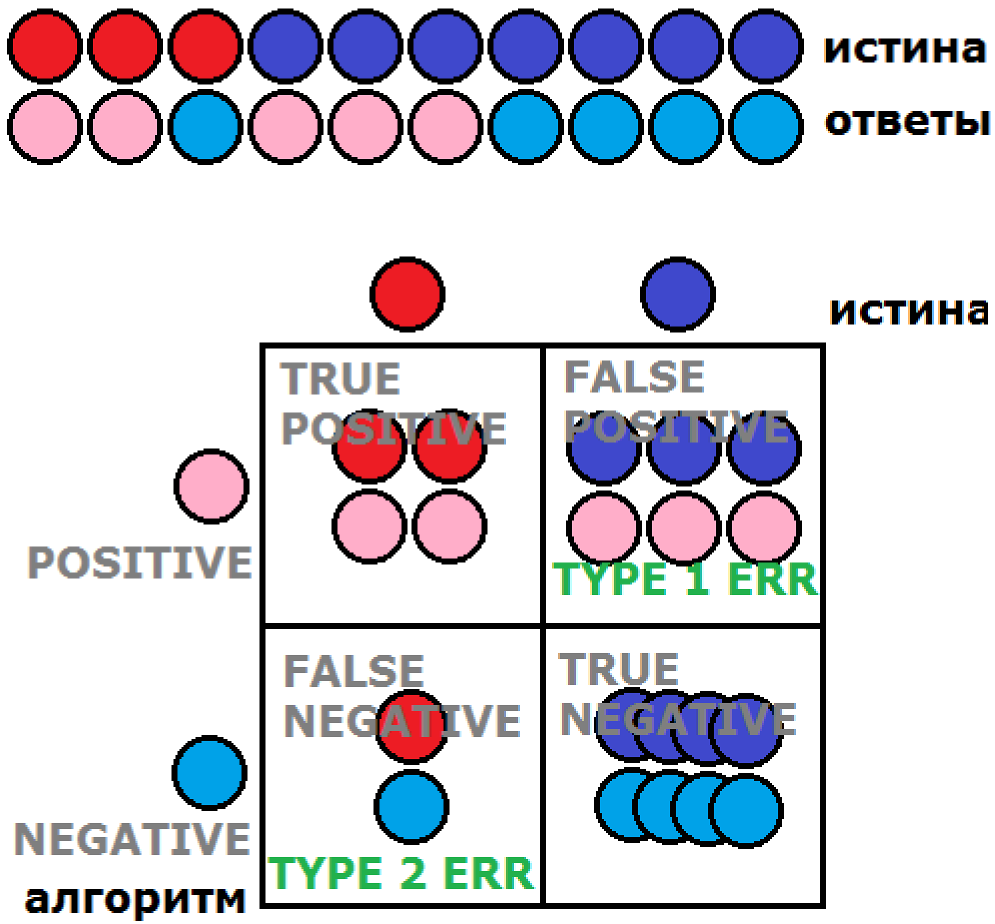
Выгодно выдавать решение – константу 0!

Задача классификации с двумя классами



Confusion Matrix

Задача классификации с двумя классами



Как запомнить названия ошибок

1 рода – не учил, но сдал (= знает по мнению экзаменатора)

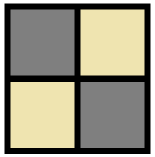
2 рода – учил, но не сдал (= не знает по мнению экзаменатора)

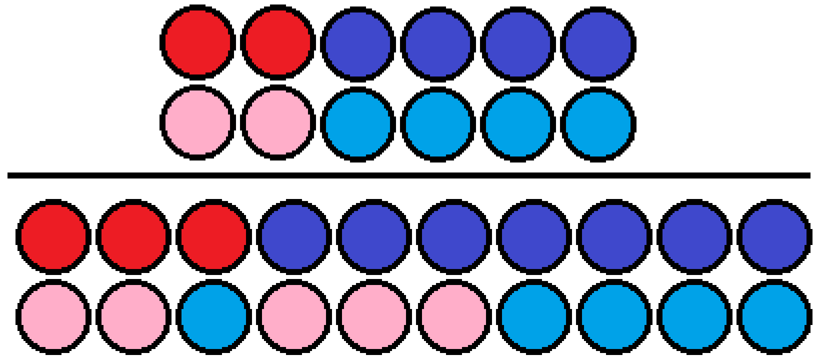
Ошибка 1 рода

Ошибка 2 рода

Точность Accuracy

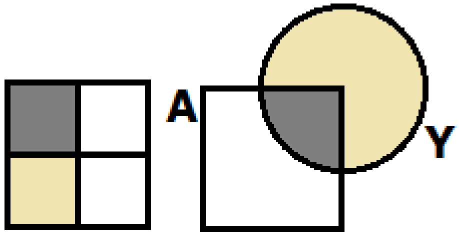
$$\mathrm{ACC} = \frac{\mathrm{TP}+\mathrm{TN}}{\mathrm{ALL}}$$

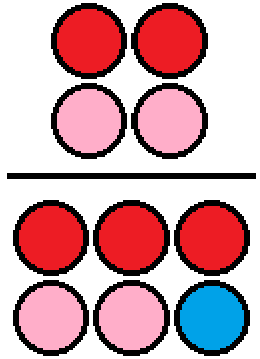




Полнота (Sensitivity, True Positive Rate, Recall, Hit Rate)

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

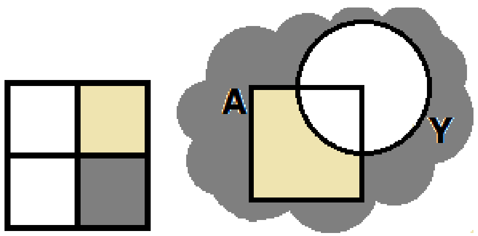


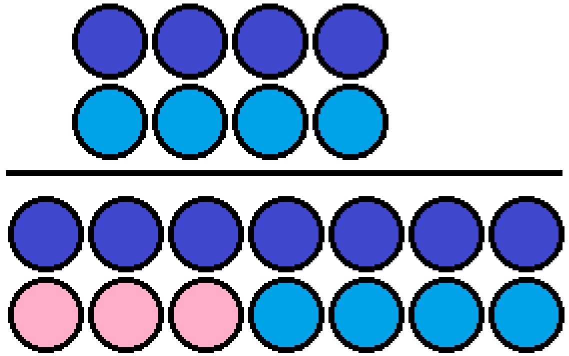


TPR = TP / сколько правда 1

Specificity (True Negative Rate)

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

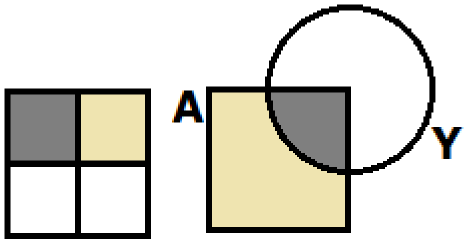


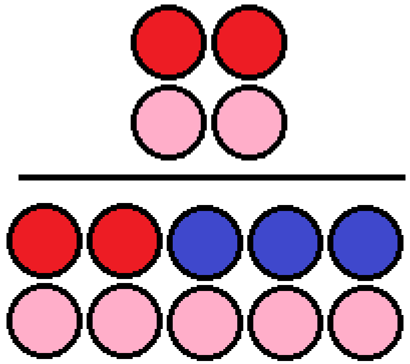


FPR = 1 – Specificity

Точность (Precision, Positive Predictive Value)

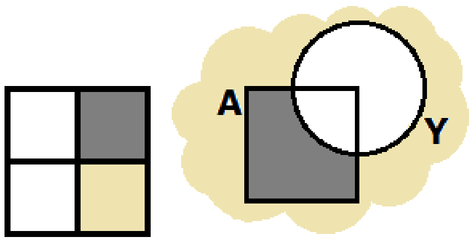
$$PPV = \frac{TP}{TP + FP}$$

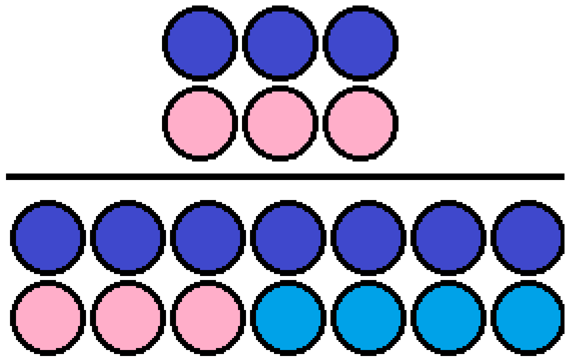




False Positive Rate (FPR, fall-out, false alarm rate)

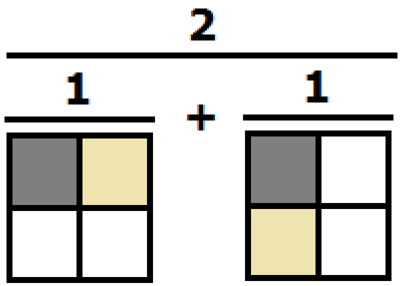
$$FPR = \frac{FP}{FP + TN}$$





FPR = FP / сколько правда 0

F_1 score



$$\frac{2}{\dfrac{1}{TP/(TP+FP)}+\dfrac{1}{TP/(TP+FN)}}=$$

$$=\frac{2TP}{2TP+FP+FN}$$

F_β score

$$\frac{1}{\dfrac{\alpha}{P}+\dfrac{1-\alpha}{R}}=\frac{PR}{\alpha R+(1-\alpha)P}=$$

$$=\frac{1}{\alpha}\frac{PR}{R+\left(\dfrac{1}{\alpha}-1\right)P}$$

$$\beta^2=\left(\frac{1}{\alpha}-1\right)$$

$$F_\beta=(1+\beta^2)\frac{PR}{R+\beta^2 P}$$

Задача бинарной классификации

Теперь выдаём оценку принадлежности к классу 1

$$y \in \{0, 1\}$$

$$a \in [0, 1]$$

Log Loss

В задаче классификации с двумя непересекающимися классами (0, 1), когда ответ вероятность (?) принадлежности к классу 1

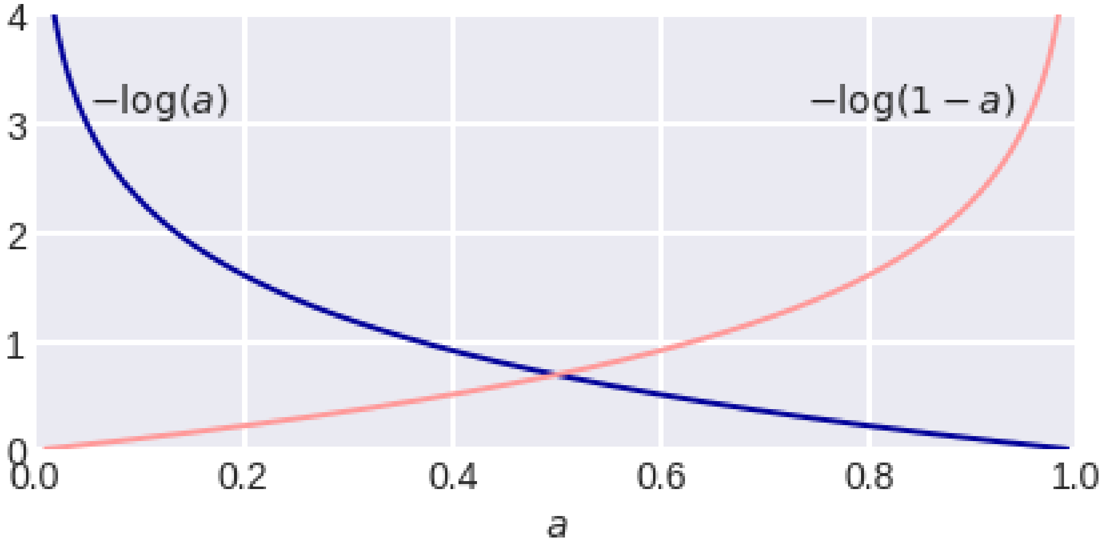
$$LOGLOSS = -\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i \log a_i + (1-y_i)\log(1-a_i))$$

На что похоже?

Так понятнее…

$$-\begin{cases} \log a_i, & y_i = 1, \\ \log(1-a_i), & y_i = 0. \end{cases}$$

Нельзя ошибаться!



Log Loss

В задаче классификации с двумя непересекающимися классами (0, 1), когда ответ вероятность (?) принадлежности к классу 1

$$\mathrm{LOGLOSS} = -\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i \log a_i + (1 - y_i)\log(1 - a_i))$$

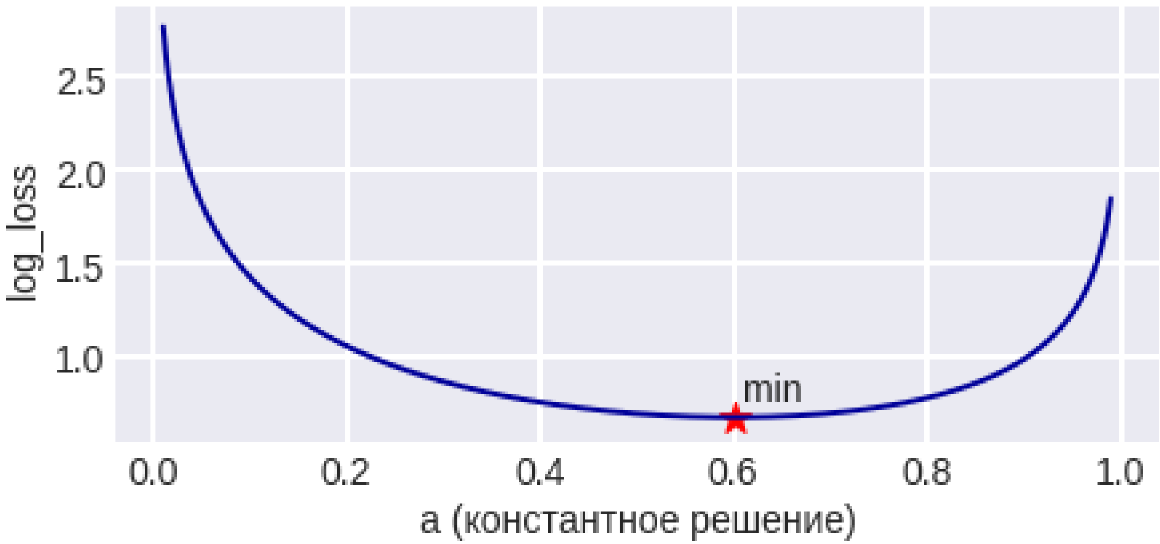
На что похоже?

Вспоминаем…

$$\Pi = \prod_{i=1}^{n} \pi_p(x_i) = p^m (1-p)^{n-m} \sim$$

$$\frac{1}{n}(m \log p + (n-m)\log(1-p))$$

Log Loss – Оптимальная константа



$$-\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(y_i \log a + (1-y_i)\log(1-a)) \to \min_a$$

$$-\frac{q_1}{q}\log a - \frac{q_0}{q}\log(1-a) \to \min_a$$

$$a = \frac{q_1}{q}$$

Интерпретация константного решения

Посчитаем матожидание ошибки –

у нас один (i-й) объект, который с вероятностью p принадлежит классу 1.

$$-p\log(a_i)-(1-p)\log(1-a_i)$$

Минимизируем это выражение:

$$\frac{p}{a_i}-\frac{1-p}{1-a_i}=0$$

$$a_i=p$$

О чудо!

Но так не всегда...

Вот почему используют log_loss

Log Loss

В каких пределах варьируется log_loss?

Какие недостатки log_loss?

Log Loss

В каких пределах варьируется log_loss?

$$[0, -p\log p - (1-p)\log(1-p)]$$

Если логарифм по основанию 2, то на сбалансированной выборке это $[0, 1]$

Какие недостатки log_loss?

Его значение неинтерпретируемы…

Задача классификации {0,1} с ответами на [0,1]

Реальный случай

Пусть ошибка:

$$| y_i - a_i | \cdot \begin{cases} 0.8, & y_i = 1, \\ 0.2, & y_i = 0, \end{cases} \quad \textbf{(*)}$$

где $y_i \in \{0,1\}$ **– верная классификация** i**-го объекта,**

$a_i \in [0,1]$ **– ответ нашего алгоритма.**

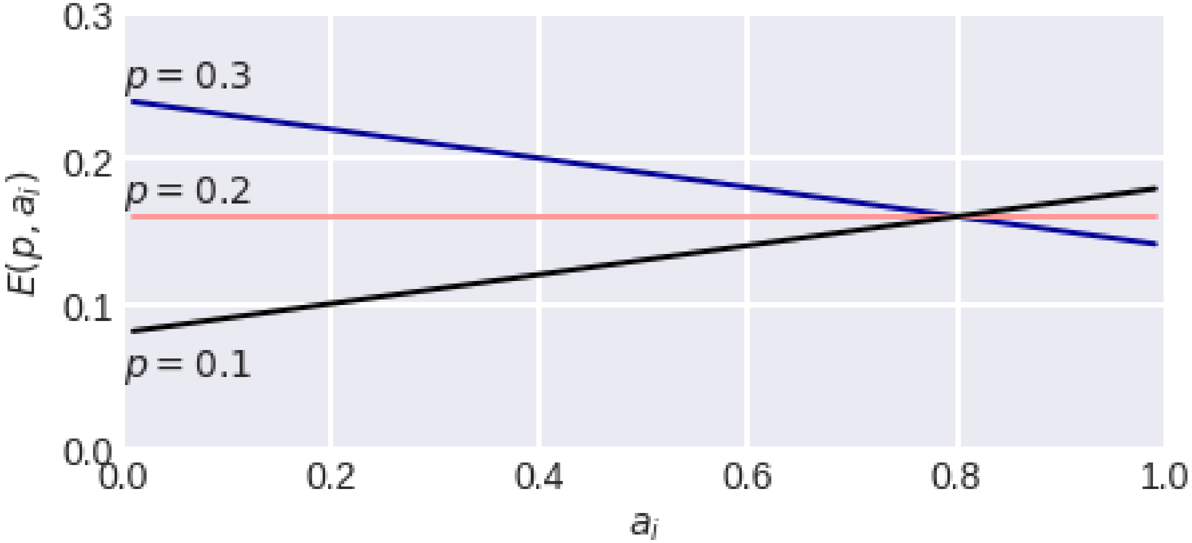
Заказчик: **важно получать значения из отрезка [0,1]**
и интерпретировать как вероятности принадлежности к классу 1

Вычисление матожидания ошибки

Пусть i-й объект принадлежит к классу 1 с вероятностью p

Посчитаем матожидание нашей ошибки:

$$0.8\,|1-a_i|\,p+0.2\,|a_i|\,(1-p)=$$
$$=0.8p-0.8pa_i+0.2a_i-0.2pa_i=$$
$$=0.8p-(p-0.2)a_i$$



Вычисление матожидания ошибки

$$0.8p-(p-0.2)a_i \to \min$$

Оптимальное решение

(которое минимизирует матожидание ошибки)

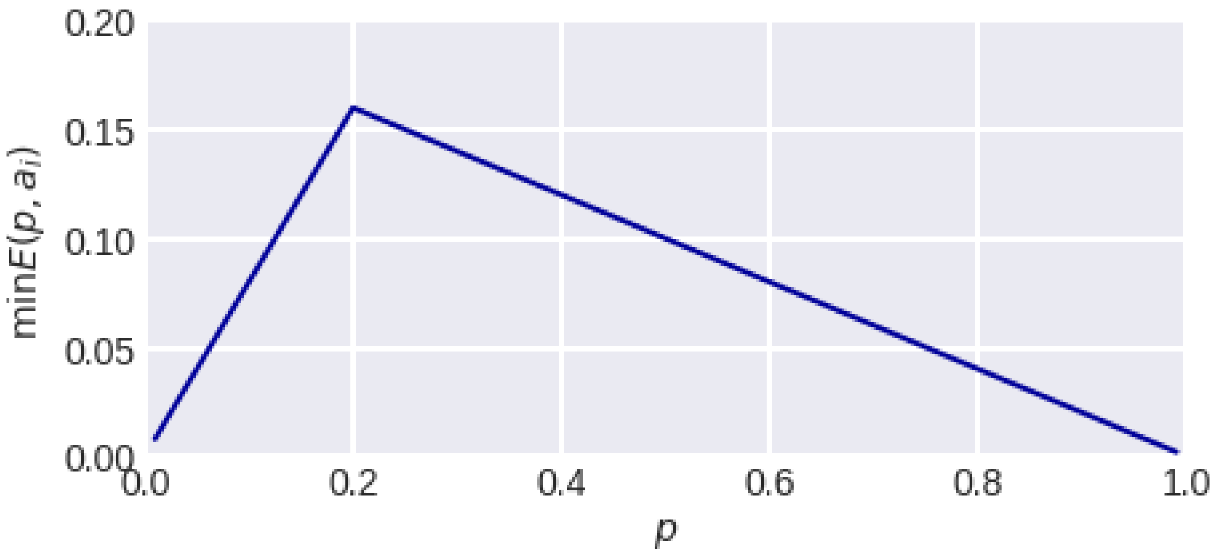
$$a_i = \begin{cases} 0, & p < 0.2, \\ 1, & p \geq 0.2. \end{cases}$$

Функционал (*) вынуждает нас выдавать значения из множества {0,1}.

В чём ошибка заказчика, как исправить?

Неправильный выбор функционала

Интересно... матожидание ошибки (при оптимальном решении) в зависимости от p.



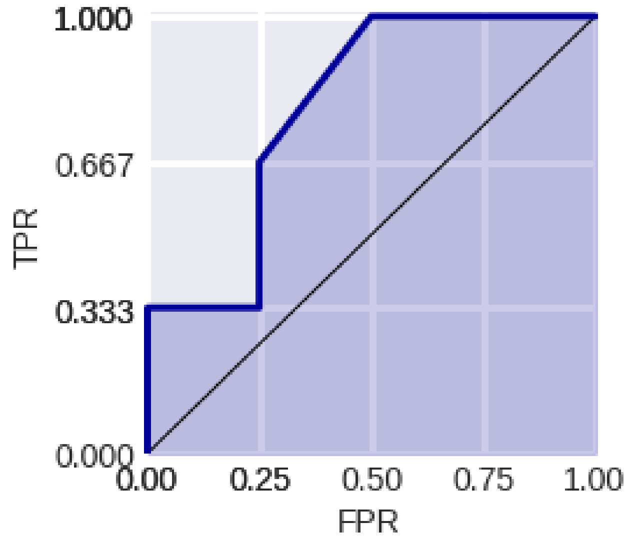
ROC и AUC ROC

Функционал зависит не от конкретных значений, а от их порядка

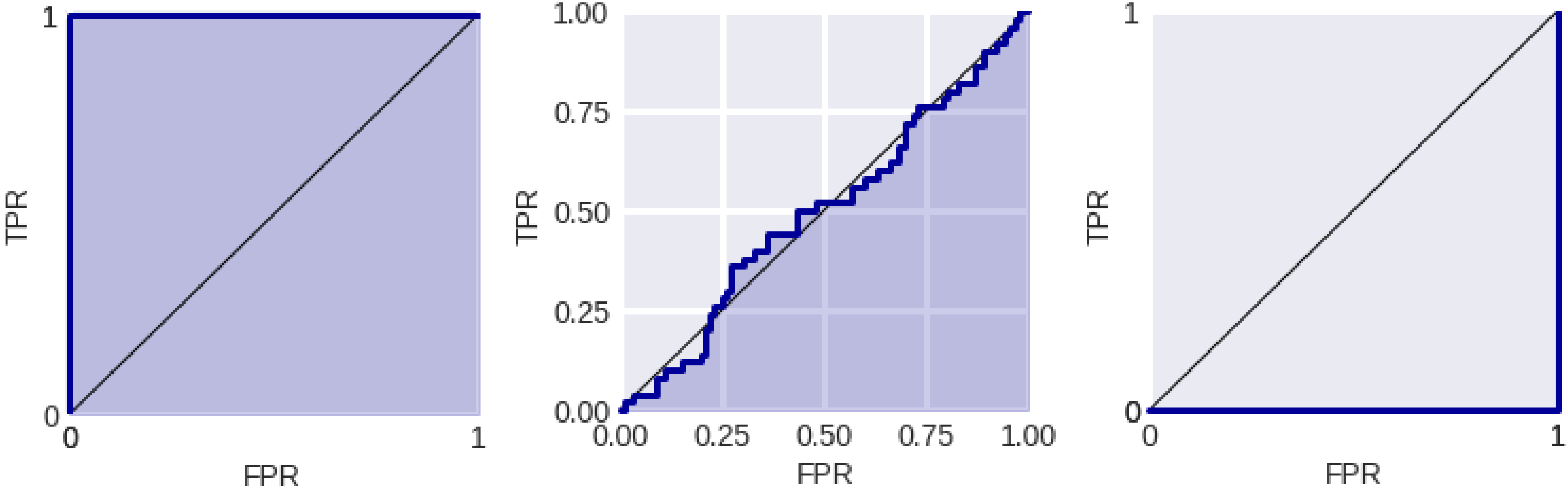
id	оценка	класс
1	0.5	0
2	0.1	0
3	0.2	0
4	0.6	1
5	0.2	1
6	0.3	1
7	0.0	0

id	оценка	класс
4	0.6	1
1	0.5	0
6	0.3	1
3	0.2	0
5	0.2	1
2	0.1	0
7	0.0	0

id	> 0.25	класс
4	1	1
1	1	0
6	1	1
3	0	0
5	0	1
2	0	0
7	0	0



ROC и AUC ROC



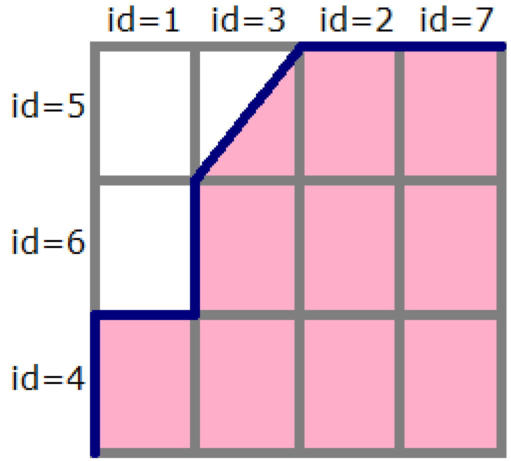
наилучший (AUC=1), случайный (AUC~0.5) и наихудшый (AUC=0) алгоритма

Смысл AUC

AUC ~ число правильно отсортированных пар (на рис. «кирпичики»)

Это сложно объяснить заказчику!

$$AUC = \frac{\sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} I[y_i < y_j] I[a_i < a_j]}{\sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} I[y_i < y_j]}$$



Чем хороша эта запись?

Что неправильно (требует пояснения) в формуле?

Смысл AUC

AUC ~ число правильно отсортированных пар (на рис. «кирпичики»)

Это сложно объяснить заказчику!

$$AUC = \frac{\sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} I[y_i < y_j] I[a_i < a_j]}{\sum_{i=1}^{q}\sum_{j=1}^{q} I[y_i < y_j]}$$

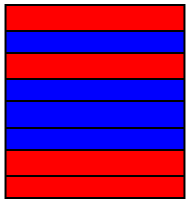
Чем хороша эта запись?

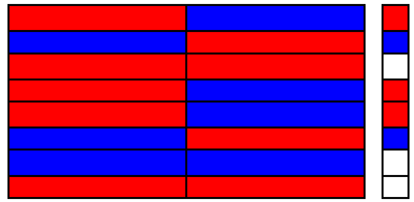
Можно обобщить, например, на регрессию.

$$I[a_i < a_j] = \begin{cases} 1, & a_i < a_j, \\ 1/2, & a_i = a_j, \\ 0, & a_i > a_j. \end{cases}$$

Настройка RF/GBM на AUC ROC

Случай из жизни (Интернет-математика)



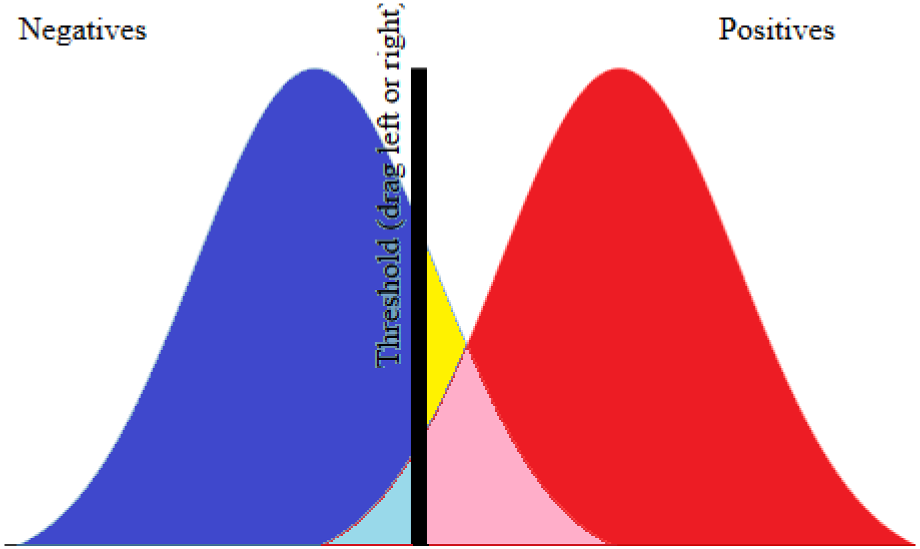


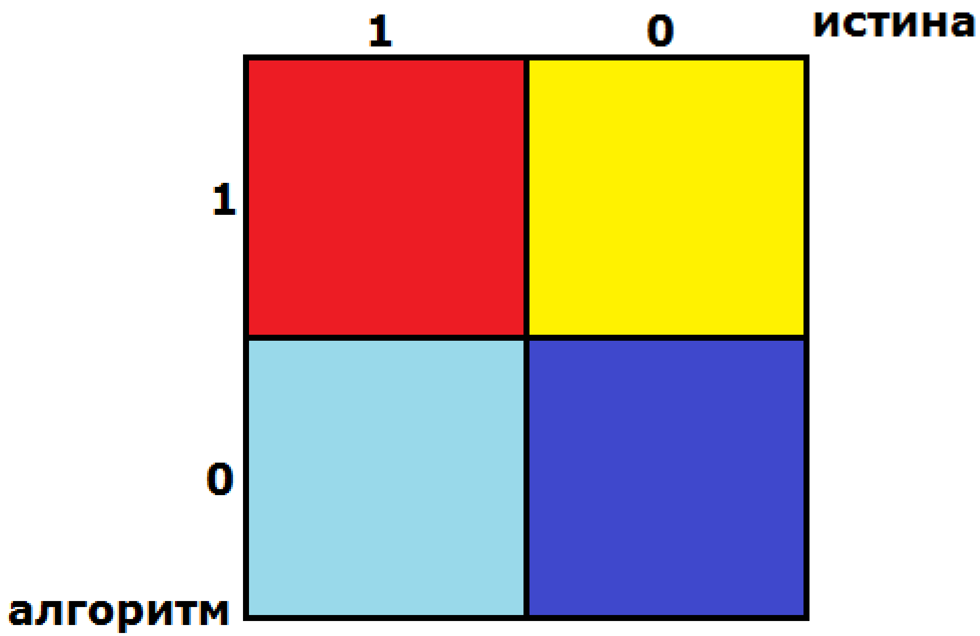
классификация → классификация пар

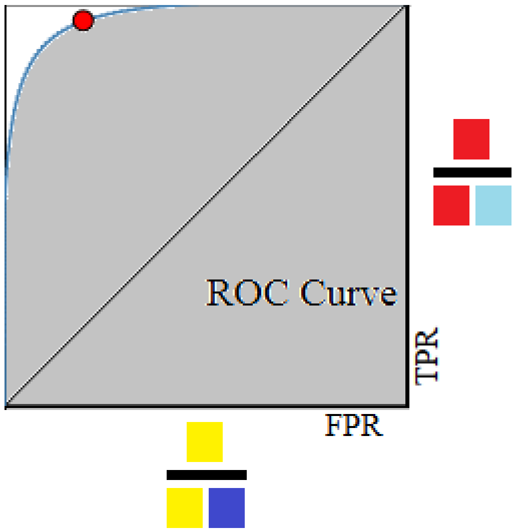
Можно дублировать,

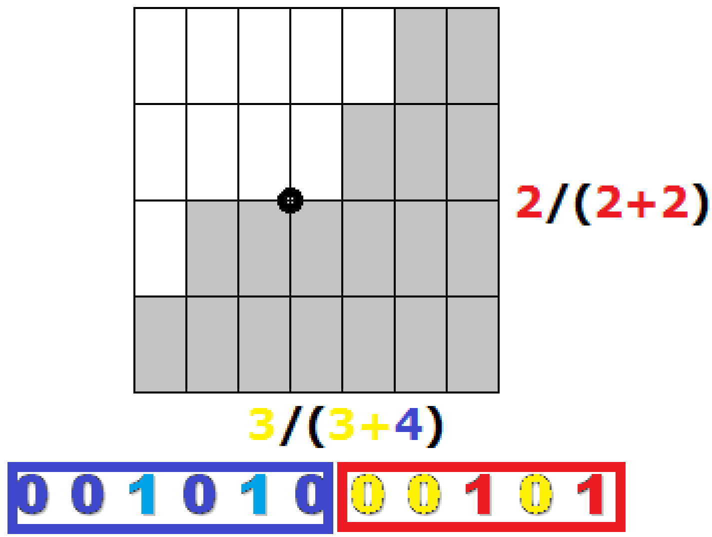
Можно брать разности/отношения.

AUC ROC







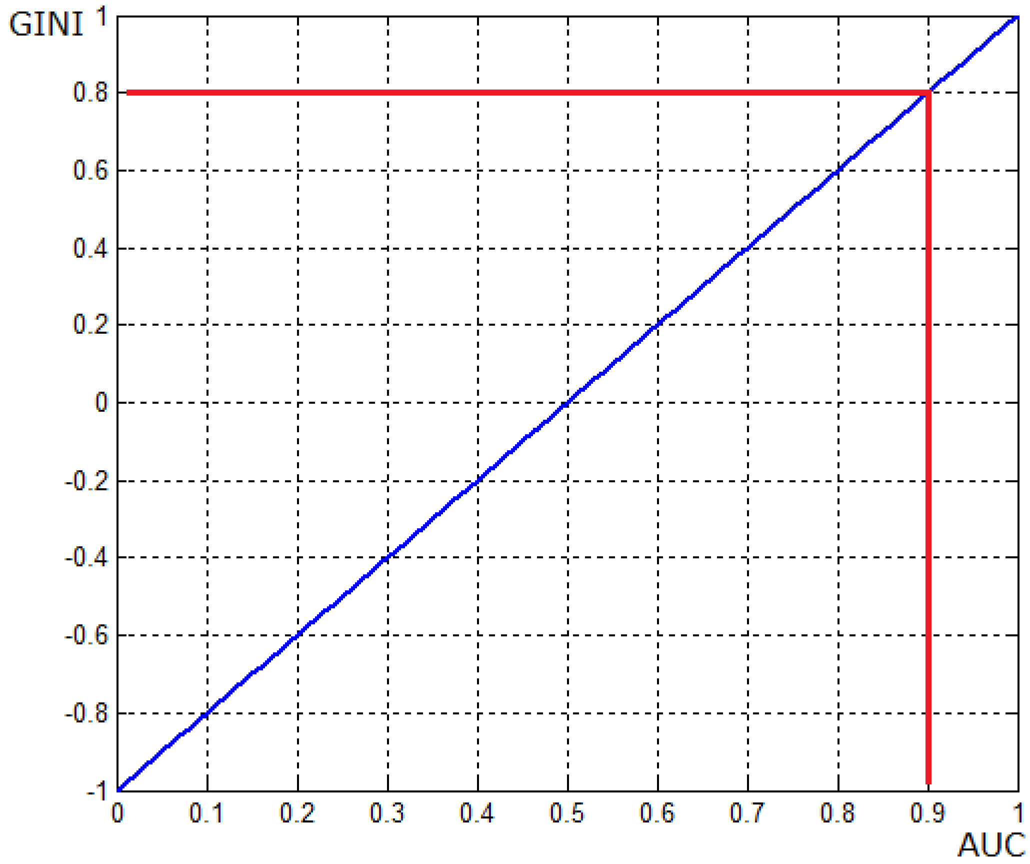


AUC – не всегда ступеньки!

GINI

В простейшем случае

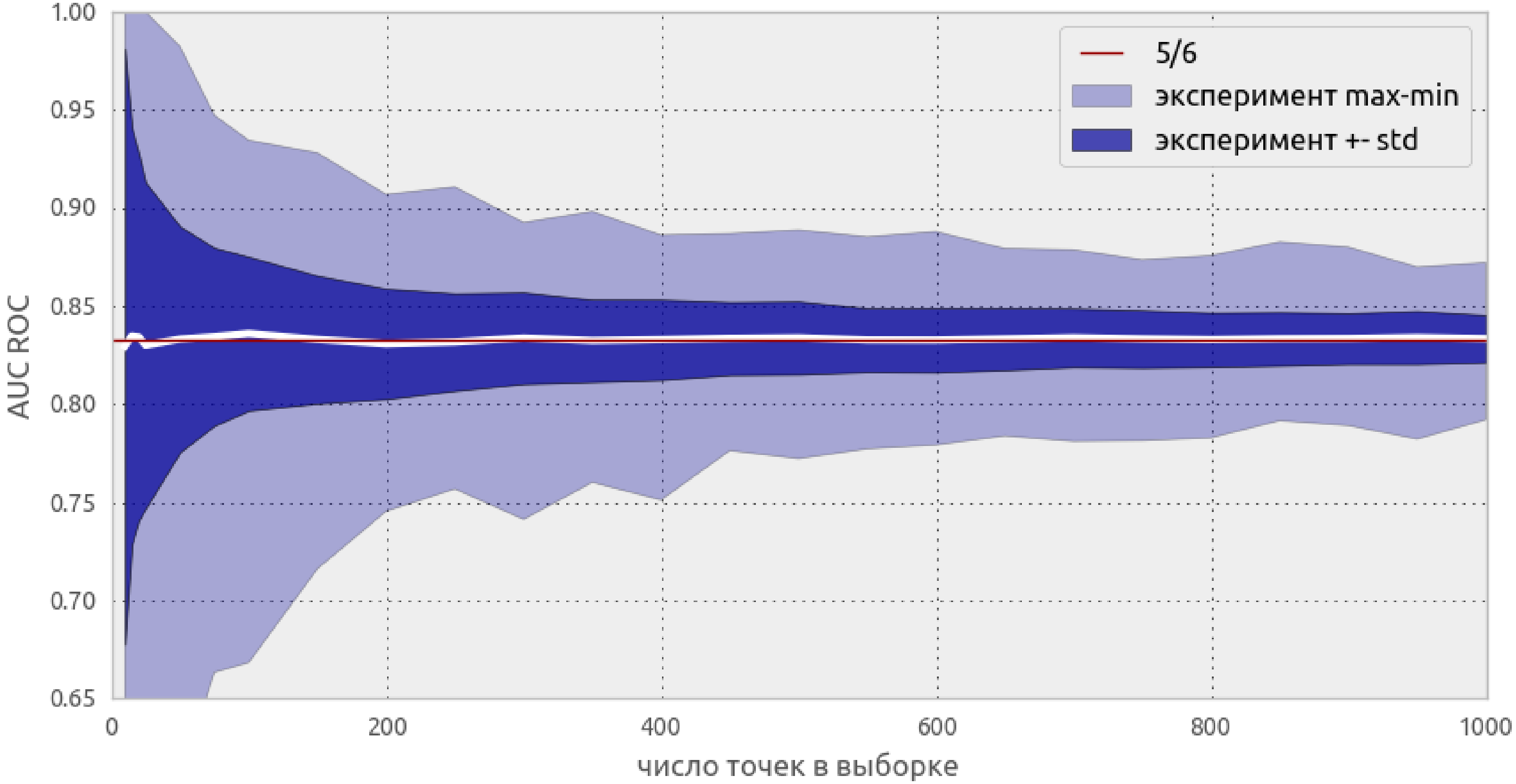
$$GINI = 2 \cdot AUC - 1$$



Немного сбивает с толку разница масштабов 0.9 → 0.8

AUC ROC

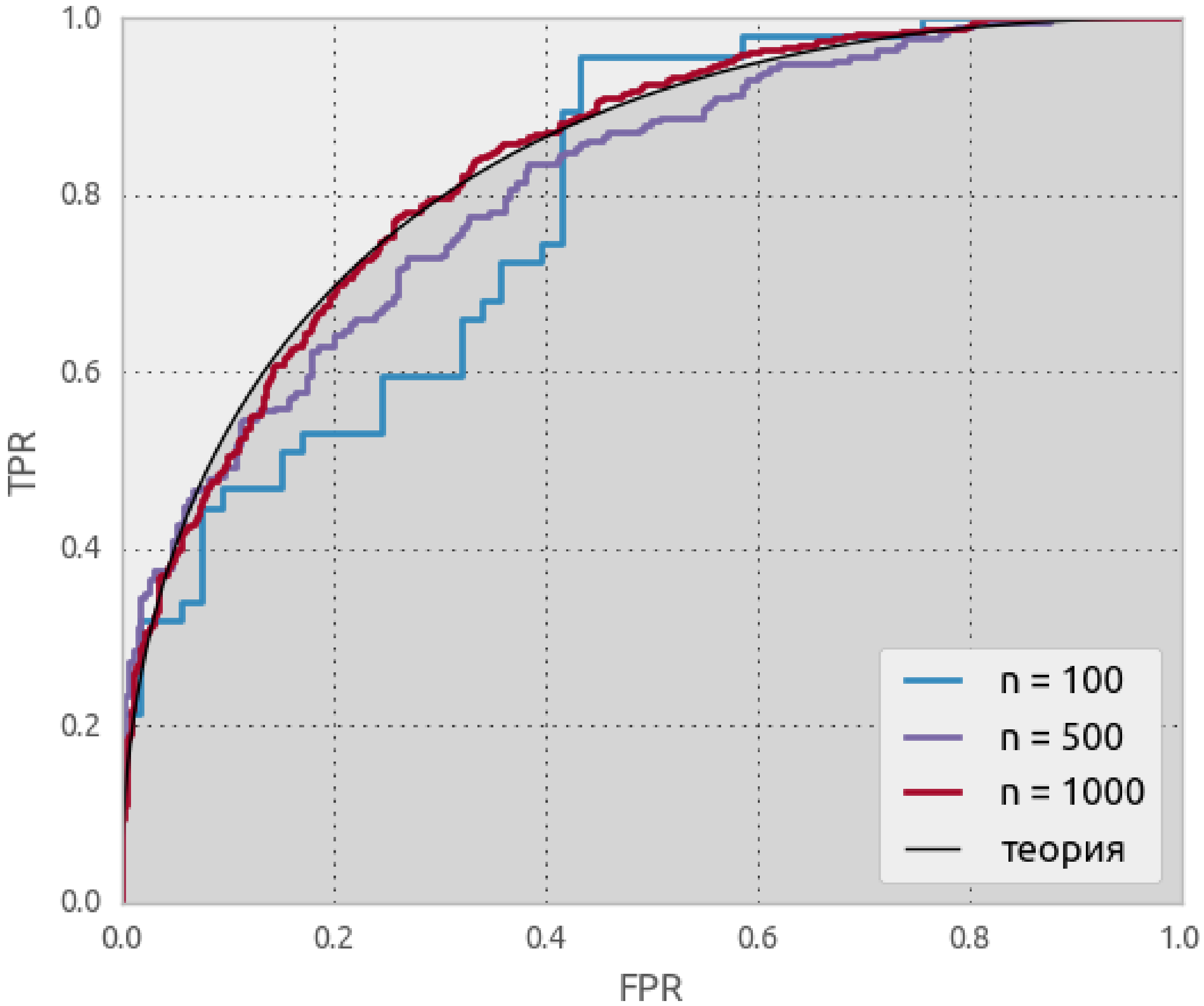
Если задаться распределениями классов (на ответах алгоритма) и получать оценку AUC ROC



Для оценки AUC ROC маленькие выборки не подходят!

AUC ROC

Если задаться распределениями классов (на ответах алгоритма) и получать оценку AUC ROC



AUC ROC

+ в задачах, где важен порядок

+ учитывает разную мощность классов

+ не важны значения, важен порядок

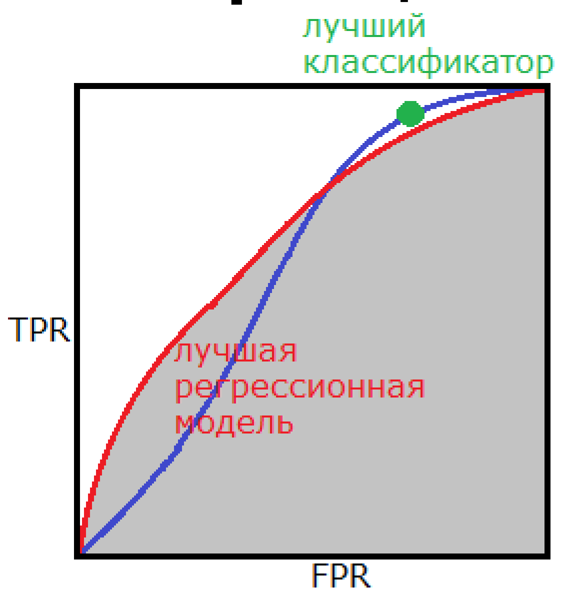
+ можно использовать для оценки признаков

- «завышает» качество

- оценивает не конкретный классификатор, а регрессию

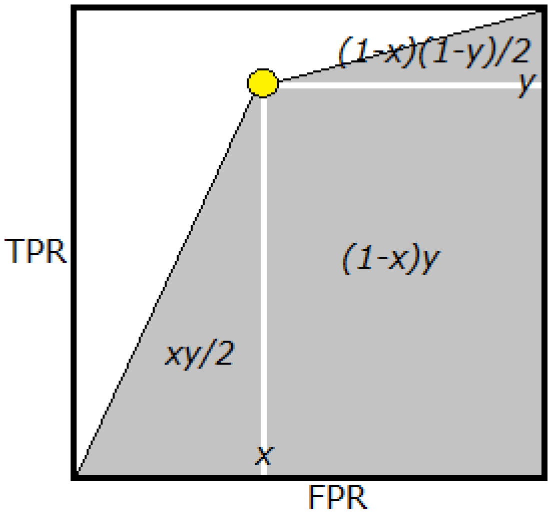
- сложно объяснить заказчику

- не путать классификацию и регрессию



Полностью бинарный случай

Если «вдруг» $a \in \{0,1\}^q$, $y \in \{0,1\}^q$, $F = AUC$ **?! (Сбербанк)**



$S=(xy+2y-2xy+1-x-y+xy)/2=$
$=(1+y-x)/2$

Из рисунка

$$AUC = (1 + TPR - FPR)/2 =$$
$$= \frac{1}{2}\left[1 + \frac{TP}{TP+FN} - \frac{FP}{FP+TN}\right]$$

A \ Y	1	0
1	TP	FP
0	FN	TN

$$= \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\|a \cdot y\|}{\|y\|} - \frac{\|a \cdot \bar{y}\|}{\|\bar{y}\|}\right] =$$
$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\|a \cdot y\|}{\|y\|} + \frac{\|\bar{a} \cdot \bar{y}\|}{\|\bar{y}\|}\right]$$

т.е. это точность с оглядкой на мощности классов…

$$TPR - FPR \to \max$$

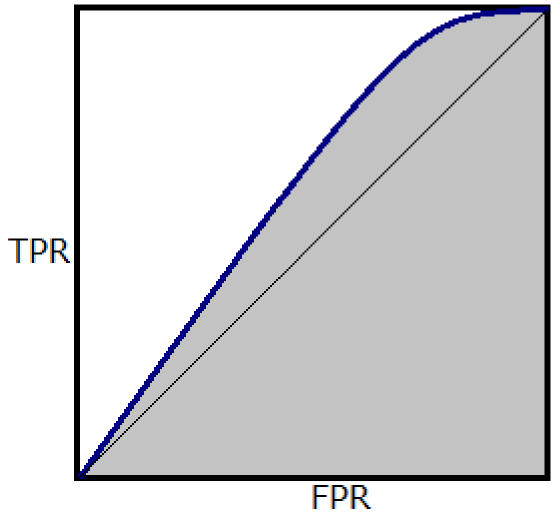
Полностью бинарный случай

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\| a\cdot y \|}{\| y \|}+\frac{\| \bar{a}\cdot \bar{y} \|}{\| \bar{y} \|}\right]$$

– примитивная точность (Accuracy, не Precision), если мощности классов совпадают.

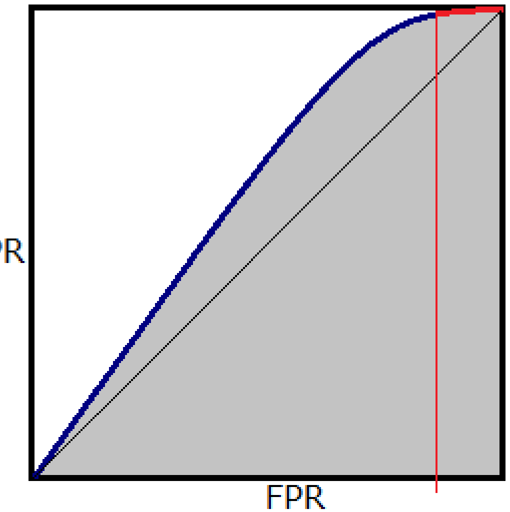
А если выровнять мощности (как?), то можно смотреть на точность…

Маленький AUC не всегда плохо…



В каких случаях хороша такая ROC-кривая?

Маленький AUC не всегда плохо…

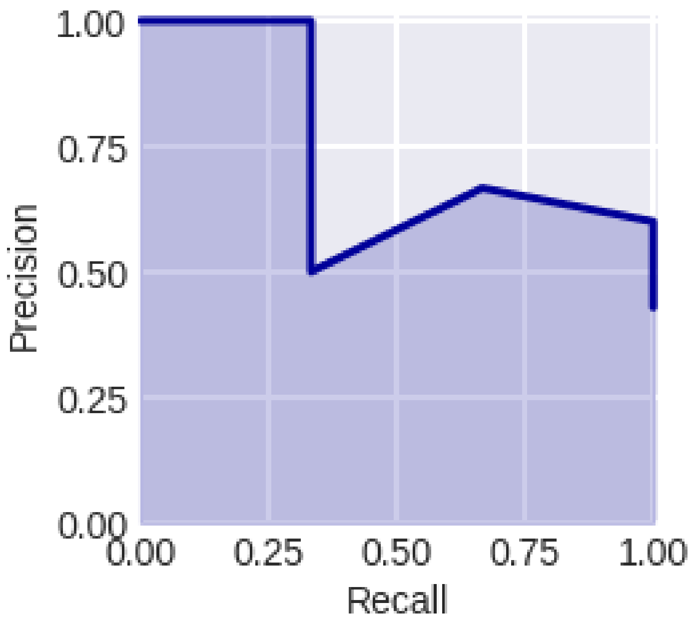


11010010110…011010100000100000

Мы не можем хорошо решить задачу классификации, но можем хорошо отделить часть объектов одного класса

Пример: **клиенты, которые не купят билет (чтобы предложить его им со скидкой)**

Ещё примеры кривых… «полнота-точность»



id	оценка	класс
1	0.5	0
2	0.1	0
3	0.2	0
4	0.6	1
5	0.2	1
6	0.3	1
7	0.0	0

id	оценка	класс
4	0.6	1
1	0.5	0
6	0.3	1
3	0.2	0
5	0.2	1
2	0.1	0
7	0.0	0

id	> 0.25	класс
4	1	1
1	1	0
6	1	1
3	0	0
5	0	1
2	0	0
7	0	0

Максимизация AUC ROC

- замена индикаторных функций на дифференцируемые
- использование смысла функционала (переход к парам)
- ансамблирование с ранговой деформацией

ДЗ Пройти тест goo.gl/93qkum

Совет

Ищите матожидание!

Пробуйте константные решения.

Многоклассовая задача

Hamming Loss

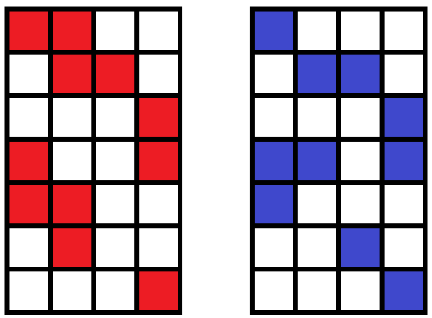
Число ошибок в векторе классификаций

$$HL(\tilde{a}, \tilde{y}) = \frac{\| \tilde{a} \oplus \tilde{y} \|}{l}$$

Log Loss

$$LOGLOSS = -\frac{1}{q} \sum_{i=1}^{q} \sum_{j=1}^{l} y_j \log a_j$$

Полнота и т.п. – всё что придумывается со строками матрицы



Полнота и т.п. – по строкам или столбцам

Это множества – и можно усреднять функции сходства множеств

Как использовать на практике (LSHTC)

- **Решающее правило с отсечкой:**

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 1, & \gamma_{ij} \geq \min(c, \max(\{\gamma_{ij}\}_{j=1}^{l}), \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

- **Решать задачу по вертикали / по горизонтали**

Функционал в LSHTC

$$\tilde{F} = \frac{2\tilde{P}\tilde{R}}{\tilde{P} + \tilde{R}}$$

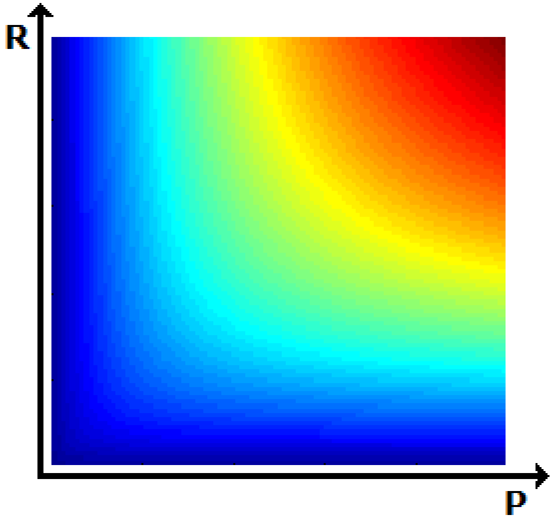
```
Id,Predicted
1,12 35 200
2,54 55
3,11
4,1 7 101
...
```

$$\tilde{P} = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{l}\frac{TP_j}{TP_j + FP_j}$$

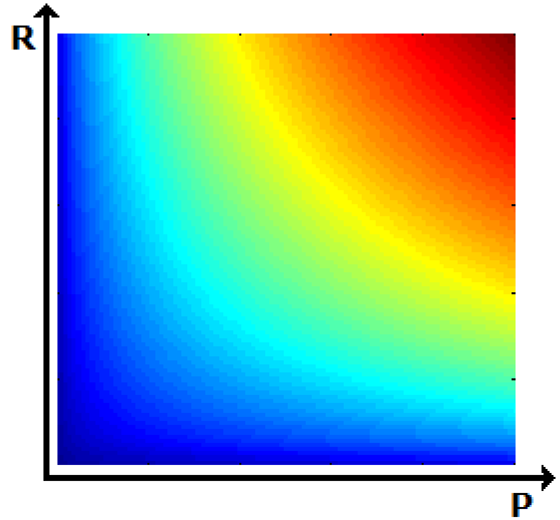
$$\tilde{R} = \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{l}\frac{TP_j}{TP_j + FN_j}$$

Почему используется F-мера

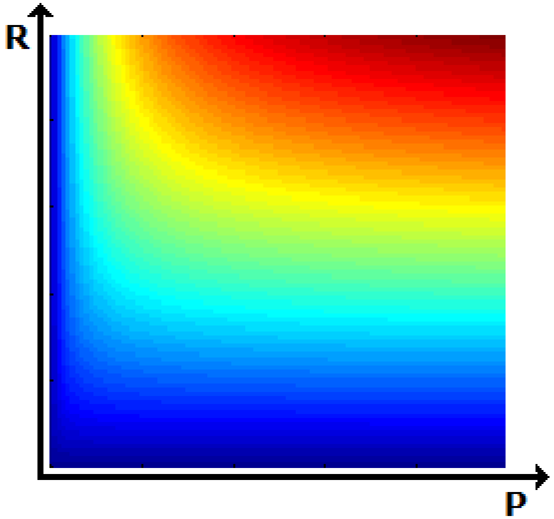
$$2/(1/P+1/R)$$



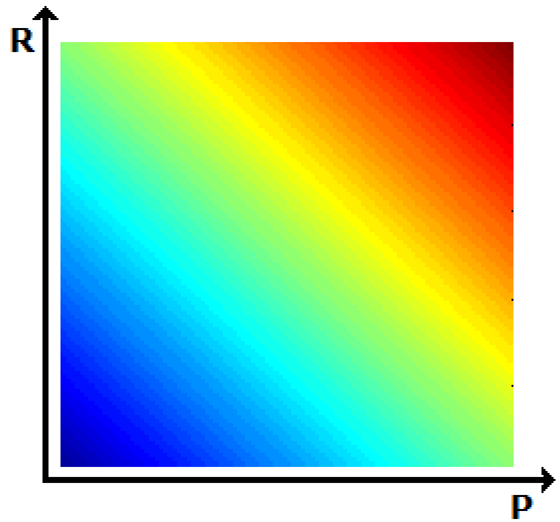
$$\sqrt{P\cdot R}$$



$$2/(0.9/P+0.1/R)$$



$$(P+R)/2$$



Очень полезно «чувствовать функции»

Пример из жизни: лайки

L	D	
+100	0	Совсем хорошо
+10	0	Хорошо
+1	–0	Мало статистики, но нет минусов
+2	–1	Есть минусы
+10	–9	Много минусов
+100	–100	Неоднозначно
+1	–1	Мало статистики
+9	–10	Много плюсов
+1	–2	Мало плюсов
0	–1	Нет плюсов

Как придумать один признак на базе двух?

Очень полезно «чувствовать функции»

Пример из жизни: лайки

L	D	$(\lvert L\rvert-\lvert D\rvert)/\sqrt{\lvert L\rvert+\lvert D\rvert}$
+100	0	10.0000
+10	0	3.1623
+1	–0	1.0000
+2	–1	0.5774
+10	–9	0.2294
+100	–100	0
+1	–1	0
+9	–10	-0.2294
+1	–2	-0.5774
0	–1	-1.0000

Оценка результатов поиска/рекомендаций

Задача с бинарной релевантностью

$$x_1 \prec x_2 \prec \ldots \prec x_q$$

$y_i = 1$ – **релевантный объект**

$y_i = 0$ – **нерелевантный объект**

Задача ранжирования

Целевой признак может быть бинарным, но это не задача классификации

Precision at n

Точность на первых n элементах

$$p@n = \frac{y_1 + \ldots + y_n}{n}$$

Average Precision at n

Средняя точность на первых n элементах

$$ap@n = \sum_{k=1}^{n} \frac{P(k)}{\min(n, m)}$$

m – мощность множества релевантных объектов (товаров, документов)

n – сколько рекомендаций будет учитываться

$$P(k) = \begin{cases} p@k, & y_k = 1, \\ 0, & y_k = 0, \end{cases}$$

y_i – бинарное значение релевантности

Average Precision at n

Примеры (три релевантных объекта):

$0 \prec 0 \prec 0$

$$ap@3 = \frac{1}{3}[0+0+0]$$

$0 \prec 0 \prec 1$

$$ap@3 = \frac{1}{3}\left[0+0+\frac{1}{3}\right]$$

$0 \prec 1 \prec 1$

$$ap@3 = \frac{1}{3}\left[0+\frac{1}{2}+\frac{2}{3}\right]$$

$1 \prec 0 \prec 0$

$$ap@3 = \frac{1}{3}\left[\frac{1}{1}+0+0\right]$$

$0 \prec 0 \prec 1 \prec 1 \prec 1$

$$ap@5 = \frac{1}{3}\left[0+0+\frac{1}{3}+\frac{2}{4}+\frac{3}{5}\right]$$

$1 \prec 1 \prec 1 \prec 0 \prec 0$

$$ap@5 = \frac{1}{3}\left[\frac{1}{1}+\frac{2}{2}+\frac{3}{3}+0+0\right]$$

Mean Average Precision

– усреднение ap@n по всем пользователям

Concordant – Discordant ratio

$$\frac{|\{(i,j)\,|\,y_i > y_j, 1 \le i < j \le n\}|}{|\{i\,|\,y_i = 1\}| \cdot |\{j\,|\,y_j = 0\}|}$$

Упорядочили: E, D, C, B, A (по убыванию релевантности)

На самом деле: B, E – релевантные

Пары «нерелевантный» – «релевантный»:

BA	EA
BC	EC
BD	ED

Качество упорядочивания: 4 / (2 + 4)

Что ещё может встретиться… в задачах рекомендации

$$\frac{1}{|Z|}\sum_{z\in Z}\frac{|\{x_1,\ldots,x_{h(z)}\}\cap\{x'_1,\ldots,x'_{h(z)}\}|}{h(z)}$$

$x_1,\ldots,x_n$ – **упорядоченный** **список ответов**

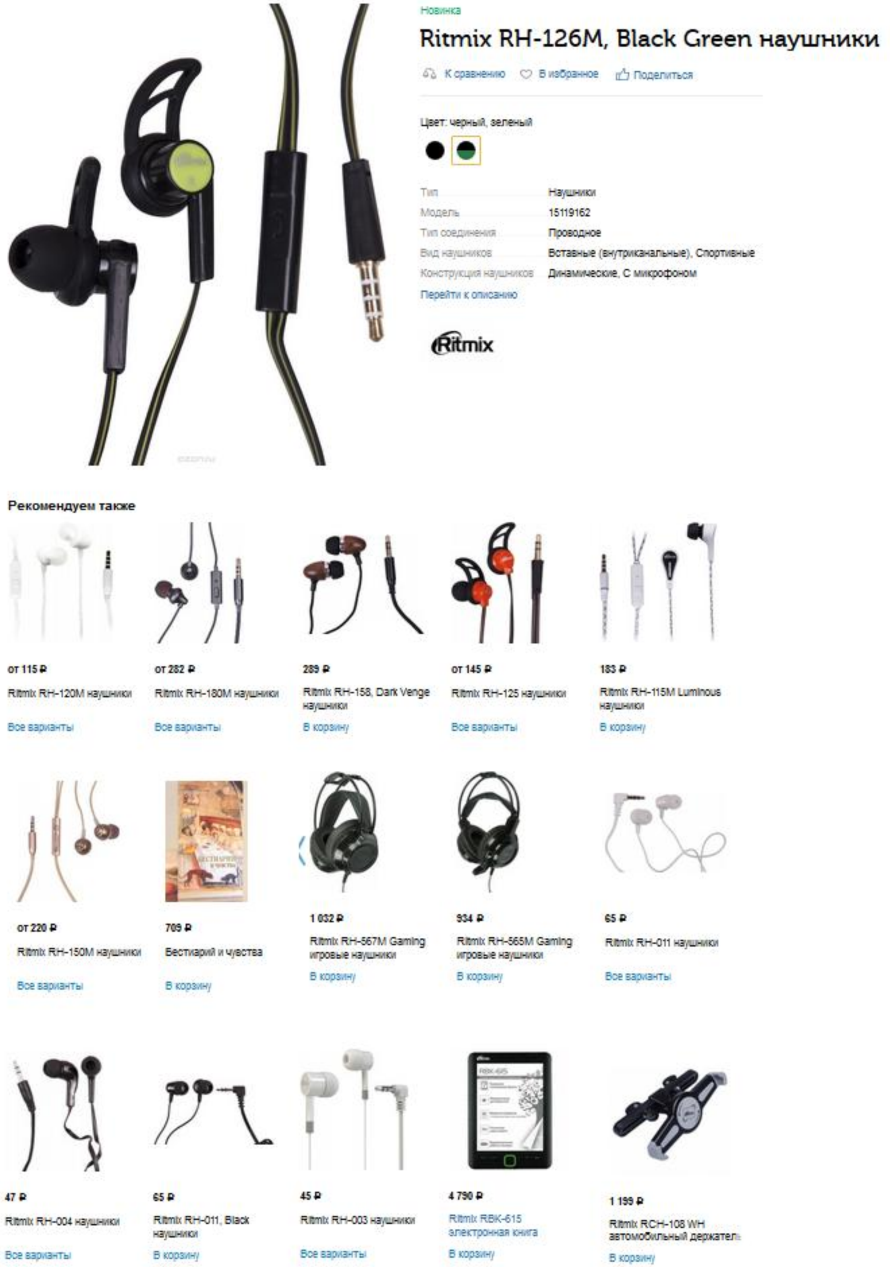
$x'_1,\ldots,x'_m$ – **все релевантные**

$$Z\subseteq\{1,2,\ldots,n\}$$

$$Z=\{5,10,15,20,25,30\}$$

когда логично применить?

Рекомендации



Mean Reciprocal Rank (MRR)

– это усреднение Reciprocal rank (RR) по всем ранжированиям, который сделал алгоритм.

$$RR = \frac{1}{\arg\min_i y_i}$$

Часто оптимизируют именно его!

Классические функционалы в поиске

Случай небинарной релевантности

Выдали id документов/товаров/..., а их ценность (релевантность):

$$y_1, \ldots, y_q$$

Cumulative Gain at n

$$\mathrm{CG@}n = y_1 + \ldots + y_n$$

Discounted Cumulative Gain at n

$$\mathrm{DCG@}n = \sum_{i=1}^{n} \frac{2^{y_i} - 1}{\log_2(i+1)}$$

Ещё вариант:

$$DCG@n = y_1 + \sum_{i=2}^{n} \frac{y_i}{\log_2(i)} = y_1 + y_2 + \frac{y_3}{\log_2 3} + \ldots + \frac{y_n}{\log_2 n}$$

Цена ошибок за неправильное ранжирование

$$\frac{1}{\log_2(1+1)} - \frac{1}{\log_2(1+2)} \approx 0.37$$

$$\frac{1}{\log_2(1+10)} - \frac{1}{\log_2(1+11)} \approx 0.01$$

$$\frac{1}{\log_2(1+10)} - \frac{1}{\log_2(1+20)} \approx 0.06$$

Normalized DCG

$$nDCG = \frac{DCG}{IDCG}$$

IDCG = ideal DCG

для того, чтобы не было зависимости от длины выдачи

Ещё подход к сравнению порядков:

Пусть алгоритм выдал

$$x_1 \prec x_2 \prec \ldots \prec x_q$$

Правильный порядок

$$x_{i_1} \prec x_{i_2} \prec \ldots \prec x_{i_q}$$

Надо сравнить:

$$(1,2,\ldots,q)$$

$$(i_1, i_2, \ldots, i_q)$$

Ранговые корреляции...

Ещё подход к оценке ранжирования

Известны вероятности того, что объект является релевантным

$$p_i = p(x_i)$$

~ пользователь выберет ссылку

Expected reciprocal rank (ERR)

$$ERR@n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k}p_k\prod_{i<k}(1-p_i)$$

Как интерпретировать?

Quadratic Weighted Kappa

показывает согласованность порядков, когда ответы «мера релевантности»

```
y = 1 1 1 2 2 3 3 3 # правильный ответ
a = 1 1 2 1 3 2 3 3 # наш ответ                 0.6666667

a = 1 1 1 2 2 3 3 3 # наш ответ                     1

a = 3 3 3 2 2 1 1 1 # наш ответ                    -1
```

Quadratic Weighted Kappa

```
  E = table(y) %*% t(table(a))
  O = table(y,a)
  E = E/sum(E)*sum(O)
  n = length(unique(y))
  W = (matrix(1:n,nr=n,nc=n) -
matrix(1:n,nr=n,nc=n,byrow = TRUE))**2/(n-1)**2
  kappa = 1-sum(W*O)/sum(W*E)
```

ответы

```
a = 1 1 2 1 3 2 3 3
y = 1 1 1 2 2 3 3 3
```

матрица ответов

```
O =
   a
y   1 2 3
  1 2 1 0
  2 1 0 1
  3 0 1 2
```

веса

```
W =
     [,1] [,2] [,3]
[1,] 0.00 0.25 1.00
[2,] 0.25 0.00 0.25
[3,] 1.00 0.25 0.00
```

Внешнее произведение сумм

```
E =
   a
y   1 2 3
  1 9 6 9
  2 6 4 6
  3 9 6 9
```

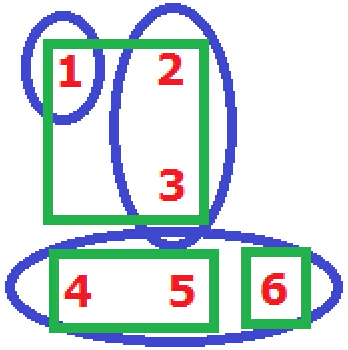
Нормировка

```
E =
   a
y       1    2     3
  1 1.125 0.75 1.125
  2 0.750 0.50 0.750
  3 1.125 0.75 1.125
```

Редакторское расстояние

Операции

добавление к кластеру
создание кластера с одним объектом
удаление из кластера
удаление кластера с одним объектом



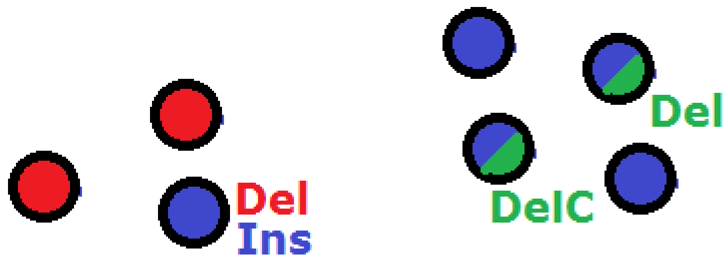
1 2 3;4 5;6
1 2 3; 4 5 [delC]
2 3; 4 5 [del]
2 3; 4 5; 1 [insC]
2 3; 4 5 6; 1 [ins]

	2 3	4 5 6	1
1 2 3	1	6	2
4 5	4	1	3
6	3	2	2

Редакторское расстояние

- Плохо заносить не в тот кластер (целых две операции на перенос)
- Плохо создавать неправильный кластер

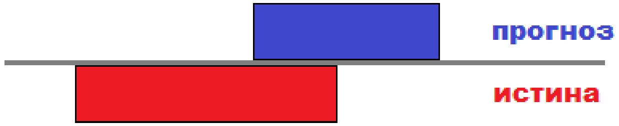
$\Rightarrow$ осторожный алгоритм



- Многое зависит от операций...

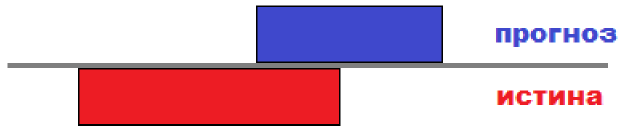
Задача с «неклассическим целевым вектором»

Надо предсказывать не значение,
а интервал [a, b]



Как измерить качество?

Задача с интервальным целевым вектором



Интервал – это множество!

Коэффициент Жаккара (Jaccard)

$$\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$

коэффициент Шимкевича-Симпсона (Szymkiewicz, Simpson)

$$\frac{|A \cap B|}{\min(|A|,|B|)}$$

коэффициент Браун-Бланке (Braun-Blanquet)

$$\frac{|A \cap B|}{\max(|A|,|B|)}$$

См. википедию «Коэффициент сходства» для переноса идеи Колмогорова об обобщённом среднем...

Вариации на тему усреднения…

коэффициент Сёренсена (Sörensen)

$$\frac{2|A\cap B|}{|A|+|B|}$$

коэффициент Кульчинского (Kulczinsky)

$$\frac{|A\cap B|}{2}\frac{1}{1/|A|+1/|B|}$$

коэффициент Отиаи (Ochiai)

$$\frac{|A\cap B|}{\sqrt{|A|\cdot|B|}}$$

Меры включения

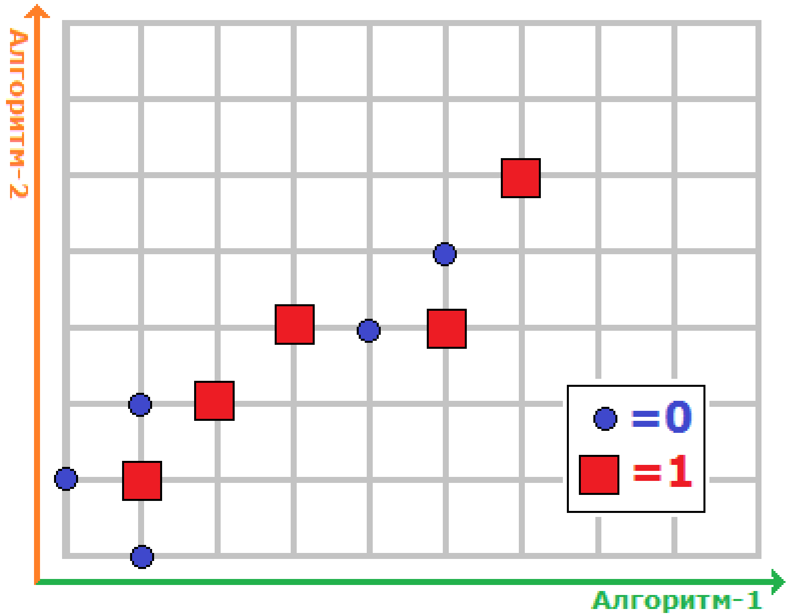
$$\frac{|A\cap B|}{|A|} \qquad \frac{|A\cap B|}{|B|}$$

$$\frac{|A\cap B|}{2|A|-|A\cap B|} \qquad \frac{|A\cap B|}{2|B|-|A\cap B|}$$

Как решать задачи с интервалами? Потом вернёмся…

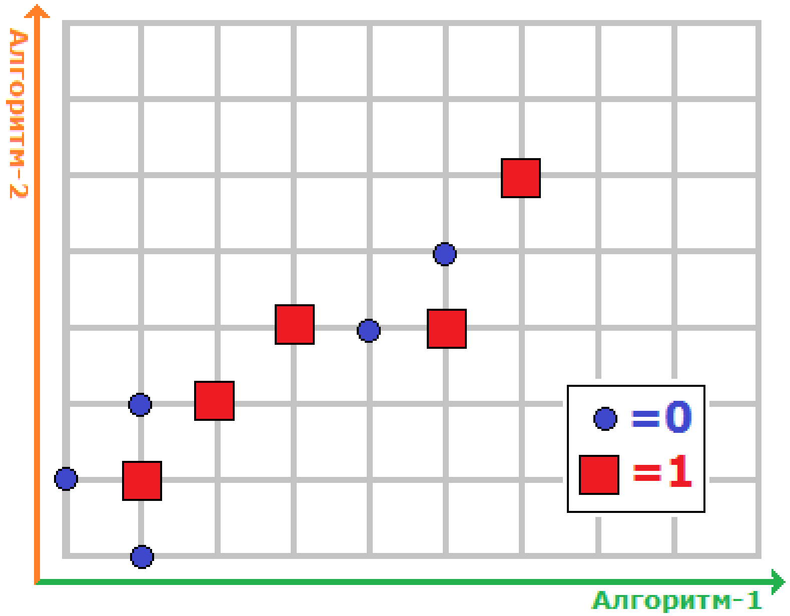
Упражнение №1.

Рассматривается задача классификации на два класса. На рисунке показаны объекты в пространстве ответов двух алгоритмов. Вычислить AUC ROC для алгоритмов.



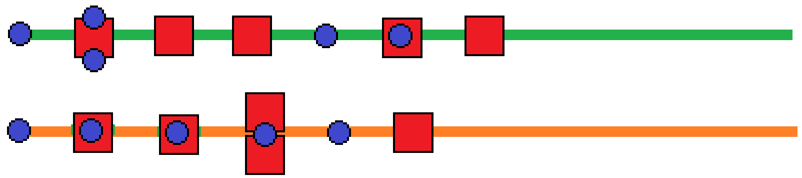
Упражнение №1 - Решение

1. Смотрим проекции на оси – ответы алгоритмов

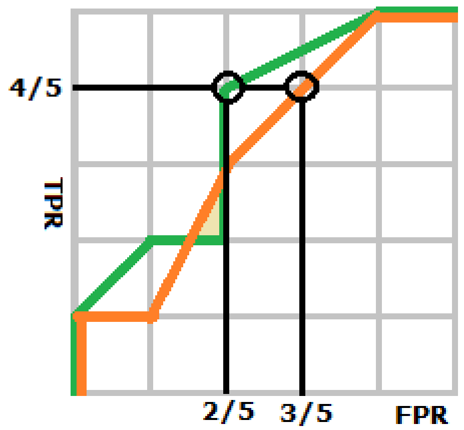


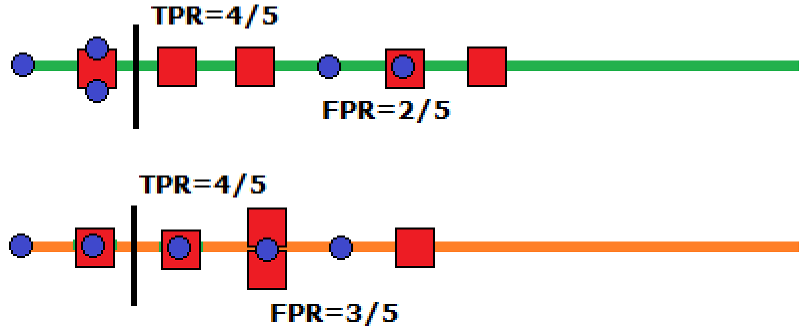
Первый алгоритм:

Второй алгоритм:

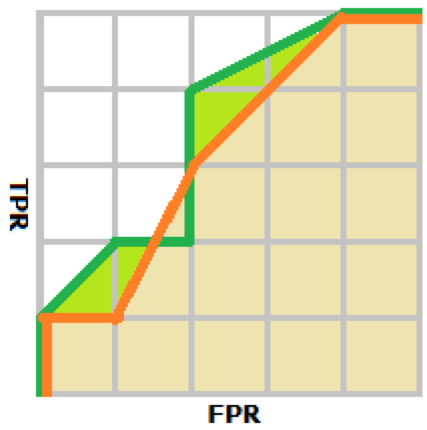


2. По проекциям строим ROC - кривые:





3. Вычисляем площади под ROC - кривыми:



16/25

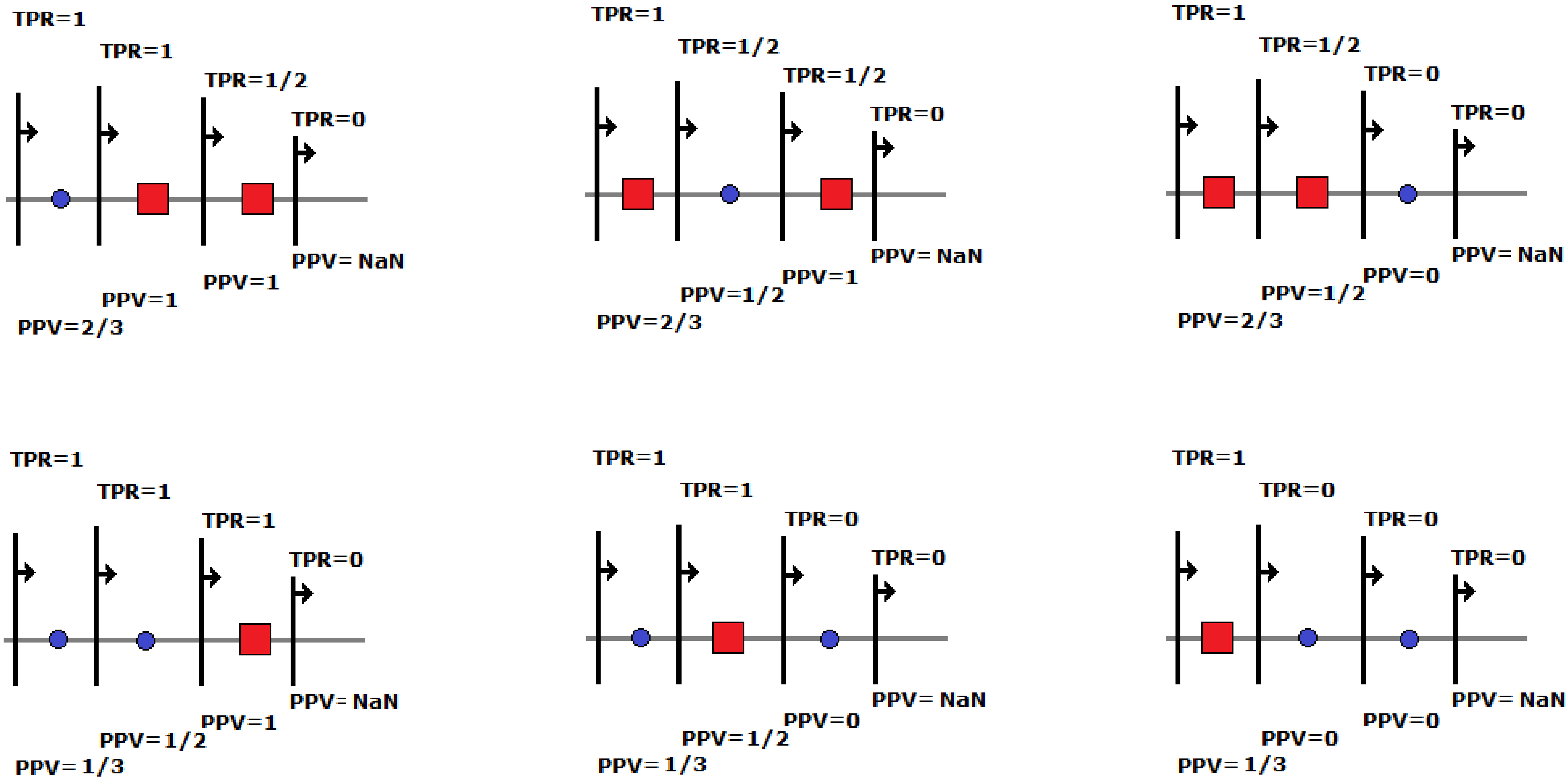
17.5/25

Упражнение №2.

Какие значения F_1-меры могут быть у классификатора в задаче с двумя непересекающимися классами и тремя объектами?

Упражнение №2 – Решение.

Можно честно рассмотреть все возможные случаи:



Упражнение №2 - Решение.

Получаем, что F1-мера – среднее гармоническое чисел из пар (1, 1), (1/2, 1), (2/3, 1), (1/3, 1), (1/2, 1/2), (0, 0)

Все возможные значения F1-меры: 1, 0.8, 2/3, 0.5, 0

Но можно быстрее догадаться до ответа…

Упражнение №3

Вычислить ap@k:

ap@5(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3])

ap@3(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3])

ap@3(actual = [1], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

ap@3(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

ap@2(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6])

Упражнение №3

Решение:

ap@5(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3]) = 0.5

ap@3(actual = [1, 2, 3], predict = [1, 4, 5, 2, 6, 3]) = 1/3

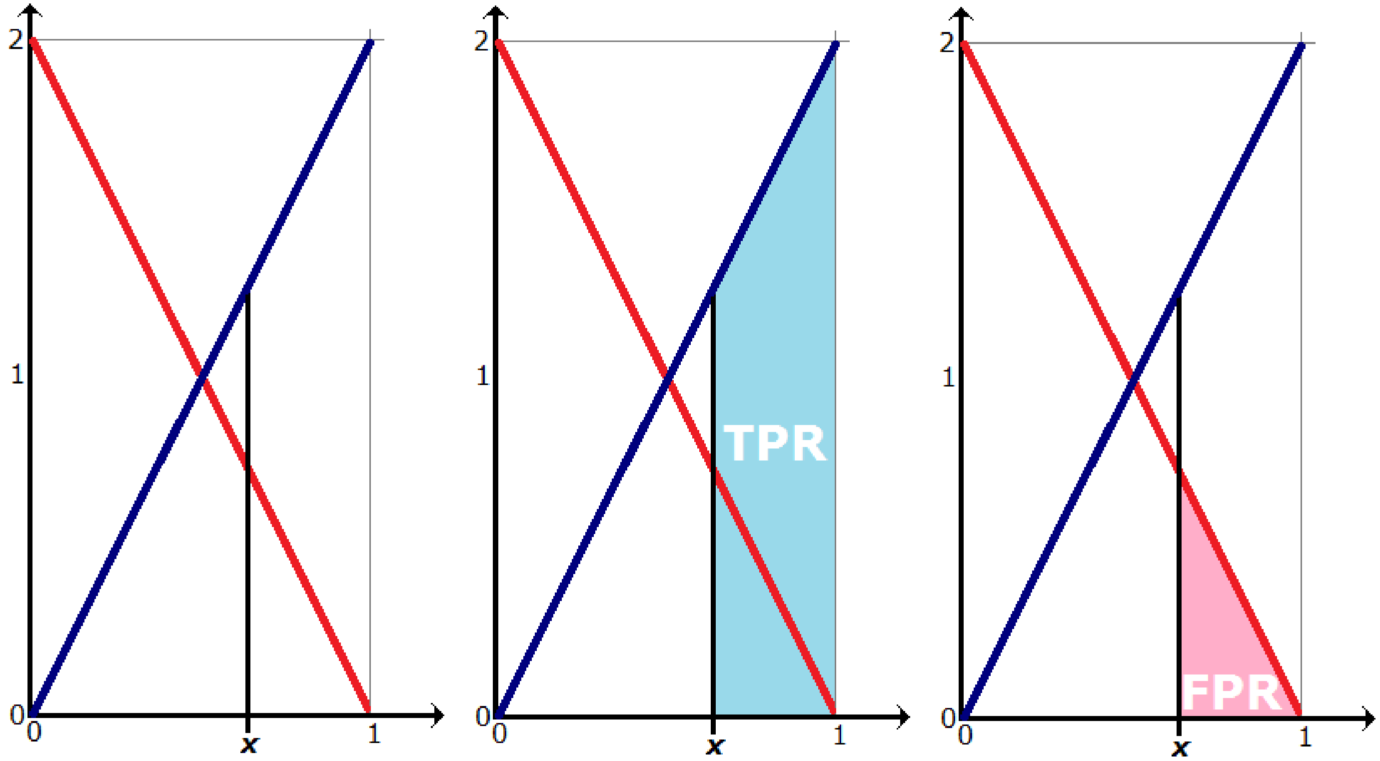
ap@3(actual = [1], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 1

ap@3(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 5/6

ap@2(actual = [1, 3], predict = [1, 2, 3, 4, 5, 6]) = 1/2

Упражнение №4

На ответах алгоритма $a(x) \in [0,1]$ объекты класса 0 распределены с плотностью $p_0(a) = 2 - 2a$, а объекты класса 1 – с плотностью $p_1(a) = 2a$. Построить ROC-кривую и вычислить площадь под ней.



Упражнение №4

Решение

$$\mathrm{TPR}(x) = 1 - \frac{1}{2}x2x = 1 - x^2$$

$$\mathrm{FPR}(x) = \frac{1}{2}(1-x)(2-2x) = (1-x)^2$$

Площадь под параметрической кривой

$$\int_1^0 \mathrm{TPR}(x)\cdot \mathrm{FPR}'(x)\partial x = 2\int_0^1 (1-x^2)(1-x)\partial x$$

или

$$\mathrm{TPR} = 2\sqrt{\mathrm{FPR}} - \mathrm{FPR}.$$

$$\int_0^1 (2\sqrt{t} - t)\partial t = \frac{5}{6} \approx 0.83.$$

Литература

Tom Fawcett An introduction to ROC analysis // Pattern Recognition Letters Volume 27 Issue 8, 2006, P. 861-874.
https://ccrma.stanford.edu/workshops/mir2009/references/ROCintro.pdf

Стрижов В.В. Функция ошибки в задачах восстановления регрессии // Заводская лаборатория, 2013, 79(5): 65-73.
http://strijov.com/papers/Strijov2012ErrorFn.pdf

К.Д. Маннинг, П. Рагхаван, Х. Шютце «Введение в информационный поиск» // . — Вильямс, 2011.