A modellszelekció kérdései

Ferenci Tamás
tamas.ferenci@medstat.hu

Utoljára frissítve: 2023. május 12.

Tartalom

1. Általánosítóképesség, túlilleszkedés
2. Modellszelekció
    - A modellszelekció tartalma
    - Modellszelekciós tesztek
        - Kitérő: modellezési filozófiák
    - Modellszelekciós mutatók, kritériumok

Pár gondolat a magyarázó változók körének kiválasztásához

- Eddig egyetlen minősítőjét láttuk egy modell jóságának: az R^2-et
- Tételmondat: új változó bevonásával R^2 értéke *mindenképp* nő (de legalábbis nem csökken), teljesen függetlenül attól, hogy mi a bevont változónk, mik vannak már a modellben stb.
- Tehát: ha az R^2-tel jellemezzük a modellünket, akkor *mindig* az összes potenciális magyarázó változó felhasználása lesz a legjobb döntés
- A valóságban azonban már nem biztos!
- Mert: az R^2 a *minta* jó leírását jellemzi, de mi a sokaságot akarjuk megragadni
- A kettő ellentmondásba kerülhet!

Általánosítóképesség

- Azt, hogy a modell – a mintából kinyert információk alapján – mennyire jól tud a sokaságról (tehát a mintán kívüli világról) is számot adni, *általánosítóképességnek* nevezzük
- Igazából mi erre játszunk!
- ... ennyiben (erre a célra) az R^2 nem szerencsés mutató

Általánosítóképesség

- Persze az sem jó megközelítés, hogy az R^2-tel nem törődünk, hiszen ha nem szedünk ki elég információt a mintából, akkor sem várható, hogy a sokaságról jól tudunk nyilatkozni (mivel arra vonatkozóan csak a mintára támaszkodhatunk)
- Tehát: kompromisszumra van szükség a mintainformációk felhasználásában...
  - ... ha túl keveset használunk fel, akkor nem nyerünk elég jó képet a sokaságról
  - ... ha túl sokat használunk fel, akkor túlságosan „ráfókuszálunk” a mintára

Általánosítóképesség

- Ahogy egyre több információt nyerünk ki a mintából (egyre jobban „elköteleződünk” mellette), úgy egy pontig javul, majd ezen túl romlik az általánosítóképesség
- Tehát: nem csak nem javít a több információ, de egyenesen ront (ezért az „ellentmondás”)!

Alulilleszkedés, túlilleszkedés

- A fentiek jól értelemzhetőek a *gépi tanulás* fogalomkészletével
- Itt a tanulás információkinyerés a mintából
- Ha ezt túl kis mértékben hajtjuk végre, akkor alulilleszkedésről (alultanulásról)...
- ... ha túl nagy mértékben, akkor túlilleszkedésről (túltanulásról) beszélünk
- A túltanított modell látszólag nagyon jó (a mintát jól megragadja), de valójában nem az, mert a mintán kívüli képességei gyatrák lesznek (hiszen túlságosan „ráfókuszált” a mintára)

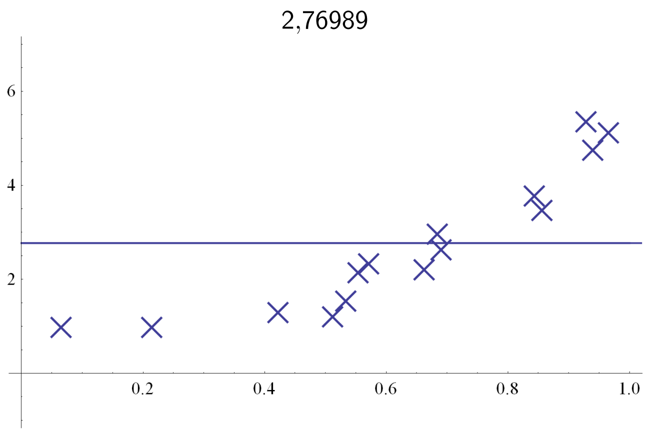
Egy példa a túlilleszkedésre

- Egyszerű kétváltozós feladat: egy magyarázó- és egy eredményváltozó
- A példánkban a tanítás fokát tehát nem a magyarázó változók számával fogjuk mérni, hanem a függvényforma bonyolultságával: $Y = \beta_1 + \beta_2 X + u$, $Y = \beta_1 + \beta_2 X + \beta_2' X^2 + u'$, $Y = \beta_1 + \beta_2 X + \beta_2' X^2 + \beta_2'' X^3 + u''$ stb.
- Tehát az eredményváltozót a magyarázó változó egyre nagyobb fokszámú polinomjával közelítjük (a polinom fokszámát jelölje p)
- (A függvényforma ilyen megválasztásával később foglalkozunk részleteiben, de most nem is ez a lényeg)

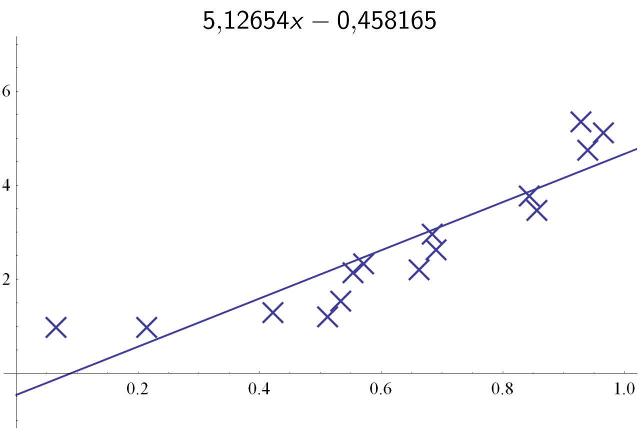
Egy példa a túlilleszkedésre

- Hogy tudjuk mi a „jól illeszkedő” modell, elárulom, hogy az adatokat valójában egy $Y = 5 \cdot X^3 + 1 + u$ modell szerint generáltam, ahol $u \sim \mathcal{N}(0; 0{,}3)$
- Tehát lényegében: „zajos harmadfokú” függvény
- A jól illeszkedő modell – ezt *most* tudjuk, általában persze nem! – a harmadfokú lenne

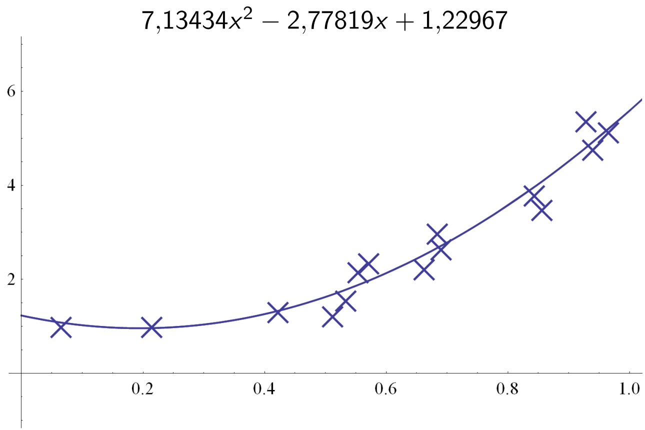
Alulilleszkedés: $p = 0$



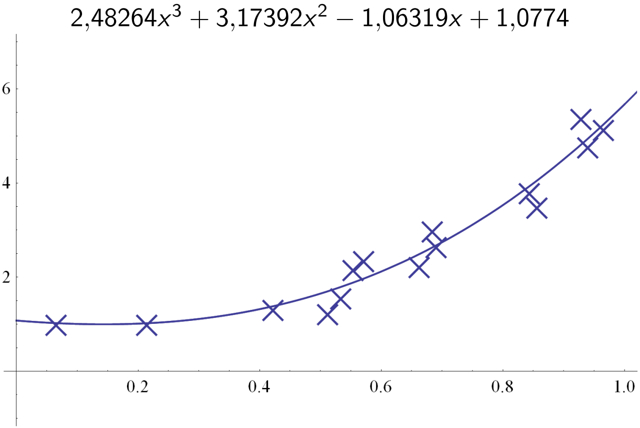
Alulilleszkedés: $p = 1$



Nagyjából jó illeszkedés: $p = 2$

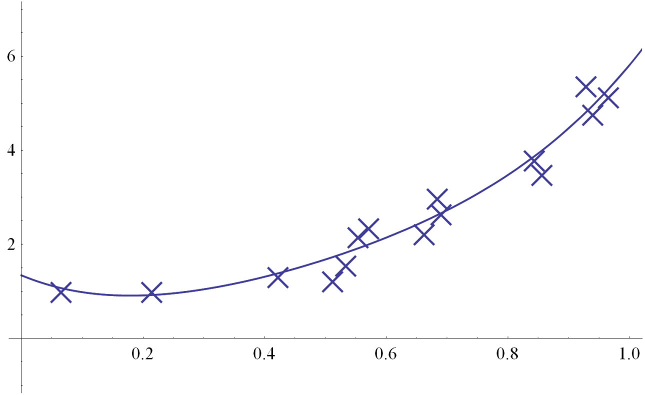


Nagyjából jó illeszkedés: $p = 3$



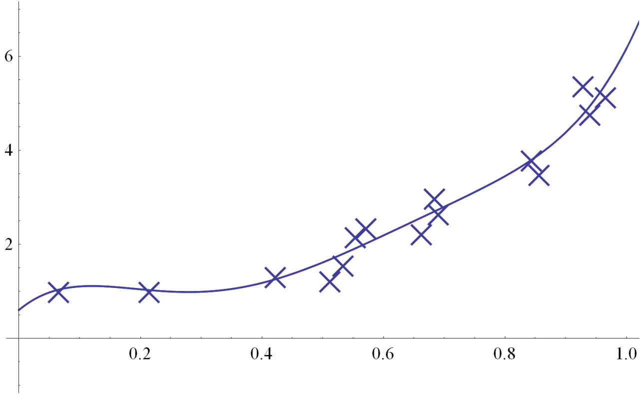
Nagyjából jó illeszkedés: $p = 4$

$$11{,}6577x^4 - 22{,}0369x^3 + 20{,}2496x^2 - 5{,}39823x + 1{,}34003$$



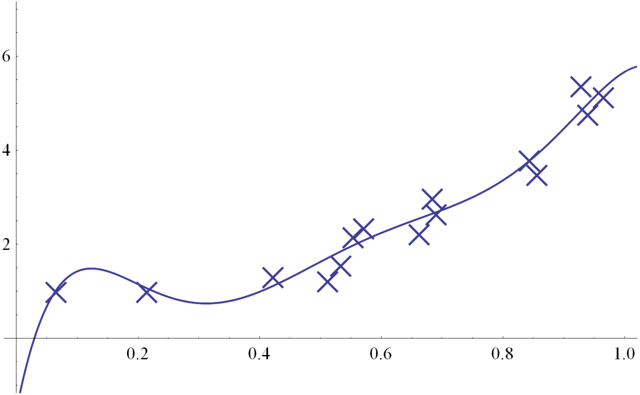
Túlilleszkedés: $p = 5$

$$94{,}7601x^5 - 236{,}514x^4 + 213{,}631x^3 - 77{,}138x^2 + 10{,}8264x + 0{,}601515$$



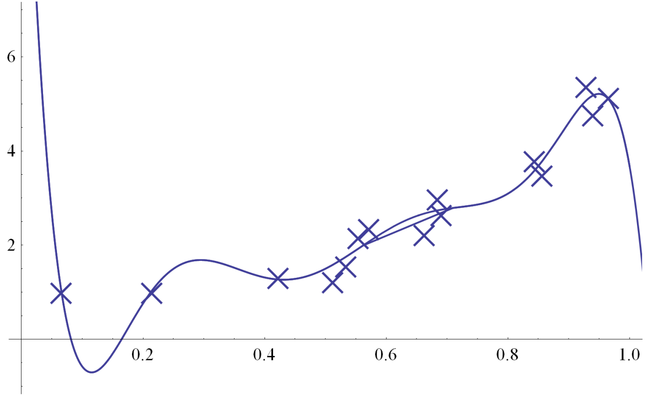
Túlilleszkedés: $p = 6$

$$-556{,}426x^6 + 1895{,}28x^5 - 2494{,}87x^4 + 1587{,}69x^3 - 489{,}325x^2 + 64{,}8299x - 1{,}52203$$



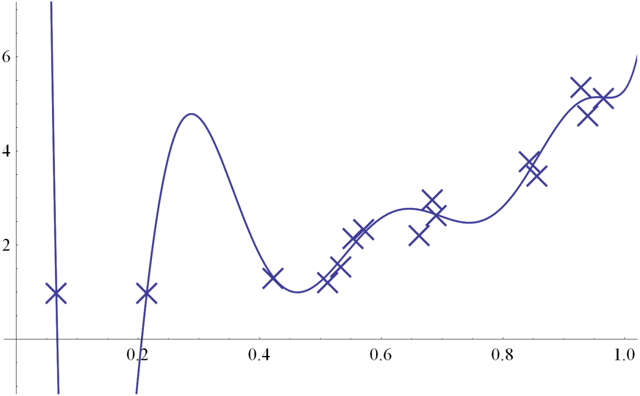
Túlilleszkedés: $p = 7$

$$-7426{,}18x^7 + 28047{,}2x^6 - 42886{,}1x^5 + 33991{,}4x^4 - 14813{,}8x^3 + 3456{,}67x^2 - 380{,}286x + 14{,}6986$$



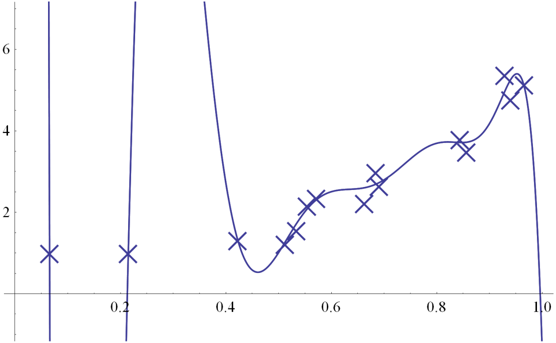
Túlilleszkedés: $p = 8$

$$59039{,}2x^8 - 282296{,}x^7 + 565254{,}x^6 - 613881{,}x^5 + 390937{,}x^4 - 146967{,}x^3 + 31001{,}6x^2 - 3195{,}04x + 112{,}114$$



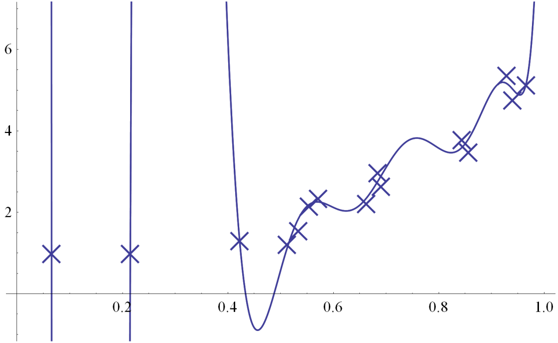
Túlilleszkedés: $p = 9$

$$-722495{,}x^9 + 3{,}85053 \cdot 10^6 x^8 - 8{,}84295 \cdot 10^6 x^7 + 1{,}1426 \cdot 10^7 x^6 - 9{,}08926 \cdot 10^6 x^5 + 4{,}57009 \cdot 10^6 x^4 - 1{,}43064 \cdot 10^6 x^3 + 262396{,}x^2 - 24485{,}1x + 807{,}137$$



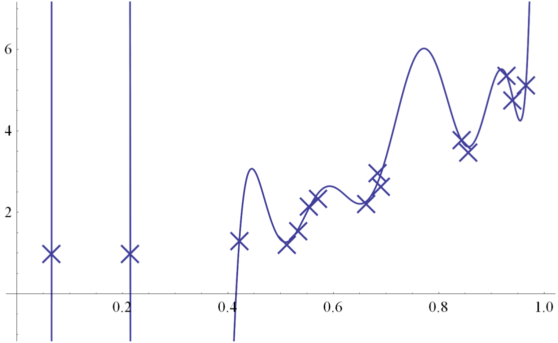
Túlilleszkedés: $p = 10$

$$8{,}61299 \cdot 10^6 x^{10} - 5{,}24999 \cdot 10^7 x^9 + 1{,}40371 \cdot 10^8 x^8 - 2{,}16006 \cdot 10^8 x^7 + 2{,}1085 \cdot 10^8 x^6 - 1{,}35546 \cdot 10^8 x^5 + 5{,}75915 \cdot 10^7 x^4 - 1{,}57537 \cdot 10^7 x^3 + 2{,}59736 \cdot 10^6 x^2 - 223991{,}x + 7044{,}46$$



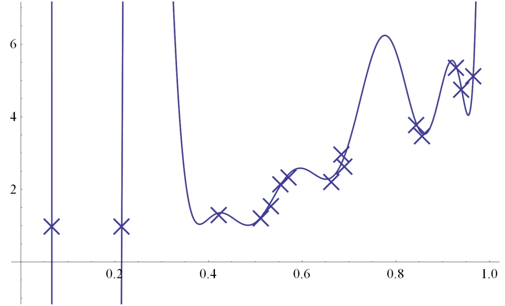
Túlilleszkedés: $p = 11$

$$9{,}81027\cdot10^{7}x^{11}-6{,}54761\cdot10^{8}x^{10}+1{,}94347\cdot10^{9}x^{9}-3{,}37777\cdot10^{9}x^{8}+3{,}80722\cdot10^{9}x^{7}-2{,}91\cdot10^{9}x^{6}+1{,}53045\cdot10^{9}x^{5}-5{,}49469\cdot10^{8}x^{4}+1{,}30416\cdot10^{8}x^{3}-1{,}91189\cdot10^{7}x^{2}+1{,}50501\cdot10^{6}x-44723{,}9$$



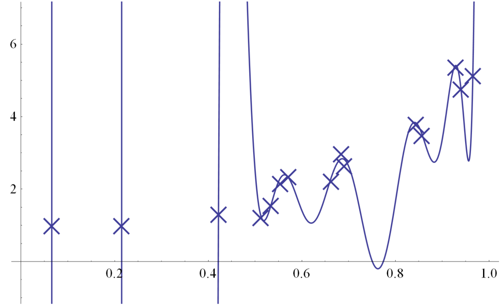
Túlilleszkedés: $p = 12$

$$1{,}97286 \cdot 10^8 x^{12} - 1{,}37728 \cdot 10^9 x^{11} + 4{,}31319 \cdot 10^9 x^{10} - 7{,}99714 \cdot 10^9 x^9 + 9{,}75531 \cdot 10^9 x^8 - 8{,}22533 \cdot 10^9 x^7 + 4{,}8983 \cdot 10^9 x^6 - 2{,}06632 \cdot 10^9 x^5 + 6{,}08915 \cdot 10^8 x^4 - 1{,}211 \cdot 10^8 x^3 + 1{,}51977 \cdot 10^7 x^2 - 1{,}05188 \cdot 10^6 x + 28665$$



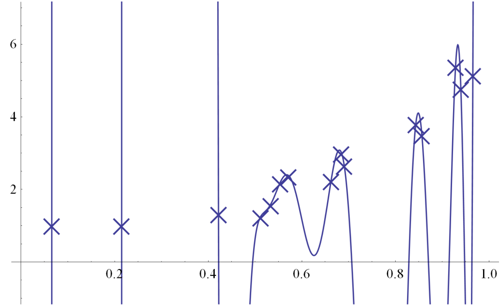
Túlilleszkedés: $p = 13$

$$1{,}33188 \cdot 10^{10}x^{13} - 1{,}09101 \cdot 10^{11}x^{12} + 4{,}06208 \cdot 10^{11}x^{11} - 9{,}08859 \cdot 10^{11}x^{10} + 1{,}36095 \cdot 10^{12}x^{9} - 1{,}43708 \cdot 10^{12}x^{8} + 1{,}0978 \cdot 10^{12}x^{7} - 6{,}12006 \cdot 10^{11}x^{6} + 2{,}4775 \cdot 10^{11}x^{5} - 7{,}14241 \cdot 10^{10}x^{4} + 1{,}41049 \cdot 10^{10}x^{3} - 1{,}77685 \cdot 10^{9}x^{2} + 1{,}24223 \cdot 10^{8}x - 3{,}41822 \cdot 10^{6}$$

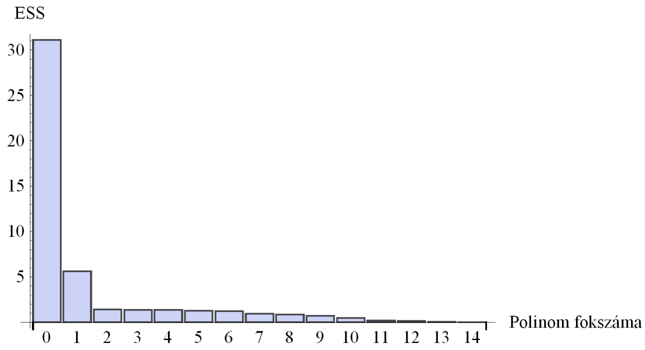


Túlilleszkedés: $p = 14$

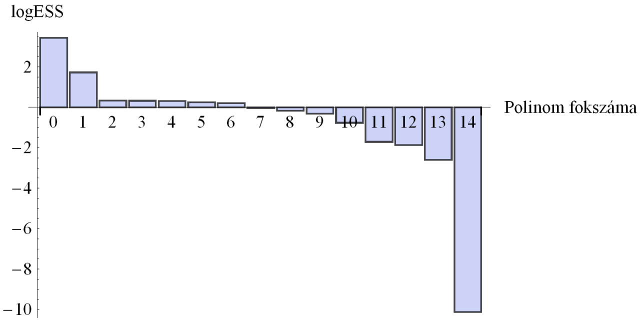
$$2{,}23808 \cdot 10^{11} x^{14} - 1{,}95447 \cdot 10^{12} x^{13} + 7{,}81606 \cdot 10^{12} x^{12} - 1{,}89512 \cdot 10^{13} x^{11} + 3{,}10833 \cdot 10^{13} x^{10} - 3{,}64245 \cdot 10^{13} x^{9} + 3{,}1386 \cdot 10^{13} x^{8} - 2{,}01508 \cdot 10^{13} x^{7} + 9{,}65479 \cdot 10^{12} x^{6} - 3{,}41996 \cdot 10^{12} x^{5} + 8{,}76076 \cdot 10^{11} x^{4} - 1{,}55904 \cdot 10^{11} x^{3} + 1{,}79489 \cdot 10^{10} x^{2} - 1{,}16536 \cdot 10^{9} x + 3{,}04682 \cdot 10^{7}$$



Hiba az egyes fokszámok mellett



Jobban láthatóan...



A túlilleszkedés hatása

- Itt a tanítás mértékét a polinom fokszáma jelzi
- A példa tökéletesen mutatja, hogy mi a túlilleszkedés tartalma:
  - A mintaadatokat ugyan egyre jobban megtanuljuk...
  - ... de közben a mintán kívüli világról egyre kevesebbet tudunk mondani (holott minket ez érdekelne igazából!)
- A túltanulás igazi problematikáját az adja, hogy ez utóbbi *elkerülhetetlenül* bekövetkezik, ha a tanítást túl sokáig folytatjuk (az ellentmondás a két szempont között, ugyebár)

Túlilleszkedés túl sok magyarázó változó miatt

- A magyarázó változók száma tipikus példája a tanítás fokának
- Túl kis mértékű tanítás (túl kevés magyarázó változó) esetén az alulilleszkedés miatt lesz rossz a modellünk...
- ... túl nagy mértékű tanítás (túl sok magyarázó változó) esetén a túlilleszkedés, az általánosítóképesség leromlása miatt
- Szemléletes megjelenés: a bevont magyarázó változók száma csökkenti a tesztek szabadsági fokainak számát (erre ugyanis sokszor jön elő valamilyen $n-(k+1)$ jellegű kifejezés), így az erejüket; „leköti a szabadsági fokokat"
- Az R^2 ezt nem jellemzi, csak a mintához való illeszkedést
- Valahogy „javítani" kell; ezzel fogunk most foglalkozni

Megoldási lehetőségek I.

- Magyarázó változók számának csökkentése *csak* a bennük lévő információk alapján, tehát *nem* is nézve az eredményváltozót („blinded to the outcome")
  - A legtisztább megoldás
  - Két alapvető kivitelezési lehetőség: szakmai szempontok szerinti szűrés, vagy statisztikai alapú redundanciavizsgálat a magyarázó változók körében és redundánsak elhagyása vagy összevonása
  - Ebben segíthetnek az arra vonatkozó irányelvek, hogy adott mintanagyság mellett mennyi prediktor modellezhető
- Minden magyarázó változó felhasználása, de a regresszió regularizálása (penalizálás)
- Egyéb korszerű megoldások (pl. bayes-i modellátlagolás, BMA)

Megoldási lehetőségek II.

- Statisztikai alapú szűrés
  - Ezzel fogunk most részletesen foglalkozni
  - De vigyázat, ész nélkül nem használható, mert az *maga* is túlilleszkedéshez vezethet!
  - Ész nélkül: össze-vissza mindenféle lehetőséget megvizsgálva, hogy melyik jobb; ehelyett vezessenek minket amennyire lehet szakmai megfontolások, a próbálkozások lehetőleg legyenek pre-specifikáltak (ne az adatok sugallják őket), és ha kétség van, inkább közöljünk többféle modellt

A modellszelekció fogalma

- Modellszelekció alatt az optimális magyarázó változó-kör meghatározását értjük
- Ennek megfelelően foglalkozik változó bevonásának/elhagyásának hatásával...
- ...de nem „mikroszkopikusan" (mi történik a többi változó becsült paramétereivel stb.), hanem „makroszkopikusan" (mi történik a modell jóságával)
- Az előbbi inkább a modellspecifikáció kérdése, később fogunk vele foglalkozni
- Továbbá: a modellspecifikációhoz szoktuk sorolni az adott magyarázó változó-kör melletti függvényforma kialakítást (de nincs egyértelmű határ a kettő között)

A modellszelekció problematikájának megoldása

- Az biztos, hogy a mintához való illeszkedés az R^2-tel jellemezhető
- Innentől két lépésben lehet továbbhaladni a modellszelekcióval:
  1. Két modell között úgy döntünk, hogy megnézzük, hogy lényeges-e köztük az R^2-beli különbség... és csak akkor választjuk a bővebbet, ha nem csak nagyobb (ez biztos), de *lényegesen* nagyobb az R^2-e (más szóval: egy modellből mindazon változókat elhagyjuk, melyek nem csökkentik *lényegesen* az R^2-et, még ha számszerűen csökkentik is)
  2. Definiálunk olyan mutatót az R^2 helyett, mely az R^2-hez hasonlóan figyelembe veszi a mintához való illeszkedést, de – azzal szemben – az ehhez szükséges magyarázó változók számát *is*
- Most e két kérdést fogjuk közelebbről is megvizsgálni

A modellszűkítésről

- Már láttuk, hogy miért akarhatunk modellt szűkíteni (változót elhagyni a modellből), még ha ezzel rontunk is az R^2-en (és még látni fogunk más okot is)
- Melyik változót lehet érdemes ezek miatt elhagyni? $\rightarrow$ *mérlegelés* a fentiekben javulás és az R^2 romlása között
- Sok vagy kevés a romlás? – a szó statisztikai értelmében lényeges-e!
- Azaz túlmutat-e a mintavételi ingadozáson: ehhez teszt kell

Az LM és a Wald-teszt eltérései

- Ha ugyanazt a hipotézist vizsgálják, mi a különbség köztük?
- A nyilvánvaló: teljesen más elven épülnek fel
- Ennek konkrétabb következményei:
  1. Nem feltétlenül ugyanakkor utasítanak el; sőt, ennél több is mondható: az LM-próba *mindig* az elfogadás felé „hajlik” (olyan értelemben, hogy ha ez elutasít, akkor a Wald is, viszont ha a Wald elfogad, akkor az LM is elfogad)
  2. A Wald kismintás próba, az LM-próba nagymintás (értsd: tulajdonságai csak aszimptotikus értelemben garantáltak), de azért a gyakorlatban már néhányszor 10 mintaelemre is elég jól szokott közelíteni
  3. Belátható, hogy a Wald-teszt csak a korlátozatlan, az LM-teszt csak a korlátozott modell becslését igényli; ez utóbbi egyszerűbb (gyakorlatban számít!)

Az LM és a Wald-teszt eltérései

- Van egy általánosabb különbség is: más modellezési filozófiához illeszkednek
- A Wald-teszt inkább az „általánostól az egyszerűig" filozófiának (Hendry/LSE) felel meg (a korlátozatlan modellből indul, és kérdezi, hogy lépjünk-e a csökkentés irányába)
- Az LM-próba inkább az „egyszerűtől az általánosig" filozófiának felel meg (a korlátozott modellből indul, és kérdezi, hogy lépjünk-e a bővítés irányába)
- … hát ez a különbség – hiába ugyanaz *formailag* a hipotézispár!

Az LM és a Wald-teszt eltérései

- Már most megjegyezzük, hogy az „újonnan felvett” változó nem szükségszerű, hogy még nem szereplő változó legyen: lehet egy már bent levő változó valamilyen új, nemlineáris függvényformája (pl. négyzete), vagy változók interakciója (ld. később)
- E célra általában LM-tesztet használnak, emiatt igaz az, hogy az LM-elvű teszteket kicsit általánosabban is használják az ökonometriában, más hipotézisek tesztelésére is
- ... tehát: ez modellspecifikációs tesztként is felhasználható!

Az R^2 „megjavítása”

- Ahogy láttuk az R^2 *önmagában* nem minősít egy modellt, mert csak a hibát minimalizálja, a túl sok változó káros hatásával egyáltalán nem foglalkozik („egyoldalú” mérlegelés)
- Nem lehetne ezt valahogy kijavítani? $\rightarrow$ olyan mutatót konstruálni, ami mindkét szempontra tekintettel van
- Ötlet: induljunk ki az R^2-ből, de büntessük a magyarázó változók számának növelését
- Bár máshonnan származik, de épp ennek a logikának felel meg (gondoljuk végig!) a *korrigált* R^2:

$$\bar{R}^2 = 1 - \left(1 - R^2\right) \frac{n-1}{n-k-1}$$

- Ez már alkalmas különböző számú magyarázó változót tartalmazó modellek összehasonlítására

Az $\bar{R}^2$ főbb tulajdonságai

- $\bar{R}^2 \leq R^2$
- Ebből következően 1-nél nem lehet több...
- ...de 0-nál lehet kisebb (ha sok magyarázó változóval is csak gyenge magyarázást (kis R^2-et) tud elérni)
- Ez már csökkenhet is új változó bevonásával (belátható, hogy ez a változó t-hányadosától függ)
- Ilyen módon már nem beágyazott modellek szelekciójára is használható...
- ... de vigyázat: csak akkor, ha az eredményváltozó azért ugyanaz (különben a megmagyarázandó variancia is más lenne)

Automatikus modellszelekció

- Megadjuk a változók egy maximális halmazát (l darab potenciálisan szóba jövő magyarázó változó), és „a gép" kiválasztja, hogy melyik részhalmaza az optimális: melyeket érdemes egy modellbe bevonni, hogy az a legjobb legyen
- Jóság valamilyen célfüggvény szerint (ami ugye *nem* R^2, hogy a dolognak értelme is legyen, hanem pl. $\bar{R}^2$)
- Léteznek heurisztikus stratégiák (mind mohó algoritmus), hogy ne kelljen a 2^l kombinációt tesztelni (forward, backward, stepwise szelekció)
- Az automatikus modellszelekció használata azonban szinte *minden esetben* és *határozottan ellenjavallt*, az alkalmazásával nyert modelleknek torzítottak lesznek a regressziós koefficiensei, torzítottak lesznek a becsült standard hibái, ebből adódódan torzítottak lesznek a konfidenciaintervallumai, a szokásos p-értékek falsak lesznek, a rájuk alapozott tesztek invalidak, a t és F statisztikáknak nem t illetve F eloszlásuk lesz, torzított lesz a modell R^2-e stb.

Információs kritériumok

- Vannak további mutatók is, melyek egyszerre büntetik a magyarázó változók nagy számát és a nagy hibát, a kettő között egyensúlyt keresve, pl.
  - Akaike (AIC): $AIC = \frac{ESS}{n} e^{\frac{2(k+1)}{n}}$
  - Schwarz (SBC): $BIC = \frac{ESS}{n} n^{\frac{k+1}{n}}$
  - Hannan-Quinn (HQC): $HQC = \frac{ESS}{n} (\ln n)^{\frac{2(k+1)}{n}}$
- Teljesen más elven (információelméleti alapon) épülnek fel mint az $\bar{R}^2$
- Hiba jellegű mutatók, ezért őket *minimalizálni* akarjuk és nem maximalizálni!
- Sok van belőlük, döntsük el előre, hogy melyiket használjuk a modellszelekcióra!
- Ezekkel nem csak beágyazott modellek hasonlíthatóak össze (de azért jobbak a tulajdonságaik ilyenkor)

Modellszelekciós stratégiák

- Itt már látszik, hogy miért mondtuk az elején, hogy az ökonometriai munka iteratív
- Diagnosztizáljuk a modellt, és – ha ilyen baj van vele – szűkítjük vagy bővítjük, majd újra diagnosztizáljuk, majd...
- De vigyázat: újra fontos felhívni a figyelmet, hogy ha rengeteg ilyen iterációra kerül sor az értelemszerűen *maga is* túlilleszkedéshez vezethet (túlságosan rászabjuk a konkrét mintára a modellt)!