Влияние схемы кросс-валидации на оценку качества классификатора. Разбор расхождения accuracy 0,54 и 0,96 на датасете Mushroom

Еклашева Ольга Витальевна, доцент, кандидат экономических наук
Поволжский государственный технологический университет

Аннотация. При решении задачи классификации на датасете mushroom_cleaned обнаружено расхождение в оценке accuracy. Единичное дерево решений и hold-out-схемы дают около 0,96, тогда как cross_val_score(cv=5) около 0,54. В работе последовательно проверены гипотезы о случайности удачного разбиения, утечке препроцессинга, групповой утечке и переобучении. Установлено, что причиной расхождения является использование KFold без перемешивания на упорядоченных данных: последовательные блоки оказываются смещенными по составу классов. Включение shuffle=True в KFold и StratifiedKFold поднимает оценку до 0,96, совпадая с результатами hold-out и ShuffleSplit. Сделан вывод, что корректной базовой схемой для табличной классификации является StratifiedKFold(shuffle=True), а оценка 0,96 может считаться честной при отсутствии временной и групповой структуры данных.

Ключевые слова: кросс-валидация, KFold, StratifiedKFold, ShuffleSplit, смещение оценки, упорядоченные данные, DecisionTreeClassifier.

Кросс-валидация является стандартным инструментом оценки обобщающей способности моделей машинного обучения. Однако получаемые оценки чувствительны к схеме разбиения данных. Разные процедуры могут давать систематически смещенные результаты, если данные обладают скрытой временной, групповой или просто порядковой структурой.

В настоящей работе рассматривается практический случай, возникший при классификации датасета mushroom_cleaned [1].Этот датасет, предназначенный для задачи бинарной классификации, содержит только числовые значения, не содержит пропусков и выбросов. При построении дерева решений одиночное разбиение на тренировочную и тестовую выборки и многократное повторение метода отложенной выборки (hold-out) давали accuracy около 0,96, тогда как среднее значение accuracy при использовании кросс валидации с количеством фолдов равным 5, около 0,54. Разрыв в 40 процентных пунктов требовал объяснения, поскольку обе процедуры формально оценивают одну и ту же модель на одних и тех же данных.

Целью работы стало установить причину расхождения и сформулировать рекомендации по корректной оценке качества для данного класса задач.

Набор mushroom_cleaned содержит только описание характеристик грибов (cap-diameter: диаметр шляпки, cap-shape: форма шляпки, gill-attachment: способ прикрепления пластинок, gill-color: цвет пластинок, stem-height: высота ножки, stem-width: толщина нижки, stem-color: цвет ножки, season: сезон и class: класс) и не содержит никаких идентификаторов или иных группирующих признаков. Целевая переменная и категориальные признаки обработаны в составе Pipeline, что исключает утечку препроцессинга между обучающей и валидационной частями.

В качестве основы был взят метод решения задачи классификации построение дерева решений с критерием информативности энтропия и максимальной глубиной дерева 15 (DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', max_depth=15)).

Сравнивались следующие схемы оценки: одиночный метод отложенной выборки (train_test_split), многократный метод отложенной выборки: ShuffleSplit(n_splits=20); кросс валидация с параметрами по умолчанию (без перемешивания) KFold(n_splits=5); кросс валидация с перемешиванием

KFold(n_splits=5, shuffle=True); кросс-валидации с сохранением пропорций классов (стратификация) в каждом обучающем и тестовом наборе данных (StratifiedKFold(n_splits=5, shuffle=True)) [2].

Для каждой схемы фиксировалось среднее значение accuracy и разброс по фолдам. Результаты сведены в таблицу 1.

Таблица 1. Accuracy при различных схемах валидации

Схема валидации	**Accuracy (среднее)**	**Разброс / примечание**
Одиночный hold-out	0,96	однократное разбиение
ShuffleSplit (20 разбиений)	0,957–0,971	узкий диапазон
KFold(5), без shuffle	0,536	0,41–0,69
KFold(5), shuffle=True	0,964	—
StratifiedKFold(5), shuffle=True	0,962	—

Как видно из таблицы, методы с отложенной выборкой и кросс валидация с перемешиванием дают согласованные оценки около 0,96. Кросс валидация без перемешивания дает не только низкое среднее, но и относительно большой разброс (0,41–0,69), что указывает на неоднородность фолдов по составу.

Рассмотрим **проверенные** и **отвергнутые гипотезы**.

Случайность удачного разбиения. Если бы высокое значение метрики accuracy для единичного случая использования метода отложенной был следствием везения, при многократном повторении разбиений оценка испытывала бы значительные колебания. ShuffleSplit(n_splits=20) дал устойчивый диапазон 0,957–0,971, что позволяет отклонить эту гипотезу.

Утечка препроцессинга. Использование Pipeline гарантирует, что параметры преобразований оцениваются только на обучающей части каждого фолда. Утечка через препроцессинг исключена.

Групповая утечка. Если бы данные содержали группы, случайное перемешивание привело бы к попаданию связанных объектов и в тренировочную, и в тестовую, завышая оценку. Однако в этом случае KFold(shuffle=True) и StratifiedKFold(shuffle=True) также дали бы низкую оценку, поскольку они перемешивают тем же образом. Наблюдаемое значение 0,96 для shuffle-схем указывает на отсутствие значимой групповой структуры. Кроме того, в датасете mushroom_cleaned такой колонки нет.

Подтвержденная гипотеза. KFold(n_splits=5) без перемешивания делит данные на пять последовательных блоков в том порядке, в котором строки хранятся в массиве. Если данные упорядочены (по классу, по источнику, по значению признака или просто в результате сортировки датафрейма) фолды оказываются смещенными. Одни содержат преимущественно объекты одного класса, другие - другого.

В результате модель обучается на одном распределении, а проверяется на существенно ином. Это объясняет одновременно низкое среднее (0,536) и широкий разброс (0,41–0,69).

Включение перемешивания (shuffle=True) рандомизирует порядок перед разбиением. Фолды становятся репрезентативными, и оценка поднимается до 0,964.

StratifiedKFold(shuffle=True) дает практически идентичный результат (0,962). Получается, решающую роль играло именно отсутствие перемешивания.

Для задач табличной классификации без временной и групповой структуры базовой схемой следует считать StratifiedKFold(n_splits=5, shuffle=True, random_state=42). Эта процедура одновременно устраняет эффект порядка строк и сохраняет пропорции классов в каждом фолде. Согласно результатам масштабного сравнительного исследования R.Kohavi, стратифицированная десятикратная кросс-валидация является предпочтительным методом выбора модели для реальных наборов данных [3] .

Если данные обладают временной структурой и задача состоит в прогнозе будущих значений, следует использовать TimeSeriesSplit без перемешивания. В этом случае более низкая оценка является честной.

Если данные содержат группы (пациенты, устройства, партии), необходимо применять GroupKFold, даже при наличии перемешивания. Однако для рассматриваемого датасета групповая структура отсутствует, и GroupKFold неприменим.

Полученная оценка 0,96 является корректной, если данные являются независимыми и одинаково распределенными, в признаках нет идентификаторов, которые могут организовать утечку протекающих в целевую переменную, и задача не является по своей сути прогнозом в будущее. Для окончательного подтверждения отсутствия скрытой структуры рекомендуется выполнить перемешивание строк датафрейма перед сохранением или загрузкой и повторить эксперимент. Результат не должен измениться.

Разрыв между оценками 0,54 и 0,96 объясняется не свойствами модели и не утечкой данных, а артефактом схемы валидации. cross_val_score с параметром cv=5 для классификатора по умолчанию использует KFold без перемешивания; на упорядоченных данных это порождает смещенные фолды. Включение shuffle=True в KFold и StratifiedKFold приводит оценку в соответствие с результатами построение одного дерева решений и ShuffleSplit. Честной оценкой качества модели на данном датасете следует считать ~0,96, а стандартной схемой — StratifiedKFold(shuffle=True).

Список литературы

1. Датасет Mushroom Cleaned [Электронный ресурс] // Kaggle. URL: https://www.kaggle.com/datasets/shabbirchinioti/mushroom-cleaned
2. Документация scikit-learn: Cross-validation: evaluating estimator performance [Электронный ресурс]. URL: https://scikit-learn.org/stable/modules/cross_validation.html.
3. Kohavi R. A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection // Proceedings of the 14th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI). – Montreal, 1995. – P. 1137–1143.