分类模型

授课教师：吴翔

邮箱：wuhsiang@hust.edu.cn

May 4-18, 2019

统计学习概述

统计学习方法

统计机器学习（statistical machine learning）可分为：

- 有监督学习（supervised learning）vs 无监督学习（unsupervised learning）：聚类分析即为典型的无监督学习
- 参数方法（parametric methods）vs 非参数方法（non-parametric methods）
- 回归（regression）问题 vs 分类（classification）问题：分别针对连续变量和分类变量

模型复杂程度

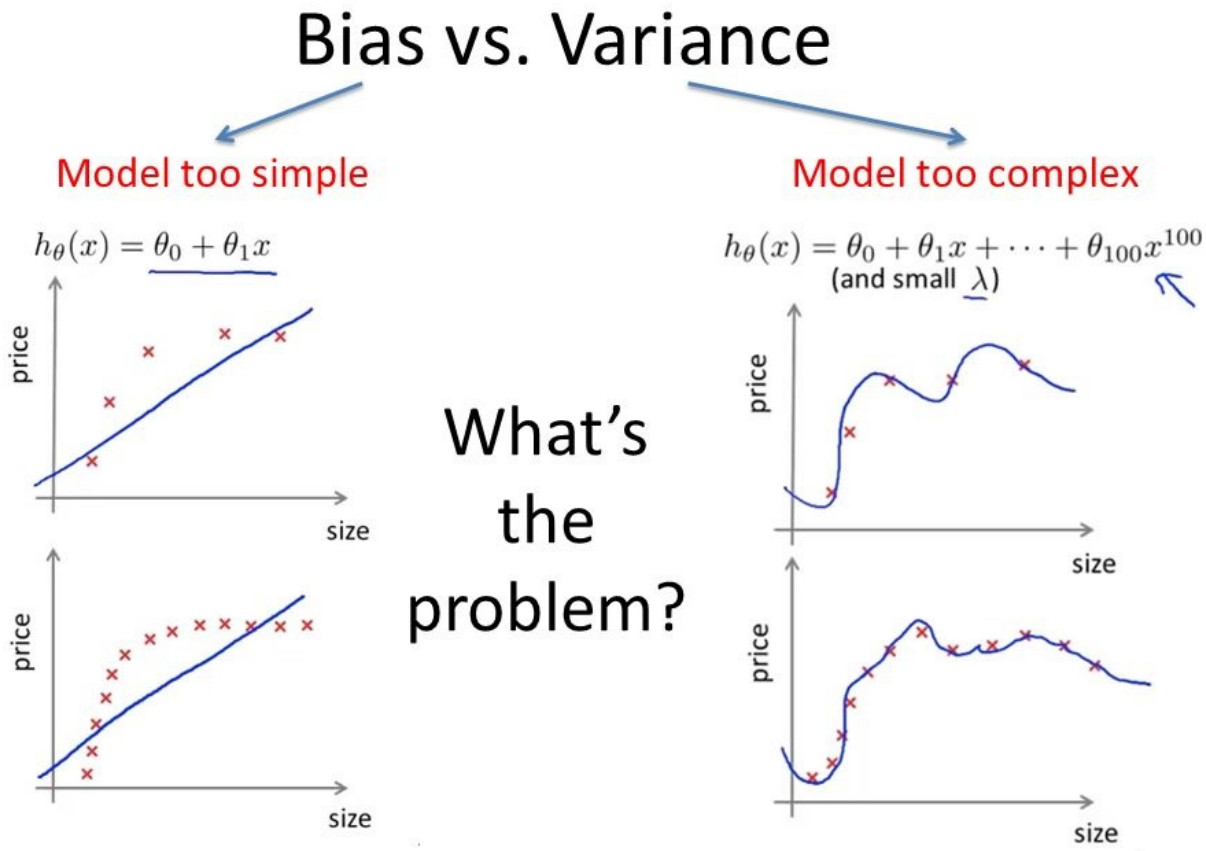


图 1: Model complexity

测试均方误差的分解

测试均方误差的期望值（**expected test MSE**）可以分解为如下三个部分：

$$E(y-\hat{f}(x))^2 = \underbrace{\mathrm{Var}(\hat{f}(x))}_{\text{variance}} + \underbrace{[\mathrm{Bias}(\hat{f}(x))]^2}_{\text{bias}} + \underbrace{\mathrm{Var}(\epsilon)}_{\text{irreducible}} .$$

- 模型方差（variance）：针对不同的训练数据，$\hat{f}$ 的变化程度。
- 模型偏误（bias）：通过相对简化的模型来**近似**真实世界的问题时所引入的误差。

权衡模型偏误与方差

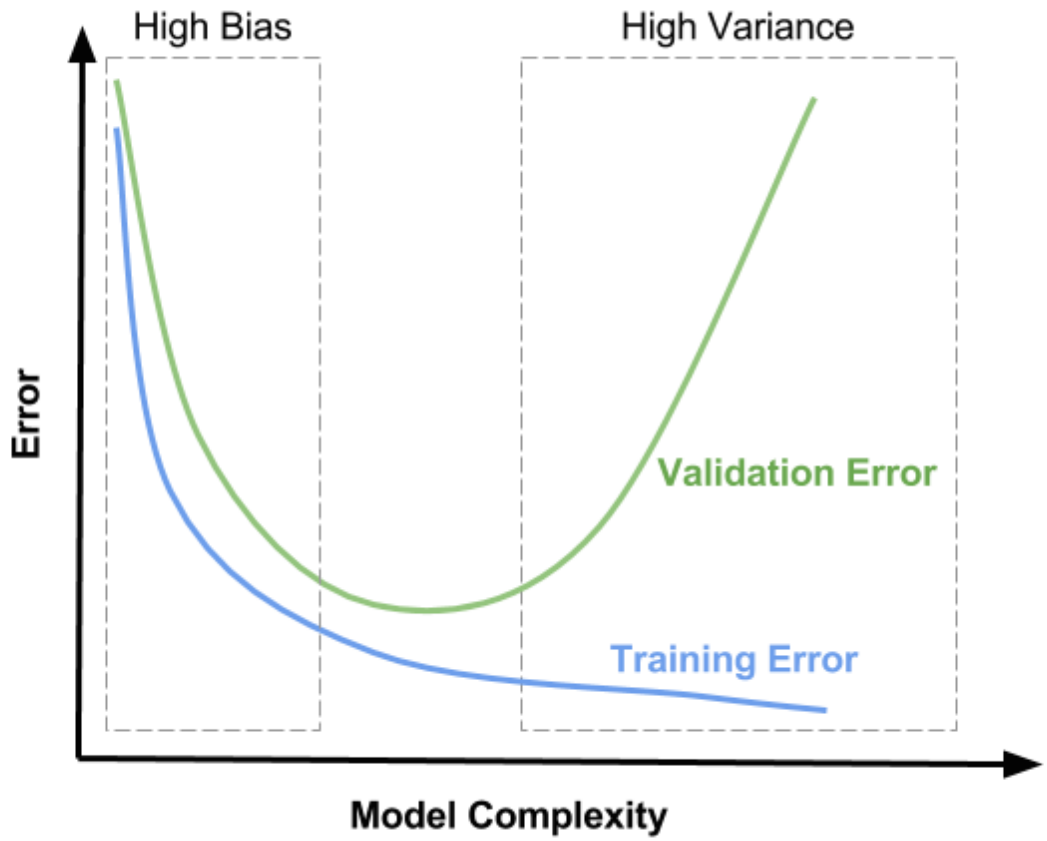


图 2: bias-variance trade-off

如何选择统计模型?

- 传统统计模型的局限：线性回归模型等统计模型通常最小化训练数据的均方误差，但是其测试均方误差（test MSE）却较大。换言之，传统统计模型执着于寻求“真实规律”，以致于将一些随机因素**误判**为 f 的真实性质。
- 权衡模型偏误与方差（**bias-variance trade-off**）：随着模型灵活性（或自由度）的增加，模型方差随之增大，但模型偏误则相应减小（过度拟合问题）。通过交叉验证（cross-validation）来实现两者的权衡。
- 权衡预测精度与可解释性（**accuracy-interpretability trade-off**）：诸如 bagging、boosting、support vector machines 等非线性模型具有很高的预测精度，但不易解释；linear models 等易于解释，但预测精度不高。两者的权衡取决于研究目的。

交叉验证

交叉验证将原始数据集分为训练集（**training set**）和验证集（**validation set**），并以验证集的错误率选择最佳模型。

- 留一交叉验证法（leave-one-out cross validation, LOOCV）
- k 折交叉验证法（k—fold CV）：将观测集随机分为 k 个大小基本一致的组，或说折（fold）。每次选取其中一折作为验证集，而剩余 $k-1$ 折作为训练集。通常，取 $k=5$ 或 $k=10$。

分类模型验证集错误率：

$$\mathrm{CV}_{(k)} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\mathrm{Err}_k = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{1}{m_k}\sum_{i=1}^{m_k} I(y_i \neq \hat{y}_i).$$

分类模型概述

预测分类响应变量（categorical response variable）：

1. 基本分类模型（basic classifier）
2. 树模型（tree-based models）
3. 支持向量机（support vector machine, SVM）
4. 聚类模型（clustering models）

分类模型的评价

Confusion Matrix and ROC Curve

		Predicted Class	
		No	Yes
Observed Class	No	TN	FP
	Yes	FN	TP

TN	True Negative
FP	False Positive
FN	False Negative
TP	True Positive

Model Performance

Accuracy	= (TN+TP)/(TN+FP+FN+TP)
Precision	= TP/(FP+TP)
Sensitivity	= TP/(TP+FN)
Specificity	= TN/(TN+FP)

图 3: confusion matrix

疾病筛查问题

采用乳房 X 光检查乳腺癌，得到以下混淆矩阵：

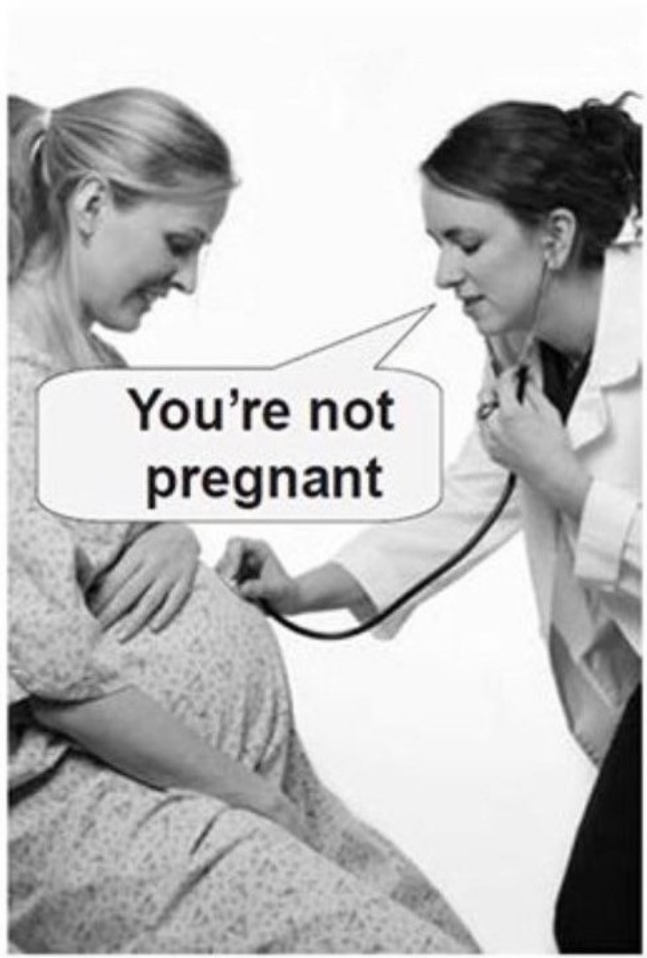
Example: Breast Cancer Screening

	Breast Cancer		
Mammogram Results	Disease	No Disease	Total
Positive	132	983	1,115
Negative	45	63,650	63,695
Total	177	64,633	64,810

两类预测错误

(false positive)

(false negative)



灵敏度

- 定义：灵敏度（sensitivity）也称为真阳性率、召回率（recall rate)。指实际为阳性的样本中，被正确判断为阳性的比例。
- 疾病筛查：在患病人群中，成功检出患者的概率。
- 适用情况：用以**避免假阴性**。例如 HIV 的筛查。
- 结果解读：由于真阳性率高，因而假阴性低。亦即，若得到结果是阴性，则有把握认为未患病。

以上筛查技术的灵敏度为：$132 \ / \ 177 = 74.6\%$。

特异度

- 定义：特异度（specificity）也称为真阴性率。指实际为阴性的样本中，被正确判断为阴性的比例。
- 疾病筛查：在未患病人群中，成功给出阴性结果的概率。
- 适用情况：用以**避免假阳性**。例如，治疗风险较大的疾病。
- 结果解读：由于真阴性率高，因而假阳性率低。亦即，若得到结果是阳性，则有把握认为患病。

以上筛查技术的特异度为：$63650 \ / \ 64633 = 98.5\%$。

联合筛查：先采用低成本、高灵敏度的筛查技术，排除未患病人群；再采用高成本、高特异度的筛查技术，确诊患病人群。

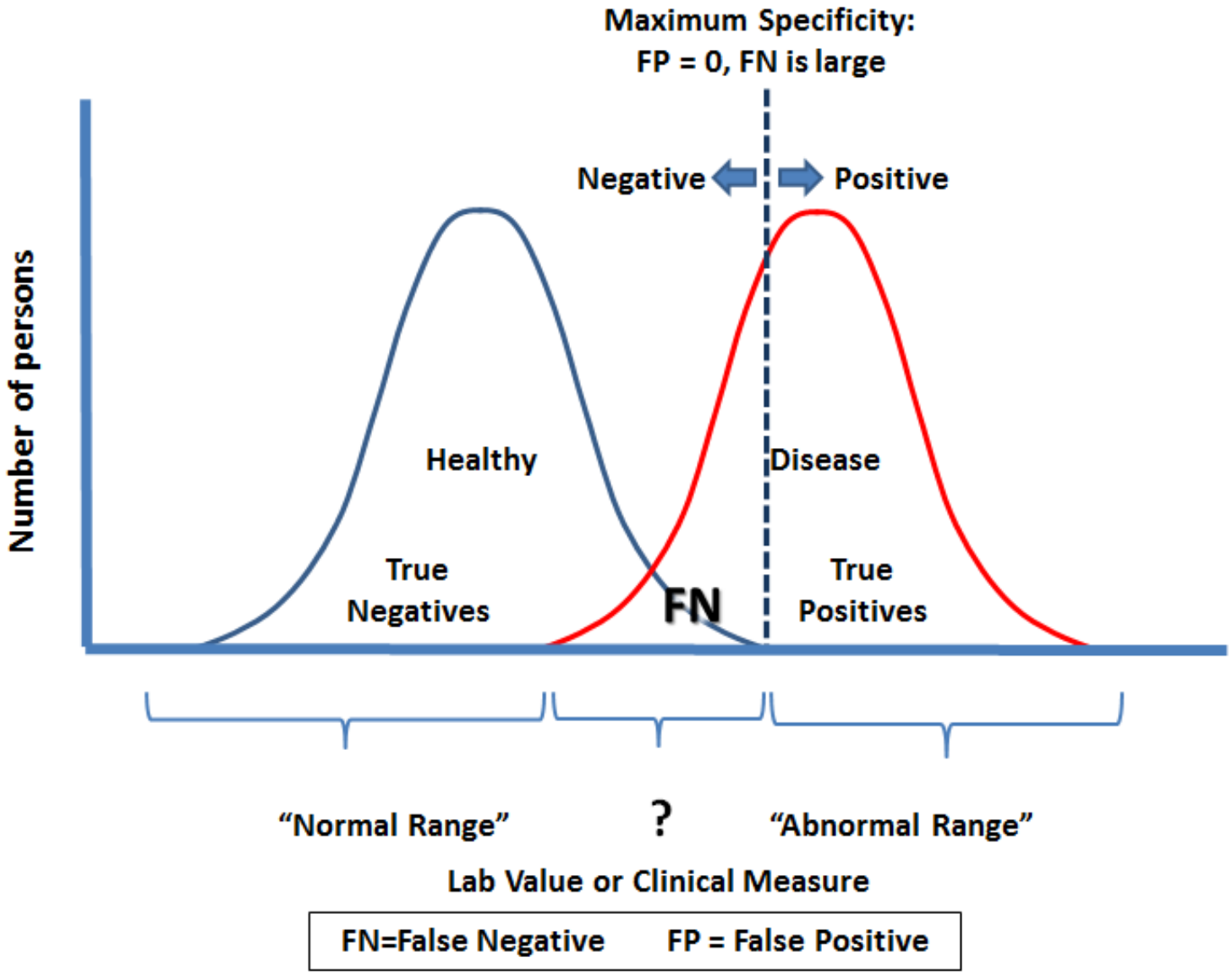
机场安检问题

- 方案一：
  - 措施：针对所有可疑的危险物品，均触发报警。
  - 评价：高灵敏度、低特异度。
- 方案二：
  - 措施：更复杂、成本更高的技术，尽可能方便未携带危险物品的乘客。
  - 评价：高特异度。

如何设计安检方案?

实践中的权衡：灵敏度 vs 特异度

权衡灵敏度和特异度


Maximum Specificity:
FP = 0, FN is large
Negative
Positive
Number of persons
Healthy
Disease
True
Negatives
FN
True
Positives
"Normal Range"
?
"Abnormal Range"
Lab Value or Clinical Measure
FN=False Negative
FP = False Positive

ROC 曲线与 AUC

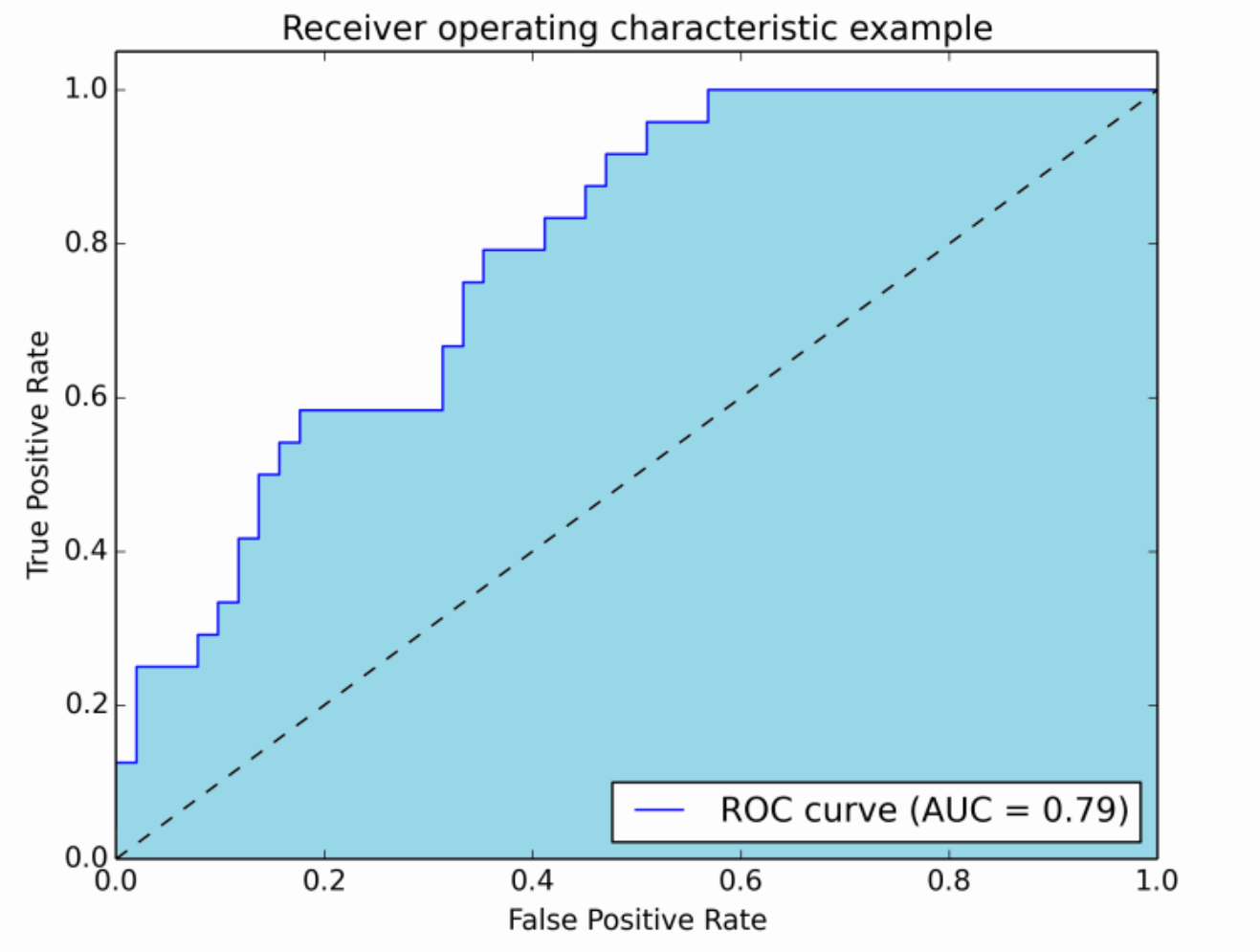


图 7: ROC curve and AUC

混淆矩阵及评价指标

- 准确率（accuracy）：指被正确判断的样本的比例。
- 精确率（precision）：指判断为阳性的样本中，实际为阳性的比例。
- 灵敏度（sensitivity）：也称为真阳性率、召回率（recall rate）。指实际为阳性的样本中，被正确判断为阳性的比例。
- 特异度（specificity）：也称为真阴性率。指实际为阴性的样本中，被正确判断为阴性的比例。

完美的分类器可以达到 100% 的灵敏度，及 100% 的特异度。但是理论上所有的分类器都会有最小的误差范围，称为贝叶斯错误率。

可以绘制接收者操作特征曲线（receiver operating characteristic curve，ROC 曲线），并结合 ROC 曲线下面积（area under the curve of ROC，AUC）来比较不同分类模型。

基本分类模型

基本分类模型（basic classifier）

1. 逻辑斯蒂回归（logistic regression）
2. 贝叶斯分类器（bayes classifier）
3. 线性判别分析（linear discriminant analysis, LDA）
4. 二次判别分析（quadratic discriminant analysis, QDA）
5. K 最近邻（$K-$nearest neighbor, KNN）

logistic 回归

给定 X 条件下事件 Y 发生的概率 $p(X) = \mathrm{Pr}(Y = 1|X)$，据此可以将发生比 (odd) 的对数建模为 X 的线性函数

$$\log[\frac{p(X)}{1-p(X)}] = \beta X.$$

上式左侧称为对数发生比（log-odd）或分对数（logit），其取值范围在 $(-\infty, \infty)$。

当类别 $K \geq 2$ 时，则采用多类别 logistic 回归模型。

似然函数

可以通过**最大似然估计**（maximum likelihood estimation, MLE）得到 logistic 回归的参数值。

参数记为 θ，数据记为 D。似然函数（likelihood function）是参数 θ 的函数，且定义为给定参数 θ 时，观测到数据 D 的概率：

$$l(\theta) = p(D|\theta).$$

例如，logistic 回归模型的似然函数

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^{n} p(X_i)^{y_i}[1 - p(X_i)]^{1-y_i}.$$

贝叶斯定理

贝叶斯定理阐述了随机变量 X 和 Y 的条件概率之间的关系：

$$p(Y|X) = \frac{p(X,Y)}{p(X)} = \frac{p(Y) \cdot p(X|Y)}{p(X)}.$$

或从“数据-参数”的视角而言，参数 θ 的后验分布 $\pi(\theta) = p(\theta|D)$ 正比于参数的先验分布 $p(\theta)$ 和似然函数 $l(\theta)$ 之积：

$$\pi(\theta) = \frac{p(\theta)p(D|\theta)}{p(D)} = \frac{p(\theta)l(\theta)}{p(D)}.$$

课堂板书：贝叶斯定理推导及概念解释

贝叶斯定理与分类

对于分类（categorical）响应变量 Y 而言，运用贝叶斯定理：

$$p(Y=k|X=x)=\frac{p(Y=k)\cdot p(X=x|Y=k)}{p(X=x)}.$$

假定 x 是 m 维向量（即特征数量），简写为

$$p(C_k|x)=\frac{p(C_k)\cdot p(x|C_k)}{p(x)}\propto p(C_k)\prod_{i=1}^{m}p(x_i|C_k)$$

贝叶斯分类器

贝叶斯分类器（bayesian classifier）选择后验概率 $p(C_k|x)$ 最大的类别，作为分类结果，即 argmax $p(C_k|x)$。

可以证明，贝叶斯分类器将产生最低的测试错误率，亦即**贝叶斯错误率**。相应用于分类的边界，成为贝叶斯决策边界（bayes decision boundary）。

问题在于，如何推导出后验概率 $p(C_k|x)$？我们需要更多**假设**。

LDA

线性判别分析（linear discriminant analysis, LDA）假定 $p(x|C_k) \sim N(\mu_k, \Sigma)$。LDA 即是条件概率 $p(x|C_k)$ 为（多元）正态分布时的贝叶斯分类器，其判别函数 $f(x)$ 为线性函数。

考虑 x 是一维的情况，

$$p(x|C_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp[-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu_k)^2],$$

由此根据后验概率 $p(C_k|x)$ 的对数，得到如下判别函数

$$f_k(x) = x \cdot \frac{\mu_k}{\sigma^2} - \frac{\mu_k^2}{2\sigma^2} + \log[p(C_k)].$$

课堂板书：推导判别函数

LDA 示意图

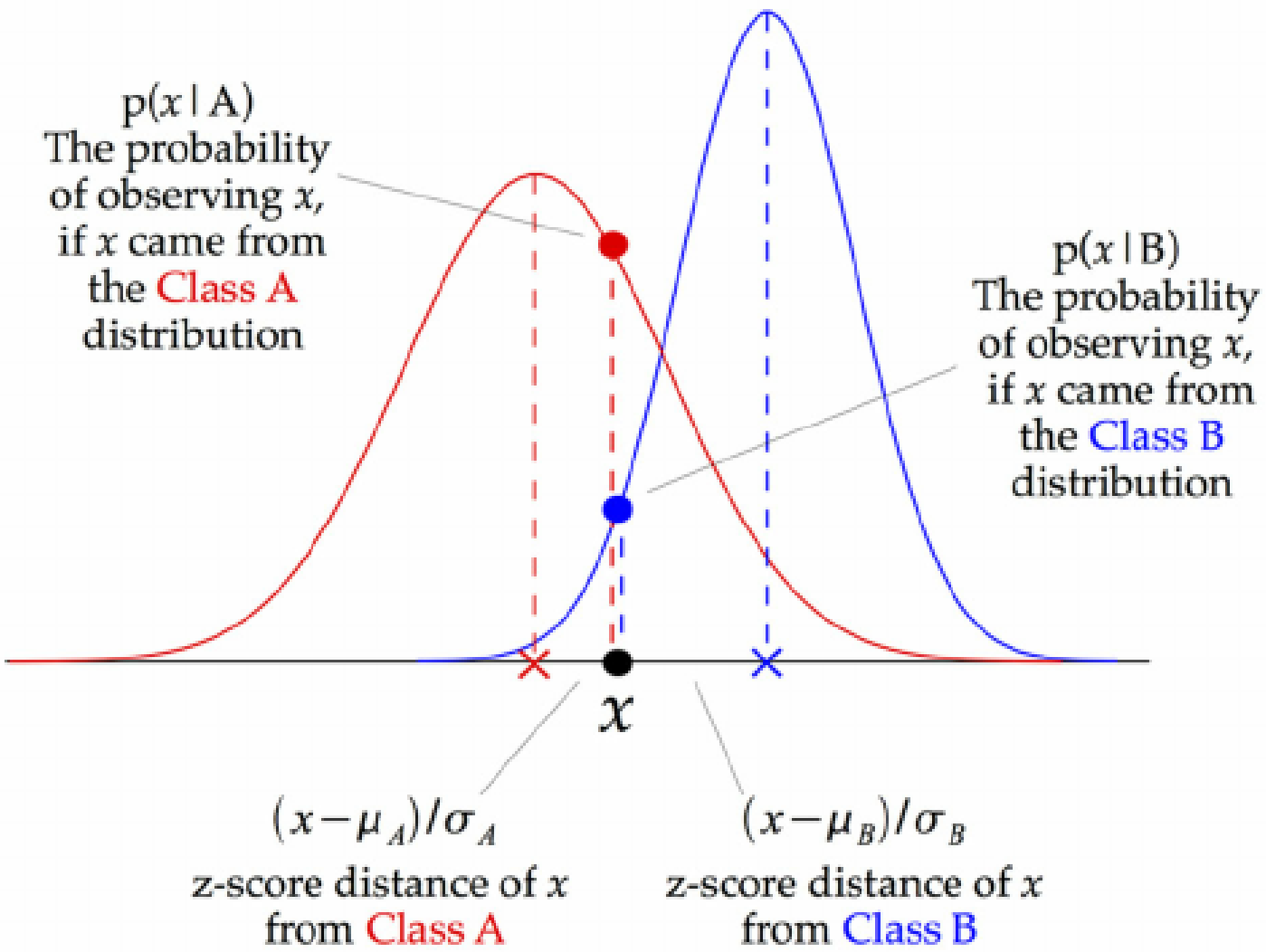


图 8: Illustration of LDA

QDA

二次判别分析（quadratic discriminant analysis, QDA）假定 $p(x|C_k) \sim N(\mu_k, \Sigma_k)$。QDA 即是条件概率 $p(x|C_k)$ 为（多元）正态分布时的贝叶斯分类器，其判别函数 $f(x)$ 为二次函数。QDA 与 LDA 的差别在于，协方差矩阵 Σ_k 是否假定相等。

x 为多维向量时，LDA 的判别函数为

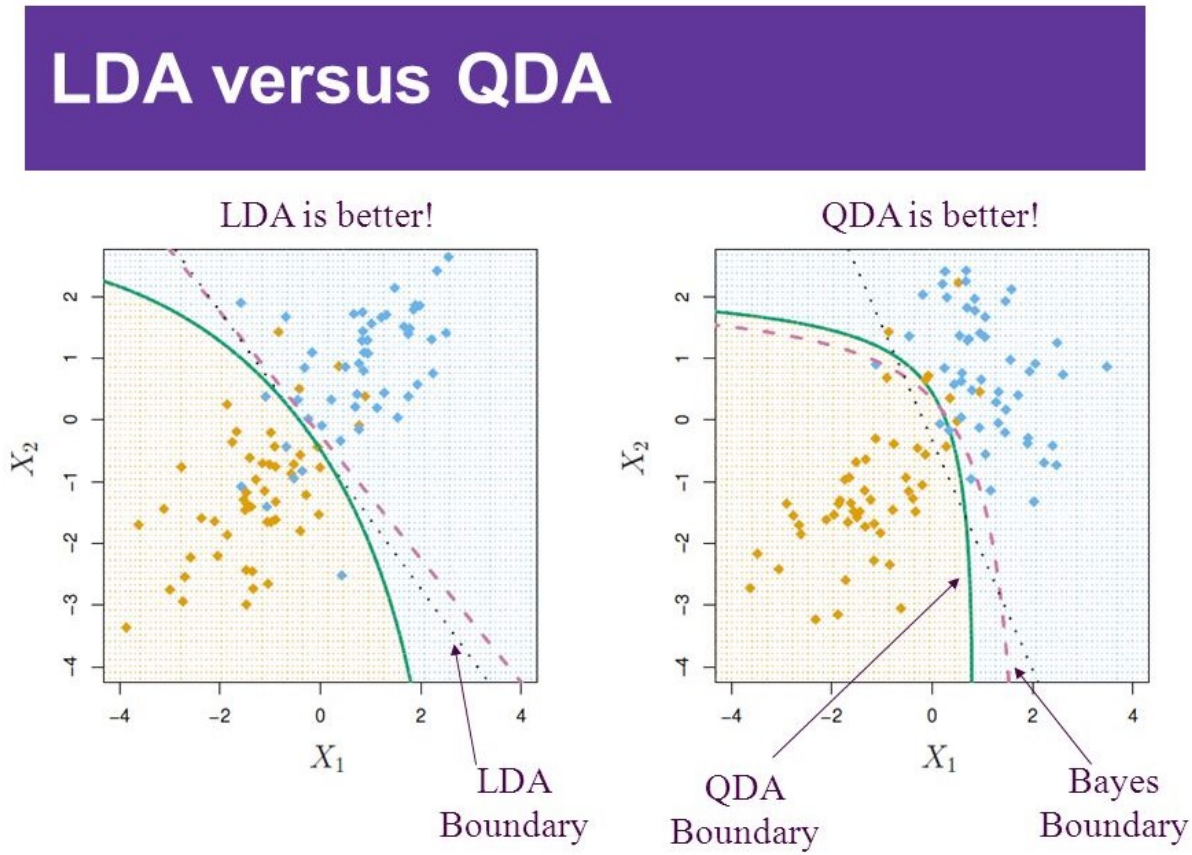
$$f_k(x) = x^T \Sigma^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^T \Sigma^{-1} \mu_k + \log[p(C_k)].$$

相应地，QDA 的判别函数为

$$f_k(x) = -\frac{1}{2} x^T \Sigma_k^{-1} x + x^T \Sigma_k^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^T \Sigma_k^{-1} \mu_k + \log[p(C_k)].$$

QDA 示意图

- 左图：对于两个类别，均有 $\rho(X_1, X_2) = 0.7$
- 右图：对于橙色类别，$\rho(X_1, X_2) = 0.7$；对于蓝色类别，$\rho(X_1, X_2) = -0.7$



KNN

通常难以知道 $p(C_k|X)$ 的分布。因而，可以设法估计条件分布 $p(C_k|X)$。

对给定正整数 K 和测试观测值 x_0，K 最近邻（KNN）分类器首先识别训练集中 K 个最靠近 x_0 的点集 A，继而以集合 A 中的点估计条件概率：

$$p(C_j|x_0) == \frac{1}{K}\sum_{i\in A} I(y_i = j).$$

最后，运用贝叶斯规则将测试观测值 x_0 分到后验概率 $p(C_j|x_0)$ 最大的类中。

- KNN 作为典型的非参数方法（non-parametric methods），能够产生一个近似于最优贝叶斯分类器的效果
- K 值的选择对 KNN 分类器的效果有根本影响

KNN 示意图

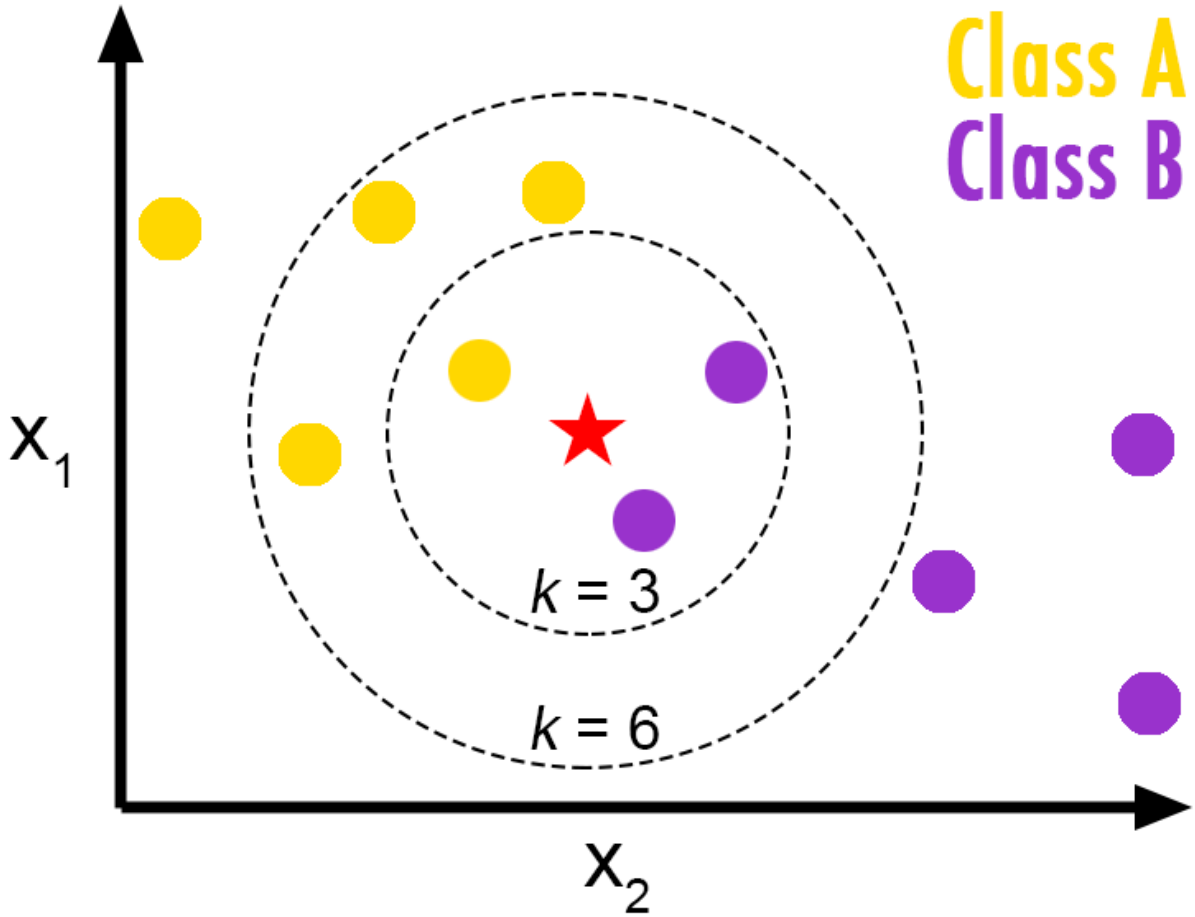


图 10: Illustration of KNN

模型讨论

- LDA 中的判别函数与 logistic 回归中的对数发生比（log-odd）均是 x 的线性函数，因而二者都产生一个线性决策边界，且分类结果相近。若 $p(x|C_k) \sim N(\mu_k, \Sigma)$ 近似成立，则 LDA 优于 logistic 回归；反之，logistic 回归优于 LDA。
- KNN 作为非参数方法，对决策边界的形状没有做出任何假设。因而当决策边界高度非线性时，KNN 优于 LDA 和 logistic 回归。
- QDA 是线性决策边界（LDA 和 logistic 回归）和非参数 KNN 方法的折衷方案，采用了二次函数形式的决策边界。

案例：股票市场走势预测

聚类模型

聚类模型（clustering models）

聚类分析（clustering）试图从观测数据中寻找**同质子类**，属于**无监督学习**（unsupervised learning）的范畴。基本聚类模型包括：

1. K 均值聚类（$K-$means clustering）
2. 层次聚类（hierarchical clustering）

原理：将观测样本分割到不同的类（cluster）中，使每个类内的观测彼此相似，而不同类中的观测彼此差异很大。

课堂讨论：比较聚类与 PCA、FA、ANOVA、线性回归

K 均值聚类

k 均值聚类通过**最小化类内差异**而得到聚类结果：

$$\min \sum_{k=1}^{K} W(C_k).$$

$W(\cdot)$ 衡量类内差异，例如可以采用欧氏距离计算。

k 均值聚类算法如下：

1. 为每个观测样本随机分配一个初始类 $k(1 \leq k \leq K)$。
2. 重复以下操作，直至类的重分配停止为止：
   - 分别计算 K 个类的中心。第 k 个类中心是其类内 p 维观测样本的均值向量。
   - 将每个观测样本分配到距离其最近的类中心所在的类中。

K 均值聚类示意图

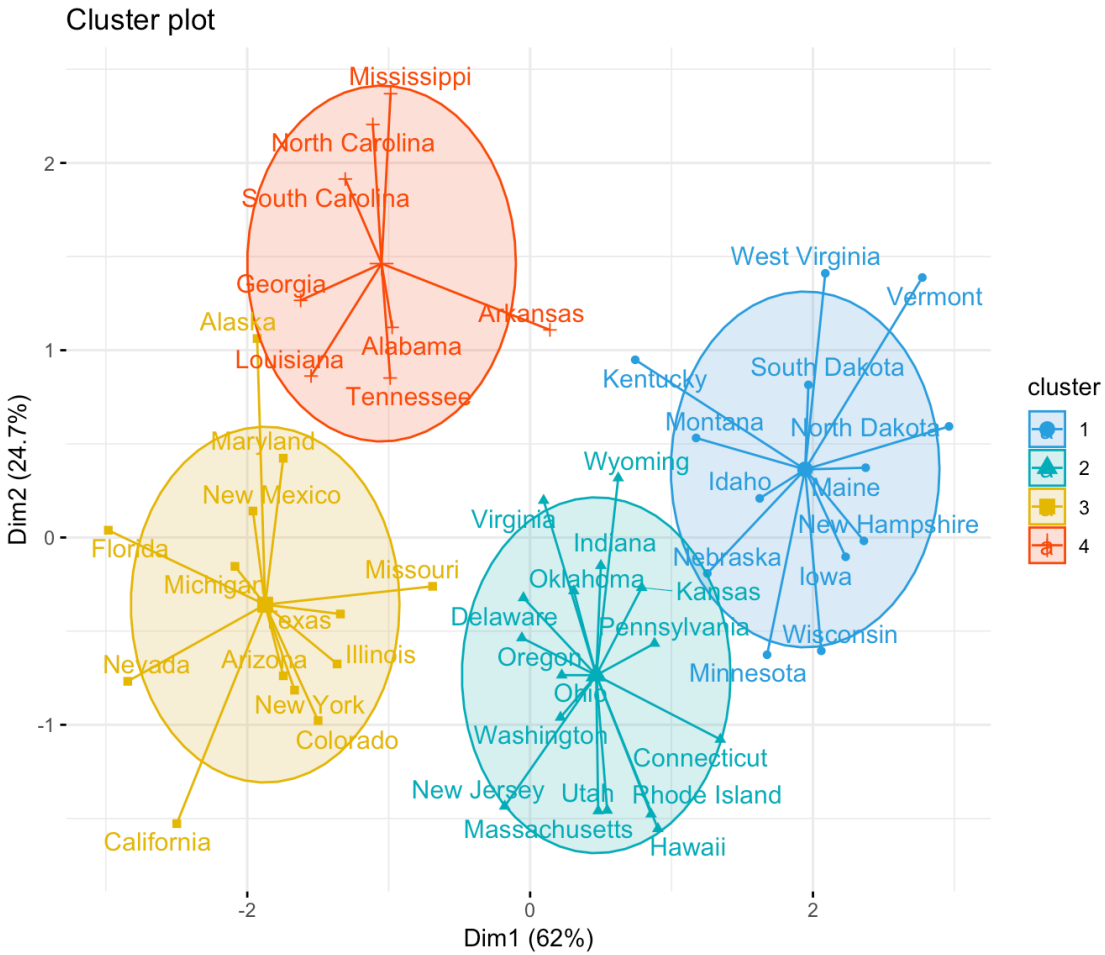


图 11: Illustration of K-means clustering

层次聚类

层次聚类（hierarchical clustering）算法如下：

1. 每个观测样本自成一类，共有 n 个初始类。计算所有 $n(n-1)/2$ 对观测样本（类）之间的相异度。
2. 令 $i = n, n-1, ..., 2$:
   - 在 i 个类中，比较任意两类间的相异度，找到相异度最小的两类，将其合并起来。用两个类之间的相异度表示这两个类在谱系图中交汇的高度。
   - 计算剩下的 $i-1$ 个新类中，每两个类间的相异度。

层次聚类采用逐步归并的方式，构建了谱系图（dendrogram），从而允许任意的类别数量。

距离测度

通常采用聚类来衡量相异度，常见距离形式包括：最长（complete）距离法、类平均法（average）、最短（single）距离法和重心法（centroid）。

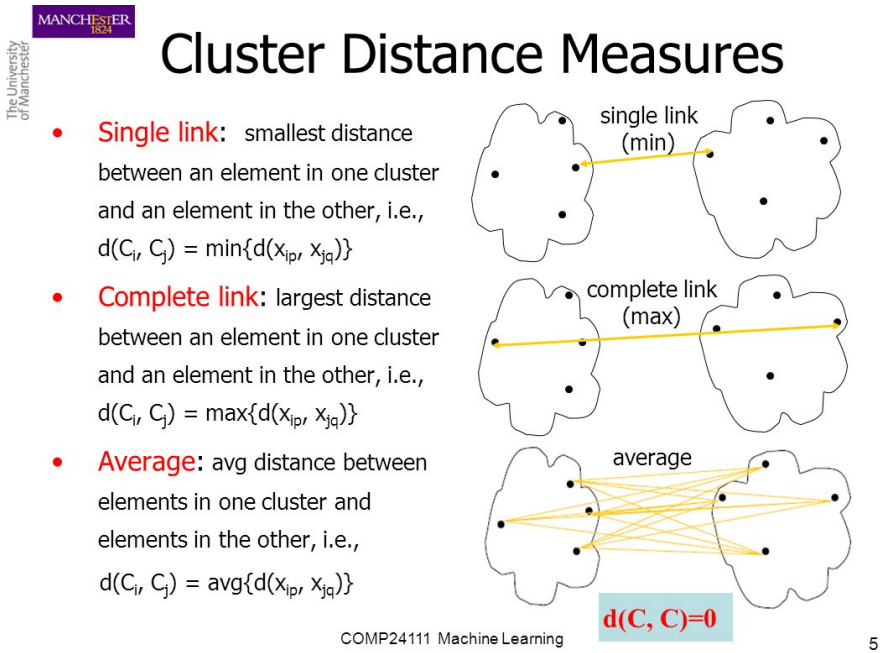


图 12: Distance measures in hierarchical clustering

层次聚类示意图

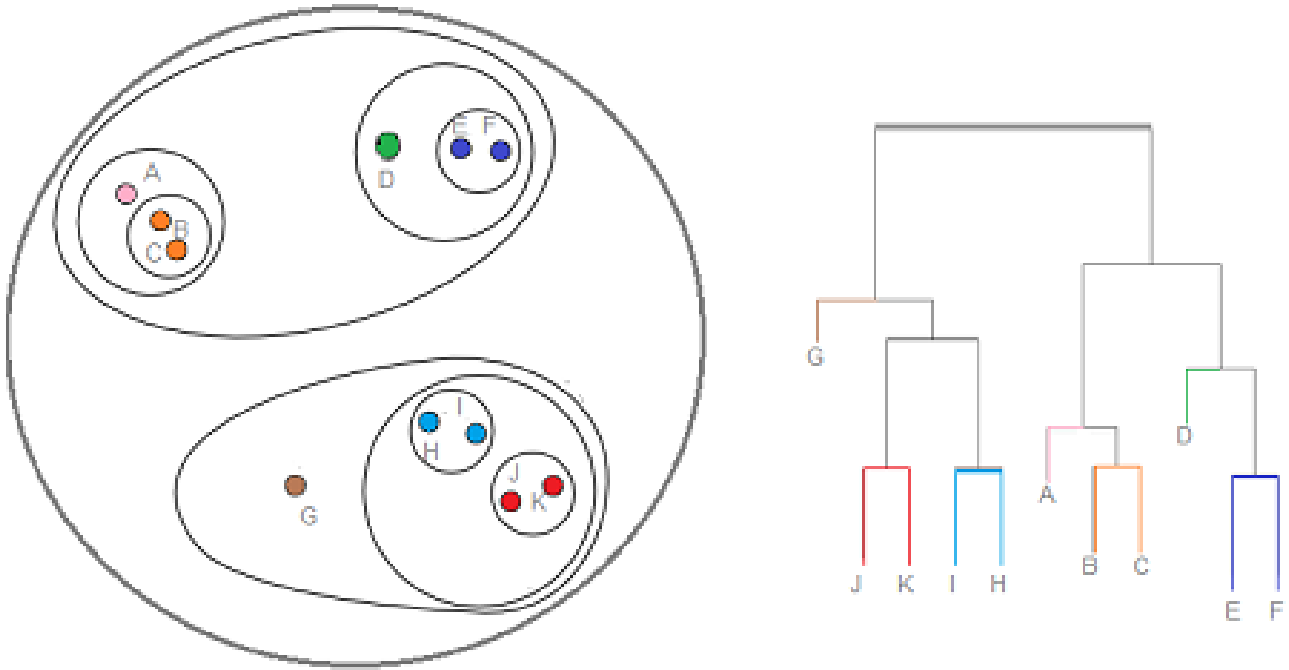


图 13: Illustration of hierarchical clustering

树模型

树模型（tree-based models）

1. 决策树（decision tree）
2. 装袋法（bagging）
3. 随机森林（random forest）
4. 提升法（boosting）

决策树

- 步骤：（1）根据分层（stratifying）或者分割（segmenting）的方式将预测变量空间划分为一系列的区域（area）；（2）给定观测样本的预测值，等于所属区域中训练集的平均值（连续变量）或者**众数**（分类变量）。
- 特征：划分预测变量空间的分割规则可以概括为一棵树
- 适用范围：回归问题及分类问题

课堂板书：与回归模型预测值比较

错误率的衡量

均方误差 MSE 适用于衡量回归问题的误差率。假定第 m 个区域第 k 个类别所占比例为 p_{mk}，则分类问题的错误率衡量指标包括：

- 分类错误率（classification error rate）：此区域的训练集中非最常见类所占的比例，$E = 1 - \max(p_{mk})$
- 基尼系数（Gini index）：$G = \sum_{k=1}^{K} p_{mk}(1 - p_{mk})$
- 互熵（cross entropy）：$D = -\sum_{k=1}^{K} p_{mk}\log(p_{mk})$

后两个指标对节点纯度更加敏感。

预测变量空间的划分

- 形状：理论上，预测变量空间可以划分为任意形状。但为了简化模型和增强可解释性，通常划分为**高维矩阵**，亦即盒子（box）。
- 算法：采用**递归二叉分割**（recursive binary splitting）算法将预测变量空间划分为不同的盒子。递归二叉分割从树的根节点开始依次分割预测变量空间；每个分割点都产生两个新的分支；每一次分割空间都是**局部**最优的。
- 步骤
  1. 考虑所有预测变量 $(X_1, \ldots, X_p)$，从中选择预测变量 X_j 和分割点 s，将预测变量空间分割为 $R_1(j,s) = X|X_j < s$ 和 $R_2(j,s) = X|X_j \geq s$ 两个盒子，使训练集的错误率最小。
  2. 针对新的预测变量空间，重复步骤 1，直至符合某个停止规则（例如，每个盒子观测值个数小于等于 5）为止。

课堂讨论：（1）分类变量的处理？（2）对比向前逐步选择（forward stepwise selection）

树的剪枝

递归二叉分割采用了局部最优算法，且有可能造成数据的过度拟合，从而在测试集上预测效果不佳。我们希望选择更简单的树，从而降低模型方差。可行的解决方案包括：仅当分割使训练集的 MSE 或 Err 的减少量超过某阈值时，才分割树的节点。

可以从树 T_0 开始，通过剪枝（prune）得到子树（subtree）。**代价复杂性剪枝**（cost complexity pruning）在训练集的误差/错误率衡量公式中加入调整系数 α，以权衡模型的精确性和复杂性：

$$\sum_{m=1}^{m_T} \sum_{i:x_i \in R_m} (y_i - \hat{y}_{R_m})^2 + \alpha|T| \text{ or } \sum_{m=1}^{m_T} \sum_{i:x_i \in R_m} [1 - \max(p_{mk})] + \alpha|T|$$

$|T|$ 为树 T 的节点个数。最后，可以通过交叉验证选择最佳调整系数 α。

课堂讨论：比较 lasso 与代价复杂性剪枝

决策树示例

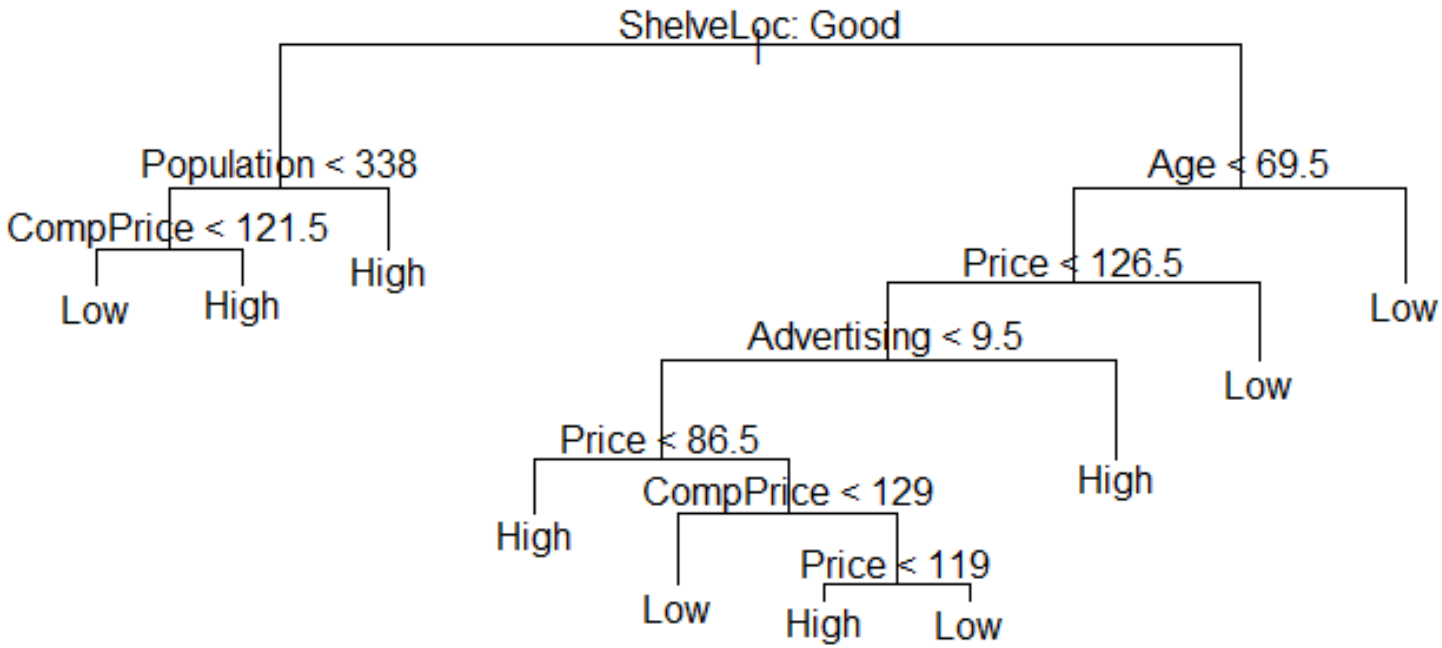


图 14: Illustration of decision tree

决策树的优缺点

- 优点：易于图示化，解释性较强，且更加接近人的决策模式
- 缺点：预测准确性通常低于其它回归和分类方法

因而，通常采用装袋法、随机森林、提升法等方法组合大量决策树，从而显著提高树的预测效果。

装袋法

决策树有着高方差（high variance），而自助法（bootstrapping）可以用以降低方差，其原理为：n 个独立观测值 $Z_1, ..., Z_n$ 的方差都为 σ^2，它们的均值 $\bar{Z}$ 的方差为 σ^2/n。

装袋法（bagging），也称自助法聚集（bootstrap aggregation），从原始数据集中重抽样得到 B 个自助抽样训练集，据此建立 B 课回归树，在计算相应预测值的均值（连续变量）或众数（分类变量）。计算众数，也称为**多数投票**（majority vote）规则。当 B 增大到一定规模后，就无法再降低模型误差了。因此，只要 B 充分大即可。

装袋法的 B 颗树，可以证明，平均每棵树能利用约 $2/3$ 的观测样本。对特定树而言，剩余 $1/3$ 的观测样本称为**袋外** (out-of-bag, OOB) 观测样本。可以用所有将第 i 个观测样本作为 OOB 的树来预测第 i 个观测样本的响应值。由此，产生整体的 OOB 均方误差（连续变量）或 **OOB 分类误差**（分类变量）。实施 OOB 方法比交叉验证更为便利。

装袋法示意图

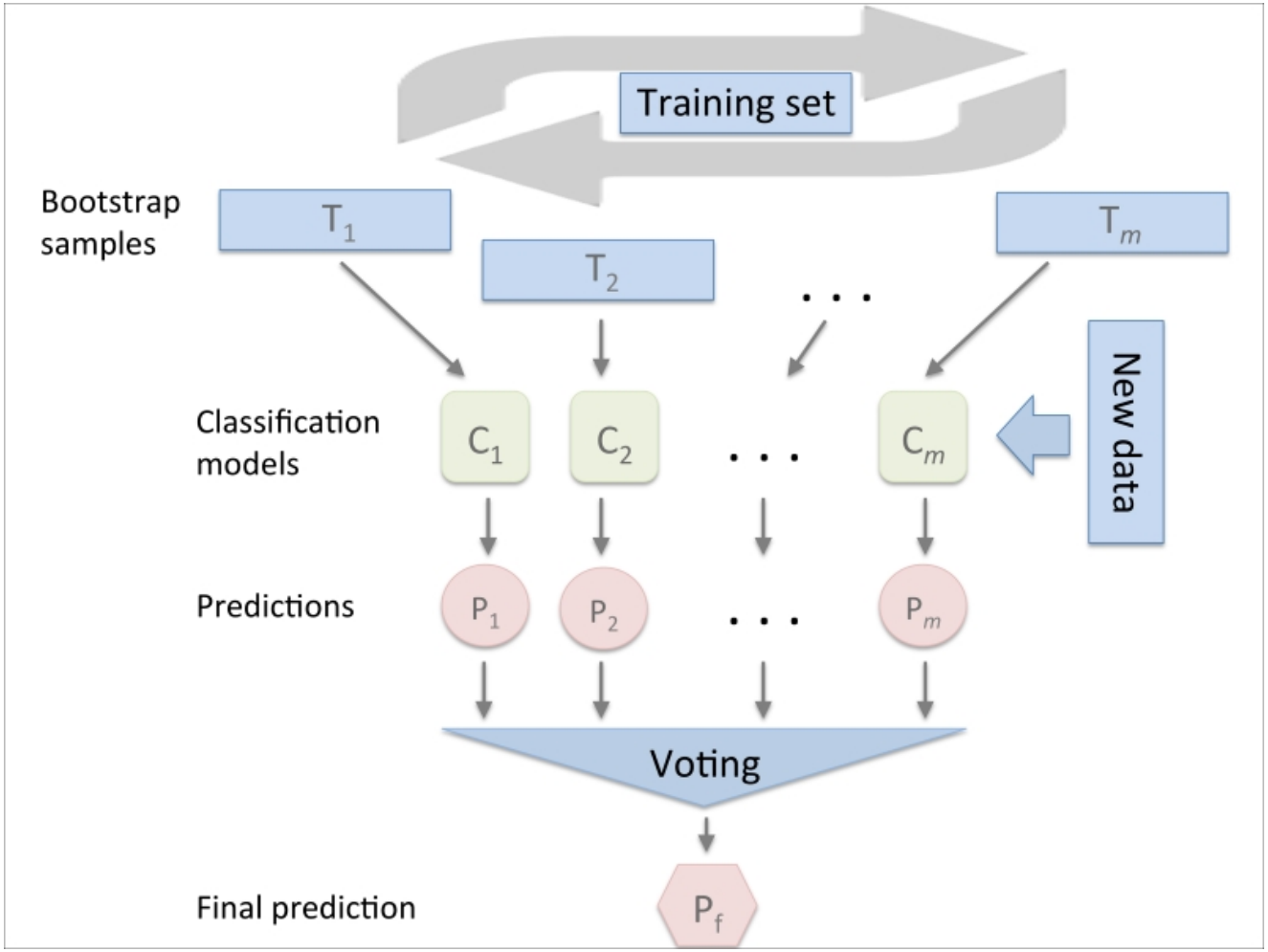


图 15: Illustration of bagging (bootstrap aggregation)

模型解释性

单棵决策树的结果易于解释，而采用多棵树得到的结果则难以解释。因而，装袋法以牺牲解释性为代价获得了更高的预测准确性。

可以计算**变量重要性**（variable importance），从而获得装袋法的解释性。在装袋法建模过程中，记录下任一给定预测变量引发的分割而减少的误差量，并在所有 B 棵树上求平均。结果越大，标明变量越重要。

课堂讨论：回归模型中变异的分解与解释

随机森林

随机森林（random forest）沿袭了装袋法的思路，并进行了改进：每次分割的时候，从全部的 p 个预测变量中**随机**选择 $m \approx \sqrt{p}$ 个预测变量实施分割。

随机森林对树**去相关**（decorrelate），从而减少 B 棵树的均值或众数的方差。尤其是存在较强预测变量，或者预测变量之间相关度较高时，随机森林能有效改进装袋法。

随机森林示意图

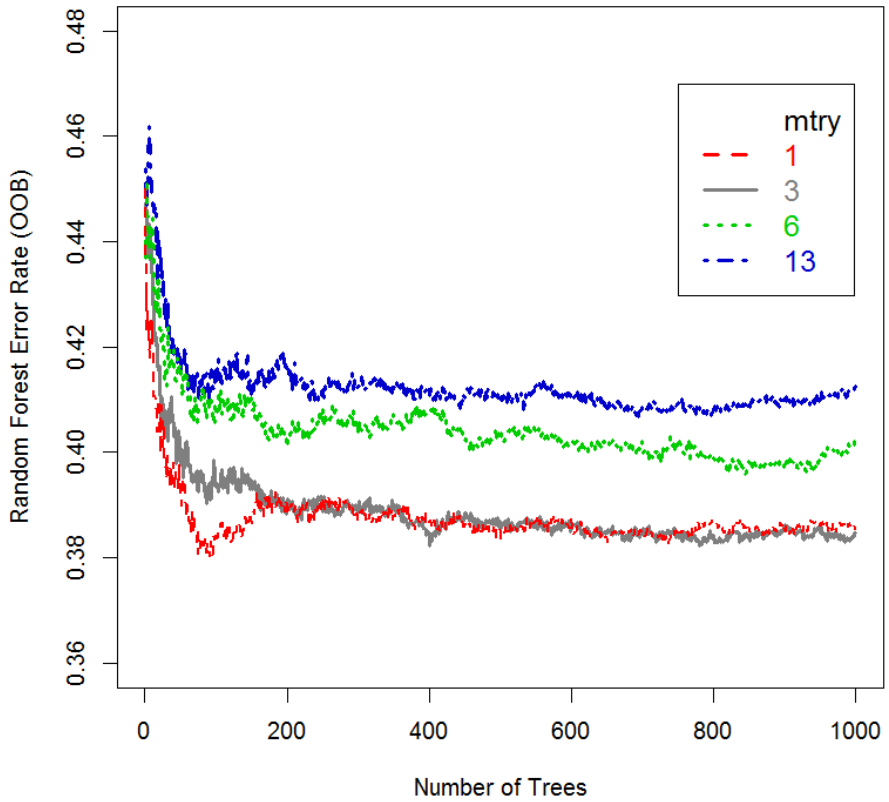


图 16: Number of trees

提升法

提升法（boosting）沿袭了装袋法的思路，并进行了改进：B 棵树按**顺序**(sequentially) 生成，每棵树的构建都需要用到之前生成的树的信息，采用现有模型的**残差信息**(X, ϵ) 生成决策树。回归情形下，提升法的算法如下：

1. 对训练集中所有观测样本 i，令 $\hat{f}(x) = 0$，$\epsilon_i = y_i$。
2. 对 $b = 1, 2, ..., B$，重复以下过程：
   - 对训练数据 (X, ϵ) 建立一棵有 d 个分割点（亦即 $d + 1$ 个节点）的树 $\hat{f}^b$。
   - 将压缩后的新树加入模型以更新 $\hat{f}$：$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x)$。
   - 更新残差：$\epsilon_i \leftarrow \epsilon_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$。
3. 输出经过提升的模型，$\hat{f}(x) = \sum_{b=1}^{B} \lambda \hat{y}^b(x)$。

提升法（续）

提升法采用舒缓（learning slowly）训练模型的方法，即利用现有残差而非原始响应变量 y 作为响应值。压缩参数 λ 使学习过程变得缓慢。通过充分利用之前生成的树的信息，有效提高预测或分类准确度。

提升方法的调整参数包括：

- 树的总数 B：与装袋法和随机森林不同，B 值过大时会出现过度拟合，因而通常用交叉验证来选择 B 值。
- 压缩参数 λ：控制提升法的学习速度，通常取极小的值，如 $\lambda = 0.01$ 或 $\lambda = 0.001$。压缩参数 λ 越小，就需要越多的树，即越大的 B 值。
- 每棵树的分割点数 d：控制整个提升模型的复杂程度。

提升法通常需要的树更小（d 值很小），因为生成一棵特定的树已经考虑了其它已有的树。

提升法示意图

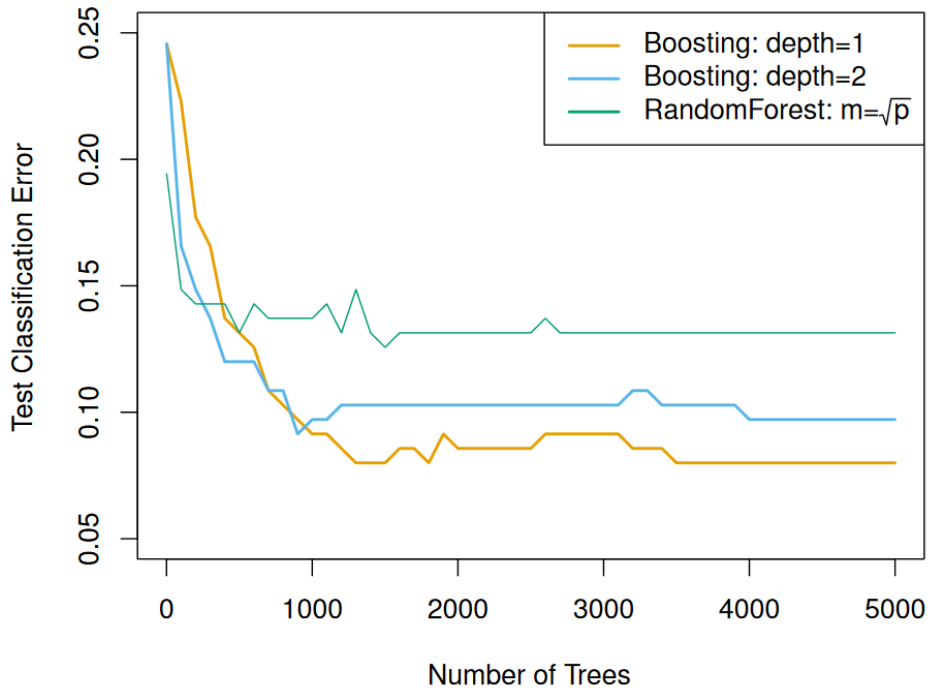


图 17: Illustration of boosting