

INT104W5_分类与模型训练

分类

二元分类器 (Binary Classifier)

- **分类器**：分类算法就是找到一个函数，这个函数可以判断输入的数据属于哪个类别。
- **二元分类器**：属于一种监督学习算法，可以将新的观测值分成两类

简单来说，二元分类器就是将事情分成是与非。如判断一个数字5，在二元分类器中就是用来分成两个类别：5（正）或非5（负）。此时随机梯度是一个很好的选择(SGD)。因为SGD可以独立处理实例，一次一个。

如果我们创造了一个分类器，评判分类器分类质量是很重要的一件事。

如何评价分类质量？

准确率 (Accuracy)

在机器学习中，我们通常把整个数据集拆分为训练集 (Train set) 和测试集 (Test set)（比如70%训练集，30%测试集）

[训练集-70%][测试集-30%]

评价机器学习的泛化 (generalize) 性能取决于他在测试集（独立于训练集）上的预测能力。

$$\text{准确率} = \frac{\text{预测正确的个数}}{\text{总预测数}}$$

但我们发现，如果仅仅以一个独立的测试集评判机器学习的性能，我们获得的可能只是在该测试集上表现最好的参数，而不是在整个数据集上表现最好，也就是泛化能力最好的参数。为防止这一问题的产生，我们可以使用**交叉验证 (Cross Validation)** 把训练集再分为训练集 (Training fold) 和验证集 (Validation fold)。

交叉验证 (Cross Validation)

[训练集-(70-n)%][验证集-n%][测试集-30%]

训练集：用于拟合模型

验证集：用于估计模型选择的预测误差

测试集：用于评估最终所选模型的预测误差

|| K-flod 交叉验证

将训练集分为K份，每次选一份作为验证集，其余为训练集，从而可以交叉验证

假设这里分为3份：

	训练集			测试集
split1	Flod1	Flod2	Flod3	
split2	Flod1	Flod2	Flod3	
split3	Flod1	Flod2	Flod3	
最终评估				Test data

在split1~3中，每次以加粗的部分作为验证集，其余部分作为训练集，从而找到泛化能力最强的参数，最后在最终评估中用测试集测试能力。

问题：类别失衡（class imbalance），分类任务中不同类别的训练样例数目差别很大的情况。

假设一个二分问题，有1000个训练样本，其中正类995个，负类5个。如果我们的**优化目标**是错误率最小化（Accuracy最大化），那么模型完全可以把所有样本都分为正类，准确率高达99.5%。我们发现，在类别不平衡的情况下，模型对少数类（样本量过小的类）的错误分类对准确率的影响很小。很明显，此时尽管模型准确率高达99.5%，但对负类的分类正确率是0%（查全率=0），我们应当选择更科学的优化目标。我们可以引入混淆矩阵。

|| 混淆矩阵（Confusion Matrix）（便于计算）

- TP（True Positive，真正）：将**正类**预测为**正类**
- TN（True Negative，真负）：将**负类**预测为**负类**
- FP（False Positive，假正）：将**负类**预测为**正类（误报）**
- FN（False Negative，假负）：将**正类**预测为**负类（漏报）**

		真标签		
		正	负	
预测标签	正	真正TP	假正FP	精确率(Precision)
	负	假负FN	真负TN	
		召回率 (Recall)		准确率(Accuracy)

假设模型一共将数据集分为n类：

- 精确率（查准率）：模型**正确分类的正例**占**总预测正例**的比例。

$$Precision = \frac{\sum_1^n TP_n}{\sum_1^n (TP_n + FP_n)}$$

- 召回率（查全率）：模型**正确分类的正例**占**总实际正例**的比例。

$$Recall = \frac{\sum_1^n TP_n}{\sum_1^n (TP_n + FN_n)}$$

- 准确率：模型**正确分类的正例**占**总例**的比例。

$$Accuracy = \frac{\sum_1^n (TP_n + TN_n)}{\sum_1^n (TP_n + FP_n + FN_n + TN_n)}$$

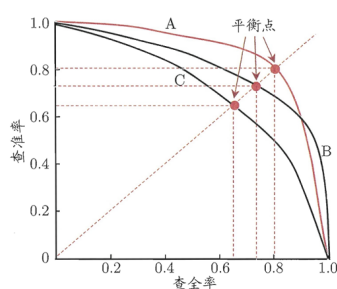


图 2.3 P-R曲线与平衡点示意图

查准率=查全率的平衡点（BEP Break-Even Point）是一种简易评估分类性能的方法，越大越好。p-r曲线面积也可以是一种性能评估方法。

常言道，错抓一万个也不能漏过一个。同时做到高查准率和查全率是几乎不可能的，减少误报往往会导致漏报，减少漏报往往会导致误报。在实际应用中，我们需要根据任务需求平衡精确率与召回率。如在面部识别逃犯时，我们宁愿多一些误报也不要漏过逃犯；而在面部识别门禁中，我们宁愿漏报（让住户的脸有时识别失败）也不希望误报（让陌生人进门）。

那么，如何更科学地评判精确率和召回率呢？

|| F1/F_β度量(F1/F_β Score)

精确率和召回率的调和平均值（相较于算术平均和几何平均，调和平均更重视最小值）

$$F_1 = \frac{1}{2} * \left(\frac{1}{\text{精确率}} + \frac{1}{\text{召回率}} \right) = \frac{2 * \text{精确率} * \text{召回率}}{\text{精确率} + \text{召回率}}$$

如果对精确率和召回率的重视程度不同，我们还可以使用F1度量的更一般形式： F_β

$$F_\beta = \frac{1}{1 + \beta^2} * \left(\frac{1}{\text{精确率}} + \frac{\beta^2}{\text{召回率}} \right) = \frac{(1 + \beta^2) * \text{精确率} * \text{召回率}}{\beta^2 \text{精确率} + \text{召回率}}$$

$\beta > 1$ 时召回率影响更大， $0 < \beta < 1$ 时查准率影响更大。

ROC(Receiver Operating Characteristic curve 受试者工作特征曲线)

很多机器学习的学习器在做预测时并不是直接给出1-正类，0-负类的，而是给出一个处于[0, 1]之间的数字，将其与0.5（阈值Threshold）比较，大于阈值被判为正类1，小于阈值被判为负类0。想象把所有样本根据其预测值从低到高排列，我们可以通过改变阈值的大小把样本切成不同的两部分，低于阈值判负，高于阈值判正。将阈值提高，我们更重视查准率；将阈值降低，我们更重视查全率。我们可以通过从高到低调节这个阈值，改变模型预测的输出，进而画出 ROC 曲线。

ROC 曲线越接近左上角，模型预测准确率越高；在最理想的情况下，所有正类的预测值是1.0，负类0.0，是过(0,1)的直线。

真正例率TP Rate（召回率/命中率）：在所有事实上的正类中模型判对为正的占比

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

假正例率FP Rate（误判率/假阳率）：在所有事实上的负类中模型判错为正的占比

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

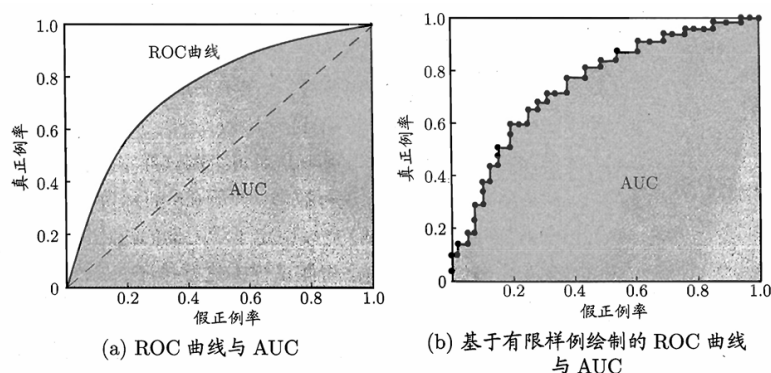


图 2.4 ROC 曲线与 AUC 示意图

基准线（(0, 0) 到 (1, 1) 的对角线）代表了随机预测时的情况，低于他意味着分类性能不如蒙眼瞎猜。

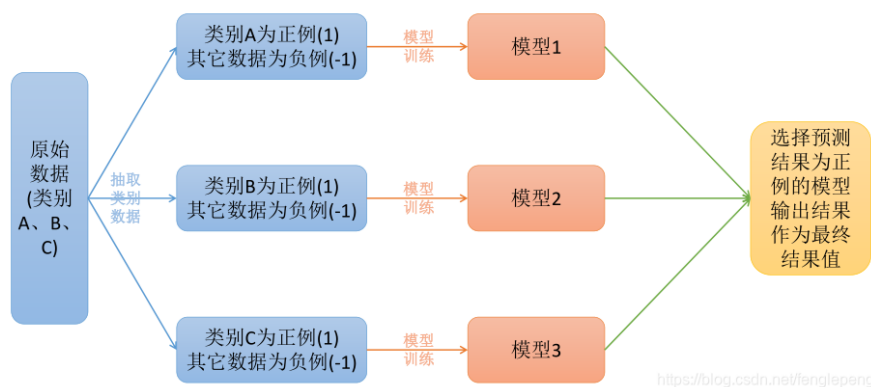
AUC(Area Under Curve): 曲线下面积, 通过比较曲线下面积, 我们可以比较预测性能的好坏, 越大越好。

多类分类 (multiclass classification)

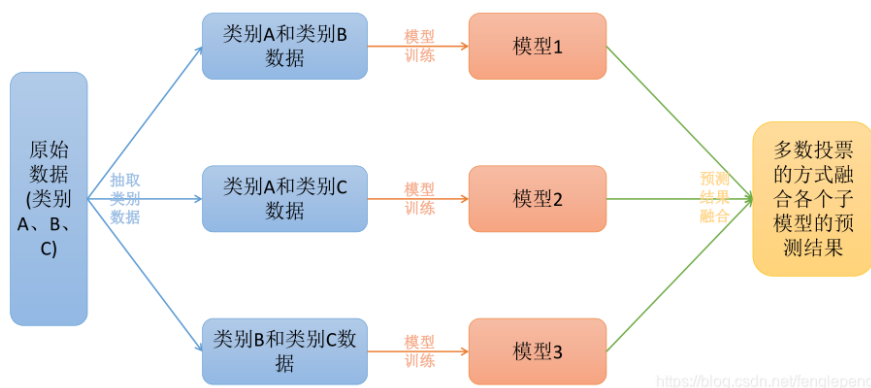
指可以区分两个以上类的分类任务。

策略:

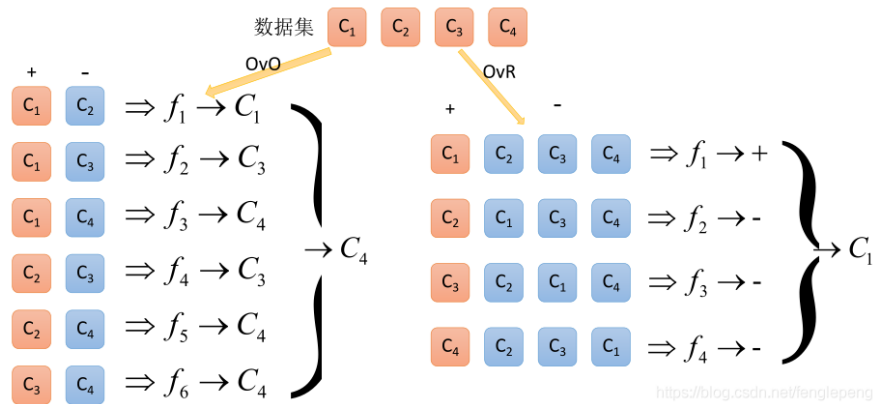
- One-Versus-The-Rest (OvR): 为每个类训练多个二元分类器, 选择分类器输出最高分的类。训练 n 次



- One-versus-one (OvO): 为每对类训练一个二元分类器。训练 $n(n-1)/2$ 次



区别:



- 多标签分类 (Multi-Label Machine Learning MLL) : 输出多个二进制标签

模型训练

线性回归

回归: 试图确定一个因变量 (pendent variable 通常用 Y 表示) 和一系列其他变量 (independent variables称为自变量) 之间关系的强度和特征。

$$\hat{y} = kx + b$$

- x: 输入的特征 (feature value)
- \hat{y} : 输出的预测值 (predicted value)
- k, b: 模型的参数 (权重与偏置)

推广到n个参数的情况下:

$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n$$

- \hat{y} : 输出的预测值 (predicted value)
- x_i : 第i个特征 (feature value)
- θ_j : 第j个模型的参数 ($\theta_{1 \sim n}$ 权重与 θ_0 偏置)

$$\text{残差: } \hat{e}_i = y_i - \hat{y}_i$$

残差: 实际观察值与估计值 (拟合值) 之间的差。

$$\text{残差平方和: } RSS = \sum_1^n \hat{e}^2$$

损失函数Cost (loss) function: 线性回归模型的均方误差 (MSE mean-square error)

$$MSE(X, h_{\theta}) = \frac{1}{m} \sum_1^m (\theta^T x_i - y_i)^2$$

MSE越小说明loss越小, 拟合越好。

正态方程Normal Equation:

TODO!

▤ 梯度下降 (Gradient Descent)

*在机器学习领域, 向量一般是列向量

思想: 先任取点 $(x_0, f(x_0))$, 求 $f(x)$ 在该点 x_0 的导数 $f'(x_0)$,在用 x_0 减去导数值 $f'(x_0)$,计算所得就是新的点 x_1 。然后再用 x_1 减去 $f'(x_1)$ 得 x_2 ...以此类推, 循环多次, 慢慢 x 值就无限接近极小值点。可理解为: 一个人下山, 以他当前的所处的位置为基准, 寻找这个位置最陡峭的方向, 然后朝着下降方向走一步, 然后又继续以当前位置为基准, 再找最陡峭的方向, 再走, 直到最后到达最低处。

目的是尽可能降低损失函数, 从而确保模型精度足够高

从起始位置 $\theta_0 = [\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n]^T$ 开始: 计算梯度

$$\text{起始位置: } \Theta_0 = [\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_n]^T \quad (1)$$

$$\text{计算梯度: } \nabla_{\theta} \text{MES}(\Theta) \quad (2)$$

$$\text{迭代: } \Theta_{i+1} = \Theta_i - \eta \nabla_{\theta} \text{MES}(\Theta_i) \quad (3)$$

其中, η 是学习率 (步长), 是重要的

特征规模不同时可能要花很久到达最小, 此时归一化特征规模很重要, 确保各个数据的规模是一样的。

此外, 除非损失函数是凸函数, 普通的梯度下降法不能保证得到全局最优解。

全 (批量) 梯度下降 (FGD) : TODO! 计算mse

随机梯度下降 (SGD) : 每次选择一个随机的instance, 尽管可能不能达到最低点, 但快速且有效。每次迭代的噪声会导致损失函数振荡。

小批量梯度下降 (Mini-batch gradient decent)：收敛性优于随机梯度下降。对于大型数据集具有计算效率。但不能保证收敛到全局最小值。

多项式回归 (Polynomial Regression)

用多项式拟合数据，但注意不要过拟合

学习曲线 (Learning Curves)

欠拟合：训练数据性能较差，验证数据性能较差。

过拟合：在训练数据上表现良好，但在验证数据上表现不佳。

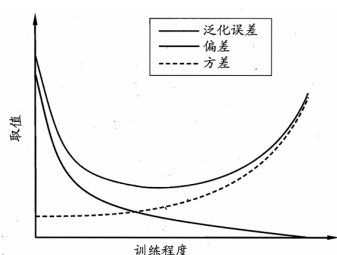


图 2.9 泛化误差与偏差、方差的关系示意图

岭回归 (Ridge Regression) (L2正则化)

在普通的线性回归中，当特征数大于样本数时，模型会出现过拟合的问题。而岭回归通过限制参数的大小，可以有效地避免过拟合问题。

岭回归的实现方式是给损失函数添加一个正则项，这个正则项包含所有参数的平方和，并乘以一个系数 α 。

α 的值越大，惩罚力度越大，参数越趋向于0，就越容易解决过拟合的问题。

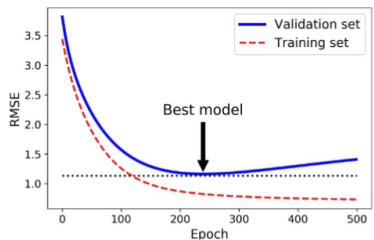
套索回归 (Lasso Regression) (L1正则化)

一般线性回归模型的目标是最小化残差平方和，即通过拟合一个线性方程来预测目标变量。然而，在实际问题中，可能存在大量的自变量，其中一些可能对目标变量的预测能力较弱或冗余。此时，Lasso回归通过引入L1正则化（即Lasso惩罚项），可以将系数向量中小的权重变为0，从而实现特征选择和模型稀疏性。

正则化线性模型：

弹性网络 (elastic net)

使用L1和L2先验作为正则化矩阵的线性回归模型



注意在模型训练时注意欠拟合和过拟合

逻辑回归 (logistic regression) - softmax回归

适合离散二值数据

softmax函数

逻辑函数的一种推广。它能将一个含任意实数的K维向量 z “压缩”到另一个K维实向量 $\sigma(z)$ 中，使得每一个元素的范围都在(0,1)之间，并且所有元素的和为1。多用于多分类问题。

$$P(y = j) = \frac{e^{x^T W_j}}{\sum_{k=1}^K e^{x^T W_k}}$$