

数据集及其拆分

(Data Set and Its Split)

刘远超 哈尔滨工业大学 计算机科学与技术学院

Iris(鸢尾花)数据集





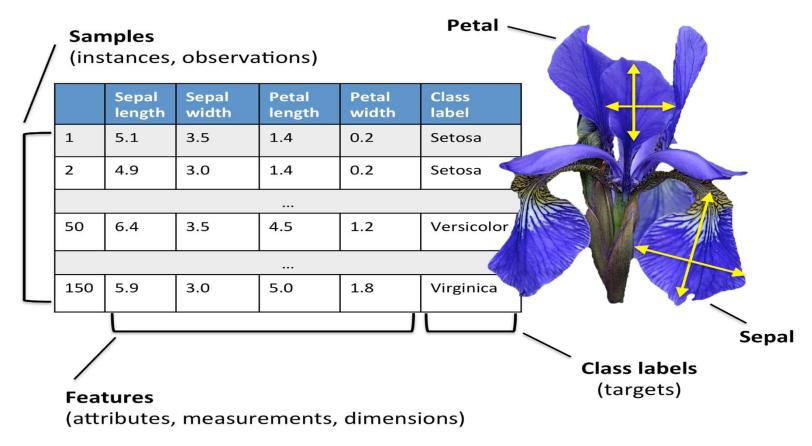


山鸢尾(Iris setosa)

变色鸢尾(Iris versicolor) 维吉尼亚鸢尾(iris virginica)

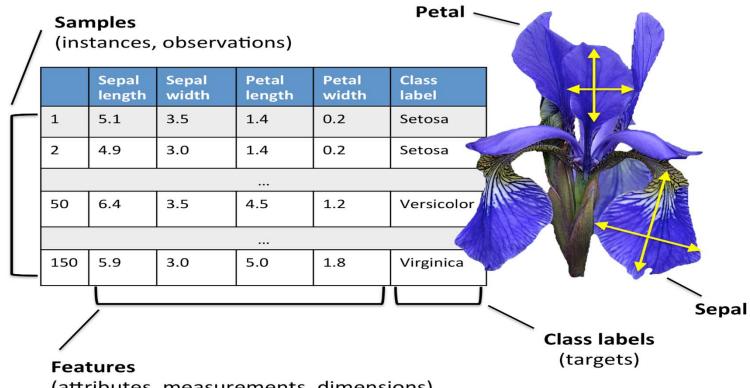
分类特征: 花萼 (sepal) 和花瓣 (petal) 的宽度和长度

Iris(鸢尾花)数据集(续)



- ●每个样本包含4个特征(单位: cm),1个类别标签(类别编码)。
- ●共有150个样本,3类,每类50个样本。

数据集(dataset)的数学表示

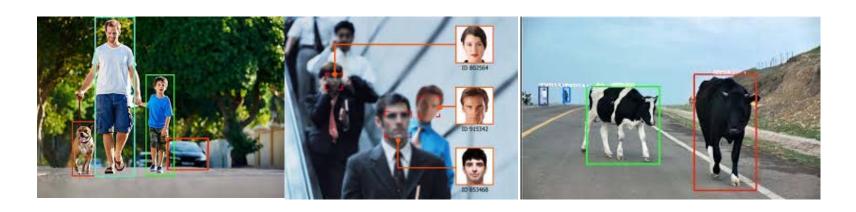


(attributes, measurements, dimensions)

数据集在数学上通常表示为 $\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),...,(x_i,y_i),...,(x_m,y_m)\}$ 的形式,

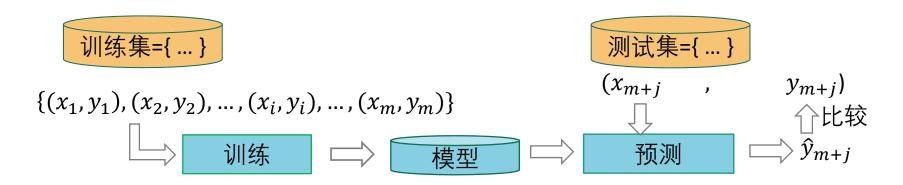
- 其中 x_i 为样本特征。由于样本一般有多个特征,因而 $x_i = \{x_i^1, x_i^2, ..., x_i^n\}^T$ 。
- 而 y_i 表示样本i的类别标签。

类别标签的ground truth与gold standard



- ground truth:可翻译为地面实况等。在机器学习领域一般用于表示真实值、标准答案等,表示通过直接观察收集到的真实结果。
- gold standard: 可翻译为金标准。医学上一般指诊断疾病公认的最可靠的方法。
- 在机器学习领域,更倾向于使用"ground truth"。而如果用 gold standard这个词,则表示其可以很好地代表ground truth。

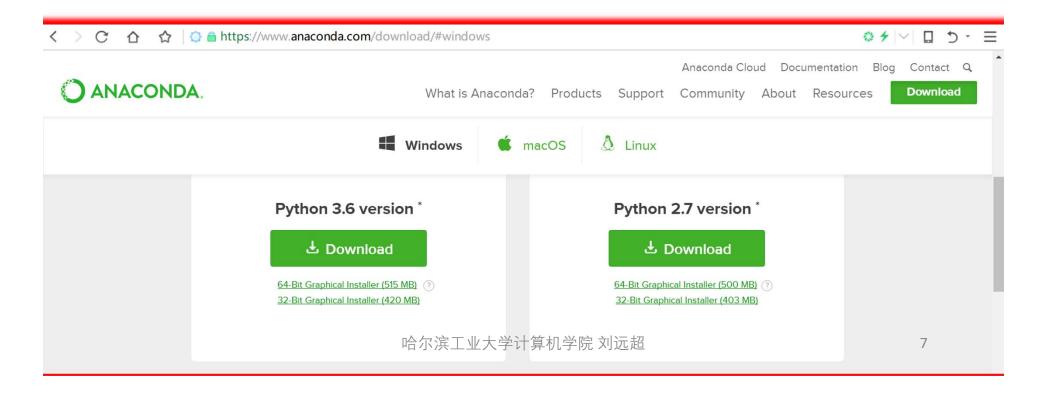
数据集与有监督学习



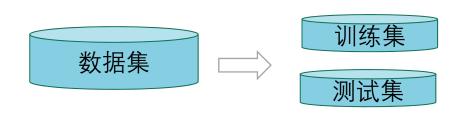
- 有监督学习中数据通常分成训练集、测试集两部分。
 - 训练集(training set)用来训练模型,即被用来学习得到系统的参数取值。
 - **测试集(testing set)**用于最终报告模型的评价结果,因此在训练阶段测试 集中的样本应该是unseen的。
- 有时对训练集做进一步划分为训练集和验证集(validation set)。验证集与测试集类似, 也是用于评估模型的性能。区别是验证集主要用于模型选择和调整超参数,因而一般不 用于报告最终结果。

训练集、测试集的拆分

- ●可以使用sklearn (即scikit-learn) 进行训练集、测试集的拆分。
- ●如何安装sklearn: anaconda是一个开源的Python发行版本,其包含了很多科学包及其依赖项,也包含sklearn。
 - 网址: https://www.anaconda.com/download/#windows

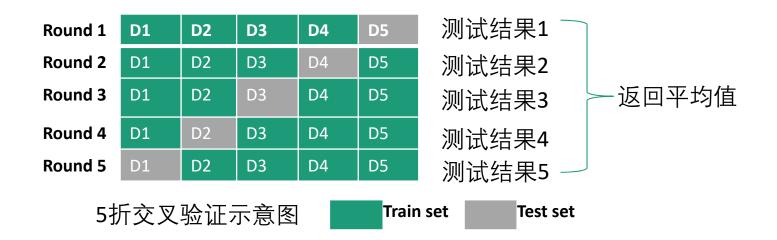


训练集测试集拆分一留出法



- 留出法 (Hold-Out Method) 数据拆分步骤:
 - 1. 将数据随机分为两组,一组做为训练集,一组做为测试集
 - 利用训练集训练分类器,然后利用测试集评估模型,记录最后的分类准确率为此分类器的性能指标
- **留出法的优点是**处理简单。而**不足之处是**在测试集上的预测性能的高低与数据 集拆分情况有很大的关系,所以基于这种数据集拆分基础上的性能评价结果不 够稳定。

K折交叉验证

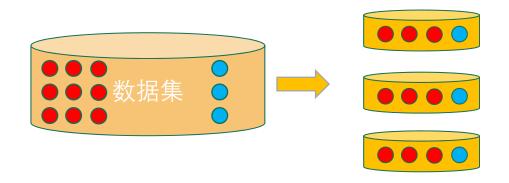


●过程:

- 1. 数据集被分成K份(K通常取5或者10)
- 2. 不重复地每次取其中一份做测试集,用其他K-1份做训练集训练,这样会得到K个评价模型
- 3. 将上述步骤2中的K次评价的性能均值作为最后评价结果
- K折交叉验证的上述做法有助于提高评估结果的稳定性

分层抽样策略(Stratified k-fold)

● 将数据集划分成k份,特点在于,划分的k份中,每一份内各个类别数据的 比例和原始数据集中各个类别的比例相同。

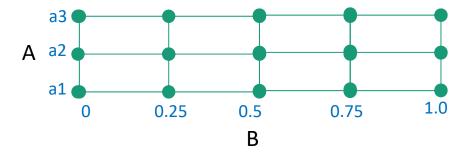


用网格搜索来调超参数 (一)

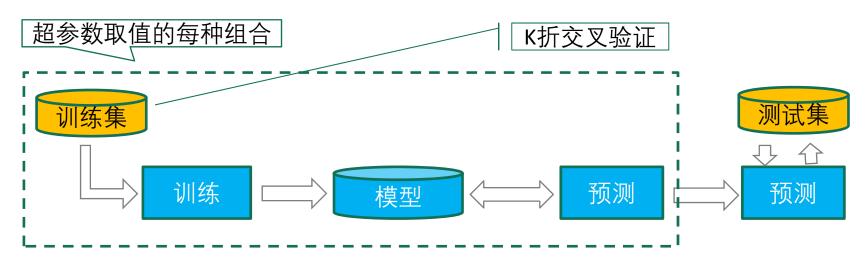
● **什么是超参数?** 指在学习过程之前需要设置其值的一些变量,而不是通过训练得到的参数数据。如深度学习中的学习速率等就是超参数。

● 什么是网格搜索?

- 假设模型中有2个超参数: A和B。 A的可能取值为{a1, a2, a3}, B的可能取值为连续的,如在区间[0-1]。由于B值为连续,通常进行离散化,如变为{0,0.25,0.5,0.75,1.0}
- 如果使用网格搜索,就是尝试各种可能的(A,B)对值,找到能使的模型取得最高性能的(A,B)值对。



用网格搜索来调超参数 (二)



网格搜索与K折交叉验证结合调整超参数的具体步骤:

- 1. 确定评价指标;
- 2. 对于超参数取值的每种组合,在训练集上使用交叉验证的方法求得其K次评价的性能均值;
- 3. 最后, 比较哪种超参数取值组合的性能最好, 从而得到最优超参数的取值组合。

Thanks!





分类及其性能度量

(Classification Problem and Its Performance Evaluation)

刘远超 哈尔滨工业大学 计算机科学与技术学院

分类问题

● 分类问题是有监督学习的一个核心问题。分类解决的是要预测样本属于哪个或者哪些预定义的类别。此时输出变量通常取有限个离散值。













- 分类的机器学习的两大阶段: 1) 从训练数据中学习得到一个分类决策函数或分类模型, 称为分类器 (classifier); 2) 利用学习得到的分类器对新的输入样本进行类别预测。
- 两类分类问题与多类分类问题。多类分类问题也可以转化为两类分类问题解决,如采用一对其余(One-vs-Rest)的方法:将其中一个类标记为正类,然后将剩余的其它类都标记成负类。



分类性能度量一准确率

●假设只有两类样本,即正例(positive)和负例(negative)。通常以关注的类为正类,其他类为负类。

ब्रे	预测类别					
际		正	负	总计		
实际类别	正	TP	FN	P(实际为正)		
别	负	FP	TN	N(实际为负)		

表中AB模式:第二个符号表示预测的类别,第一个表示预测结果对了(<u>T</u>rue)还是错了(<u>F</u>alse)

•分类准确率(accuracy): 分类器正确分类的样本数与总样本数之比: $accuracy = \frac{TP+TN}{P+N}$

思考:假设共有100个短信,其实际情况为,其中有1个是垃圾短信,99个是非垃圾短信。某分类模型将这100个短信都分为非垃圾短信,则准确率(accuracy)为?

分类性能度量一精确率和召回率

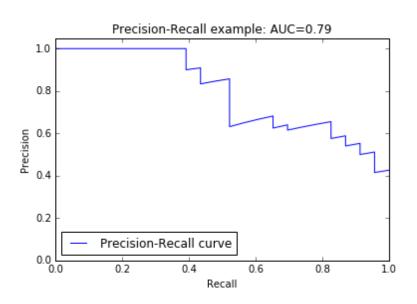
<u>जे</u>	预测类别				
实 际		正例	负例	总计	
类 别	正例	TP	FN	P(实际为正例)	
别	负例	FP	TN	N(实际为负例)	

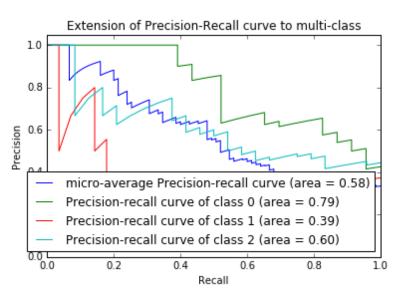
● 精确率(precision)和召回率(recall): 是二类分类问题常用的评价指标。

$$precision = \frac{TP}{TP + FP} \qquad recall = \frac{TP}{P}$$

- ●精确率反映了模型判定的正例中真正正例的比重。在垃圾短信分类器中,是指预测出的垃圾短信中真正垃圾短信的比例。
- **召回率**反映了总正例中被模型正确判定正例的比重。医学领域也叫做灵敏度(sensitivity)。在垃圾短信分类器中,指所有真的垃圾短信被分类器正确找出来的比例。

分类性能度量-P-R曲线





- Area (Area Under Curve, 或者简称AUC)
 - Area的定义(p-r曲线下的面积)如下:

$$Area = \int_0^1 p(r)dr$$

■ Area有助于弥补P、R的单点值局限性, 可以反映全局性能。

如何绘制P-R曲线

●要得到P-R曲线,需要一系列Precision和Recall的值。这些系列值是通过<mark>阈值</mark>来形成的。对于每个测试样本,分类器一般都会给了"Score"值,表示该样本多大概率上属于正例。

●步骤:

- 1. 从高到低将 "Score"值排序并依此作为阈值threshold;
- 2. 对于每个阈值,"Score"值大于或等于这个threshold的测试样本被认为正例,其它为负例。从而形成一组预测数据。

实	预测类别			
际		正例	负例	总计
类	正例	TP	FN	P(实际为正例)
别	负例	FP	TN	N(实际为负例)

Ţ	
$(precision = \frac{TP}{TP + FP'})$	$recall = \frac{TP}{P}$)

				\mathbf{A}
	样本#	实际类别	预测分值	P
_	1	Р	0.9	P
	2	N	0.8	R
	3	Р	0.75	
	4	N	0.7	Y
	5	Р	0.65	∦ N
			19	

分类性能度量--F值

● F值(F_{β} -score)是精确率和召回率的调和平均:

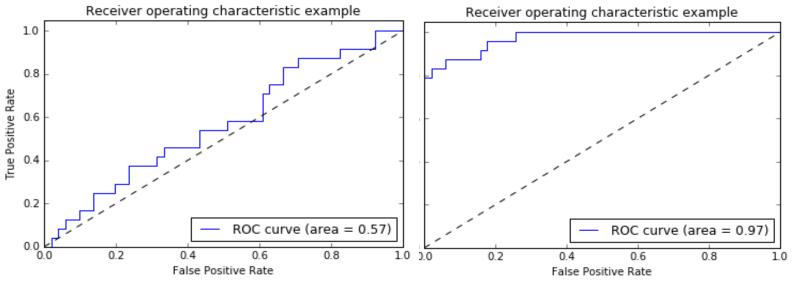
$$F_{\beta} - score = \frac{(1+\beta^2)*precision*recall}{(\beta^2*precision+recall)}$$

● β 一般大于0。当 β =1时,退化为F1:

$$F_1 - score = \frac{2*precision*recall}{(precision+recall)}$$

● 比较常用的是*F*₁,即表示二者同等重要

分类性能度量--ROC



- 横轴: 假正例率 $fp \ rate = \frac{FP}{N}$
- 纵轴: 真正例率 $tp \ rate = \frac{\dot{T}P}{P}$
- ROC (受试者工作特征曲线, receiver operating characteristic curve)描绘了分类器在*tp rate*(真正正例占总正例的比率,反映命中概率,纵轴)和*fp rate* (错误的正例占反例的比率,反映误诊率、假阳性率、**虚惊概率**,横轴)间的trade-off。

分类性能度量一ROC曲线绘制

●要得到一个曲线,需要一系列fprate和tprate的值。这些系列值是通过阈值来形成的。对于每个测试样本,分类器一般都会给了"Score"值,表示该样本多大概率上属于正例(或负例)。

●步骤:

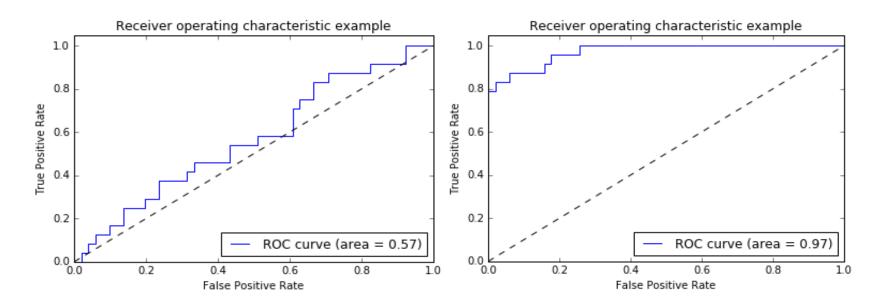
- 1. 从高到低将 "Score"值排序并依此作为阈值threshold;
- 2. 对于每个阈值,"Score"值大于或等于这个threshold的测试样本被认为正例,其它为负例。从而形成一组预测数据。

实	预测类别			
际		正例	负例	总计
类	正例	TP	FN	P(实际为正例)
别	负例	FP	TN	N(实际为负例)

	Û
$(fp\ rate = \frac{FP}{N},$	$tp\ rate = \frac{TP}{P}$)

				A	
	样本#	实际类别	预测分值		Р
ا 	1	Р	0.9	1	P
	2	N	0.8	ľ	Rı
	3	Р	0.75		N
	4	N	0.7	V	7IN
	5	Р	0.65	1	N
			22		

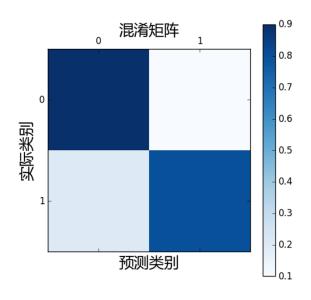
分类性能度量—ROC-AUC计算



- ROC- AUC(Area Under Curve)定义为ROC曲线下的面积
- AUC值提供了分类器的一个整体数值。通常AUC越大,分类器更好
- 取值范围为[0,1]

分类性能可视化

实	预测类别			
际		正例	负例	总计
类 别	正例	TP	FN	P(实际为正例)
别	负例	FP	TN	N(实际为负例)



- ●混淆矩阵 (Confusion matrix) 的可视化
 - ■如用热图(heatmap)直观地展现类别的混淆情况(每个类有 多少样本被错误地预测成另一个类)

分类报告

● 分类报告(Classification report)显示每个类的分类性能。包括每个类标签的精确率、召回率、F1值等。

	precision	recall	f1-score	support
class 0	0.67	1.00	0.80	2
class 1	0.00	0.00	0.00	1
class 2	1.00	1.00	1.00	2
avg / total	0.67	0.80	0.72	5

Thanks!





回归问题及其性能评价

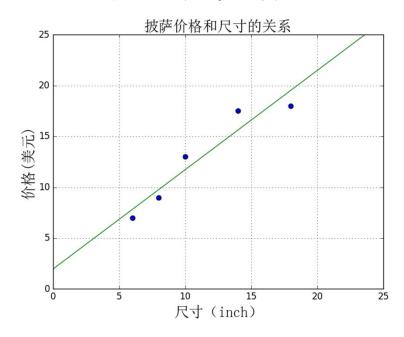
(Regression Problem and Its Performance Evaluation)

刘远超 哈尔滨工业大学 计算机科学与技术学院

回归问题

●什么是回归?

● 回归分析(regression analysis)是确定两种或两种以上变量间相互 依赖的定量关系的一种统计分析方法。



●和分类问题不同,回归通常输出为一个实数数值。而分类的输出通常为若干指定的类别标签。

回归性能度量方法(Regression metrics)

● 常用的评价回归问题的方法:

- 平均绝对误差MAE(mean_absolute_error)
- ●均方误差MSE (mean_squared_error)及均方根差RMSE
- Log loss, 或称交叉熵loss(cross-entropy loss)
- R方值,确定系数(r2_score) (后文介绍)

平均绝对误差MAE

- <u>MAE</u> (Mean absolute error) 是绝对误差损失 (absolute error loss) 的期望值。
- 如果 \hat{y}_i 是第i个样本的预测值, y_i 是相应的真实值,那么在 n_{samples} 个则试样本上的平均绝对误差(MAE)的定义如下:

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{samples}} \sum_{i=0}^{n_{samples}-1} |y_i - \hat{y}_i|$$

均方差MSE

- MSE(Mean squared error), 该指标对应于平方误差损失 (squared error loss) 的期望值。
- \bullet 如果 \hat{y}_i 是第i个样本的预测值, y_i 是相应的真实值,那么在 $n_{samples}$ 上的均方差的定义如下:

$$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{samples}} \sum_{i=0}^{n_{samples}-1} |y_i - \hat{y}_i|^2$$

●均方根差RMSE: Root Mean Squared Error, RMSE,是MSE的平方根

均方差MSE的应用举例

● 假设模型预测某日下雨的概率为P:

预测概率	Ground truth (1表示下雨, 0表示没下雨)	MSE	模型性能
1.0	1	$(1.0-1.0)^2=0$	完美
1.0	0	$(1.0-0)^2=1$	糟糕
0.7	1	$(0.7-1.0)^2=0.09$	误差较小
0.3	1	$(0.3-1.0)^2=0.49$	误差较大

logistic回归损失(二类)

- 简称Log loss,或交叉熵损失(cross-entropy loss)
 - ■常用于评价逻辑回归LR和神经网络
- 对于二类分类问题:
 - 1. 假设某样本的真实标签为y (取值为0或1),概率估计为p = pr(y = 1),
 - 2. 每个样本的log loss是对分类器给定真实标签的负log似然估计 (negative log-likelihood):

$$L_{\log}(y, p) = -\log(pr(y|p)) = -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p))$$

logistic回归损失(二类)

```
• 公式: L_{\log}(y,p) = -\log(pr(y|p)) = -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p))
● 假设 y_true = [ 0, 0, 1, 1]
        y pred = [[.9, .1], [.8, .2], [.3, .7], [.01, .99]]
   对于第一个样本, y=0, p=0.1
     则L_{\log}(y,p) = -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p)) = -(1*\log 0.9)
   对于第二个样本, y=0, p=0.2,
     则L_{\log}(y,p) = -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p)) = -(1*\log 0.8)
   对于第三个样本, y=1, p=0.7,
     则L_{\log}(y, p) = -(y \log(p) + (1 - y) \log(1 - p)) = -(1 * \log 0.7)
   对干第四个样本. y=1. p=0.99,
    则L_{\log}(y,p) = -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p)) = -(1*\log(0.99))
```

以对数e为底数,则上述四项的均值为0.1738 (Sklearn中默认为以e为底)

logistic回归损失(多类)

- 对于多类问题(multiclass problem), 可将样本的真实标签(true label)编码成1-of-K(K为类别总数)的二元指示矩阵Y:
 - 转换举例: 假设K=3, 即三个类

● 假设模型对测试样本的概率估计结果为P,则在测试集(假设测试样本总数为N) 上的交叉熵损失表示如下:

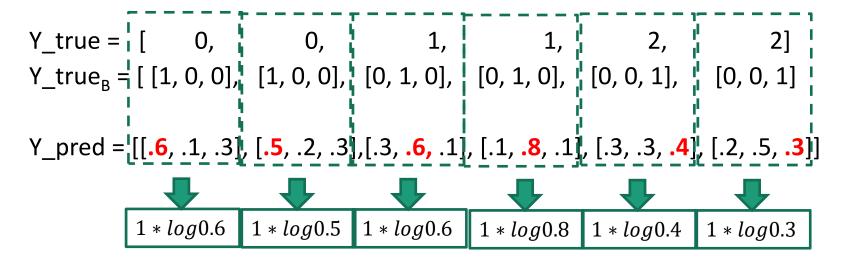
$$L_{log}(Y, P) = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{K-1} y_{i,k} log p_{i,k}$$

其中 $y_{i,k}$ 表示第 i 个样本的第 k 个标签的真实值,注意由于表示为"1-of-K"模式,因此每个样本只有其中一个标签值为1,其余均为0。 $p_{i,k}$ 表示模型对该样本的预测值。

logistic回归损失(多类)

根据公式, $L_{log}(Y,P) = -\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{K-1} y_{i,k} log p_{i,k}$

● 举例: 6个样本, 三个类



则 $L_{\log}(Y, P) = -(\log 0.6 + \log 0.5 + \log 0.6 + \log 0.8 + \log 0.4 + \log 0.3)/6 = 0.6763$

讨论: 回归评价的ground truth如何获得?

- MAE, RMSE(MSE) 常用于评分预测评价
 - 很多提供推荐服务的网站都有一个让用户给物品打分的功能。 预测用户对物品评分的行为称为评分预测。



香橙力娇 Lv4 VIP

★★★★★ 口味:4环境:4服务:4 人均:0元

一如既往的好吃,点的牛排和汉堡的程度都煎得刚刚好,酱汁味道浓郁,一份的量也好大,吃的够够的。背景音乐超级喜欢,听着很舒缓、很放松,让人进餐的时候心情愉悦。另外,美女经理的服务好好哦,以后还会经常来的!







11-24 更新于17-11-24 09:11 四季酒店咖啡厅 签到点评

赞(1) 回应 收藏 举报

Thanks!





一致性的评价方法

(Agreement Evaluation)

刘远超 哈尔滨工业大学 计算机科学与技术学院

什么是一致性评价?

●一致性评价,是指对两个或多个相关的变量进行分析,从而衡量其相关性的密切程度。



S ON THE STATE OF THE STATE OF







来电狂响

钢铁飞龙之奥...

海王

森林奇缘

闯堂兔3囧囧...

假设两评委 (rater) 对5部电影的评分如下,则二者的一致如何?

rater1 = [0.5, 1.6, 2.5, 2.5, 2.4]

rater2 = [1.5, 2.6, 3.5, 3.5, 3.4]

一致性评价--皮尔森相关系数法

- 问题举例: 如何评价两个评委的一致性? rater1 = [0.5, 1.6, 2.5, 2.5, 2.4] rater2 = [1.5, 2.6, 3.5, 3.5, 3.4]
- 皮尔森相关系数(Pearson coefficient)的应用背景:
 - ■用来衡量两个用户之间兴趣的一致性
 - ■用来衡量预测值与真实值之间的相关性
 - ■既适用于离散的、也适用于连续变量的相关分析
- X和Y之间的皮尔森相关系数计算公式:

$$\rho_{X,Y} = \frac{cov(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]}{\sigma_X \sigma_Y}$$

其中,cov(X,Y)表示X 和Y之间的协方差(Covariance), σ_X 是X的均方差, μ_X 是X的均值,E表示数学期望

● 取值区间为[-1, 1]。 -1: 完全的负相关, +1: 表示完全的正相关, 0: 没有线性相关

一致性评价--Cohen's kappa 相关系数

- Cohen's kappa相关系数也可用于衡量两个评价者之间的一致性。其特点在于:
 - 与pearson相关系数的区别: Cohen's kappa 相关系数**通常用于离散** 的分类的一致性评价。
 - 其通常被认为比两人之间的简单一致百分比更强壮,因为Cohen's kappa考虑到了二人之间的随机一致的可能性。
- ●如果评价者多于2人时,可以考虑使用Fleiss' kappa.

Reference: https://en.wikipedia.org/wiki/Joseph_L._Fleiss.

Cohen's kappa计算方法

●假设有50个人申请奖学金。有两个评委A和B。每个评委对每个申请者说"Yes" or "No"。假设AB一致性情况如下矩阵所示。

		В				В	
		Yes	No			Yes	No
Α	Yes	a	b	۸	Yes	20 10	5
А		С		Α	No	10	15

- ●先计算AB一致性比例为 $p_o = \frac{(a+d)}{(a+b+c+d)} = \frac{20+15}{20+5+10+15} = 0.7$
- ●再计算AB之间的随机一致性概率 p_e (the probability of random agreement) ,注意到:
 - 1. A对25个申请者说yes,因此比例为25/50=50%
 - 2. B对30个申请者说yes,因此比例为30/50=60%
 - 3. 因此,AB两人随机都说YES的概率 $p_{yes} = \frac{(a+b)}{(a+b+c+d)} \cdot \frac{(a+c)}{(a+b+c+d)} = 0.5 * 0.6 = 0.3$
 - 4. 同样, $p_{no} = \frac{(c+d)}{(a+b+c+d)} \cdot \frac{(b+d)}{(a+b+c+d)} = 0.5 * 0.4 = 0.2$
 - 5. AB的整体随机一致性(Overall random agreement)概率 $p_e = p_{ves} + p_{no}$ =0.3+0.2=0.5

43

ullet 最后应用Cohen's kappa公式,得到 $k = rac{p_o - p_e}{1 - p_e} = rac{0.7 - 0.5}{1 - 0.5} = 0.4$

Cohen's kappa取值的一致性含义

● kappa score是一个介于-1到+1之间的数.

Interpretation of Kappa

	Poor	Slight	Fair	Moderate	Substantial	Almost perfect
Kappa	0.0	.20	.40	.60	.80	1.0

<u>Kappa</u>	<u>Agreement</u>
< 0	Less than chance agreement
0.01 - 0.20	Slight agreement
0.21 - 0.40	Fair agreement
0.41 - 0.60	Moderate agreement
0.61 - 0.80	Substantial agreement
0.81 - 0.99	Almost perfect agreement

Fleiss' kappa

n_{ij}	1	2	3	4	5
1	0	0	0	0	14
2	0	2	6	4	2
3	0	0	3	5	6
4	0	3	9	2	0
5	2	2	8	1	1
6	7	7	0	0	0
7	3	2	6	3	0
8	2	5	3	2	2
9	6	5	2	1	0
10	0	2	2	3	7
Total	20	28	39	21	32
p_j	0.143	0.200	0.279	0.150	0.229

以上是14个评价者对10个item进行5级评价的结果(N = 10, n = 14, k = 5)。则计算Fleiss Kappa相关系数的过程为:

step 1. 对每一列计算 p_j ,即同列数据相加除以任务总数 (14*10=140)。 p_j 可以理解为每个分类的随机一致概率。

以第一列为例,则
$$p_1 = \frac{0+0+0+0+2+7+3+2+6+0}{14*10} = 0.143$$

Fleiss' kappa(续)

n_{ij}	1	2	3	4	5	P_t
1	0	0	0	0	14	1.000
2	0	2	6	4	2	0.253
3	0	0	3	5	6	0.308
4	0	3	9	2	0	0.440
5	2	2	8	1	1	0.330
6	7	7	0	0	0	0.462
7	3	2	6	3	0	0.242
8	2	5	3	2	2	0.176
9	6	5	2	1	0	0.286
10	0	2	2	3	7	0.286
Total	20	28	39	21	32	
p_{j}	0.143	0.200	0.279	0.150	0.229	

Step 2. 计算 $P_i = \frac{1}{n(n-1)} (\sum_{j=1}^k n_{ij}^2 - n)$,即对每一个标注任务进行实际一致性的计算,

以第2个item为例:
$$P_2 = \frac{1}{14(14-1)}(0^2 + 2^2 + 6^2 + 4^2 + 2^2 - 14) = 0.253$$

Fleiss' kappa (续)

			~ / \			
n_{ij}	1	2	3	4	5	P_i
1	0	0	0	0	14	1.000
2	0	2	6	4	2	0.253
3	0	0	3	5	6	0.308
4	0	3	9	2	0	0.440
5	2	2	8	1	1	0.330
6	7	7	0	0	0	0.462
7	3	2	6	3	0	0.242
8	2	5	3	2	2	0.176
9	6	5	2	1	0	0.286
10	0	2	2	3	7	0.286
Total	20	28	39	21	32	
p_j	0.143	0.200	0.279	0.150	0.229	

Step 3. 计算 p_o 和 p_e :

$$p_o = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} P_i = \frac{1}{10} (1.000 + 0.253 + \dots + 0.286 + 0.286) = \frac{1}{10} \cdot 3.780 = 0.378$$

$$p_e = \sum_{j=1}^{k} p_j^2 = 0.143^2 + 0.200^2 + 0.279^2 + 0.150^2 + 0.229^2 = 0.213$$

Step 4. 最后计算Fleiss Kappa系数

$$m{k} = rac{p_o - p_e}{1 - p_e} = rac{0.378 - 0.213}{1 - 0.213} = rac{0.210}{1 - 0.213}$$
 哈尔滨工业大学计算机学院 刘远超

Thanks!

