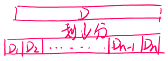
模型评估与选择

2023年11月14日 8:31

一種訓練集一種算法

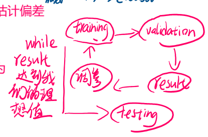
經驗誤差与过拟合
- 使用模型對m样本進行预測
- 模型得到一个预测函数$f(x)=\hat{y}$（预测值），而样本的正确结果为Y
- 则有错误率 $E=a/m$ 错误个数
- 精度1-E
- 误差$|Y-\hat{y}|$

評估方法
- 泛化能力
  - 模型对没有见过的数据的预测能力
  - 训练集vs测试集
- 训练集
- 测试集的保留方法
  - 留出法
    - 很简单的三七分、二八分
    - 注意训练集与测试集同分布
    - 或进行多次随机划分、训练出多个模型，最后取均值
  - 交叉驗证法
    - K折交叉验证
    - 缺点：数据量较大时，对算力要求高



将D划分为n个数据集
每次取其中一个作为测试集，其它用于训练
取n个测试结果的平均值作为该模型的结果

  - 自助法
    - 原理：通过自助采样，初始数据集D中约有36.8%的样本未出现在采样数据集D中，可将D'用作训练集，D\D'作为测试集
      - $\lim_{m\to\infty}(1-\frac{1}{m})^m \to \frac{1}{e} \approx 0.368$
    - 适用于数据集较小，难以划分时
    - 缺点：改变初始数据集分布，会引入估计偏差
- 验证集　为了调参，经常在数据集中再划分一部分作为验证集，流程为

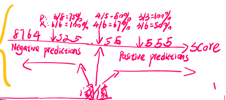


性能度量
- 任务描述
  - 给定样本例集$D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_m,y_m)\}$
  - 其中y_i是x_i的真实标记。要评价学习器f的性能，就要把学习器预测结果$f(x)$与真实标记y进行比较
- 均方誤差
  - 回归任务最常用的性能度量是“均方误差”
  - $E(f;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(f(x_i)-y_i)^2$ [概率分布一致时]
  - 更一般地，对于数据分布$\mathcal{D}$和概率密度函数$p(\cdot)$，均方误差可描述为
  - $E(f;\mathcal{D})=\int_{x\sim\mathcal{D}}(f(x)-y)^2p(x)dx$
- 錯誤率与精度
  - 错误率 $E(f;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}(f(x_i)\neq y_i)$ 其中$\mathbb{I}(\cdots)$为指示函数，括号内值为真时取1，否则为0
  - 精度：$acc(f;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}(f(x_i)=y_i)=1-E(f;D)$
- 混淆矩陣
  - True Positive 真正例
  - False Positive 假正例
  - True Negative 真反例
  - False Negative 假反例

对于二分类

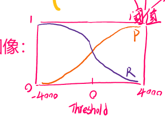
真实值	预测结果：正例	预测结果：反例
正例	TP	FN
反例	FP	TN

查准率 查全率和F1值
- 查准率 $P=\frac{TP}{TP+FP}$ 也叫精确率
- 查全率 $R=\frac{TP}{TP+FN}$ 也叫召回率
- P-R曲綫
  - 舉例說明：
    - 手写数字识别：使用机器分类是5还是非5（机器对每个样本进行打分，分最高的约容易被判断为正例）
    - 实际上是随着阈值的移动，P，R呈反向变动
  - P-R反向變動关系原理

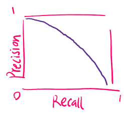


模型生成了一个值用于判断樣本是真还是假。隨著該值的变化，得到的R、R會呈反向變動

  - 閾值：PR圖像：



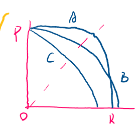
P-R曲线



- 最优阈值的確定
  - 1. 使用平衡點（即P=R时）
  - 2. F1度量
    - 多数时候，往往只需TP的占比情况，我们希望能提高TP的权重，故设定了一个调和平均数F_1
    - 其中 $\frac{1}{F_1}=\frac{1}{2}(\frac{1}{P}+\frac{1}{R}) \Rightarrow F_1=\frac{2PR}{P+R}=\frac{2TP}{m+TP-TN}$

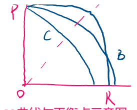
真实值	预测结果：正例	预测结果：反例
正例	TP	FN
反例	FP	TN

  - 3. F_β
    - F1是基于查准率和查全率的调和平均定义的
    - F_β则是加权调和平均：$\frac{1}{F_\beta}=\frac{1}{1+\beta^2}(\frac{1}{P}+\frac{\beta^2}{R})$ [$\frac{1}{F_1}=\frac{1}{2}(\frac{1}{P}+\frac{1}{R})$]
    - 其中β > 0度量了查全率对查准率的相对重要性，β = 1时退化为标准的F1;β > 1时查全率有更大的影响； < 1时查准率有更大影响
    - 与算数平均$\frac{P+R}{2}$和几何平均$\sqrt{P^2 \times R^2}$相比，调和平均更重视较小值
- n个二分类实现的多分类问题
  - 先分别计算，再求平均值
    - $(P_1,R_1),(P_2,R_2)\dots(P_n,R_n)$
    - marco-P宏查准率：$marco\text{-}P=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}P_i$
    - marco-R宏查全率：$marco\text{-}R=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}R_i$
    - marco-F1宏F1：$marco\text{-}F_1=\frac{2\times marco\text{-}P\times marco\text{-}R}{marco\text{-}P+marco\text{-}R}$
  - 先平均再计算
    - 先求$\overline{TP}$、$\overline{FP}$、$\overline{TN}$、$\overline{FN}$
    - $marco\text{-}P=\frac{\overline{TP}}{\overline{TP}+\overline{FP}}$
    - $marco\text{-}R=\frac{\overline{TP}}{\overline{TP}+\overline{FN}}$
    - $marco\text{-}F1=\frac{2\times marco\text{-}P\times marco\text{-}R}{marco\text{-}P+marco\text{-}R}$



一种训练多种算法

P-R曲线



PR曲线与平衡点示意图

marco-P = ...

marco-R = $\frac{TP}{TP+FN}$

marco-F1 = $\frac{2\times marco\text{-}P\times marco\text{-}R}{marco\text{-}P+marco\text{-}R}$

比较ABC 3个模型的好坏
- 首先可以确定B和A优于C，BA之间有交叉，无法确定
- 对比AB
  - 方法1：比较AB的面积大小，在一定程度上表征了模型的优劣，但是这个值不容易估算
  - 方法2：F_1
  - 方法3：F_β

ROC与AUC

ROC：

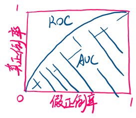
True Positive Rate：$TPR=\frac{TP}{TP+FN}$

False Positive Rate：$FPR=\frac{FP}{TN+FP}$

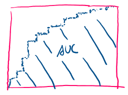
横着比对

真实值	预测值 正例	预测值 反例
正例	TP	FN
反例	FP	TN

示意图



基于有限样例绘制



AUC

AUC: Area Under ROC Curve 即ROC曲线下的面积

$$AUC=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m-1}(x_{i+1}-x_i)(y_{i+1}-y_i)$$

排序损失
- 形式化地看，AUC考虑的是样本预测的排序质量，因此它与排序误差有紧密联系。给定m^+个正例和m^-个反例，令D^+、D^-表示正反例集合
- 则排序损失定义为 $\ell_{rank}=\frac{1}{m^+m^-}\sum_{x^+\in D^+}\sum_{x^-\in D^-}\left(\underbrace{\mathbb{I}(f(x^+)<f(x^-))}_{\text{类似于线性代数中求逆序数}}+\frac{1}{2}\mathbb{I}(f(x^+)=f(x^-))\right)$
- 以手写数字为例 [机器对样本进行排序，越往左值越低，反之越高] 得到逆序数为4

即 $\ell_{rank}=\frac{4}{6\times6}=\frac{4}{36}$

$m=12, m^+=6, m^-=6$

8 7 6 4 ↓ 5 2 5 ↓ 5 6 ↓ 5 5 5 → score

Negative predictions / Positive predictions / various thresholds

真实值	预测值 正例	预测值 反例
正例	TP	FN
反例	FP	TN

$AUC=1-\ell_{rank}$ 证明：

position: 12 11 10 9 8 7 6 5 4 3 2 1 0

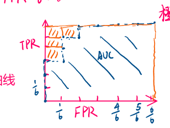
8 7 6 4 ↓ 5 2 5 ↓ 5 6 ↓ 5 5 5 → score

Negative predictions / Positive predictions / Various thresholds

对于书写数字寻找数字5，阈值Various thresholds有12种取法

1. position=0时，认为样本中不存在正例，$TPR=\frac{0}{6}=0$，$FPR=\frac{0}{6}=0$
2. ... =1，认为只有1个正例，$TPR=\frac{1}{6}$，$FPR=\frac{0}{6}$
3. ... =2, ... 2 ..., $TPR=\frac{2}{6}$, $FPR=\frac{0}{6}$
4. ... =3 ... 3 ..., $TPR=\frac{3}{6}$, $FPR=\frac{0}{6}$
5. ... =4, ... 4 ..., $TPR=\frac{3}{6}$, $FPR=\frac{1}{6}$
6. ... =5 ... 5 ..., $TPR=\frac{4}{6}$, $FPR=\frac{1}{6}$
7. ... =6 ... 6 ..., $TPR=\frac{5}{6}$, $FPR=\frac{1}{6}$
8. ... =7, ... 7 ..., $TPR=\frac{5}{6}$, $FPR=\frac{2}{6}$
9. ... =8, ... 8, ... $TPR=\frac{6}{6}$, $FPR=\frac{2}{6}$
10. ... =9, ... 9, ... TPR=1, $FPR=\frac{3}{6}$
11. =10 ... ... $FPR=\frac{4}{6}$
12. =11 ... ... $FPR=\frac{5}{6}$
13. ... =12 ... ... $FPR=\frac{6}{6}$

绘制ROC曲线



橙色块表示个，即$\frac{4}{36}=\ell_{rank}$

$\therefore AUC=1-\ell_{rank}$

多种训练集一种算法

代价敏感错误率与代价曲线

二分类代价矩阵

真实类别	预测类别 第0类	预测类别 第1类
第0类	0	$cost_{01}$
第1类	$cost_{10}$	0

代价敏感错误率为

$$E(f;D;cost)=\frac{1}{m}\left(\sum_{x_i\in D^+}\mathbb{I}(f(x_i)\neq y_i)\times cost_{01}+\sum_{x_i\in D^-}\mathbb{I}(f(x_i)\neq y_i)\times cost_{10}\right)$$

代价曲线
- 使用参数方程，使得图像是线性的
- 目的：对于一个模型，根据p（概率）不同，找到使得代价总期望最小的模型的阈值
- 集合中正例比例，即$\frac{m^+}{m}$，阈值是预测值，和给定样本中的$\frac{m^+}{m}$无关
- 横轴：归一化的正概率代价期望 $P(+)cost=\frac{p\times cost_{10}}{p\times cost_{01}+(1-p)\times cost_{10}}$
- 归一化用来统一横轴纵轴两边的单位
- 纵轴：归一化的总代价期望 $cost_{normal}=\frac{[FNR\times p\times cost_{01}+FPR\times(1-p)\times cost_{10}]}{p\times cost_{01}+(1-p)\times cost_{10}}$
- False Negative Rate & False Positive Rate
- 总损失期望

第0类

TP	FN
FP	TN

偏差与方差

测试集上的性能在多大程度上保证真实的性能

比较检验

问题
1. 测试集上的性能与真正的泛化性能未必相同
2. 测试集不同反映出来的性能不同
3. 机器学习算法本身具有随机性，同一个测试集上多次运行，可能会有不同的结果

一个测试集一种算法

二项分布

假设测试集有m个样本，其中判断错误的有m'个，可知错误率$\epsilon=\frac{m'}{m}$

在所有的真实数据中，假设其错误率为 ϵ_0，若测试集中m=10，则m'=?

常用的离散型随机变量

（1）0-1随机分布

若随机变量X只有两个可能的取值0和1，其概率分布为

$P(X=x_i)=p^{x_i}(1-p)$，$x_i=0,1$

则称X服从0-1分别

（2）二项分布

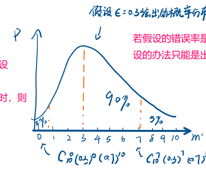
设事件A在任意一次实验中出现的概率是p（0<p<1）,X表示n重伯努利试验中发生的次数，则X的所有可能取值为0,1,2,3,4,...n，且相应概率为

$P(X=k)=C_n^kp^k(1-p)^{n-k}$, $k=0,1,2\ldots n$

假设检验

- 从测试集中找出m'的个数，若与图像出入太大，说明假设错误，可以拒绝假设
- 若与图像接近，则不能拒绝假设；
- 具体的，若置信区间为90%,则当测试集中测得的错误样本数量落在置信区间时，则无法拒绝假设
- 之所以要归到二项分布、正态分布等标准分布，是因为它们的面积好求

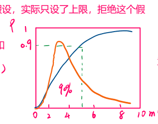
假设 $\epsilon=0.3$ 绘出的概率分布（$n\to\infty$）



判错个数出现的概率是多少

若假设的错误率是一个范围，如$\epsilon\leq0.3$ 对于这个假设，实际只设了上限，拒绝这个假设的办法只能是出现大于某个数的错误

概率累加求和 $\sum_{i=1}^{m'}P(n=i)$



置信区间90%

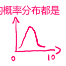
多个测试集一种算法 t检验

- 离散型随机变量的函数分布
- 卡方分布
- t分布
- 正态分布与处理为t分布

假设同一个模型有3个测试集 T_1,T_2,T_3 样本m=10，它们分别有各自的错误率 $\hat{\epsilon}_1$、$\hat{\epsilon}_2$、$\hat{\epsilon}_3$ 对它们进行排列组合

则它们每个的概率分布都是

二项分布



各自错误样本数

Test1	0	0	0		10
Test2	0	0	1	...	10
Test3	0	1	1		10

由于是独立事件，每个之间都是用乘法求的概率

得到的错误率ϵ与方差σ 共有11^3个，重复的需要合并，得到新的概率分布

又回归到1个测试集1种算法的问题

多个测试集两种算法 交叉验证t检验

一个测试集两种算法 McNemar检验

多个测试集多种算法 Friedman与Nemenyi后续检验