模型评估与选择

一種訓練集一種算法

經驗誤差与过拟合

- 使用模型對m样本進行預測
- 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 （a：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

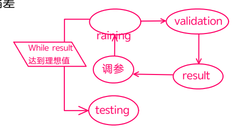
测试集的保留方法

- 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$D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\dots,(x_m,y_m)\}$
- 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D 和概率密度函数$p(\cdot)$ ，均方误差可描述为$E(f;D)=\int_{x\sim D}(f(x)-y)^2 p(x)dx$

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

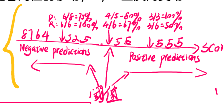
对于二分类

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

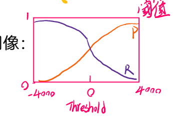
P-R曲綫

- 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
- 舉例说明：
  - 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

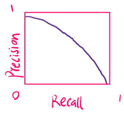


  模型生成了一个值用于判断樣本是真还是假。隨著該值的变化，得到的R、R會呈反向變動

- 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；β＜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：$marco\text{-}F1=\frac{2\times marco\text{-}P\times marco\text{-}R}{marco\text{-}P+marco\text{-}R}$
- 先求 $\overline{TP}$、$\overline{FP}$、$\overline{TN}$、$\overline{FN}$

n个二分类实现的多分类问题

$marco\text{-}R$ 宏查全率： $marco\text{-}R = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} R_i$

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

先平均再计算

先求 $\overline{TP}$、$\overline{FP}$、$\overline{TN}$、$\overline{FN}$

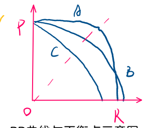
$marco\text{-}P = \frac{\overline{TP}}{\overline{TP}+\overline{FP}}$

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

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

一种训练多种算法

P-R曲线



PR曲线与平衡点示意图

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

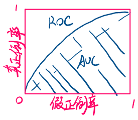
True Positive Rate: $TPR = \frac{TP}{TP+FN}$

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

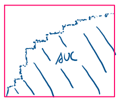
横着比计

真实值	预测值	
	正例	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

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

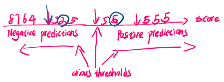
排序损失

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 $\ell_{rank} = \frac{1}{m^+m^-}\sum_{x^+\in D^+}\sum_{x^-\in D^-}\left(\underbrace{\mathbb{I}(f(x^+)<f(x^-))}_{\text{类似与线性代数中求逆序数}} + \frac{1}{2}\mathbb{I}(f(x^+)=f(x^-))\right)$

以手写数字为例（机器对样本进行排序，越往左分值越低，反之越高），得到逆序数为4

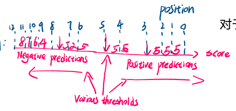


即$\ell_{rank} = \frac{4}{6\times6} = \frac{4}{36}$

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

真实值	预测值	
	正例	反例
正例	TP	FN
反例	FP	TN

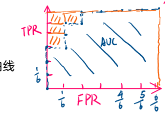
$AUC = 1 - \ell_{rank}$ 证明:



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

1. position = 0时，认爲樣本中不存在正例，$TPR=\frac{0}{6}=0$，$FPR=\frac{0}{6}=0$
2. … =1，认为只有1個正例 $TPR=\frac{1}{6}$，$FPR=\frac{0}{6}$
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



橙色块共有4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	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$\frac{m^+}{m}$，该值是预测值，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

False Negative Rate & False Positive Rate

总损失期望

纵轴：归一化的总代价期望 $cost_{normal} = \frac{[FNR\times p\times cost_{01} + FPR\times(1-p)\times cost_{10}]}{p\times cost_{01} + (1-p)\times cost_{10}}$

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

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'=?

一个测试集一种算法

二项分布

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01234…n，且相应概率为

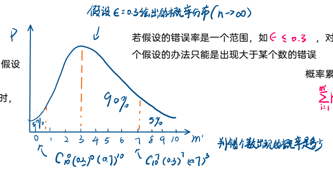
$P(X=k)=C_n^k p^k(1-p)^{n-k}$，$k=0,1,2\dots n$

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

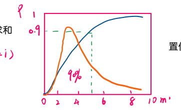
之所以要归到二项分布、正态分布等标准分布，是因为它们的面积好求



若假设的错误率是一个范围，如 $\epsilon\le 0.3$ ，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