机器学习导论

第5章 机器学习模型评估

谢茂强

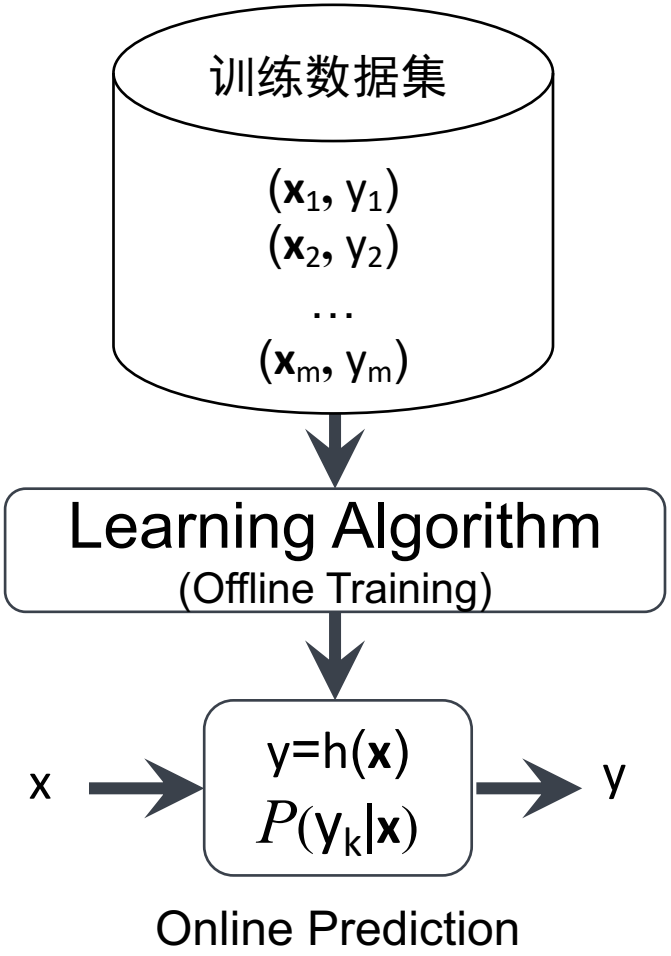
南开大学软件学院

目录

1.回顾机器学习定义

- **Definition**[Tom Mitchell, 1997]**:** A computer program is said to *learn* from experience E with respect to some class of tasks T and performance measure P, if its performance at tasks in T, as measured by P, improves with experience E.

- **Machine Learning** Addresses the question of how to build computer programs that improve their **performance** at some **task** through **experience**.

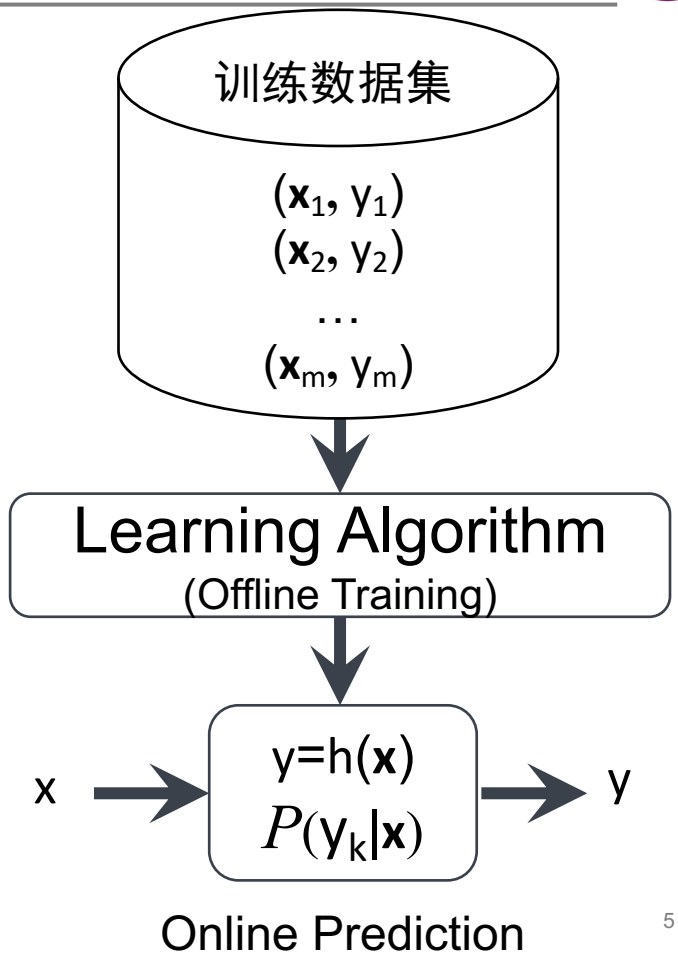


- 目的：利用预测模型$y=h(\boldsymbol{x})$或$\mathbf{argmax}_k\{P(y_k|\boldsymbol{x})\}$，为用户提供的$\boldsymbol{x}$预测输出$y$

- 预测模型从何而来：从历史经验（带专家标注的训练数据$\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\}$, $i=1,2,\ldots,m$）中学习

机器学习模型的性能评估

- 工程 v.s. 科学
- 量化评估是工程的基石
- 个人认为机器学习是体现自身优化最直观的技术
- 实验能力



目录

2.1 预测准确率(Accuracy)

将 $err(h_\Theta(x), y)$ 的返回值控制在 $\{0, 1\}$,那么

$$\text{Accuracy}= \left(1 - \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} err(h_\Theta(x^{(i)}, y^{(i)})\right) \times 100\%$$

使用标注和预测结果的组合进行评估

样本的标注y：样本的真实输出(Ground Truth)

样本的预测结果f(x)：机器学习模型对样本的预测输出(Prediction)

		Predicted condition	
	Total population	Predicted Condition positive	Predicted Condition negative
True condition	condition positive	**True positive**	**False Negative** (Type II error)
	condition negative	**False Positive** (Type I error)	**True negative**

该矩阵也被称为混淆矩阵(confusion matrix)

混淆矩阵的4种组合

		Predicted condition	
	Total population	Predicted Condition positive	Predicted Condition negative
True condition	condition positive	True positive	False Negative (Type II error)
	condition negative	False Positive (Type I error)	True negative

TP：True Positive,被判定为正样本，事实上也是正样本。

TN：True Negative,被判定为负样本，事实上也是负样本。

FN：False Negative,被判定为负样本，但事实上是正样本。
FP：False Positive,被判定为正样本，但事实上是负样本。

（相对地，用户更为关心positive结果和true样本的重合度）

2.2 查准率与查全率 (Table 2.1 P.30)

Precision：查准率，即在**分类器预测出的正例中**，真正正确的个数占整个结果的比例。

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Recall：查全率，即在预测结果中真正正确的个数**占整个标注数据集中正例个数**的比例。

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

查准率与查全率曲线(PR Curve)

- Precision和Recall相矛盾
  - 使用阈值(threshold)决定判别，如LR，NN
  - 想将所有感兴趣的样本识别出来，需要降低阈值，扩大接受范围
  - 想提高识别感兴趣样本的查准率，需要提高阈值，提高拒绝率

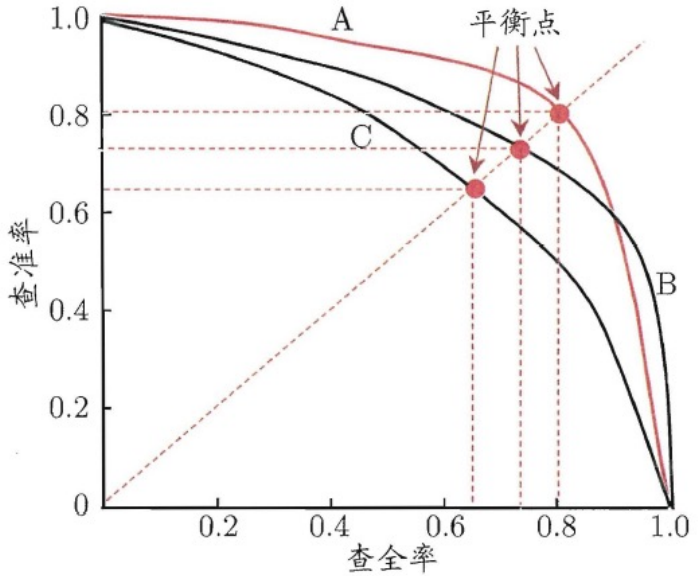


图 2.3 P-R曲线与平衡点示意图

查准率与查全率曲线(PR Curve)

- Precision和Recall相矛盾
  - 好的方法应该能够尽量包住对比方法的P-R曲线
  - 平衡点（Break-Event Point）“查准率=查全率”时的取值可以用来作为衡量分类器性能的指标之一

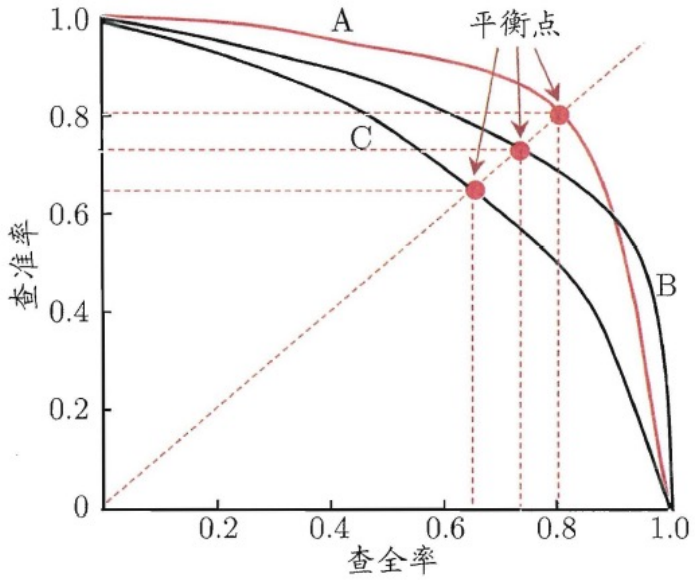


图 2.3 P-R曲线与平衡点示意图

F1 score

相比于P-R曲线的平衡点，F_1度量更为专业一些，它是precision和recall的调和平均（harmonic mean），最差为0，最好为1

$$F_1 = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall} = \frac{2TP}{2TP + FP + FN}$$

调和平均（harmonic mean）又叫倒数平均

$$H_n = \frac{n}{\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} + \ldots + \frac{1}{a_n}}$$

ROC曲线

ROC: Receiver Operating Characteristic

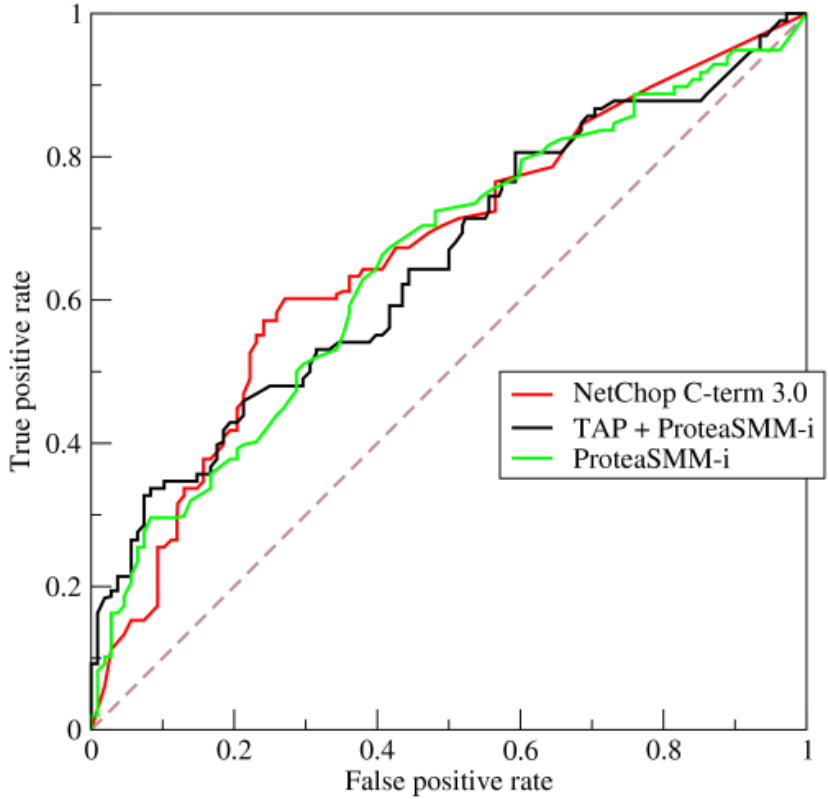
预测方法：

1）使用阈值（阈值确认风险大）

2）使用排序（搜索引擎v.s.问答系统）

排序做法：

将最可能的正例排在前，最不可能是正例的排在后面，通过cut-point区分预测结果是否为正



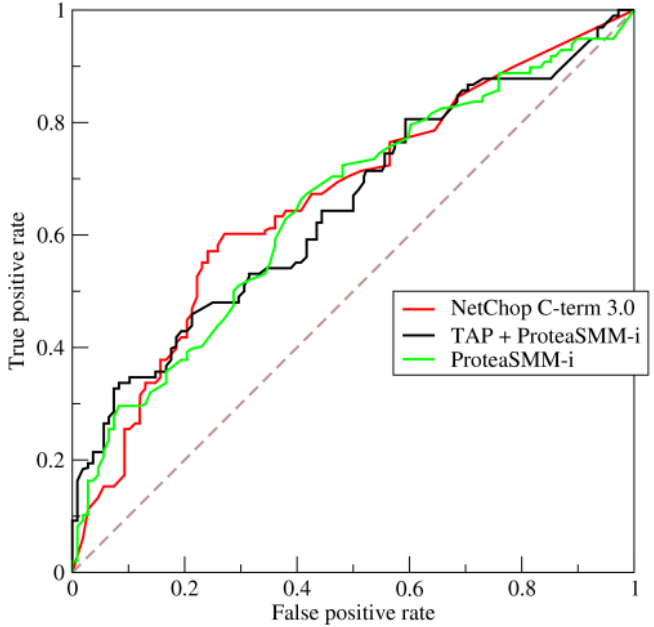
2.3 ROC曲线

- 通过不断调整分割点，使用排序更能全方位反映分类器性能。
- ROC曲线则可用来评估不同分割点下的排序性能

  Y轴：$TPR = TP/(TP + FN)$

  X轴：$FPR = FP/(FP + TN)$

- 偏向左上好，偏向右下不好



True positive	**False Negative** (Type II error)
False Positive (Type I error)	**True negative**

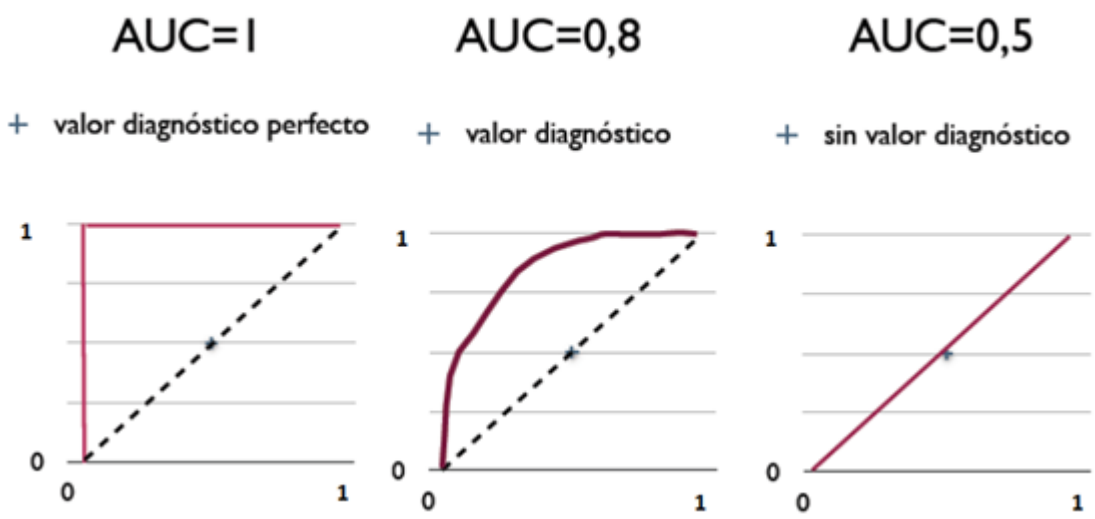
AUC(Area Under Curve) of ROC

若随机抽取一个true样本和一个false样本，AUC表示分类器接受true样本高于接受false样本的概率

AUC取值在0~1之间

AUC值越大的分类器，

正确率越高



ROC曲线

A

TP=63	FP=28	91
FN=37	TN=72	109
100	100	200

TPR = 0.63

FPR = 0.28

ACC = 0.68

B

TP=77	FP=77	154
FN=23	TN=23	46
100	100	200

TPR = 0.77

FPR = 0.77

ACC = 0.50

C

TP=24	FP=88	112
FN=76	TN=12	88
100	100	200

TPR = 0.24

FPR = 0.88

ACC = 0.18

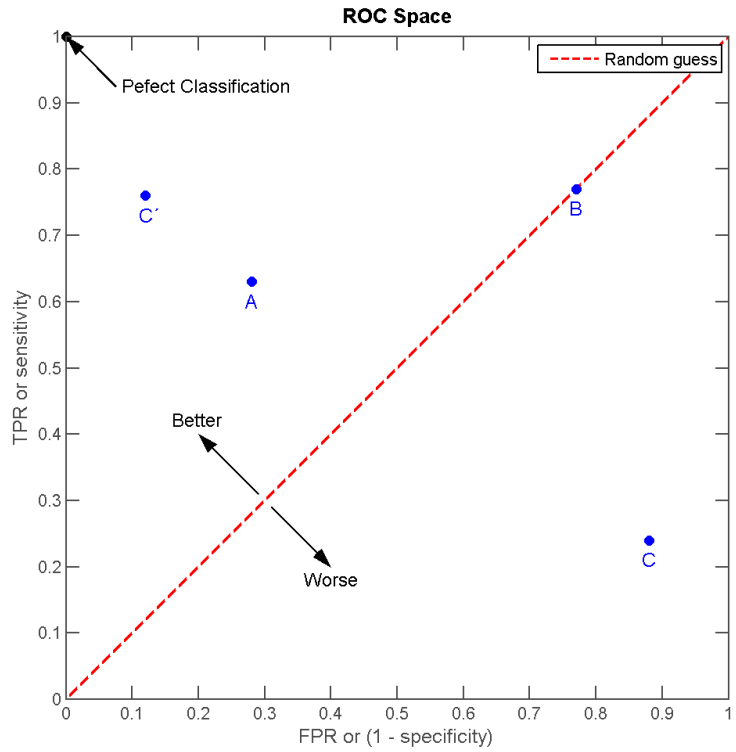
C'

TP=76	FP=12	88
FN=24	TN=88	112
100	100	200

TPR = 0.76

FPR = 0.12

ACC = 0.82



梯形法计算AUC

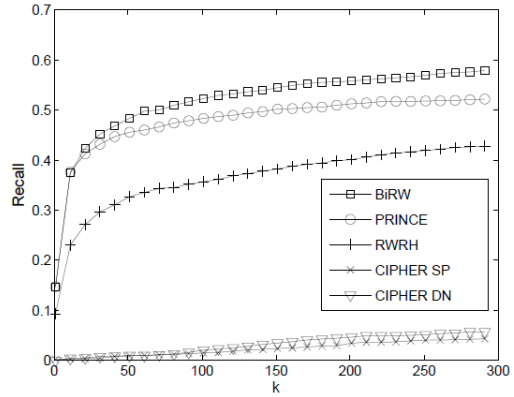
梯形法（trapezoid method）：简单地将每个相邻的点以直线连接，计算连线下方的总面积。因为每一线段下方都是一个梯形，所以叫梯形法。

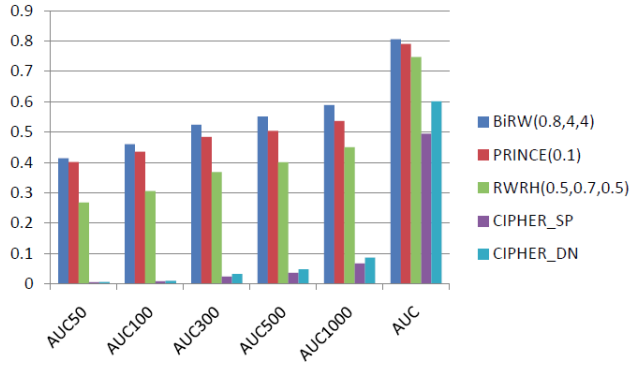
可以看作**积分**

具体实现：随着FP的增加，累加TP

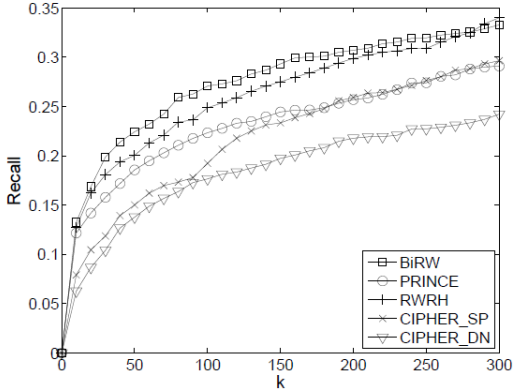
Recall@K与AUROC@K的示例

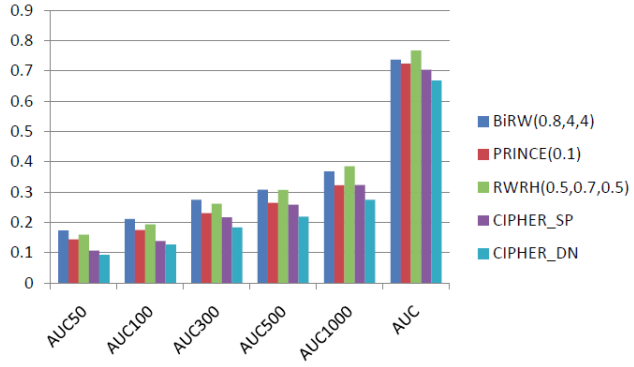
强调头部性能的意义





(A) 100-fold Cross-validation





(B) Test Data

2.4 不同类型的错误代价不一样

例1. “将患者诊断为健康人” 和 “把健康人诊断为患者”的后果不同

例2. “降低信用评估标准贷款”和“提高信用评估标准拒绝贷款”的后果不同

之前提到的算法将不同类型的错误赋予“等价错误”

2.4 代价矩阵

- 以二分类为例，可以计算不同类型的错误，将FP和FN分别计算，记为$cost_{10}$和$cost_{01}$。
- 解决方法
  - 按照任务的关注，选择$cost_{ij}$小的模型
  - 按照任务关注，调整损失函数

表 2.2　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

2.4 代价敏感(Cost Sensitive)的错误率

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

- 代价敏感的分类算法或排序算法：更改代价函数

2.5差异显著性检验(Student’ s T-Test)

主要用于判断所提方法(proposed method)与基准方法(baseline methods)之间的性能差异是否显著（significantly）

例如：这些方法在多个任务（数据集）上的性能结果作比较。

mean(PM)>mean(BM)，则对[h,p,ci]=ttest2(PM,BM);

- 当h=1时，表明可以从统计上断定算法A1的结果大于A2的结果（即两组数据均值的比较是有意义的）
- h=0则表示不能根据平均值来断定两组数据的大小关系（因为区分度小）

目录

- Training/Empirical Error

$$\text{Training Error} = \frac{1}{m_{train}} \sum_{i=1}^{m_{train}} err(h_\Theta(x_{train}^{(i)}), y_{train}^{(i)})$$ 训练模型参数

$$\text{CV Error} = \frac{1}{m_{CV}} \sum_{i=1}^{m_{CV}} err(h_\Theta(x_{CV}^{(i)}), y_{CV}^{(i)})$$ 选择超参数 (HyperParameter)

- Test/Generalization Error(这个体现模型的真实性能)

$$\text{Test Error} = \frac{1}{m_{test}} \sum_{i=1}^{m_{test}} err(h_\Theta(x_{test}^{(i)}), y_{test}^{(i)})$$

Evaluating your hypothesis

Dataset:

Size	Price
2104	400
1600	330
2400	369
1416	232
3000	540
1985	300
1534	315
1427	199
1380	212
1494	243

60% Training set

20% Cross validation (CV) set

20% test set

$(x^{(1)}, y^{(1)})$
$(x^{(2)}, y^{(2)})$
$\vdots$
$(x^{(m)}, y^{(m)})$

$(x_{cv}^{(1)}, y_{cv}^{(1)})$
$(x_{cv}^{(2)}, y_{cv}^{(2)})$
$\vdots$
$(x_{cv}^{(m_{cv})}, y_{cv}^{(m_{cv})})$

m_{cv} = no. of CV example $(x_{cv}^{(i)}, y_{cv}^{(i)})$

$(x_{test}^{(1)}, y_{test}^{(1)})$
$(x_{test}^{(2)}, y_{test}^{(2)})$
$\vdots$
$(x_{test}^{(m_{test})}, y_{test}^{(m_{test})})$

m_{test}

3.2 交叉验证Cross Validation

- **目的：使用现有数据集获得更好的模型和更全面的性能评估**
- **N-fold Cross-Validation (Fig. 2.2, page 26)**

将整个训练数据集划分成n份，选取其中一份作为验证数据集，其余n-1份作为训练数据集。

进行轮换让每一份数据都有机会作为验证数据集。尽可能避免overfitting

- **Leave One Out Cross-Validation**

是N-fold Cross-Validation的特例，每个样本都当作一份验证数据集

10折交叉验证示意

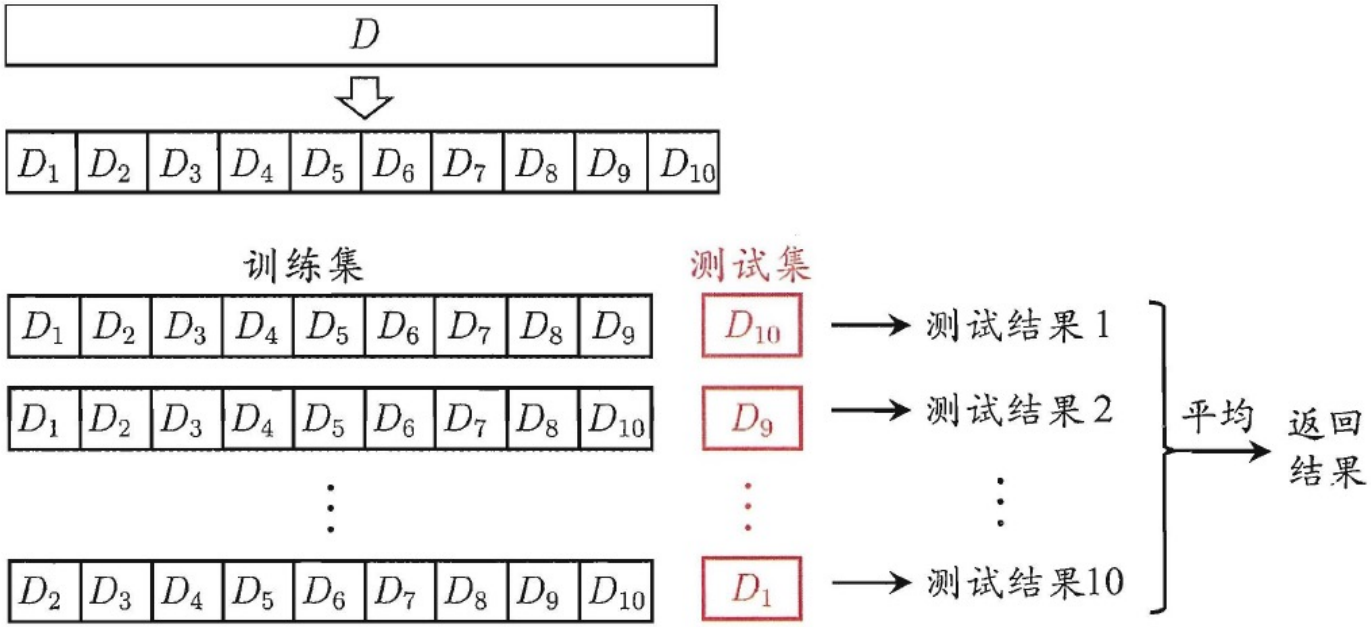


图 2.2　10 折交叉验证示意图

10-fold Cross-Validation

10折交叉验证的示例代码

```
for i = 1 : loop
        read_begin = round((i - 1) * rows / loop) + 1;
        read_end = round(i * rows / loop);

        tmp_buffer = g_p_network(read_begin : read_end, :);
        g_p_network(read_begin : read_end, :) = 0;

        tmpR = birw_mn(phenotype_logistic, ppi_network,  g_p_network,m, n, alpha,

        R(read_begin:read_end, :) = tmpR(read_begin:read_end, :);

        g_p_network(read_begin : read_end, :) = tmp_buffer;

end
```

留一交叉验证

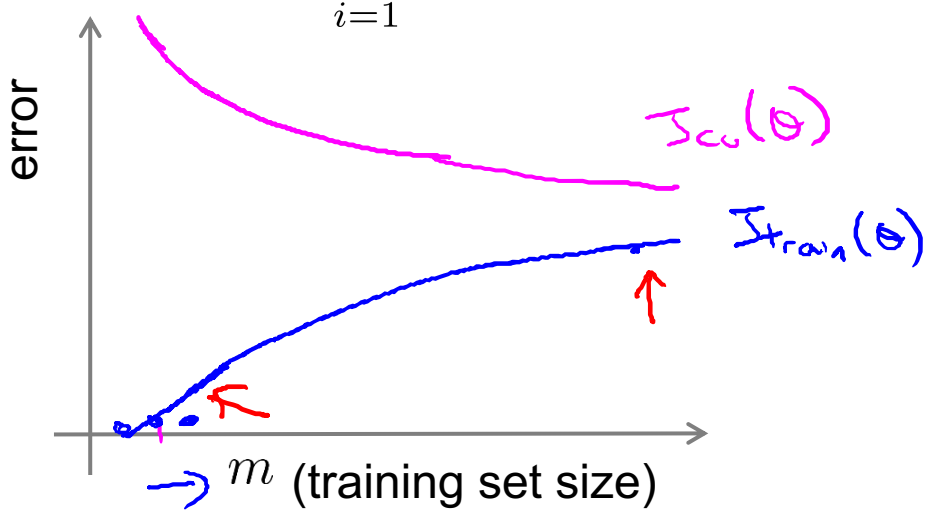
- 是N-fold Cross-Validation的特例，每个样本都当作一份验证数据集
- 对于耗时不是很长的，建议使用LOOCV

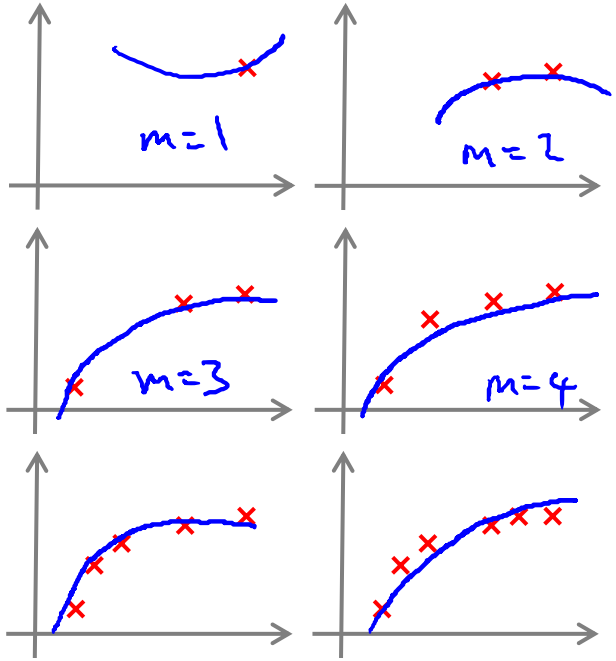
3.3 使用学习曲线(Learning curves)来反映模型的学习程度

(或拟合训练和验证数据的程度)

$$J_{train}(\theta) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

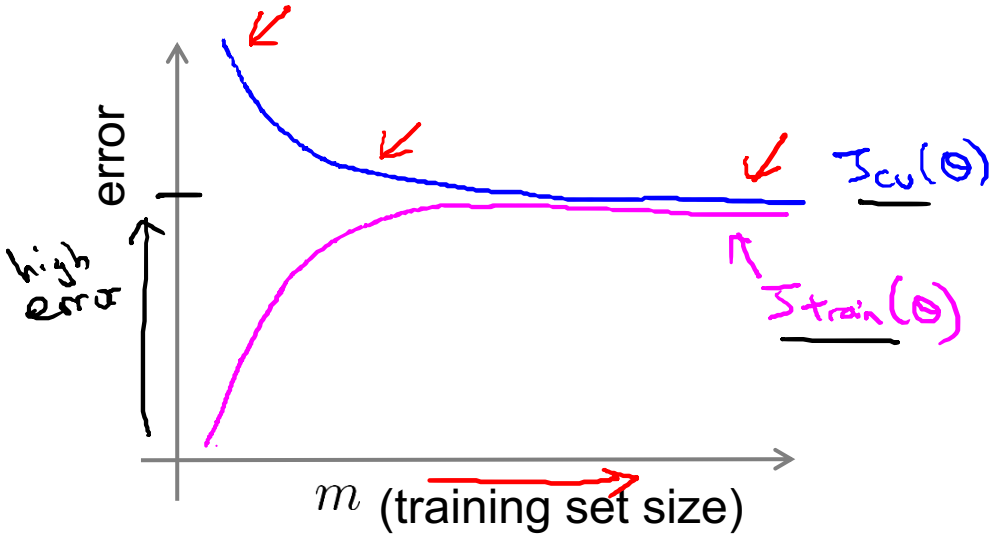
$$J_{cv}(\theta) = \frac{1}{2m_{cv}}\sum_{i=1}^{m_{cv}}(h_\theta(x_{cv}^{(i)}) - y_{cv}^{(i)})^2$$

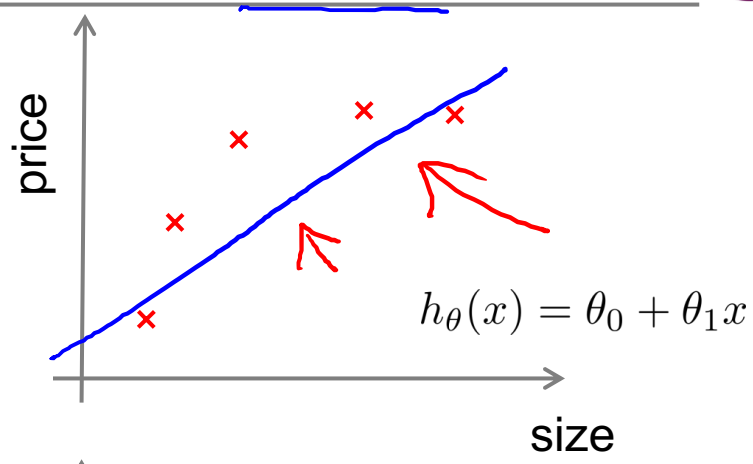


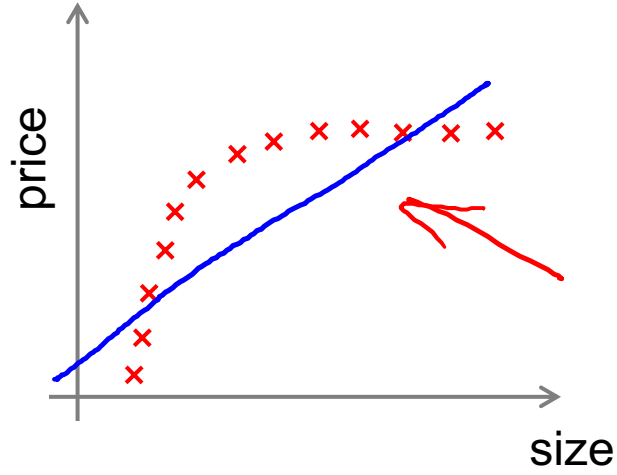


$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$

3.3使用学习曲线展示欠拟合(Underfit, High bias)





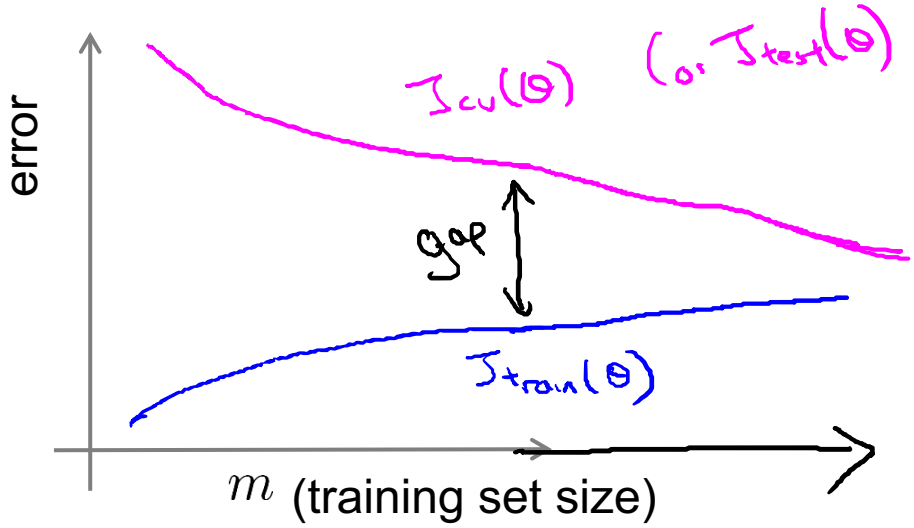


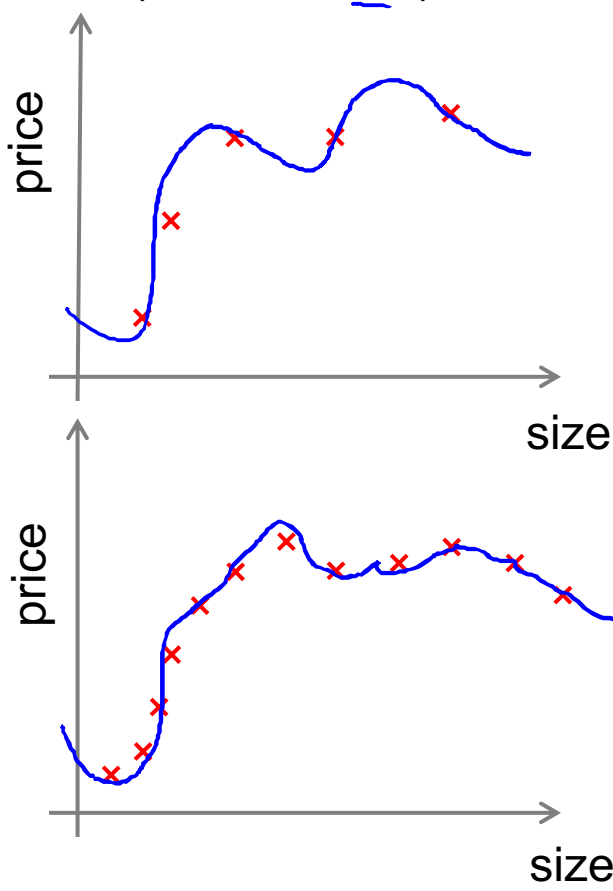
- 模型太简单，在训练数据和验证数据上错误率都高
- 错误率高的情形不会因为训练数据集规模扩大而改善

3.3使用学习曲线展示过拟合(高方差)

$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \cdots + \theta_{100} x^{100}$

(and small λ)





- 过拟合：模型复杂，且训练数据和验证数据分布差异大
- 扩大训练数据集规模（主要是让其分布更接近验证数据集）对解决过拟合很有帮助

总结

- 机器学习回顾
- 机器学习预测结果的评估
  - 准确率、查准率、查全率、F_1 Measure、ROC和AUC
  - 其他：调参、代价敏感错误率 、代价敏感分类器
- 机器学习模型的评估
  - 训练误差、验证/测试误差
  - 交叉检验
  - 根据模型评估进行调整：偏差与方差、学习曲线