《机器学习》读书笔记 第2章 模型评估与选择

错误率（error rate）

$$E = \frac{a}{m}$$

意为：在 m 个样本中，有 a 个样本分类错误

精度（accuracy）

$$1-E=1-\frac{a}{m}$$

误差（error）

学习器的实际预测输出 与 样本的真实输出之间的差异

泛化误差（generalization error）

学习器在新样本上产生的误差

过拟合（overfitting）

无法彻底避免，只能缓解或减小其风险

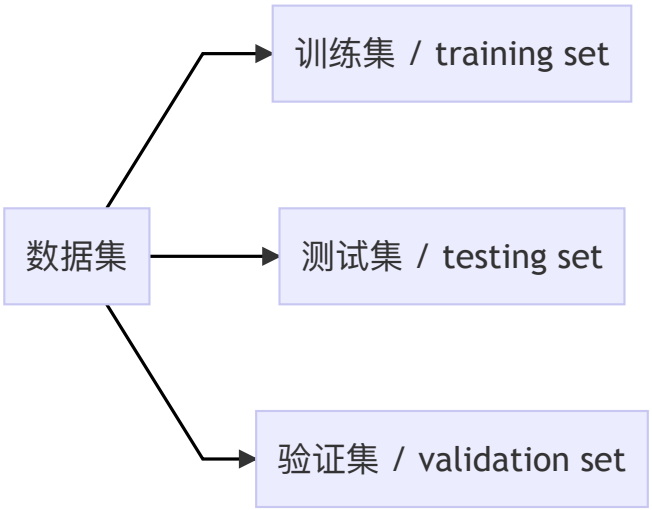
欠拟合（underfitting）

与过拟合相对

测试误差（testing error）

数据集的划分

划分类型



训练集（`training set`）

测试集（`testing set`）

用于测试学习器对新样本的判别能力

测试误差（`testing error`）

在测试集上得出的误差，可作为泛化误差的近似

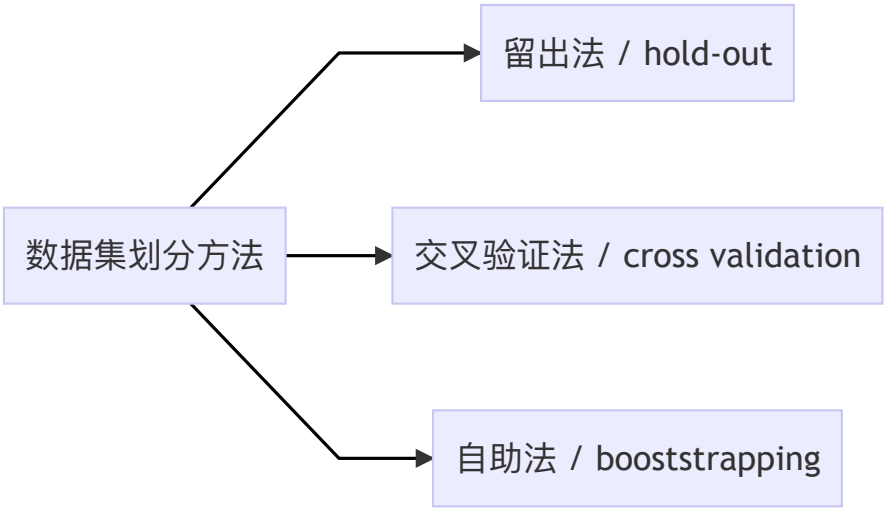
训练误差（`training error`）

亦称：**经验误差**（`empirical error`）

学习器在训练集上产生的误差

验证集（`verify set`）

划分方法



留出法（`hold-out`）

该方法直接将数据集 D 划分为两个互斥的集合，其中一个 集合作为训练集 S，另一个作为测试集 T， 即 $D = B \cup T, S \cap T = \varnothing$.在 S 上训 练出模型后，用 T 来评估其测试误差。

交叉验证法（`cross validation`）

又称 **k 折交叉验证**（`k-fold cross validation`）

先将数据集 D 划分为 k 个大小相似的互斥子集， 即

$$D = D_1 \cup D_2 \cup \ldots \cup D_k$$

其中

$$D_i \cap D_i = \varnothing, \quad (i \neq j)$$

每个子集 D_i 都 尽可 能保持数据分布的一致性，即从 D 中通过分层采样得到。然后，每次用 $k-1$ 个子集的并集作为训练集，余下的那个子集作为测试集。

自助法（`bootstrapping`）

给定包含 m 个样本的数据集 D ， 我们对它进行采样产生数据集 D' ：每次随机从 D 中挑选一个 样本 ，将其拷贝放入 D' ，然后再将该样本放回初始数据集 D 中，使得该样本在 下次采样时仍有可能被采到；这个过程重复执行 m 次后，我们就得到了包含 m 个样本的数据集 D' 。D' 用过训练集，D/D' 用作测试集

性能度量

均方误差（`mean square error`）

对于样例集 D，有

$$E(f;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(f\left(\boldsymbol{x}_i\right)-y_i\right)^2$$

更一般的可描述为

$$E(f;\mathcal{D})=\int_{\boldsymbol{x}\sim\mathcal{D}}(f(\boldsymbol{x})-y)^2p(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

错误率（`error rate`）

$$E(f;D)=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}\left(f\left(\boldsymbol{x}_i\right)\neq y_i\right)$$

更一般的有

$$E(f;\mathcal{D})=\int_{\boldsymbol{x}\sim\mathcal{D}}\mathbb{I}(f(\boldsymbol{x})\neq y)p(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

精度（`accuracy`）

$$\begin{aligned}\mathrm{acc}(f;D)&=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{I}\left(f\left(\boldsymbol{x}_i\right)=y_i\right)\\&=1-E(f;D)\end{aligned}$$

更一般的有

$$\begin{aligned}\operatorname{acc}(f;\mathcal{D}) &= \int_{\boldsymbol{x}\sim\mathcal{D}} \mathbb{I}(f(\boldsymbol{x})=y)p(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ &= 1-E(f;\mathcal{D})\end{aligned}$$

查准率、查全率和 F_1

真实情况	预测结果 正例	预测结果 反例
正例	TP(真正例)	FN(假反例)
反例	FP(假正例)	TN(真反例)

TP、FN、FP 和 TN 分别代表对应样例数，由此可知：$TP+FN+FP+TN$ 等于全部样例数

查准率和查全率是一对矛盾的度量。一般来说，查准率高时，查全率往往 偏低;而查全率高时，查准率往往偏低。

查准率（`precision`）

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

$$\text{macro}-P=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}P_i$$

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

查全率（`recall`）

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

$$\text{macro-}\ R=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}R_i$$

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

平衡点（`Balance-Event Point`）

其值为当 查全率 = 查准率 时 的取值，其值越大，说明学习器的性能越好。

$F1$

$$F1=\frac{2\times P\times R}{P+R}=\frac{2\times TP}{\text{样例总数}\ +TP-TN}$$

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

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

$F\beta$

$$F_\beta = \frac{(1+\beta^2) \times P \times R}{(\beta^2 \times P) + R}$$

其中 $\beta > 0$ 度量了查全率对查准率的相对重要性。

$\beta = 1$ 时退化为标准的 F_1；$\beta > 1$ 时查全率有更大影响；$\beta < 1$ 时查准率有更大影响。

真正率（`True Positive Rate`）

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

假正例率（`False Positive Rate`）

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

ROC 和 AUC

ROC 全称是"受试者工作特征" （Receiver Operating Characteristic）曲线

AUC 的估计如下

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

$$\ell_{\mathrm{rank}}=\frac{1}{m^+m^-}\sum_{\boldsymbol{x}^+\in D^+}\sum_{\boldsymbol{x}^-\in D^-}\left(\mathbb{I}\left(f\left(\boldsymbol{x}^+\right)<f\left(\boldsymbol{x}^-\right)\right)+\frac{1}{2}\mathbb{I}\left(f\left(\boldsymbol{x}^+\right)=f\left(\boldsymbol{x}^-\right)\right)\right)$$

$$\mathrm{AUC}+\ell_{\mathrm{rank}}=1$$

代价敏感错误率与代价曲线

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

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

正例概率代价

$$P(+)\cos t=\frac{p\times cost_{01}}{p\times cost_{01}+(1-p)\times cost_{10}}$$

其中 p 为样例为正的概率