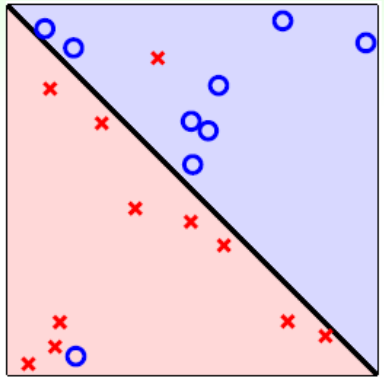
机器学习-第五章 机器学习实践

黄亮 副教授

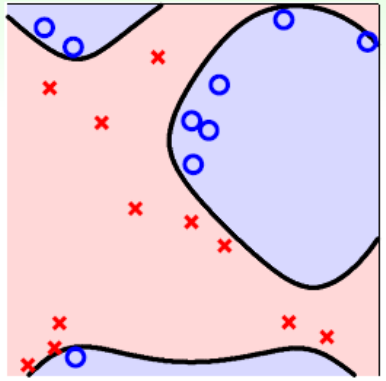
2023年10月

本章目录

选择模型



which one do you prefer? :-)



- 怎么选？肉眼观察？

1.数据集划分

01 数据集划分

02 评价指标

03 正则化、偏差和方差

1.数据集划分

训练集（Training Set）：帮助我们训练模型，简单的说就是通过训练集的数据让我们确定拟合曲线的参数。

验证集（Validation Set）：也叫做开发集（Dev Set），用来做模型选择（model selection），即做模型的最终优化及确定的，用来辅助我们的模型的构建，即训练超参数，可选；

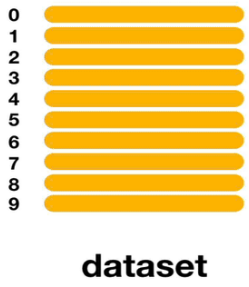
测试集（Test Set）： 为了测试已经训练好的模型的精确度。

三者划分：训练集、验证集、测试集
机器学习：60%，20%，20%；70%，10%，20%
深度学习：98%，1%，1% （假设百万条数据）

模型测试：交叉验证

evaluation

Dataset



交叉验证

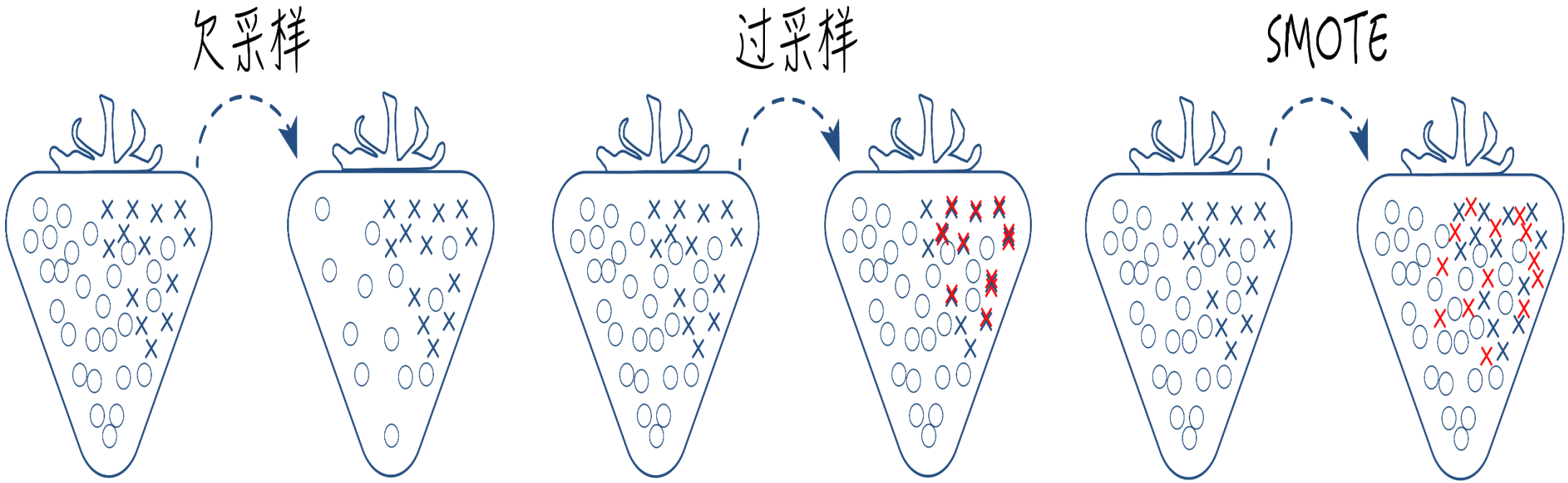
子集	数据集	验证错误	交叉验证错误
1		ϵ_1	
2		ϵ_2	$\frac{\epsilon_1 + \ldots + \epsilon_k}{k}$
⋮	⋮	⋮	
k		ϵ_k	

1. 使用训练集训练出*k*个模型 （k-fold）
2. 用*k*个模型分别对交叉验证集计算得出交叉验证误差（代价函数的值）

用于不同模型评估与选择

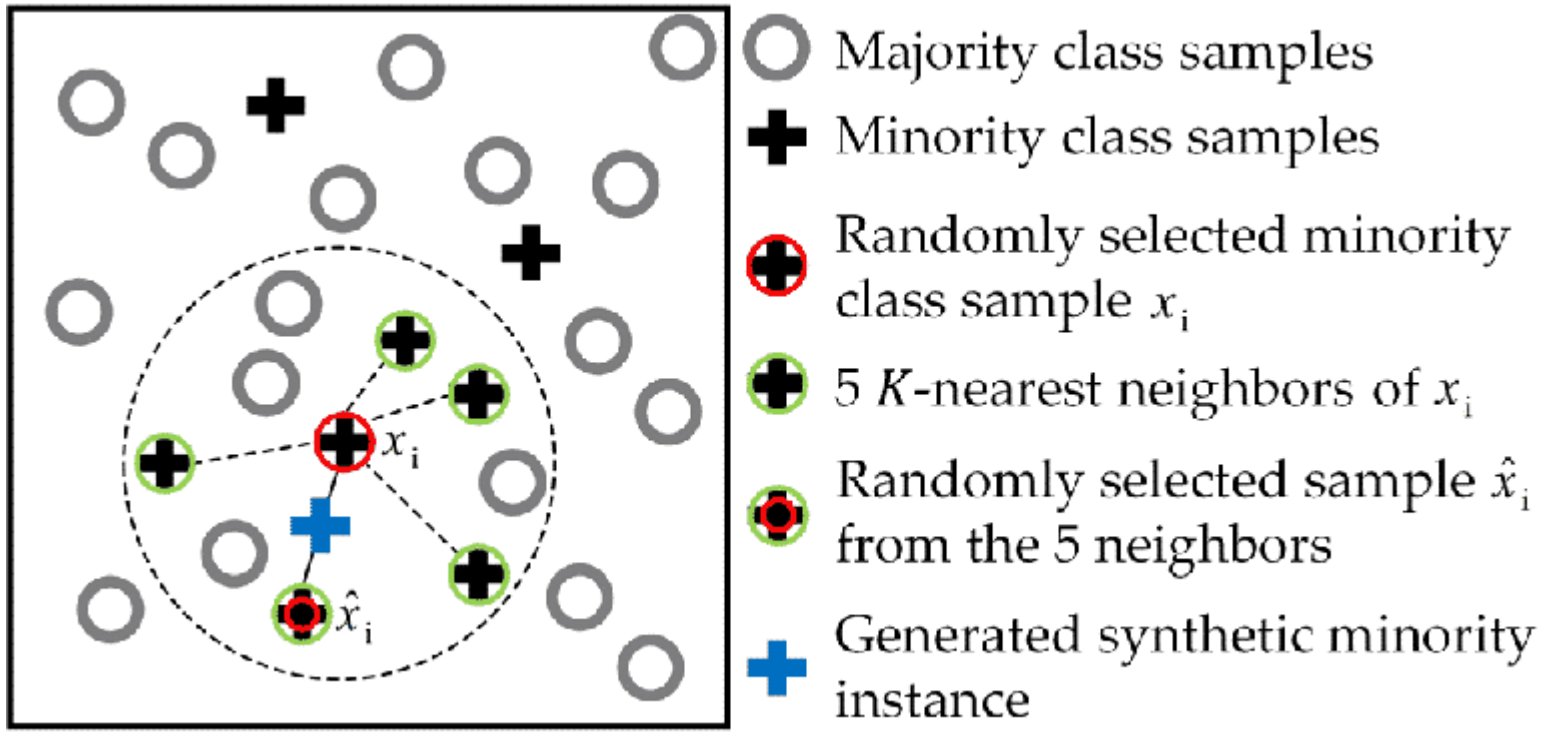
不平衡数据的处理

数据不平衡是指数据集中各类样本数量不均衡的情况.
常用不平衡处理方法有采样和代价敏感学习
采样欠采样、过采样和综合采样的方法.



SMOTE

- N. V. Chawla (2002) *Synthetic Minority Over-sampling TEchnique*



不平衡数据的处理

代价敏感学习

代价敏感学习是指为不同类别的样本提供不同的权重，从而让机器学习模型进行学习的一种方法

比如风控或者入侵检测，这两类任务都具有严重的数据不平衡问题，可以在算法学习的时候，为少类样本设置更高的学习权重，从而让算法更加专注于少类样本的分类情况，提高对少类样本分类的查全率，但是也会将很多多类样本分类为少类样本，降低少类样本分类的查准率。

2.评价指标

01 数据集划分

02 评价指标

03 正则化、偏差和方差

评价指标

1. **正确肯定（True Positive,TP）：** 预测为真，实际为真
2. **正确否定（True Negative,TN）：** 预测为假，实际为假
3. **错误肯定（False Positive,FP）：** 预测为真，实际为假
4. **错误否定（False Negative,FN）：** 预测为假，实际为真

精确率（Precision）：$Precision = \frac{TP}{TP+FP}$

召回率（Recall）：$Recall = \frac{TP}{TP+FN}$

F-measure：$F - measure = \frac{2 \times Precision \times Recall}{Precision + Recall}$

准确率（Accuracy）：$Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$

混淆矩阵（confusion_matrix）

		预测值	
		Positive	**Negtive**
实际值	Positive	TP	**FN**
	Negtive	**FP**	**TN**

评价指标

有100张照片，其中，猫的照片有60张，狗的照片是40张。

输入这100张照片进行二分类识别，找出这100张照片中的所有的猫。

正例（Positives）：识别对的

负例（Negatives）：识别错的

识别结果的混淆矩阵

		预测值	
		Positive	Negtive
实际值	Positive	TP=40	FN=20
	Negtive	FP=10	TN=30

评价指标

正确率（Accuracy）=(TP+ TN)/S
TP+ TN =70，S= 100，则正确率为：

Accuracy =70/100=0.7

精度（Precision）=TP/(TP+ FP)
TP=40，TP+ FP=50。

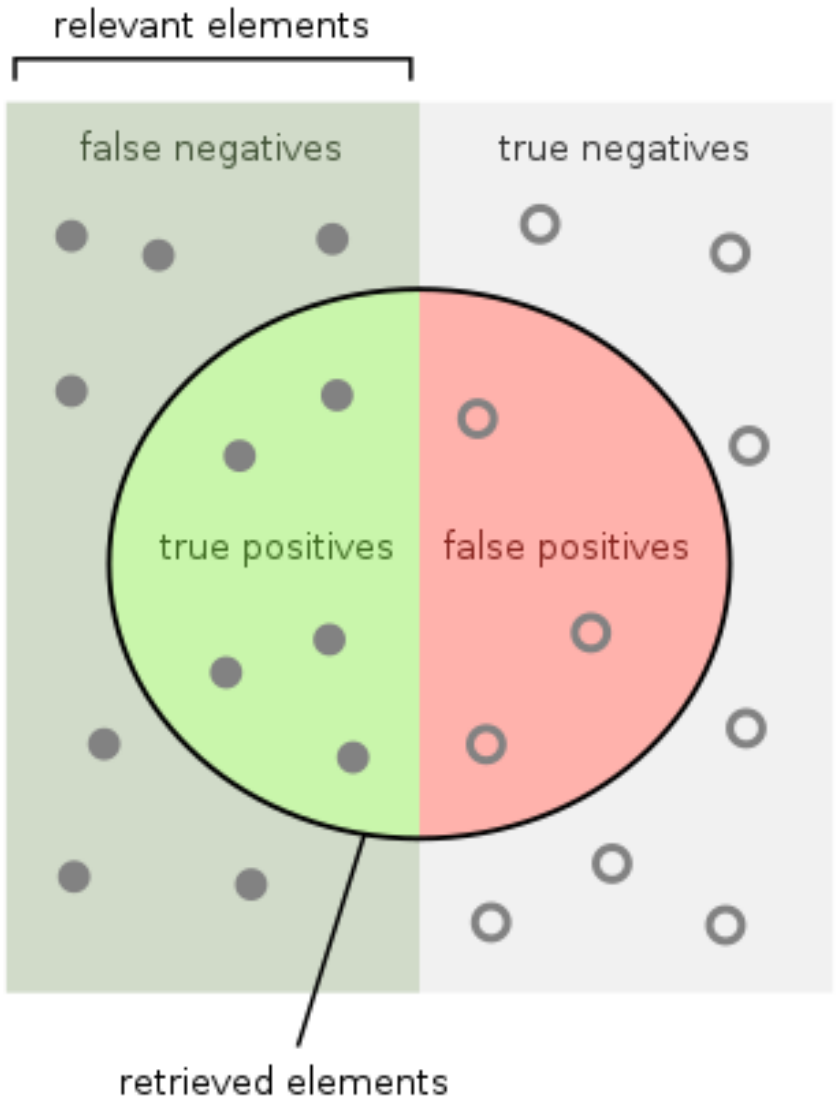
Precision =40/50=0.8

召回率（Recall）=TP/(TP+ FN)
TP=40，TP+FN =60。则召回率为：

Recall =40/60=0.67

项目	符号	猫狗的例子
识别出的正例	TP+FP	40+10=50
识别出的负例	TN+FN	30+20=50
总识别样本数	TP+FP+TN+FN	50+50=100
识别对了的正例与负例	真正例+真负例=TP+TN	40+30=70
识别错了的正例与负例	伪正例+伪负例=FP+FN	10+20=30
实际总正例数量	真正例+伪负例=TP+FN	40+20=60
实际总负例数量	真负例+伪正例=TN+FP	30+10=40

Precision vs. Recall



How many retrieved items are relevant?

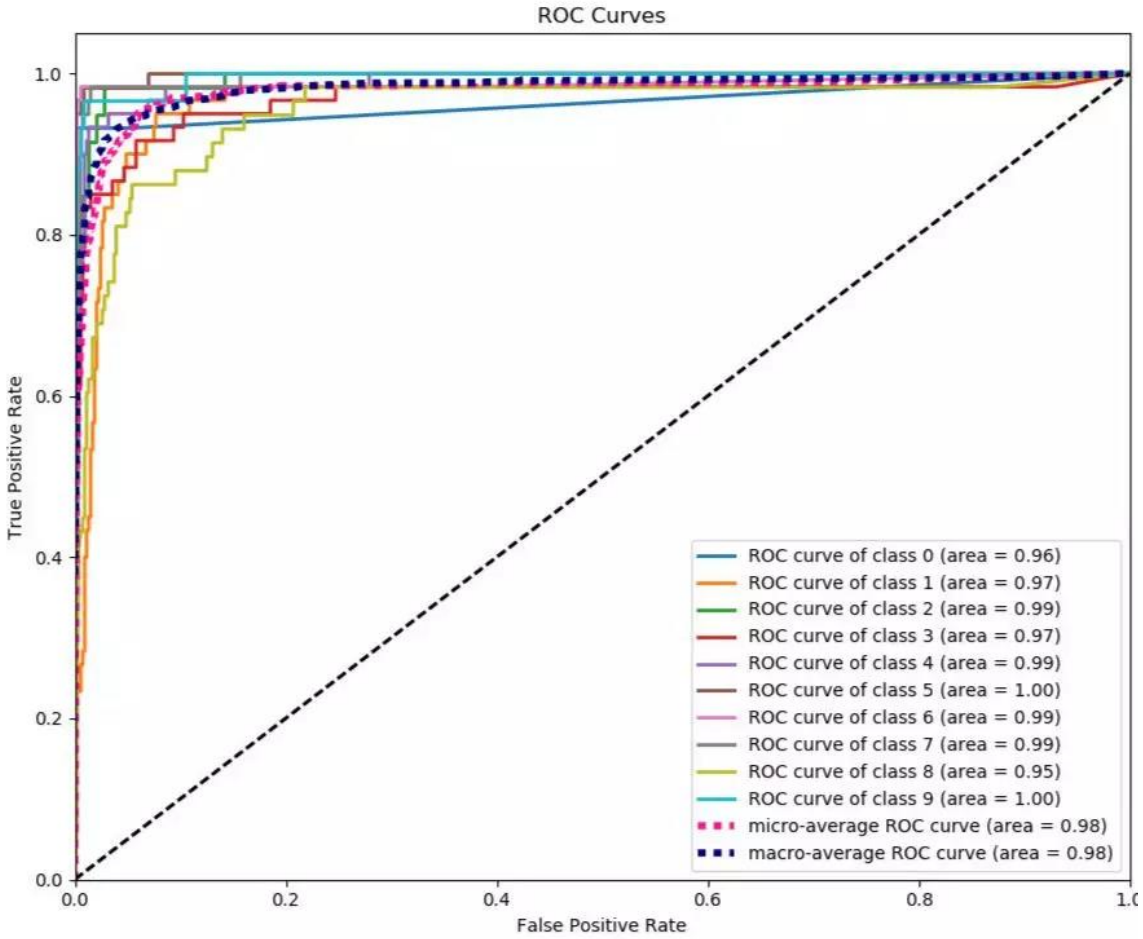
$$\text{Precision} = \frac{\text{true positives}}{\text{retrieved elements}}$$

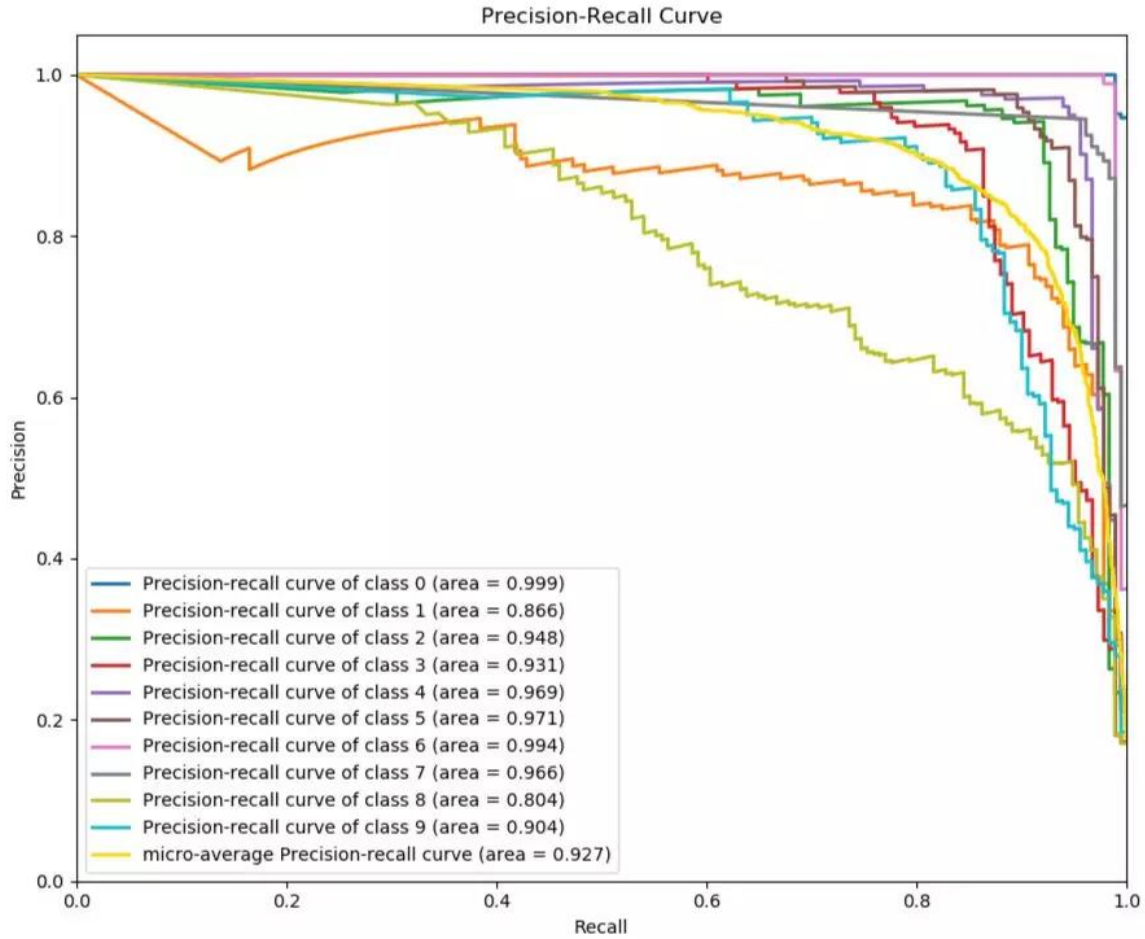
How many relevant items are retrieved?

$$\text{Recall} = \frac{\text{true positives}}{\text{relevant elements}}$$

评价指标

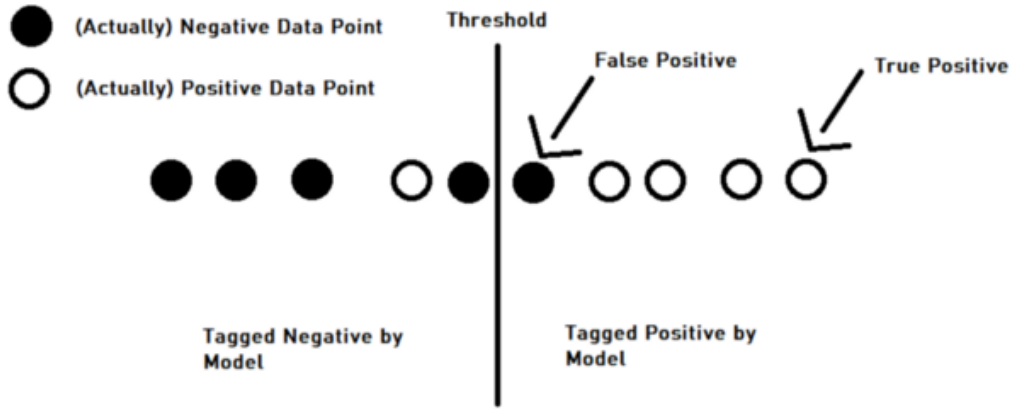
ROC和PR曲线



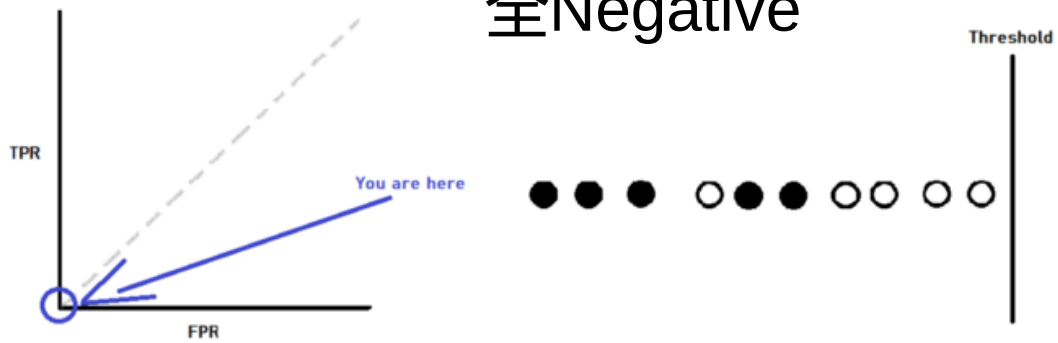


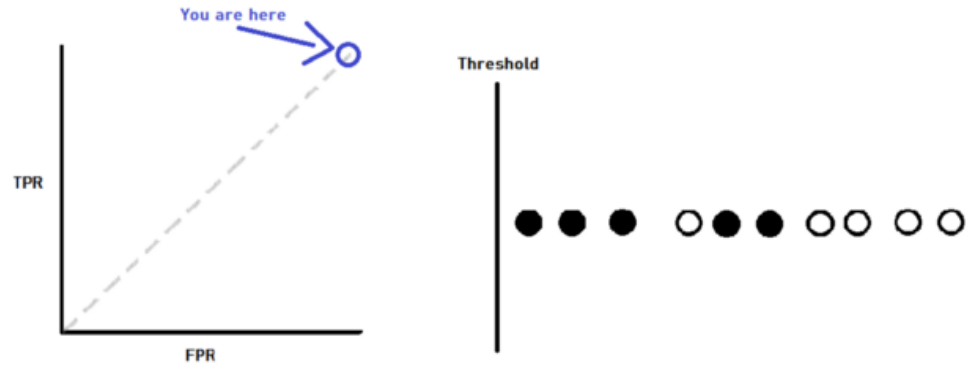
评价指标 ROC

ROC曲线



全Negative





全Positive

Friedman 检验图

- 横轴为平均序值，每个算法圆点为其平均序值，线段为临界阈值的大小
  - 若两个算法有交叠 (A 和 B)，则说明没有显著差别;
  - 否则有显著差别 (A 和 C)，算法 A 显著优于算法 C

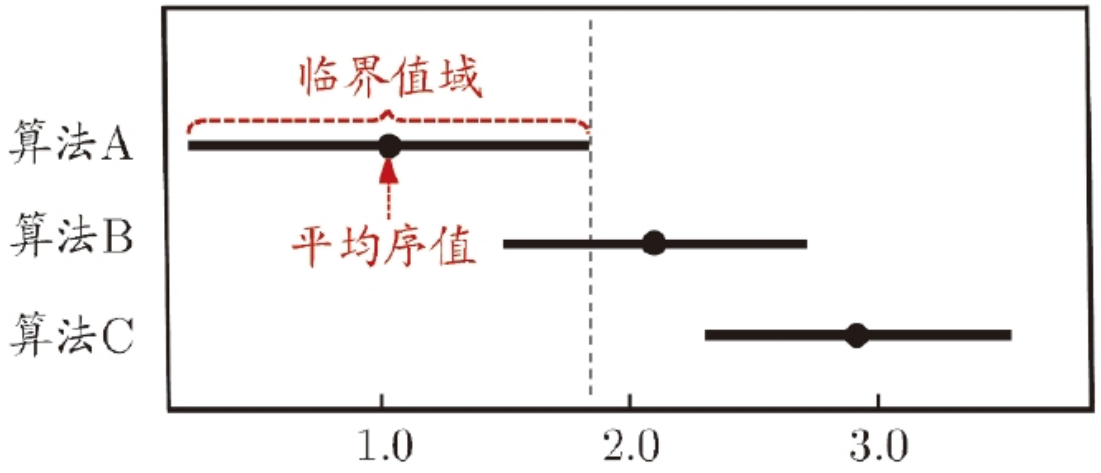


图 2.8 Friedman 检验图

3.正则化、偏差和方差

01 数据集划分

02 评价指标

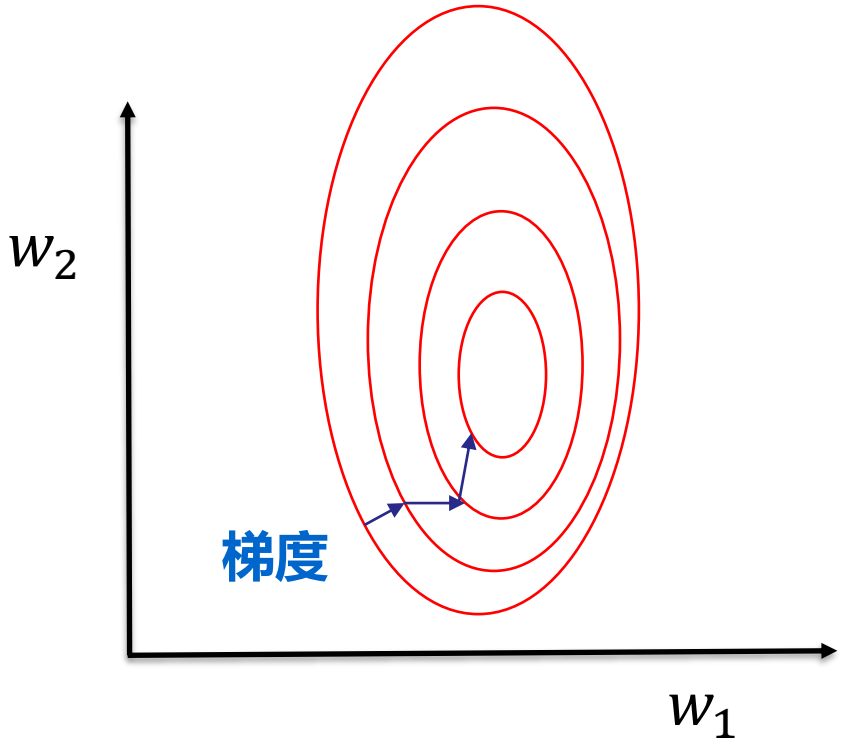
03 正则化、偏差和方差

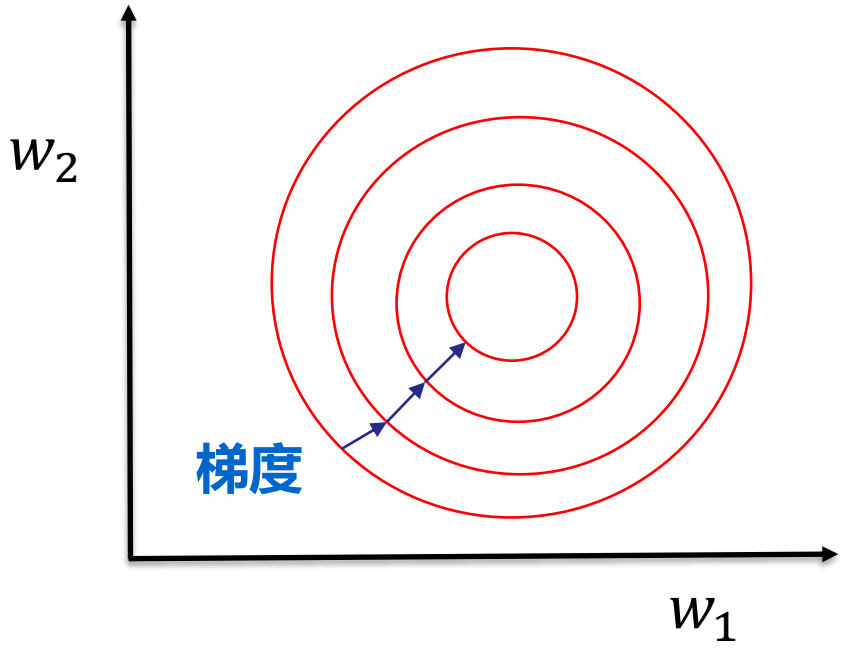
3.正则化、偏差和方差

为什么要标准化/归一化?

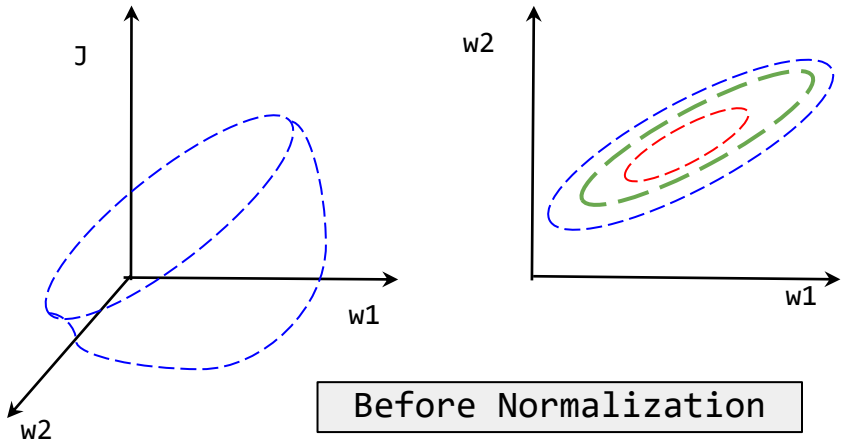
提升模型精度：不同维度之间的特征在数值上有一定比较性，可以大大提高分类器的准确性。

加速模型收敛：最优解的寻优过程明显会变得平缓，更容易正确的收敛到最优解。

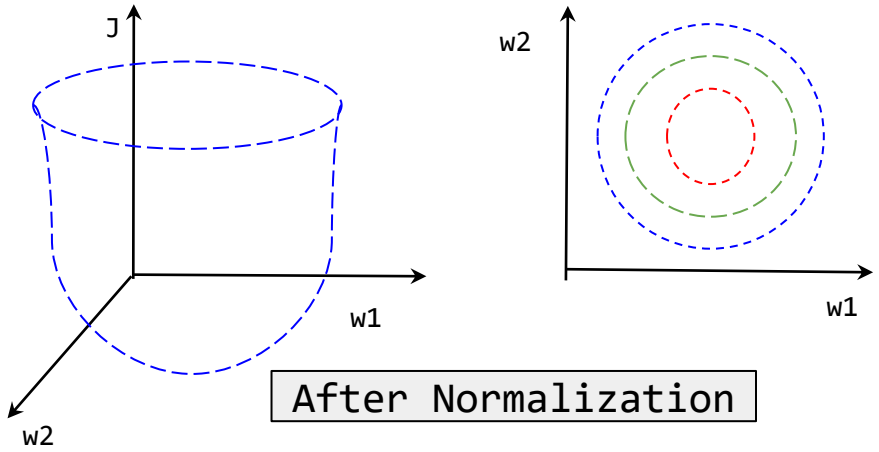




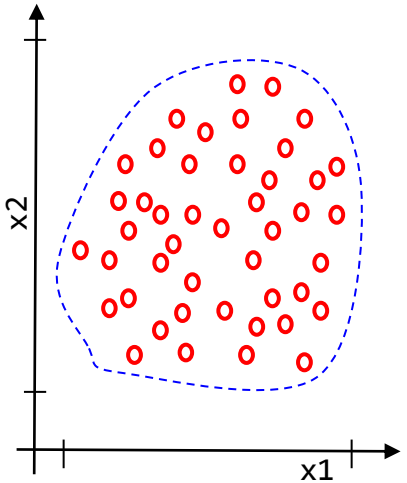
3.正则化、偏差和方差

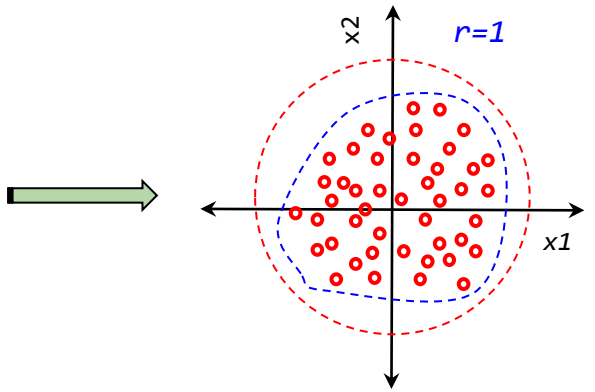


Before Normalization



After Normalization





Normalization

3.正则化、偏差和方差

归一化（最大 - 最小规范化）

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

将数据映射到[0,1]区间

数据归一化的目的是使得各特征对目标变量的影响一致，会将特征数据进行伸缩变化，所以数据归一化是会改变特征数据分布的。

Z-Score标准化

$$x^* = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)})^2$$

$$\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}$$

处理后的数据均值为0，方差为1

数据标准化为了不同特征之间具备可比性，经过标准化变换之后的特征数据分布没有发生改变。

就是当数据特征取值范围或单位差异较大时，最好是做一下标准化处理。

3.正则化、偏差和方差

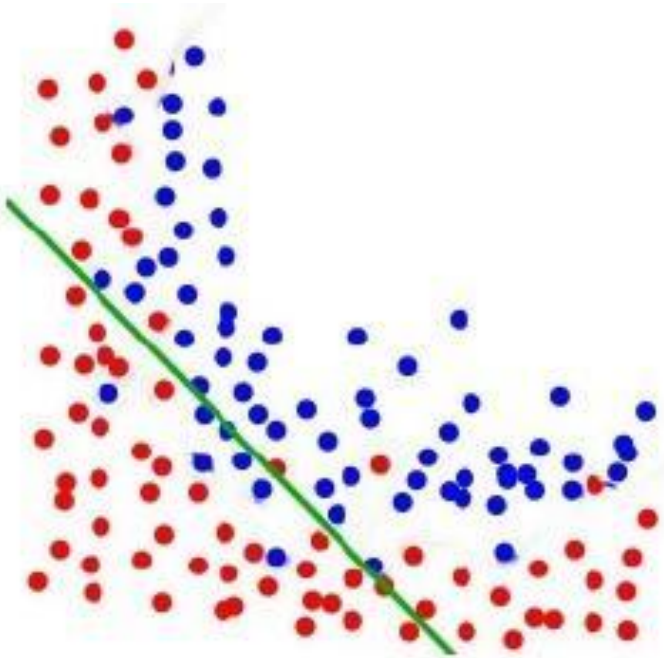
需要做数据归一化/标准化

线性模型，如基于距离度量的模型包括KNN(K近邻)、K-means聚类、感知机和SVM、神经网络。另外，线性回归类的几个模型一般情况下也是需要做数据归一化/标准化处理的。

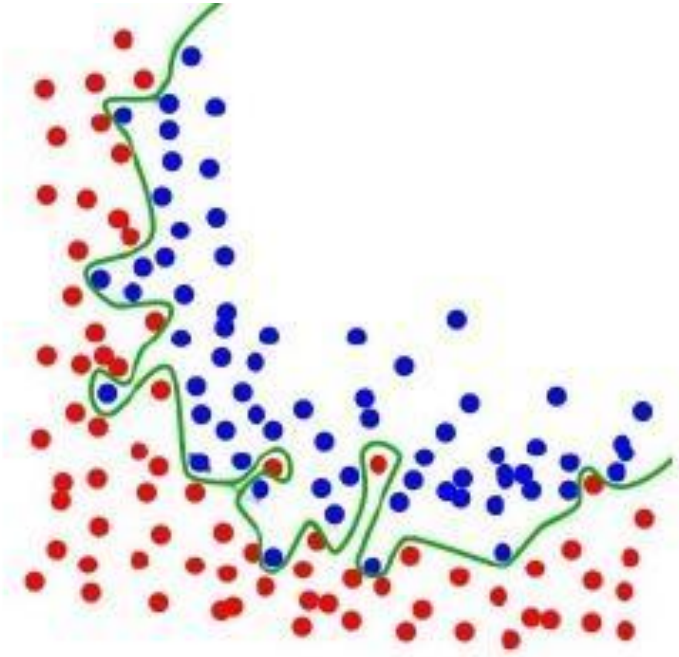
不需要做数据归一化/标准化

决策树、基于决策树的Boosting和Bagging等集成学习模型对于特征取值大小并不敏感，如随机森林、XGBoost、LightGBM等树模型，以及朴素贝叶斯，以上这些模型一般不需要做数据归一化/标准化处理。

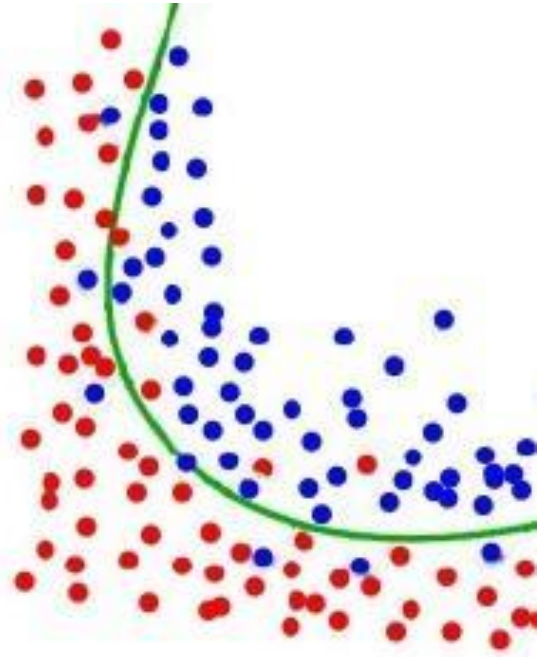
过拟合和欠拟合



欠拟合



过拟合



正合适

过拟合的处理

1.获得更多的训练数据

使用更多的训练数据是解决过拟合问题最有效的手段，因为更多的样本能够让模型学习到更多更有效的特征，减小噪声的影响。

2.**降维**

即丢弃一些不能帮助我们正确预测的特征。可以是手工选择保留哪些特征，或者使用一些模型选择的算法来帮忙（例如PCA）。

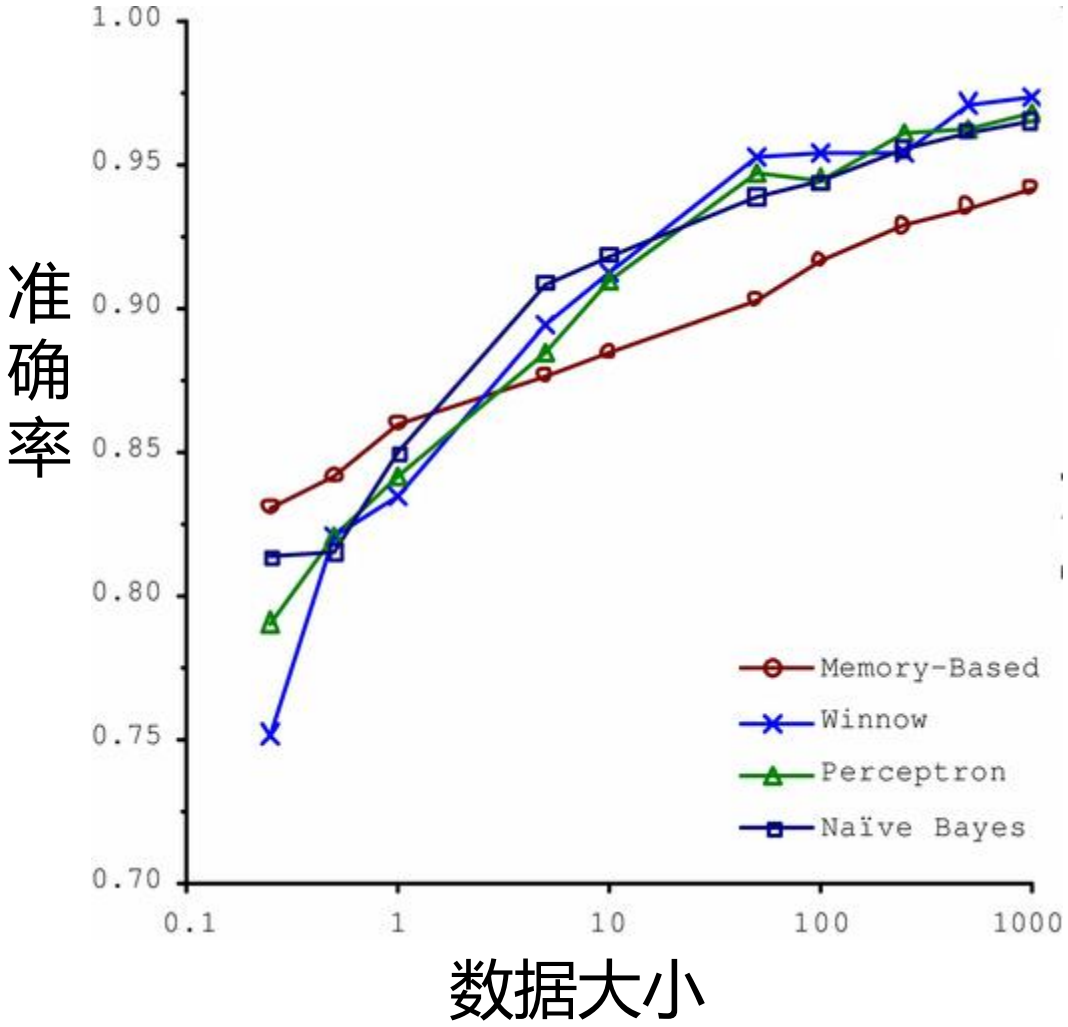
3.**正则化**

正则化(regularization)的技术，保留所有的特征，但是减少参数的大小（magnitude），它可以改善或者减少过拟合问题。

4.**集成学习方法**

集成学习是把多个模型集成在一起，来降低单一模型的过拟合风险。

数据决定一切

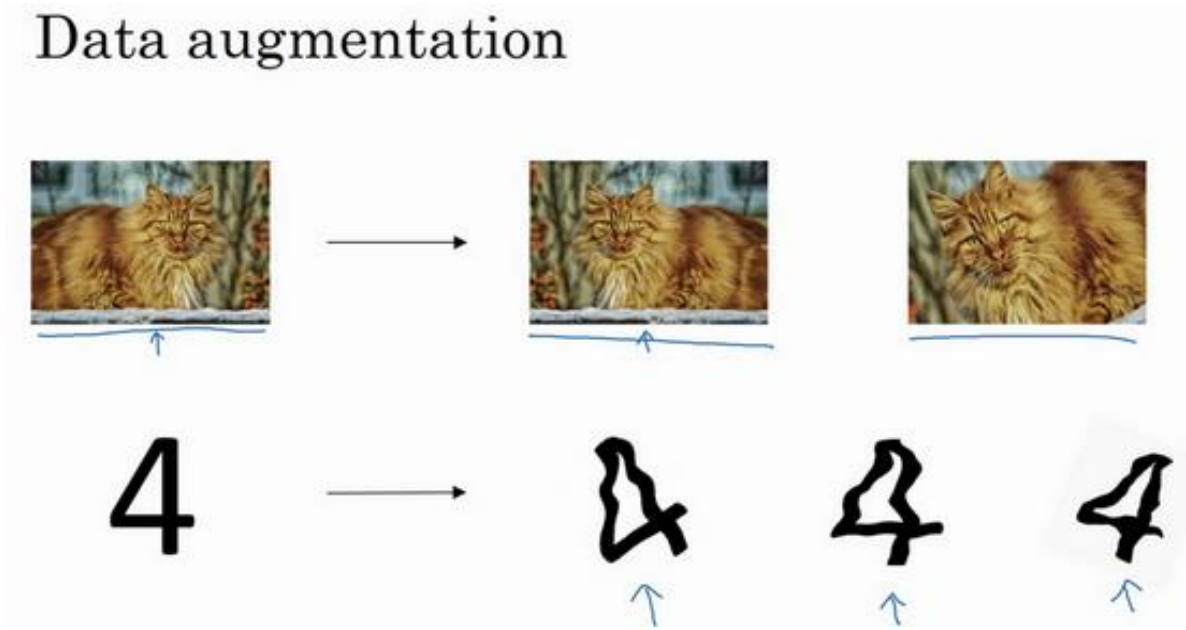


通过这张图可以看出，各种不同算法在输入的数据量达到一定级数后，都有相近的高准确度。于是诞生了机器学习界的名言：

成功的机器学习应用不是拥有最好的算法，而是拥有最多的数据！

数据增强

数据增强：随意翻转和裁剪、扭曲变形图片



数据增强：无线电磁信号

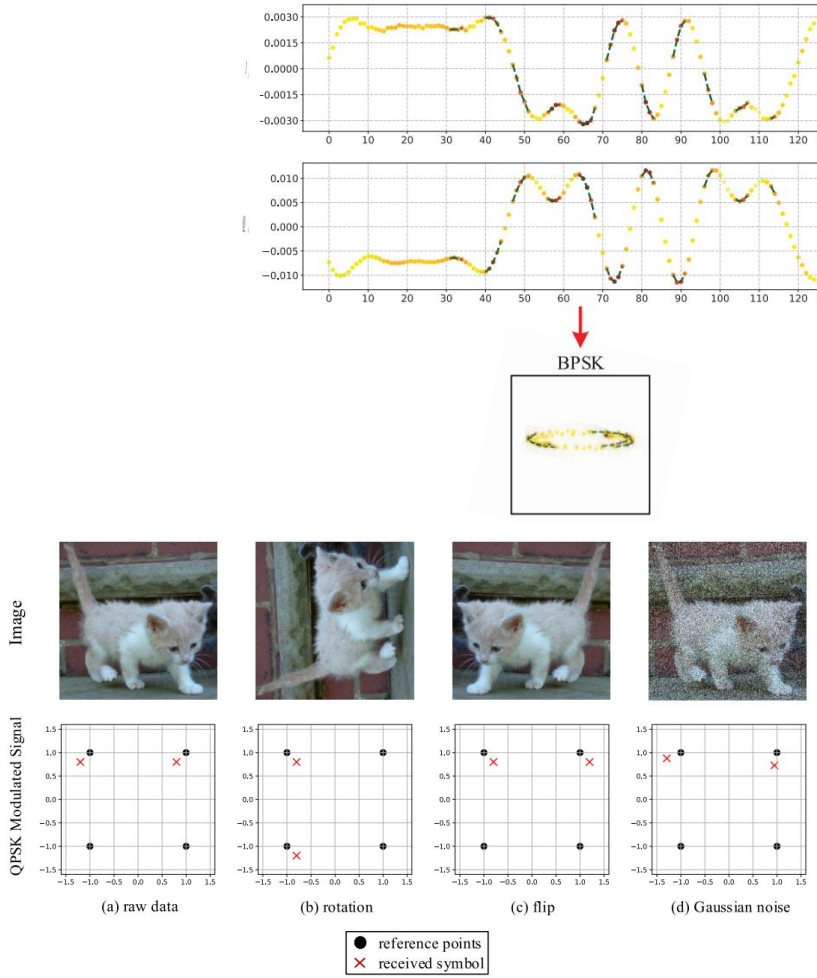


FIGURE 1. Different data augmentation methods for both image and modulated signal: (a) raw data, (b) rotation, (c) flip, (d) Gaussian noise.

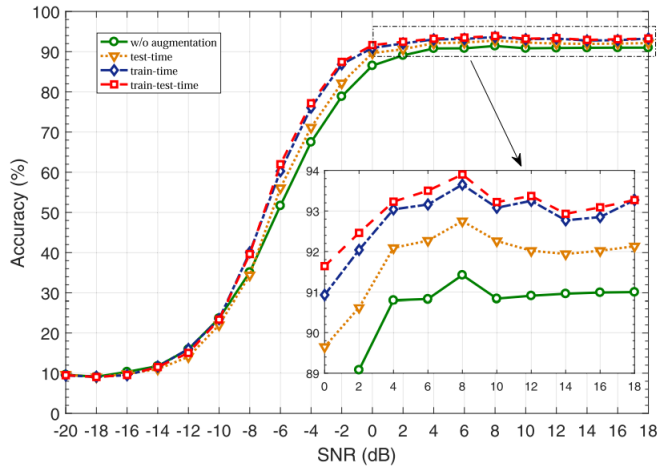


FIGURE 5. Classification accuracy under different augmentation times.

欠拟合的处理

1.**添加新特征**

当特征不足或者现有特征与样本标签的相关性不强时，模型容易出现欠拟合。通过挖掘组合特征等新的特征，往往能够取得更好的效果。

2.**增加模型复杂度**

简单模型的学习能力较差，通过增加模型的复杂度可以使模型拥有更强的拟合能力。例如，在线性模型中添加高次项，在神经网络模型中增加网络层数或神经元个数等。

3.**减小正则化系数**

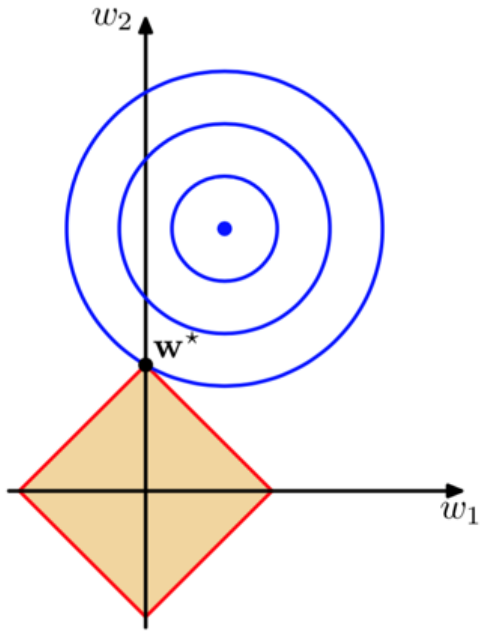
正则化是用来防止过拟合的，但当模型出现欠拟合现象时，则需要有针对性地减小正则化系数。

正则化

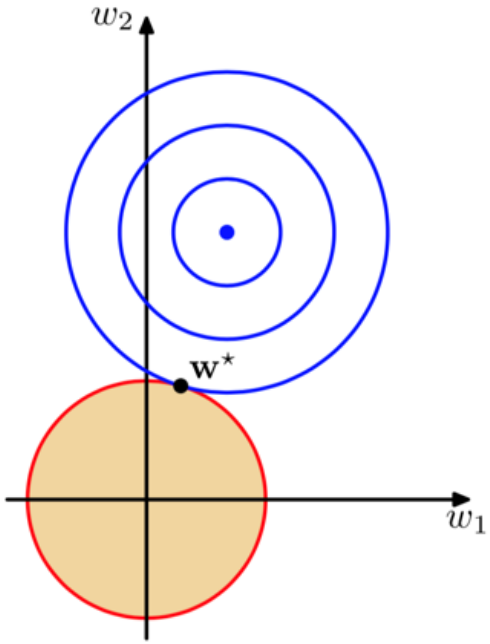
L_1正则化：$J(w) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L\left(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}\right) + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n} |w_j|$，

L_2正则化：$J(w) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L\left(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}\right) + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n} w_j^2$

正则化



L_1正则化是指在损失函数中加入权值向量w的绝对值之和，L_1的功能是使权重稀疏



在损失函数中加入权值向量w的平方和，L_2的功能是使权重平滑。

L_1正则化可以产生稀疏模型

L_2正则化可以防止过拟合

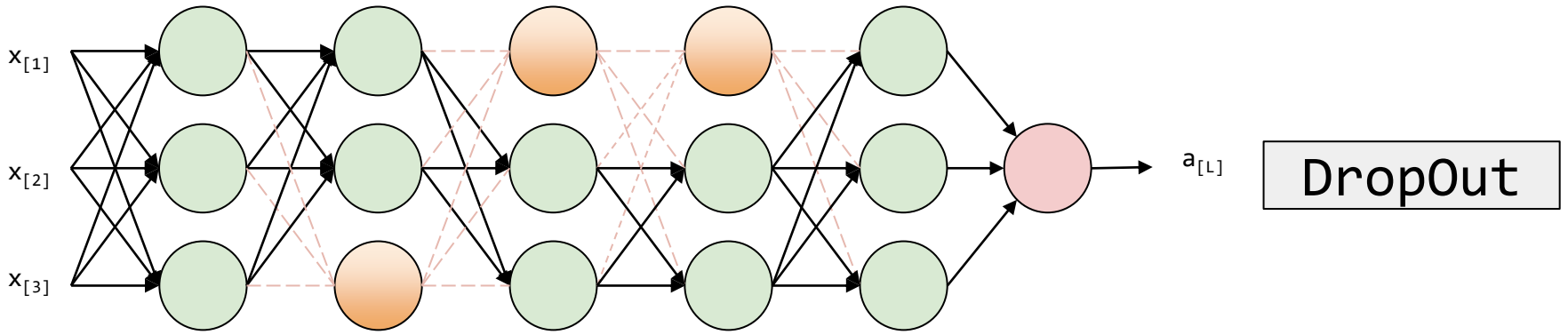
图上面中的蓝色轮廓线是没有正则化损失函数的等高线，中心的蓝色点为最优解，左图、右图分别为L_1、L_2正则化给出的限制。

可以看到在正则化的限制之下，L_2正则化给出的最优解w*是使解更加靠近原点,也就是说L_2正则化能降低参数范数的总和。

L_1正则化给出的最优解w*是使解更加靠近某些轴,而其它的轴则为0,所以L_1正则化能使得到的参数稀疏化。

正则化

Dropout正则化



Dropout的功能类似于$L2$正则化，与$L2$正则化不同的是，被应用的方式不同，**dropout**也会有所不同，甚至更适用于不同的输入范围

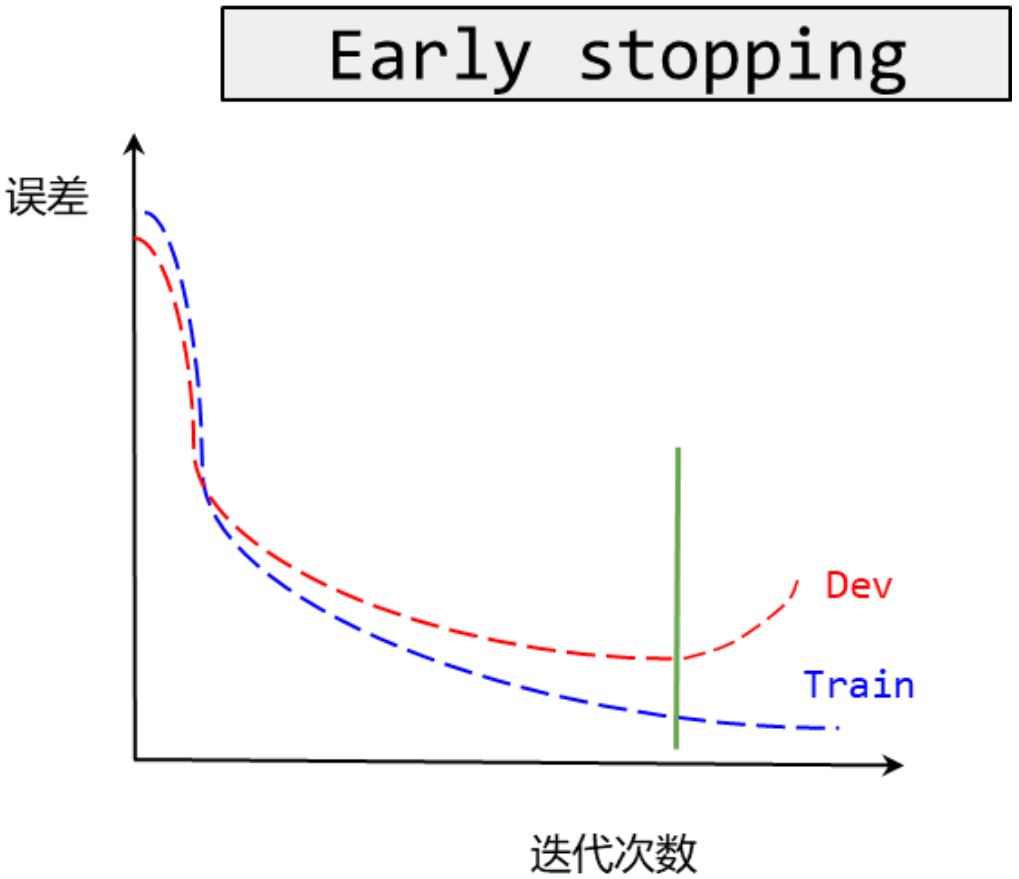
keep-prob=1(没有dropout)　keep-prob=0.5(常用取值，保留一半神经元)

在训练阶段使用，在测试阶段不使用！

正则化

Early stopping代表提早停止训练神经网络

Early stopping的优点是，只运行一次梯度下降，你可以找出w的较小值，中间值和较大值，而无需尝试$L2$正则化超级参数λ的很多值。



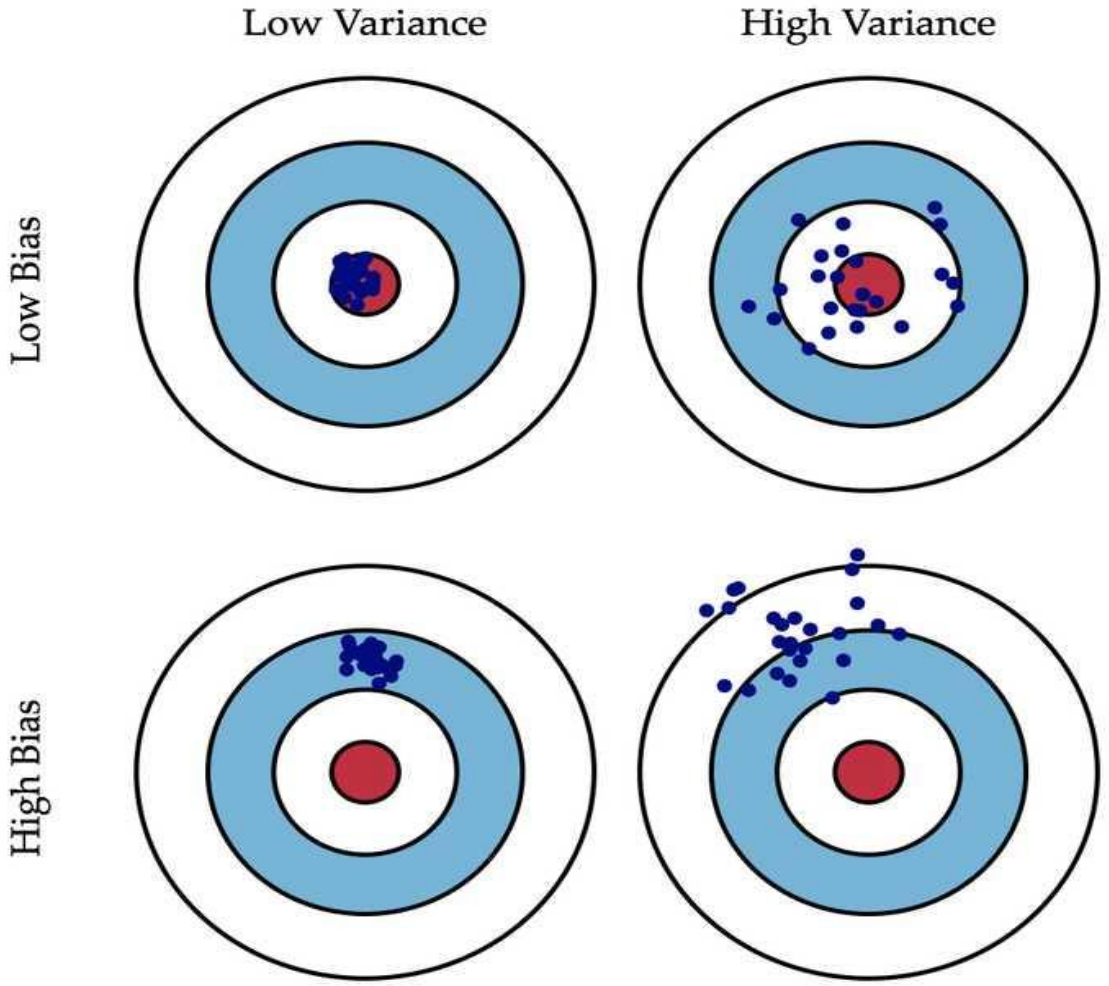
偏差和方差

方差Variance：

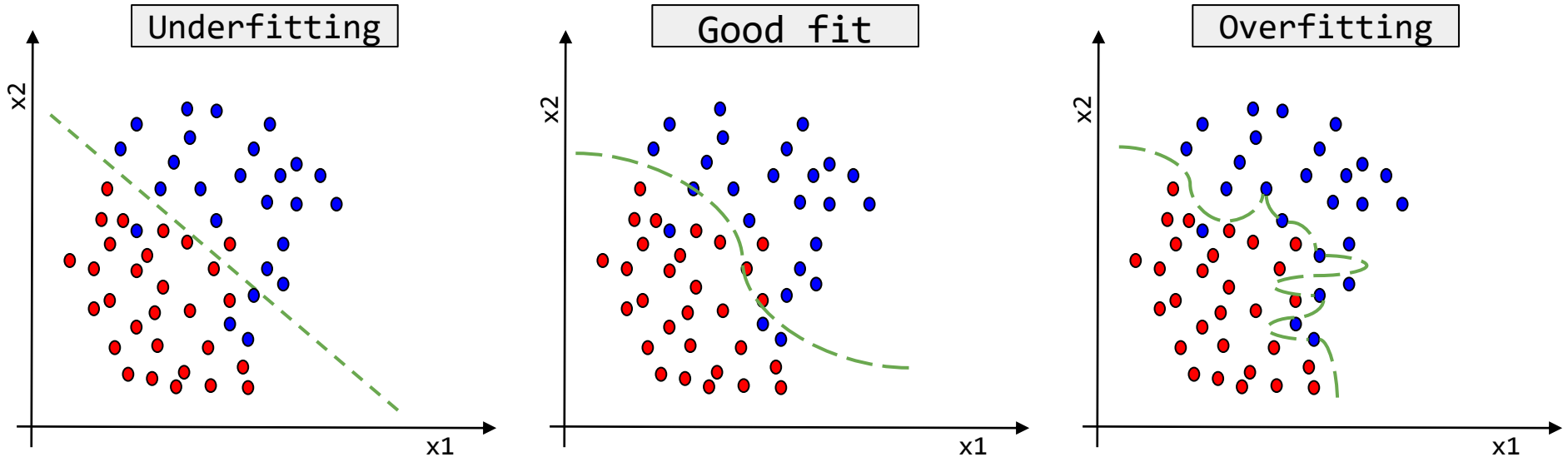
描述的是预测值的变化范围，离散程度，也就是离其期望值的距离。方差越大，数据的分布越分散，如右图右列所示。

偏差Bias：

描述的是预测值（估计值）的期望与真实值之间的差距。偏差越大，越偏离真实数据，如右图第二行所示。



偏差和方差



训练集误差和交叉验证集误差近似时：偏差/欠拟合

交叉验证集误差远大于训练集误差时：方差/过拟合

偏差-方差分解

- 对回归任务，泛化误差可通过“偏差-方差分解”拆解为：

$$E(f;D) = bias^2(\boldsymbol{x}) + var(\boldsymbol{x}) + \varepsilon^2$$

期望输出与真实输出的差别

$$bias^2(\boldsymbol{x}) = \left(\bar{f}(\boldsymbol{x}) - y\right)^2$$

同样大小的训练集的变动，所导致的性能变化

$$var(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}_D\left[\left(f(\boldsymbol{x};D) - \bar{f}(\boldsymbol{x})\right)^2\right]$$

$$\varepsilon^2 = \mathbb{E}_D\left[(y_D - y)^2\right]$$

训练样本的标记与真实标记有区别

泛化性能是由学习算法的能力、数据的充分性以及学习任务本身的难度共同决定

偏差-方差窘境 bias-variance dilemma

- 一般而言，偏差与方差存在冲突：
  - 训练不足时，学习器拟合能力不强，偏差主导
  - 随着训练程度加深，学习器拟合能力逐渐增强，方差逐渐主导
  - 训练充足后，学习器的拟合能力很强，方差主导

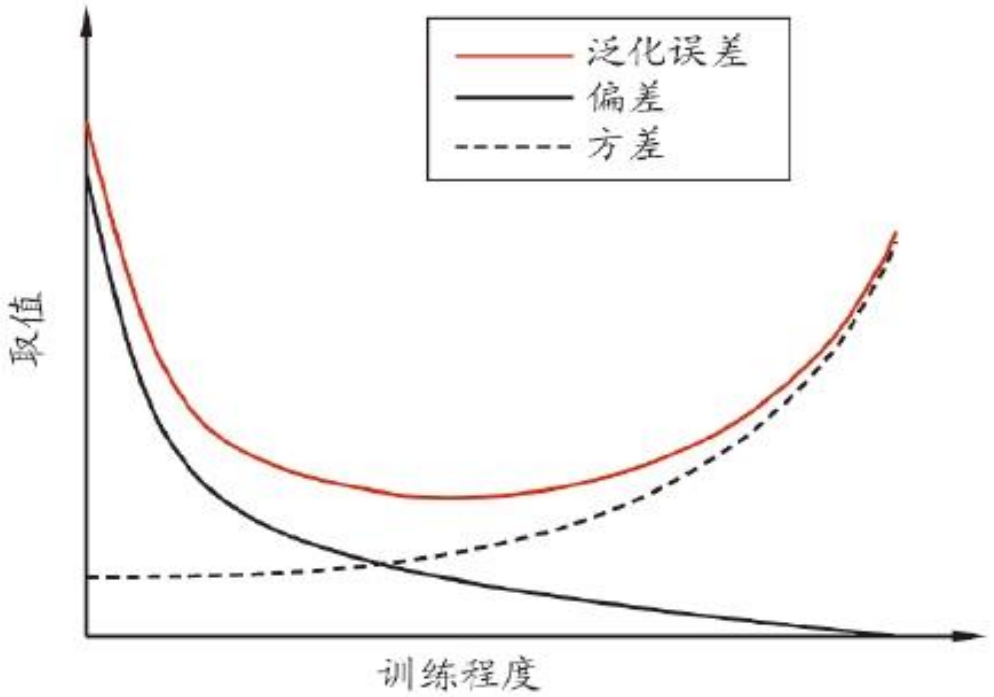
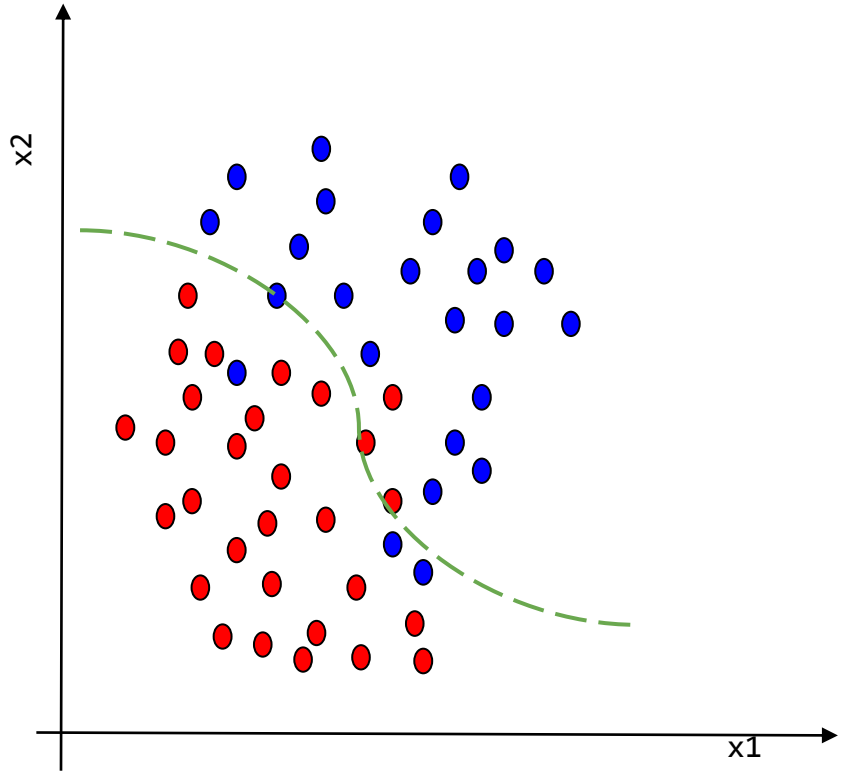


图 2.9 泛化误差与偏差、方差的关系示意图

偏差和方差

1. 获得更多的训练实例——解决高方差
2. 尝试减少特征的数量——解决高方差
3. 尝试获得更多的特征——解决高偏差
4. 尝试增加多项式特征——解决高偏差
5. 尝试减少正则化程度λ——解决高偏差
6. 尝试增加正则化程度λ——解决高方差



参考文献

1. IAN GOODFELLOW等，《深度学习》，人民邮电出版社，2017
2. Andrew Ng，http://www.deeplearning.ai
3. 谢文睿等，《机器学习公式详解》，人民邮电出版社，2021
4. 周志华，《机器学习》
5. 林轩田，《机器学习基石》


谢 谢!