数据科学导论

Introduction to Data Science

第四章 数据挖掘基础

黄振亚，陈恩红
Email: huangzhy@ustc.edu.cn, cheneh@ustc.edu.cn

课程主页：
http://staff.ustc.edu.cn/~huangzhy/Course/DS2024.html

分类与预测

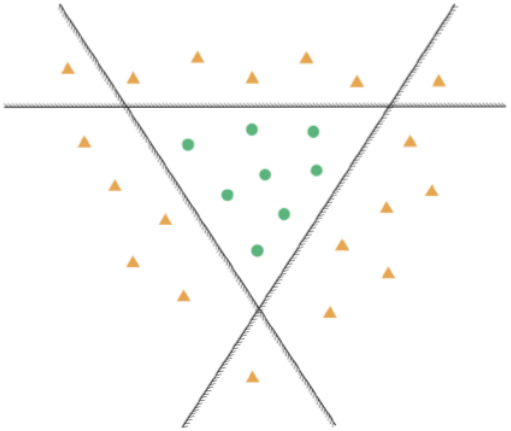
- 有监督学习：分类与预测
- 常用方法
  - 规则方法
  - 决策树
  - 最近邻方法
  - 感知机，支持向量机（SVM）
  - 集成方法
- 分类的评价指标
- 类不平衡问题

分类：集成学习

- 分类——集成学习
  - 思想：集成多个模型的能力，得到比单一模型更好的效果
  - 为什么能够提升效果？
    - 增强模型的表达能力
      - 单个感知机无法正确分类数据能用三个感知机完成
    - 降低误差
      - 假设单个分类器误差p， 有T个独立的分类器采用投票进行预测，得到集成模型 H
      - 集成分类器误差为

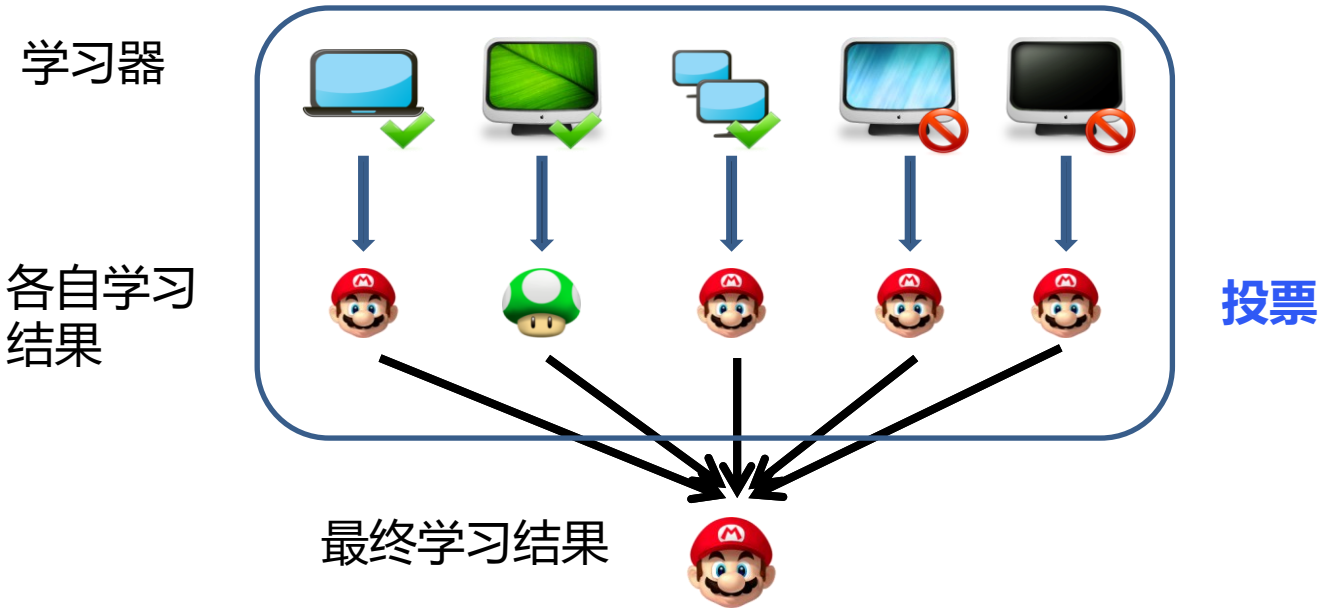
$$Error_H = \sum_{k \le \frac{T}{2}} C_T^k \cdot p^{T-k} \cdot (1-p)^k$$

      - $T = 5, p = 0.1$时， $Error_H < 0.01$



分类：集成学习

- 分类——集成学习
  - 集成过程



  - 此类方法经常用在数据挖掘竞赛中(如KDD CUP，CCF-BDCI)
    - KDD Cup2021 MAG240M-LSC赛道第一名集成了30个模型
    - KDD Cup2021 WikiKG90M-LSC赛道第三名集成了15个模型

分类：集成学习

- 常见集成学习方法
  - Bagging（Bootstrap Aggregating）
    - 对样本或特征随机取样，学习产生多个独立的模型，然后平均所有模型的预测值
    - 主要减小方差
    - 典型代表：随机森林
  - Boosting
    - 串行训练多个模型，后面的模型是基于前面模型的训练结果（误差）
    - 主要减小偏差
    - 典型代表： AdaBoost

随机森林

- 集成学习算法：随机森林
  - 最典型的Bagging算法：算法思想
  - 随机：每棵树，保证各棵树之间的独立性，采用两到三层的随机性
    - 随机有放回的抽取样本作为训练集
    - 随机选取m个特征作为树节点的划分特征
    - 随机选择特征取值进行分割 (不遍历特征所有取值)

    样本和特征尽可能不同
  - 森林：多颗决策树集成
    - 假设使用三棵决策树组合成随机森林，每各不相同且预测结果相互独立，每棵树的预测错误率为 40%。那么两棵树以及上预测错误的概率下降为：三三棵全部错误+两棵树错误一个正确$= 0.4^3 + 3 * 0.4^2 * (1 - 0.4) = 0.352$

sklearn.ensemble.RandomForestClassifier

AdaBoost

- 集成学习算法：AdaBoost
  - 最有代表性的Boosting算法
  - 算法思想：利用同一训练样本的不同加权版本，训练一组弱分类器，然后把这些弱分类器以加权的形式集成起来，形成一个最终的强分类器：
    - 在每一步迭代过程中，会给训练集中的样本赋予一个权重$w_1, w_2 \ldots, w_n$
    - 样本的初始权重都一样，设置为$\frac{1}{n}$；
    - 在每一步迭代过程中，
      - 被当前弱分类器分错的样本的权重会相应得到提高
      - 被当前弱分类器分对的样本的权重则会相应降低；
    - 弱分类器的权重则根据当前分类器的加权错误率来确定。

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
```

分类与预测

- 有监督学习：分类与预测
- 常用方法
  - 规则方法
  - 决策树
  - 最近邻方法
  - 支持向量机（SVM）
  - 集成方法
- 分类的评价指标

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？——以二分类为例
  - 基本概念
    - T/F：True or False，表示二分类结果的正确与否
    - P/N：Positive or Negative，表示算法对样本的判断
  - 四种简写的含义：
    - 真正(True Positive,TP): 样本为正例，预测为正，(正确)
    - 假负(False Negative, FN): 样本为正例，预测为负，(错误)
    - 假正(False Positive, FP): 样本为负例，预测为正，(错误)
    - 真负(True Negative, TP): 样本为负例，预测为负，(正确)

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？——指标Accuracy
  - 通常用混淆矩阵 表示：TP、 FN、 FP、 TP

		PREDICTED（预测） CLASS	
		Class=Yes	Class=No
ACTUAL（真实）CLASS	Class=Yes	a (TP)	b (FN)
	Class=No	c (FP)	d (TN)

- 评价指标1： $\text{Accuracy} = \frac{a+d}{a+b+c+d} = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？——指标Accuracy
  - 举例：假设一共有200个测试数据样本，以下是使用分类模型得到的分类结果，请问*Accuracy*是多少？

		PREDICTED（预测） CLASS	
		Class=Yes	Class=No
ACTUAL（真实）CLASS	Class=Yes	60 (TP)	40 (FN)
	Class=No	20 (FP)	80 (TN)

$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} = \frac{60 + 80}{60 + 80 + 20 + 40} = 0.7$$

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？— Accuracy的局限性
  - 样本不均衡时，评估结果可能不合理
  - 例子：考虑2分类问题
    - 假设10000个数据样本中，类别0的样本数为 9990，类别1的样本数为 10
    - 假设模型将所有样本均预测为0
    - 计算$\text{Accuracy} = 9990/10000 = 99.9\ \%$

Accuracy很高，表明模型很好?

结论：模型不好

原因：10个正例均预测错误

分析：这个例子中，显然我们关注类别为1的样本，但Accuracy被类别为0的样本影响了

Count	PREDICTED CLASS		
ACTUAL CLASS		Class=Yes	Class=No
	Class=Yes	a	b
	Class=No	c	d

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？——分类问题的常用指标
  - 准确率(查准率)Precision(p) $= \frac{a}{a+c} = \frac{TP}{TP+FP}$：预测为Yes中正确的比例
    - **正确预测的个体总数 / 预测出的个体总数**
  - 召回率(查全率) Recall(r) $= \frac{a}{a+b} = \frac{TP}{TP+FN}$: 真实为Yes中被预测正确的比例
    - **正确预测的个体总数 / 测试集中Yes的个体总数**

Count	PREDICTED CLASS		
ACTUAL CLASS		Class=Yes	Class=No
	Class=Yes	a (TP)	b (FN)
	Class=No	c (FP)	d (TN)

分类模型的评价

- 分类模型的其他指标——分类问题的常用指标
  - F值 $= \frac{2PR}{P+R} = \frac{2a}{2a+b+c}$：正确率和召回率的调和平均值
  - 意义：不同应用场景中，对于准确率和召回率有着不同的侧重
    - 邮件分类：宁愿放过一些垃圾邮件，也不能错杀正常邮件
      - 牺牲召回率，保证较高准确率
    - 智慧医疗：宁愿多判断一些疑似患者，不能漏掉一个病人
      - 牺牲准确率，保证较高召回率

Count	PREDICTED CLASS		
ACTUAL CLASS		Class=Yes	Class=No
	Class=Yes	a	b
	Class=No	c	d

分类模型的评价

- 分类问题的常用指标——**课堂练习**
  - 在一次垃圾邮件检测中，使用某分类模型认为有100篇邮件是垃圾邮件，后经过专家判定，其中真是垃圾邮件的为60篇，其余的40篇为误分类，那么请问本次分类的准确率Precision就等于_____。
  - 假如专家发现邮件样本集里还有90篇垃圾邮件，由于各种原因而未被检出（漏检），那么按照上述公式，本次分类的查全率Recall就等于_____，F1值等于_____。

$$\text{Precision(P)} = \frac{a}{a+c}$$

$$\text{Recall(R)} = \frac{a}{a+b}$$

$$\text{F值} = \frac{2PR}{P+R} = \frac{2a}{2a+b+c}$$

		PREDICTED CLASS	
		Class=Yes	Class=No
ACTUAL CLASS	Class=Yes	a (TP)	b (FN)
	Class=No	c (FP)	d (TN)

分类模型的评价

- 分类模型的其他指标—ROC与AUC
  - ROC(Receiver Operating Characteristic)与AUC(Area Under the ROC curve)
    - 背景：发展于20世纪50年代的信号检测理论，用于分析噪声信号
    - 两者的关系：ROC曲线的面积就是AUC
  - 基本概念
    - 真正例率TPR(True Positive Rate) = TP/(TP+FN)
      - **预测为正且实际为正的样本占所有正样本的比例**
    - 假正例率FPR(False Positive Rate)=FP/(TN+FP)
      - **预测为正但实际为负的样本占所有负样本的比例**

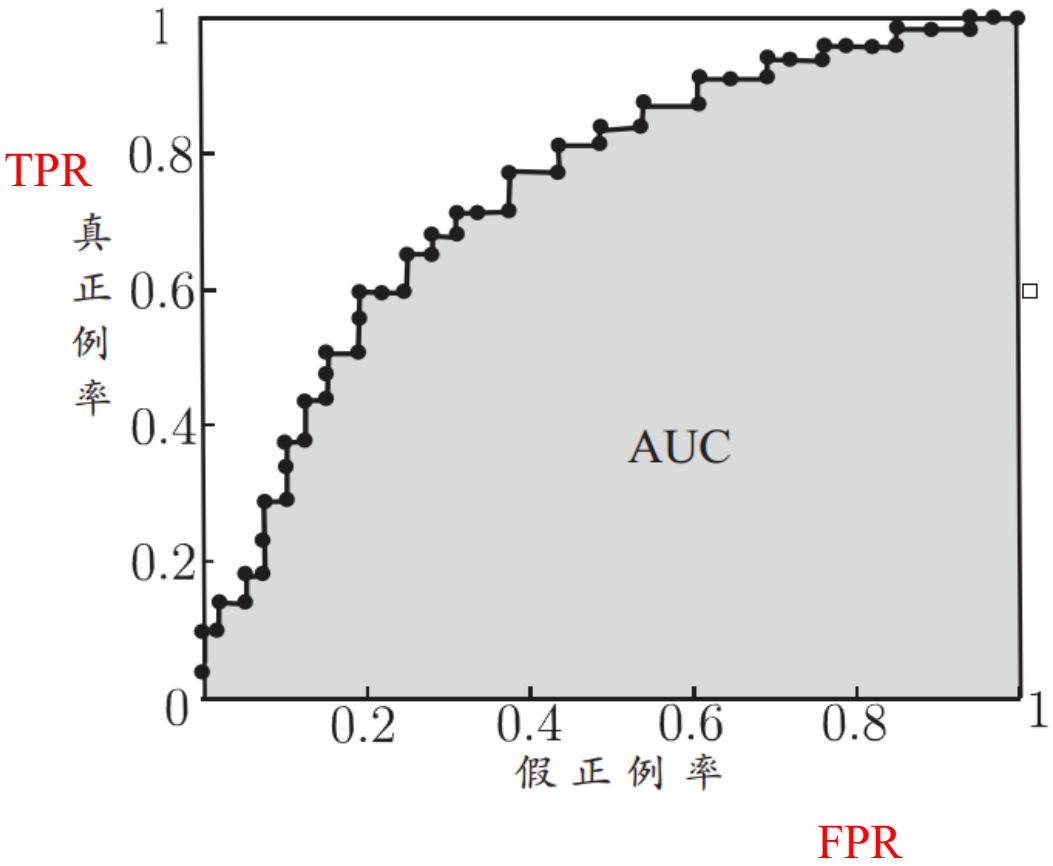
		PREDICTED CLASS	
		Class=Yes	Class=No
ACTUAL CLASS	Class=Yes	a (TP)	b (FN)
	Class=No	c (FP)	d (TN)

分类模型的评价

- ROC曲线

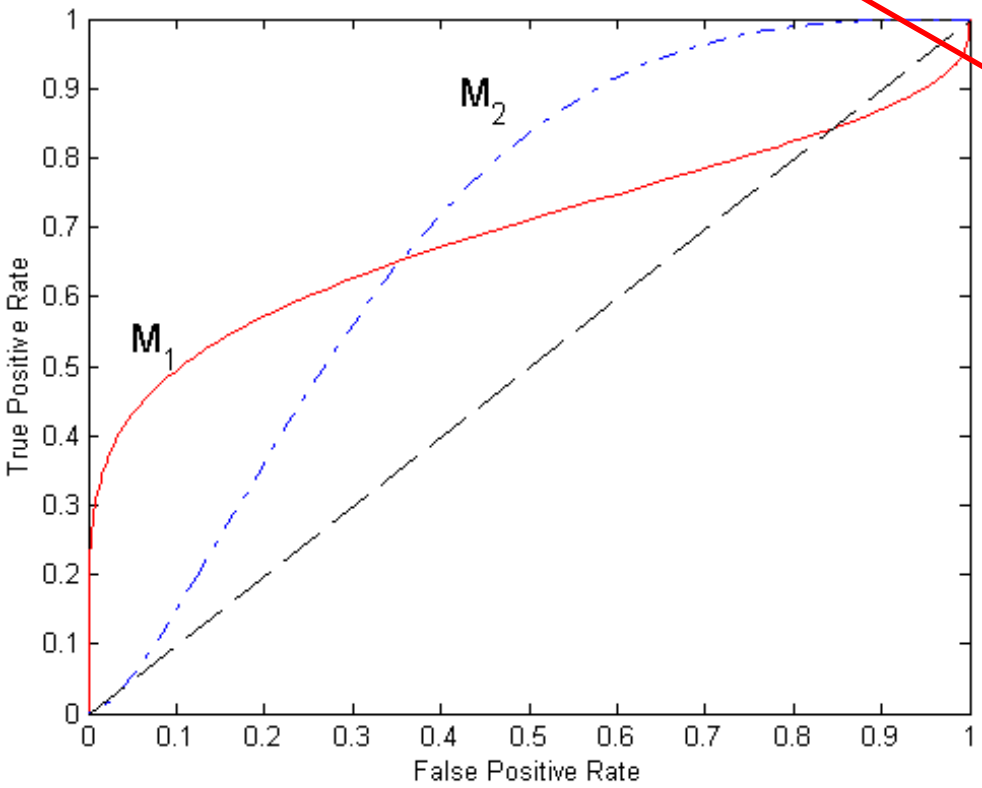
特点：

- 对角线表示区分能力为0，即随机猜测
- 在对角线上端越远，效果越好
- 低于对角线的结果无意义（无区分度）



分类模型的评价

- 如何基于ROC曲线比较模型好坏？
  - 一般而言，模型A的ROC曲线将模型B的完全包住，则模型A更好
  - 但往往并不会完全包住



对比ROC曲线发现，两个模型都不是一直表现得好

- M_1在FPR较小时表现好
- M_2在FPR较大时表现好

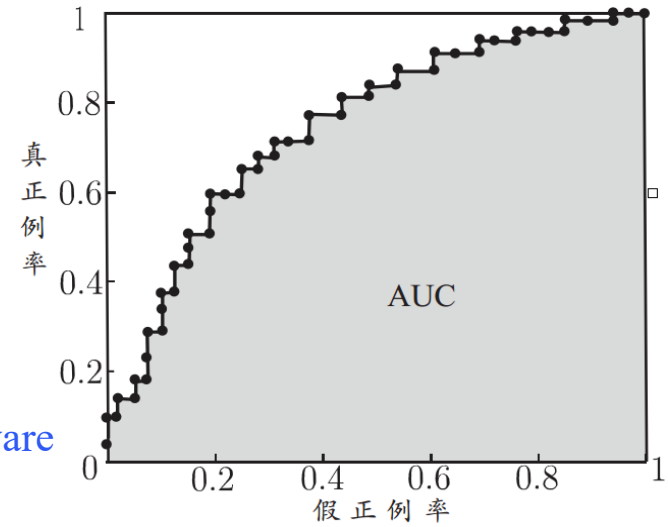
分类模型的评价

- ROC不能量化——AUC量化指标
  - AUC定义为ROC曲线的面积，可以直接计算如下
  - 假设ROC曲线由$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_m, y_m), x_1 = 0, x_m = 1\}$的点按序连接而形成，则AUC为：

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

AUC越大，结果越好

AUC衡量了样本预测的排序质量



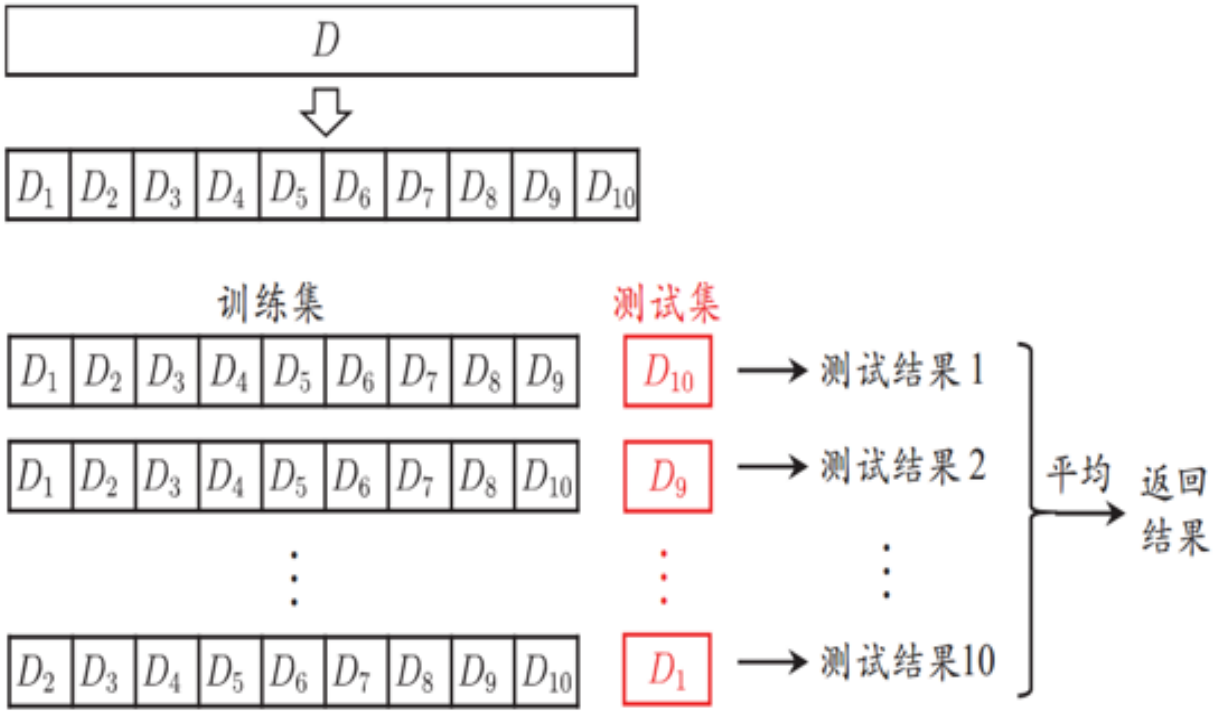
Qi Liu, Zhenya Huang, Yu Yin, Enhong Chen, et al, EKT: Exercise-aware Knowledge Tracing for Student Performance Prediction, IEEE TKDE,

分类模型的评价

- 如何评价分类模型的效果？—分类模型的比较方法
  - 关于性能比较:
    - 测试性能并不等于泛化性能
    - 测试性能随着测试集的变化而变化
    - 很多机器学习算法本身有一定的随机性
      - 例如，对两个模型:
        - M1: accuracy = 85%, 在30个样本上测试
        - M2: accuracy = 75%, 在5000个样本上测试
  - 常常进行**假设检验**，判断不同模型的性能差别是否具有统计意义
    - 假设检验为学习器性能比较提供了重要依据，基于其结果我们可以推断出：若在测试集上观察到学习器A比B好，则A的泛化性能是否在统计意义上优于B，以及这个结论的把握有多大。

分类模型的验证

- 分类模型的验证方法 —— 增加结果的可靠性
  - 交叉验证法（Cross Validation）：将数据集分层采样划分为k个大小相似的互斥子集，每次用k-1个子集的并集作为训练集，余下的子集作为测试集，最终返回k个测试结果的均值，k最常用的取值是10.



10折交叉验证

分类与预测

- 有监督学习：分类与预测
- 常用方法
  - 规则方法
  - 决策树
  - 最近邻方法
  - 支持向量机（SVM）
  - 集成方法
- 分类的评价指标