新媒体大数据分析

New Media Big Data Analysis

第三章 数据建模

黄振亚，朱孟潇，张凯

课程主页：
http://staff.ustc.edu.cn/~huangzhy/Course/NM2024.html

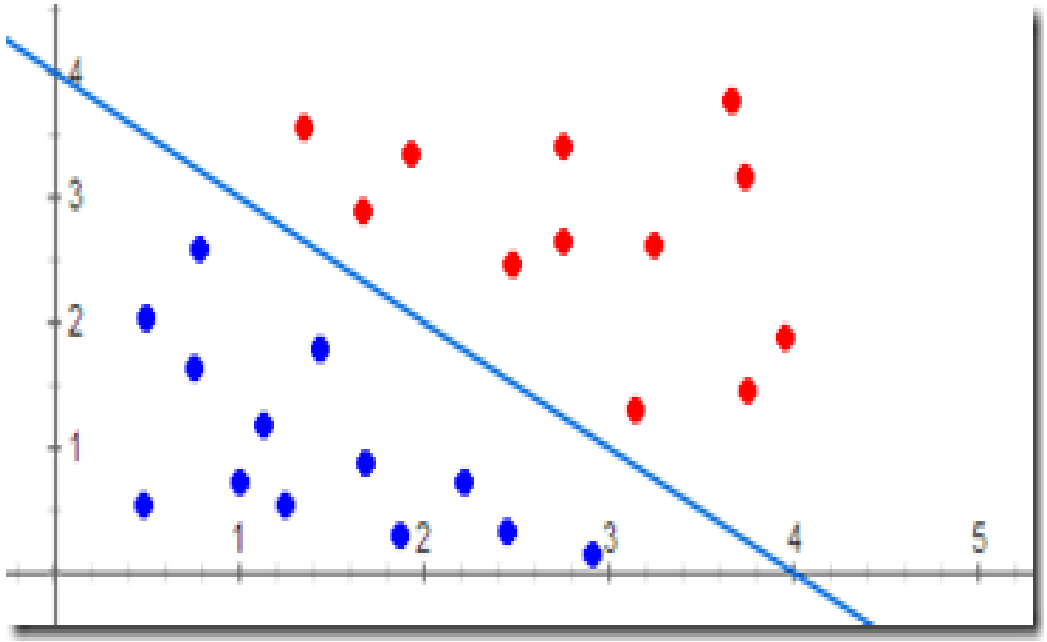
助教：陈宗阳
bigdata_2024@163.com

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
- 类不平衡问题

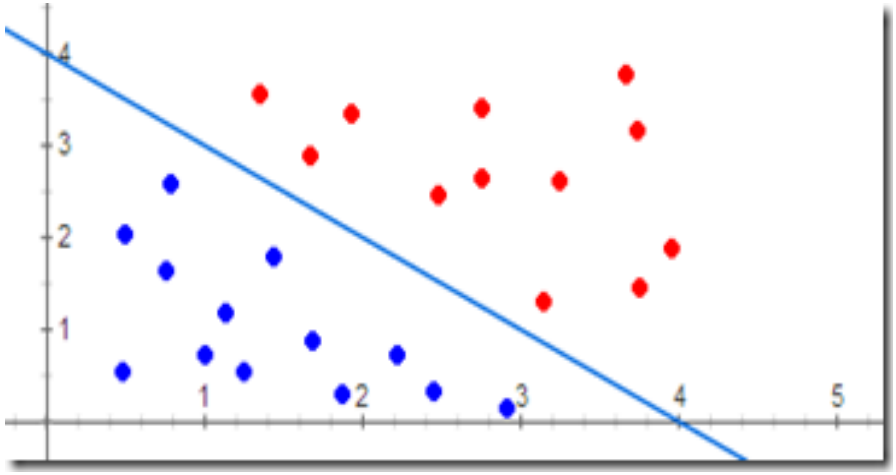
分类：感知机

- 分类——感知机（perceptron）
  - 目标：寻找一条直线S（高维时是超平面）划分不同类别的数据
  - 输入：样本的特征向量X={x}, $x \in R^d$
  - 输出：样本类别y $\in \{-1, +1\}$

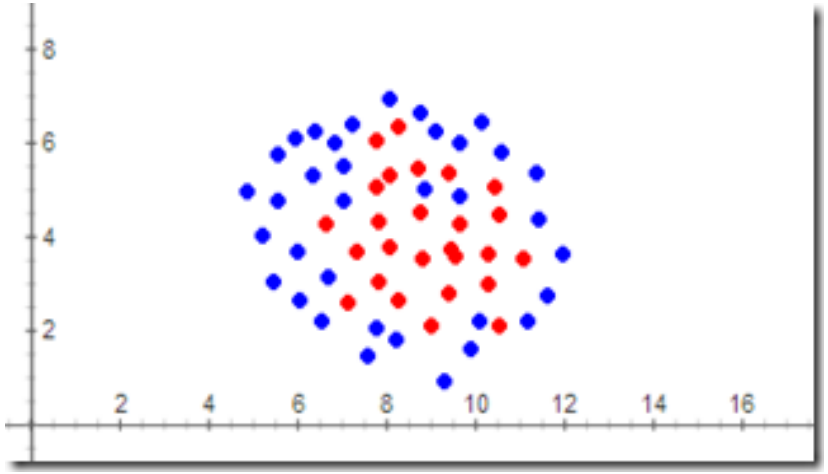


分类：感知机

- 分类——感知机（perceptron）
  - 1957年由Rosenblatt提出，是神经网络与支持向量机的基础
  - 感知机的前提：样本空间线性可分
    - 左例中，可以用一条直线将+1类和-1类完美分开，称这个样本空间是线性可分的
    - 右例的样本是线性不可分的，感知机不能处理这种情况

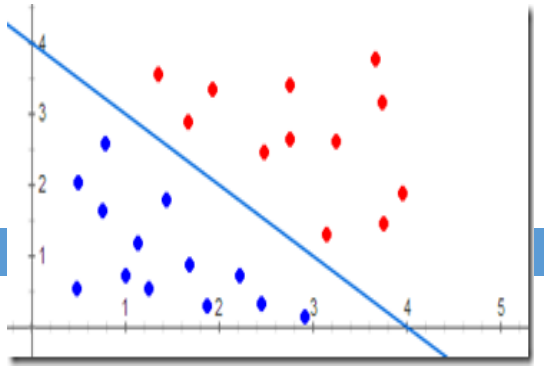


线性可分



线性不可分

分类：感知机



- 感知机的基本概念
  - 模型：符号函数 $f(x) = sign(w \cdot x + b) = \begin{cases} +1, & w \cdot x + b \geq 0 \\ -1, & w \cdot x + b < 0 \end{cases}$
  - 分界超平面 S： $w \cdot x + b = 0$
  - 学习目标：最小化 误分类点 到 超平面 的 总距离
    - 点(x_0, y_0)到超平面S: $w \cdot x + b = 0$的距离$\frac{1}{\|w\|} |w \cdot x_0 + b|$
    - 误分类点(x_i, y_i)到超平面S: $w \cdot x_i + b = 0$的距离为 $-\frac{1}{\|w\|} y_i (w \cdot x_i + b)$

推导过程省略

x_i错分时，若y_i为-1，则计算的$(w \cdot x_i + b) > 0$
若y_i为+1，则计算的$(w \cdot x_i + b) < 0$

  - 损失函数：$\underset{w,b}{\operatorname{argmin}} L(w, b) = -\sum_{x_i \in M} y_i (w \cdot x_i + b)$，
  - 学习策略：找到参数w和b，使得损失函数最小

它是连续可导的，这就使得我们比较容易求得其最小值

分类：感知机

- 感知机学习算法：梯度下降 — 课后学习

$$\min_{w,b} L(w,b) = -\sum_{x_i \in M} y_i (w \cdot x_i + b)$$

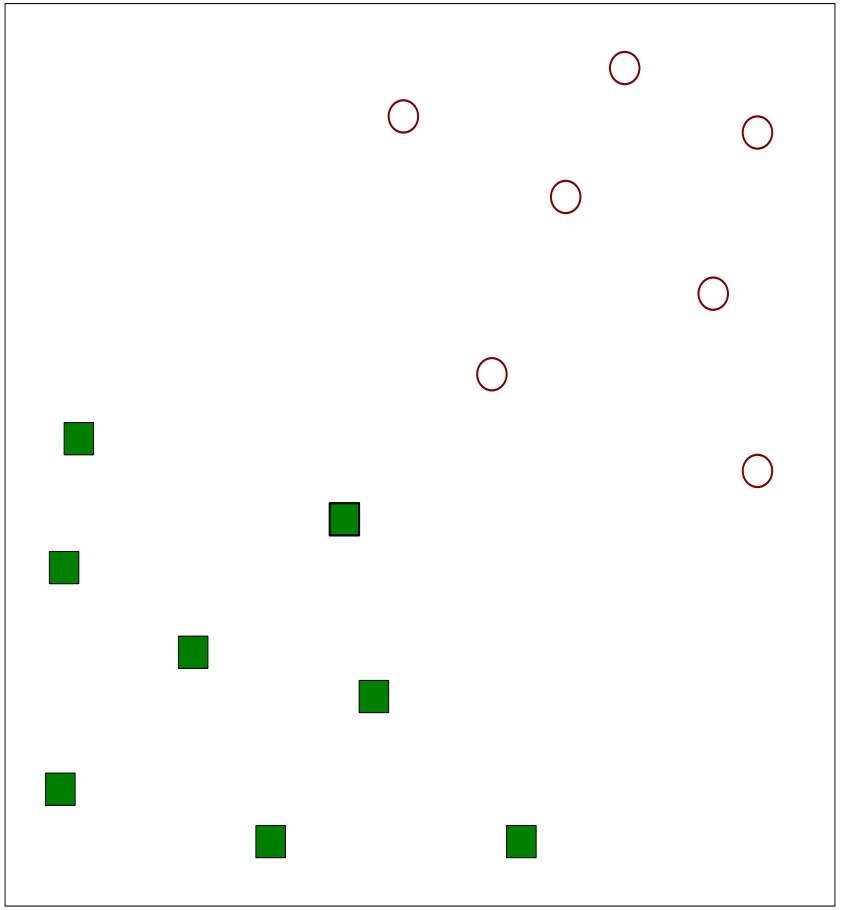
  - 随机初始化w_0和b_0
  - 梯度下降不断地极小化损失函数
    - 每次随机选取一个误分类点对w和b进行更新。
    - 设误分类点为(x_i, y_i)，那么损失函数$L(w,b)$的梯度为：

$$\nabla_w L(w,b) = -y_i \cdot x_i$$
$$\nabla_b L(w,b) = -y_i$$

    - 接下来对w, b进行更新$w \leftarrow w + \gamma y_i \cdot x_i, b \leftarrow b + \gamma y_i$，其中$\gamma (0 \le \gamma \le 1)$为步长，也、称为学习速率（learning rate）。
    - 通过迭代，直到损失函数为0 (无误分点)

分类：支持向量机

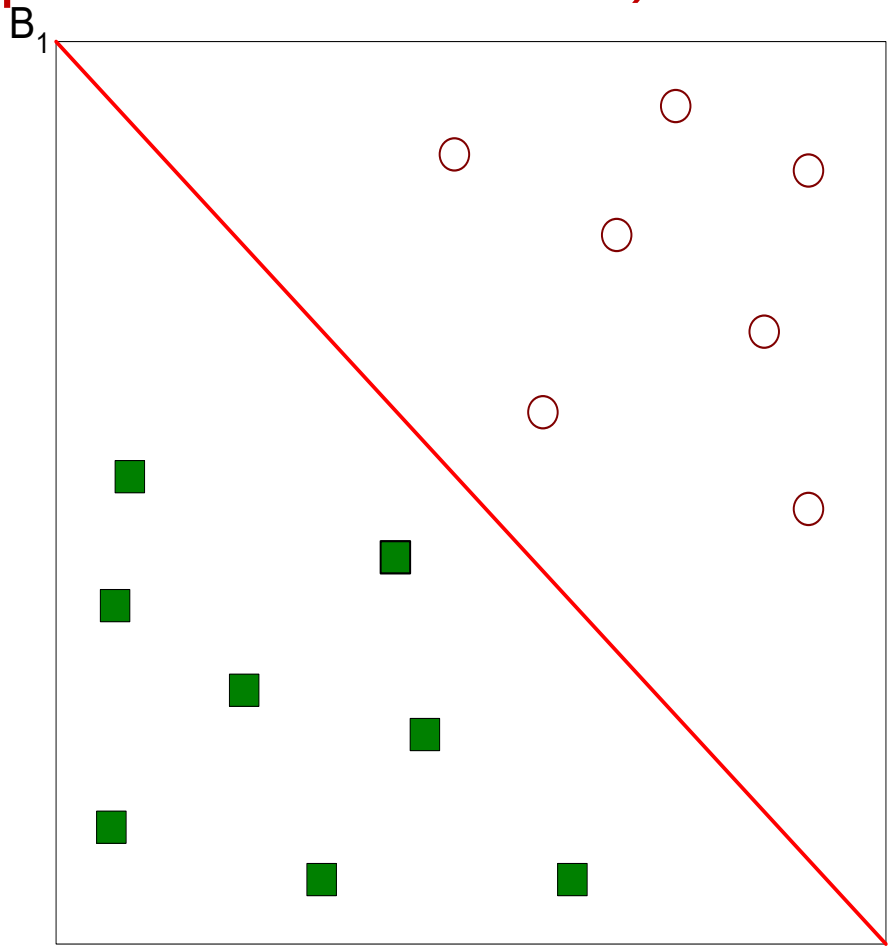
- 分类——支持向量机（Support Vector Machine）



分类：支持向量机

- 分类——支持向量机（Support Vector Machine）

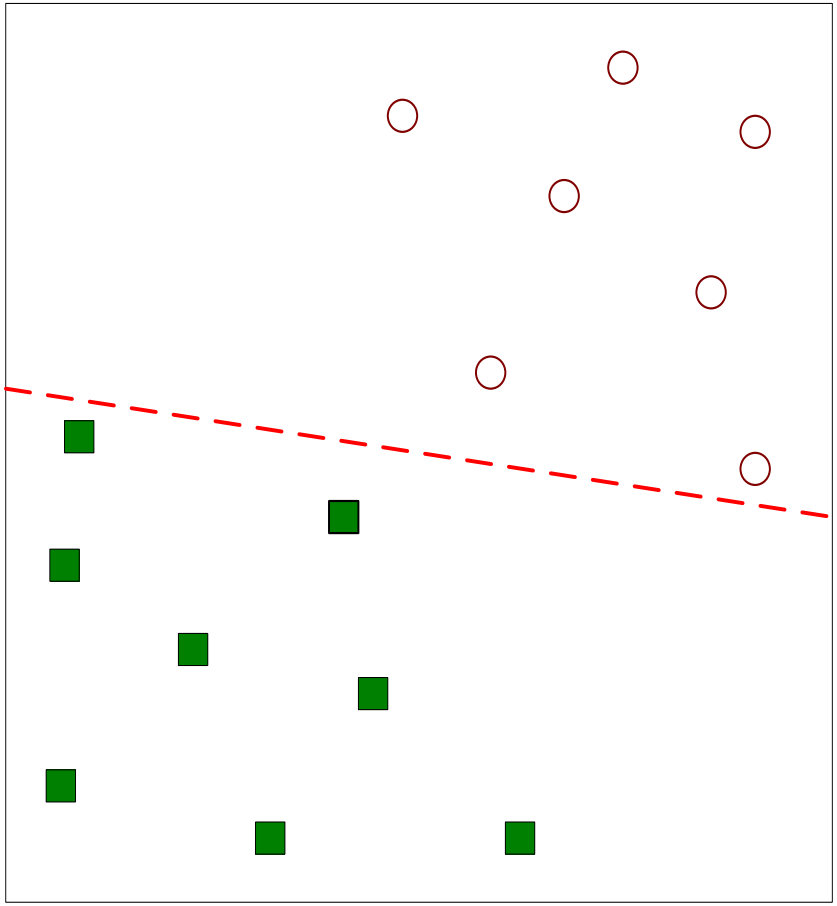
一个可行解



分类：支持向量机

- 分类——支持向量机（Support Vector Machine）

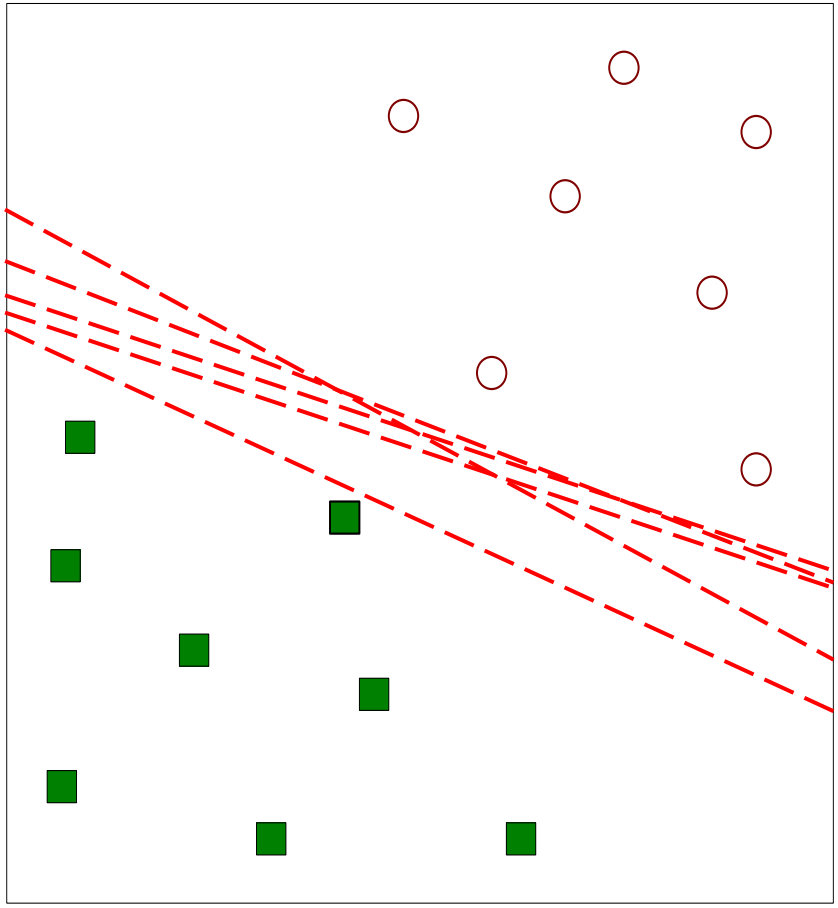
另一个可行解



分类：支持向量机

- 分类——支持向量机（Support Vector Machine）

其他可行解



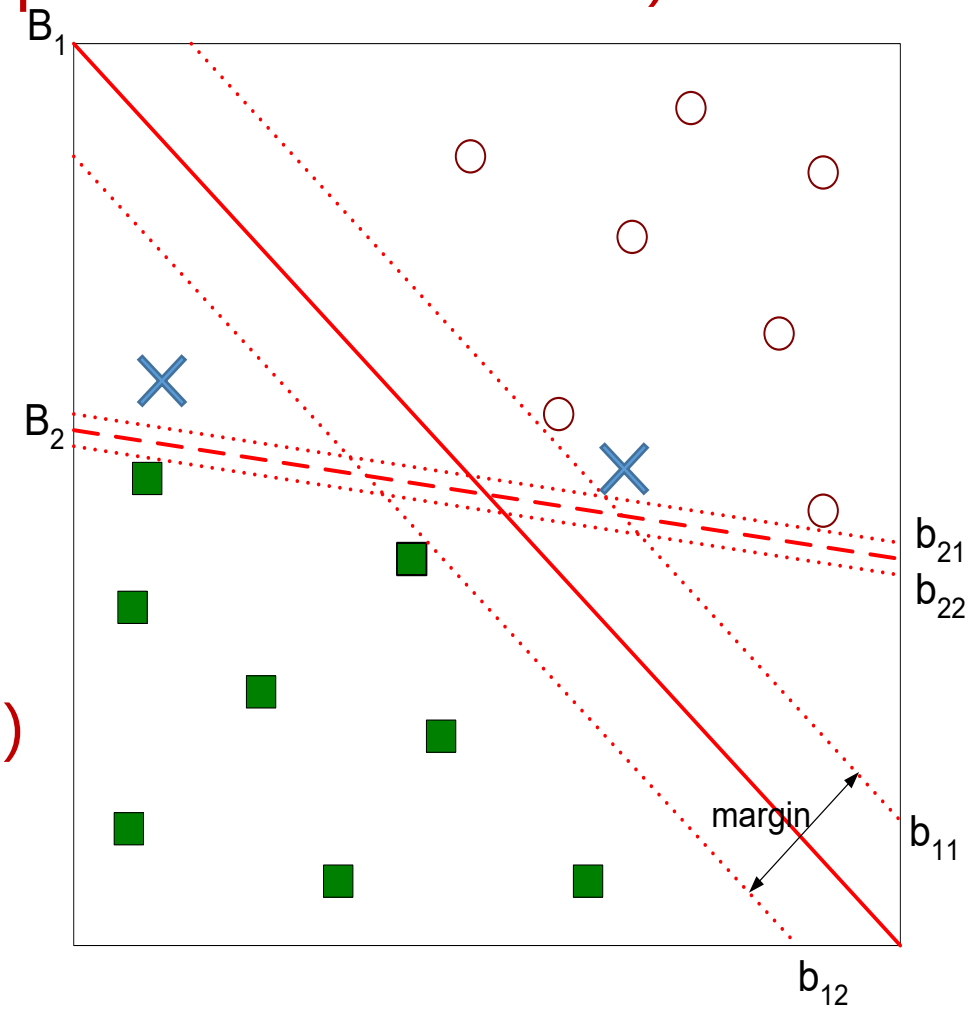
分类：支持向量机

- 分类——支持向量机（Support Vector Machine）

B1与B2，哪个更好？

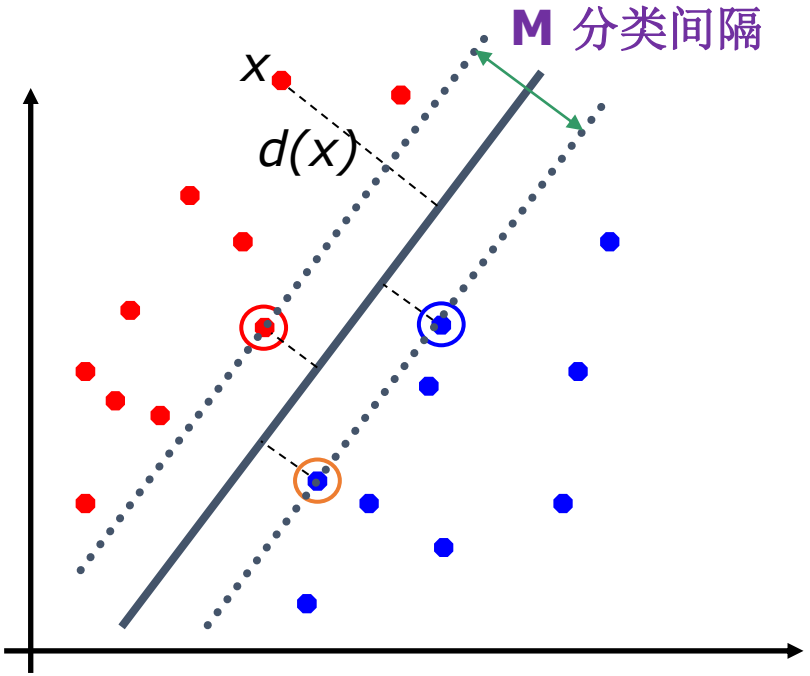
B1 保证分类正确（区分）

分类间隔大 （更容易区分）



分类：支持向量机

- 分类——支持向量机
  - 因此，应该选择“正中”的最大间隔超平面（分类间隔最大）
    - 容忍性好，泛化能力强
    - 在线性可分的条件下，符合这样条件的超平面“存在且唯一”
  - 问题：如何找到最优的超平面？
  - 最大化分类间隔

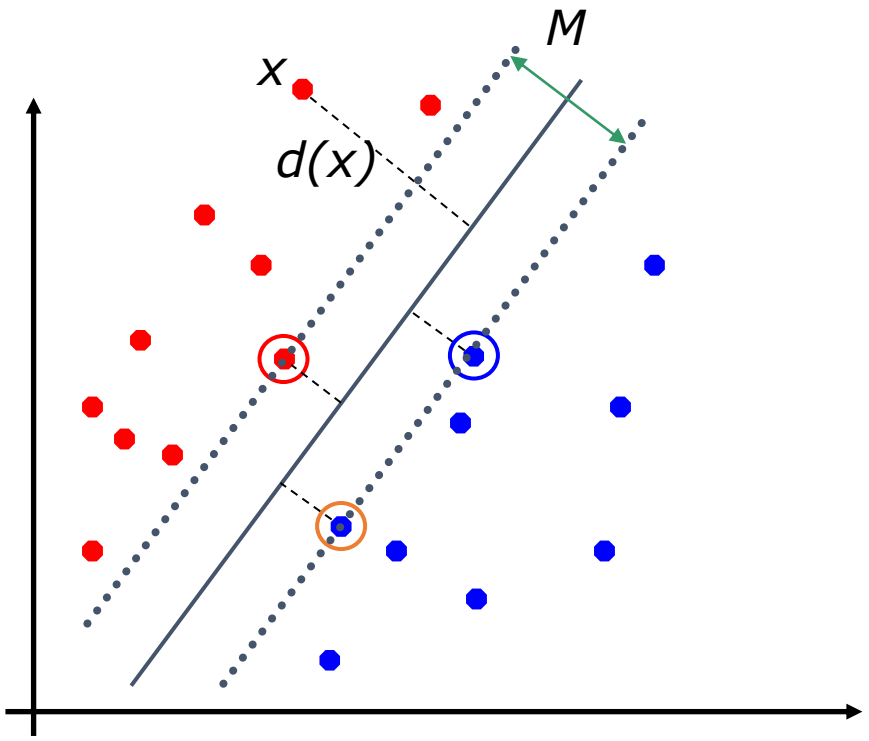


分类：支持向量机

- 分类——支持向量机
  - 理解：最大化分类间隔
    - 区分能力更强
    - 概率的角度: 最难的点置信度最大
    - 即使我们在选边界的时候犯了小错误，使得边界有偏移，仍然有很大概率保证可以正确分类绝大多数样本
    - 很容易实现交叉验证，因为边界只与极少数的样本点有关
    - 有一定的理论支撑
    - 实验结果验证了其有效性

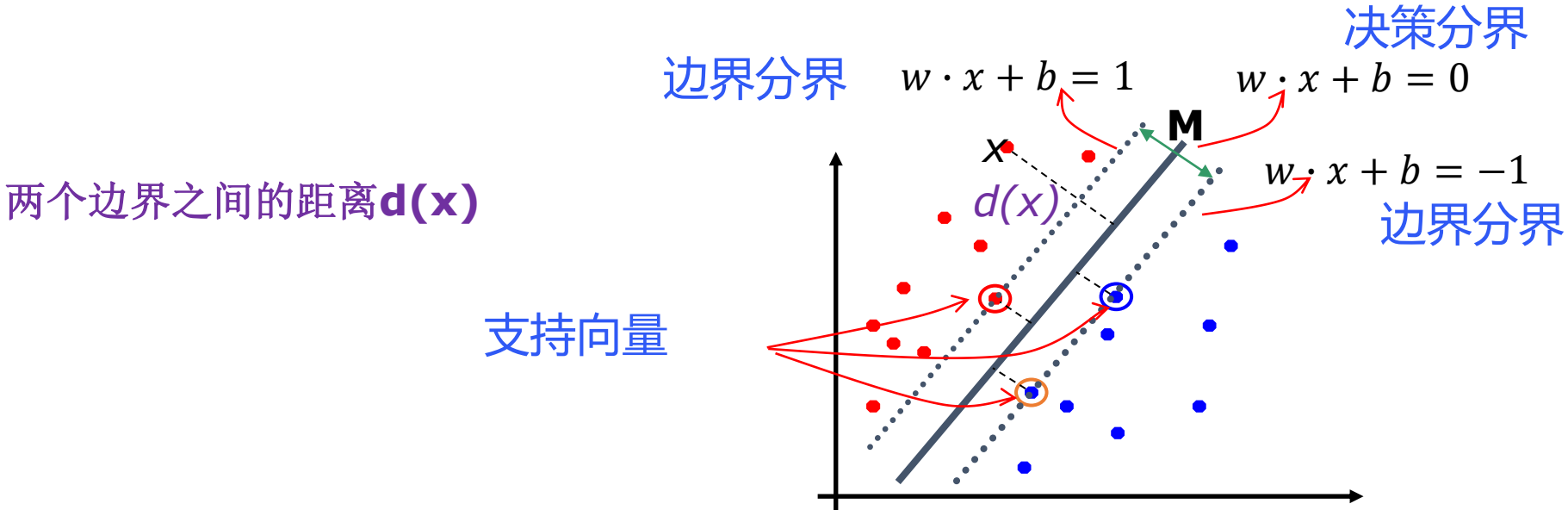
保证分类正确性—当前

保证分类质量—未来



分类：支持向量机

- 支持向量机的基本概念
  - 模型：符号函数$y = sign(w \cdot x + b) = \begin{cases} +1, w \cdot x + b \geq 0 \\ -1, w \cdot x + b < 0 \end{cases}$
  - 决策分界面(Decision Boundary)：$w \cdot x + b = 0$
  - 边界分界面(Margin Boundary)：$w \cdot x + b = \pm 1$
  - 支持向量(Support Vectors)：满足$w \cdot x + b = \pm 1$的样本



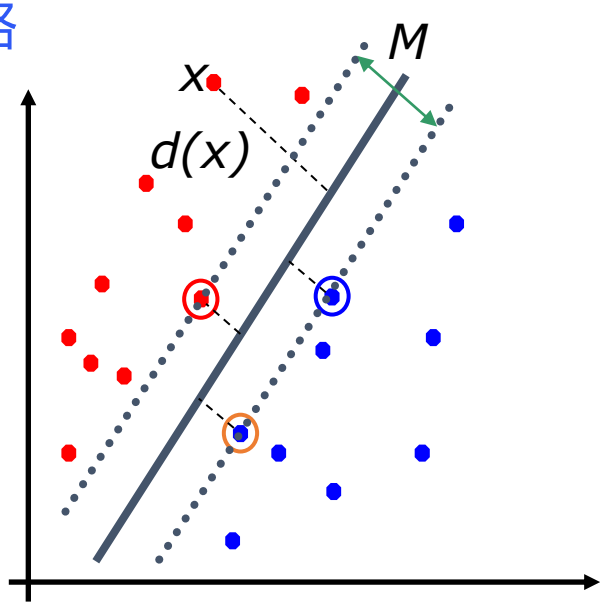
分类：支持向量机

- 支持向量机
  - **两个边界之间的距离d(x)：支持向量到决策分界面的距离**
    - 点x_i到平面$w \cdot x + b = 0$的距离为$\frac{1}{\|w\|} y_i(w \cdot x_i + b)$
    - 支持向量到决策平面的距离为$\frac{1}{\|w\|}$

最大化

- 两个边界之间的距离：$\frac{2}{\|w\|}$　推导过程省略
  - 目标函数：$\text{argmax}\, L(w,b) = \frac{2}{\|w\|}$
  - 学习策略：找到参数w和b，使得目标最大

$$\underset{w,b}{\text{argmax}}\, L(w,b) = \frac{2}{\|w\|}$$
$$s.t. \quad y_i\left(\mathrm{w}^T \cdot x_i + b\right) \geq 1, \qquad \mathrm{i} = 1,2,\ldots,\mathrm{m}$$



分类：支持向量机

- 支持向量机学习算法
  - 优化任务转化

$$\underset{w,b}{argmax}\ L(w,b)=\frac{2}{\|w\|}$$
$$s.t.\quad y_i\left(\mathrm{w}^T\cdot x_i+b\right)\geq 1,\qquad \mathrm{i}=1,2,\ldots,\mathrm{m}$$

优化目标：平方和系数都是为了求导方便

等价

$$\underset{w,b}{\mathrm{argmin}}\ L(w,b)=\frac{1}{2}\|w\|^2$$
$$s.t.\quad y_i\left(\mathrm{w}^T\cdot x_i+b\right)\geq 1,\qquad \mathrm{i}=1,2,\ldots,\mathrm{m}$$

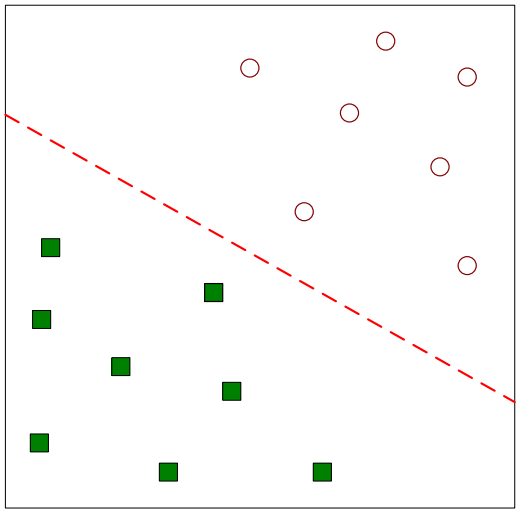
  - (课后学习)注意到，该形式符合凸二次规划问题特征，可以借助拉格朗日对偶性，通过求解对偶问题加以求解
  - (课后学习)具体而言，求解方式可采用序列最小优化算法（SMO）

```
from sklearn.svm import LinearSVC
```

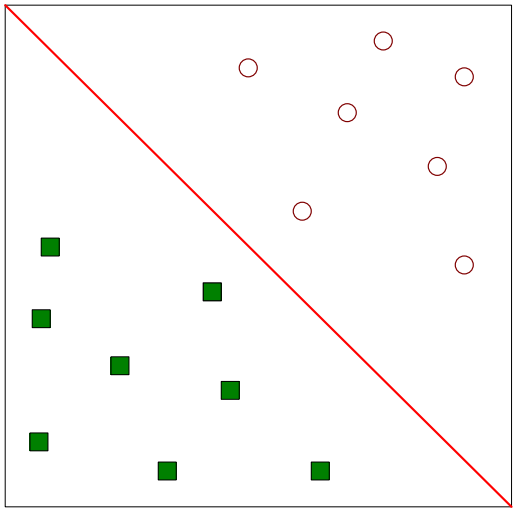
分类：支持向量机

- 感知机与支持向量机对比
  - 相同点：均采用模型$f(x) = sign(w \cdot x + b)$
  - 不同点：采用不同的优化目标

感知机



SVM



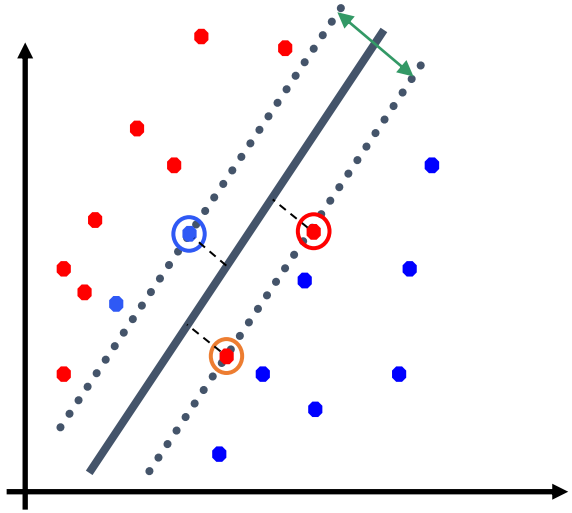
优化目标：

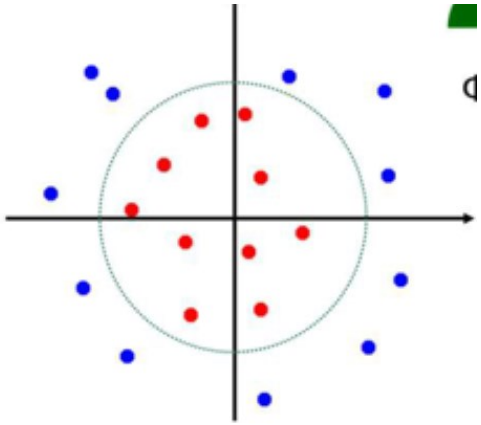
$$\min_{w,b} L(w,b) = -\sum_{x_i \in M} y_i(w \cdot x_i + b)$$

$$\min_{w,b} L(w,b) = \frac{1}{2}\|w\|^2$$
$$s.t.\, y_i\left(w^T x_i + b\right) \geq 1$$

SVM总结

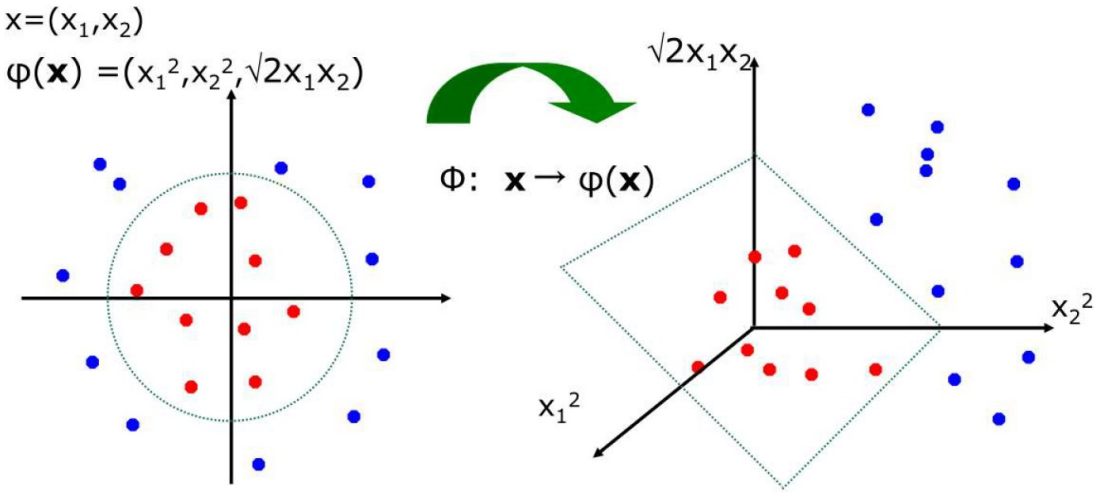
- 支持向量机
  - 优点：强分类器
    - 区分分类结果
    - 最大化间隔：更容易区分分类结果
    - 有数学理论保证
    - 只有支持向量在影响，优化简单
  - 缺点： Hard Margin SVM
    - 只能处理线性可分问题
    - 线性不可分
      - 软间隔：soft margin SVM（课后学习）
    - 线性完全不可分





线性不可分问题

- 线性不可分问题
  - 如果数据集线性不可分，不存在这样一个超平面，怎么办？
    - 解决方法：将样本映射到一个更高维的特征空间，使得在这个特征空间线性可分
  - **核函数：**
    - 核函数的目的，在于将高维空间下的SVM求解时需要的内积运算转化为低维空间下的核函数计算，从而避免可能遇到的“维度灾难”问题



核函数

- 线性不可分问题与核函数——（课后学习）
  - 常见的核函数如下表所示

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^{\top} \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^{\top} \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geq 1$为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{2\delta^2}\right)$	$\delta > 0$为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|}{\delta}\right)$	$\delta > 0$
Sigmoid核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^{\top} \boldsymbol{x}_j + \theta)$	tanh为双曲正切函数, $\beta > 0, \theta < 0$

  - 其中，线性核函数与高斯核函数（径向基）是最为常用的
  - 常见挑选核函数方法一般为以下两种：
    - 穷举法：一个个试过来，选择效果最好的一种
    - 混合法：将多个不同的核函数混合起来使用

分类与预测

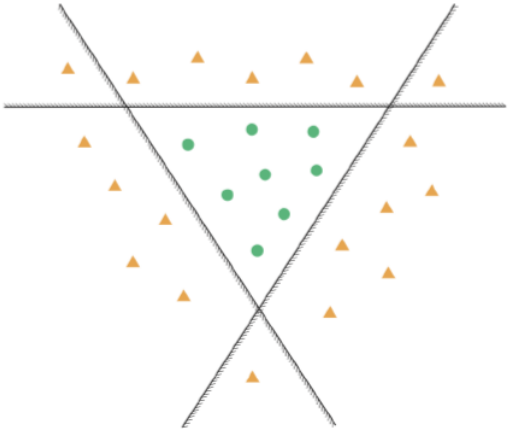
- 有监督学习：分类与预测
- 常用方法
  - 规则方法
  - 决策树
  - 最近邻方法
  - 感知机，支持向量机（SVM）
  - 集成方法
- 分类的评价指标
- 类不平衡问题

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

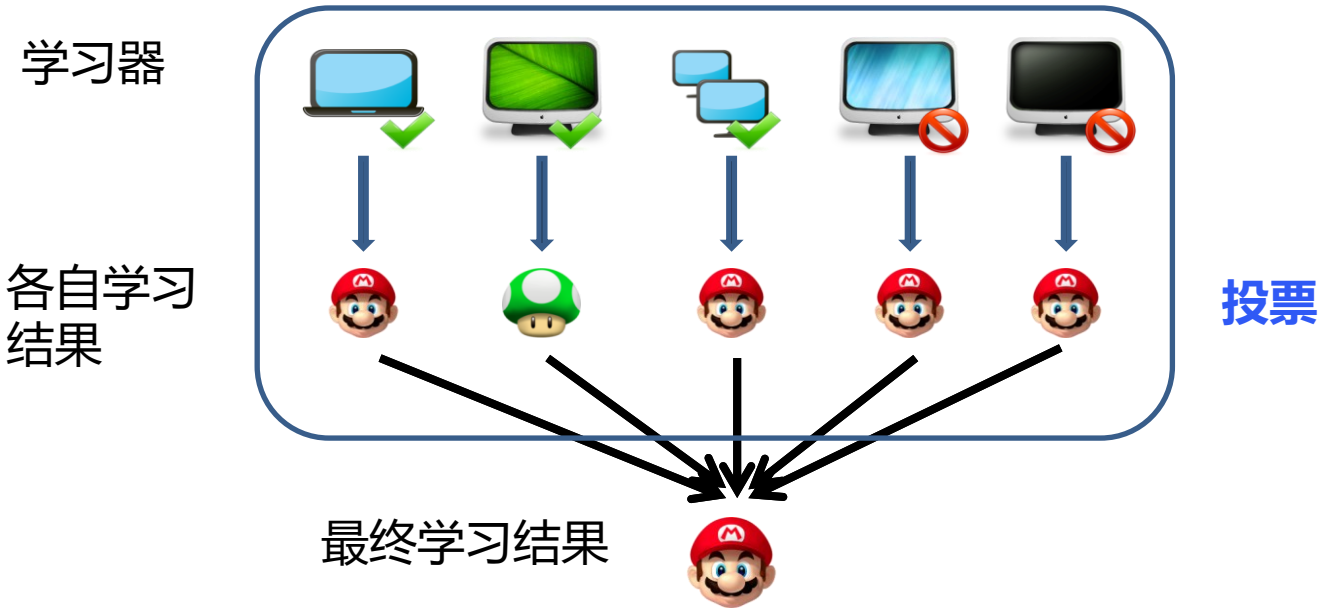
$$Error_H = \sum_{k \le \frac{T}{2}} C_T^k \cdot p^{T-k} \cdot (1-p)^k$$

      - $T = 5, p = 0.1$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**

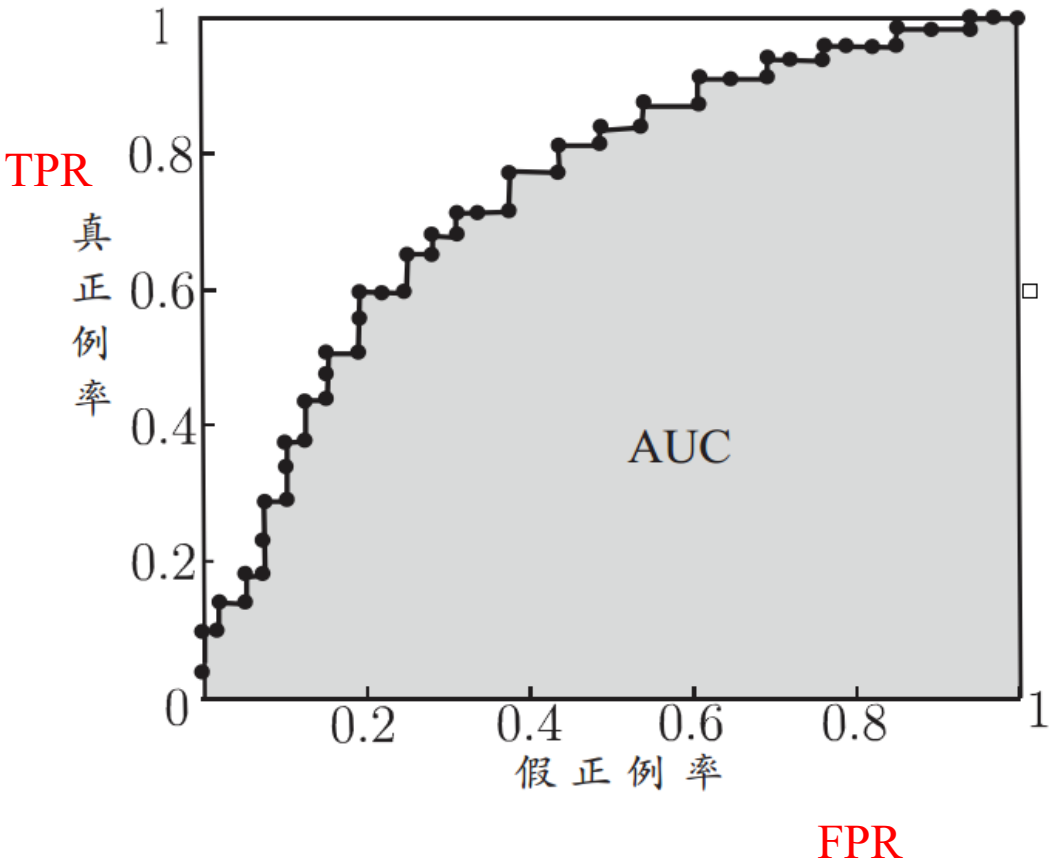
		PREDICTED CLASS	
		Class=Yes	Class=No
ACTUAL CLASS	Class=Yes	a (TP)	b (FN)
	Class=No	c (FP)	d (TN)

分类模型的评价

- ROC曲线

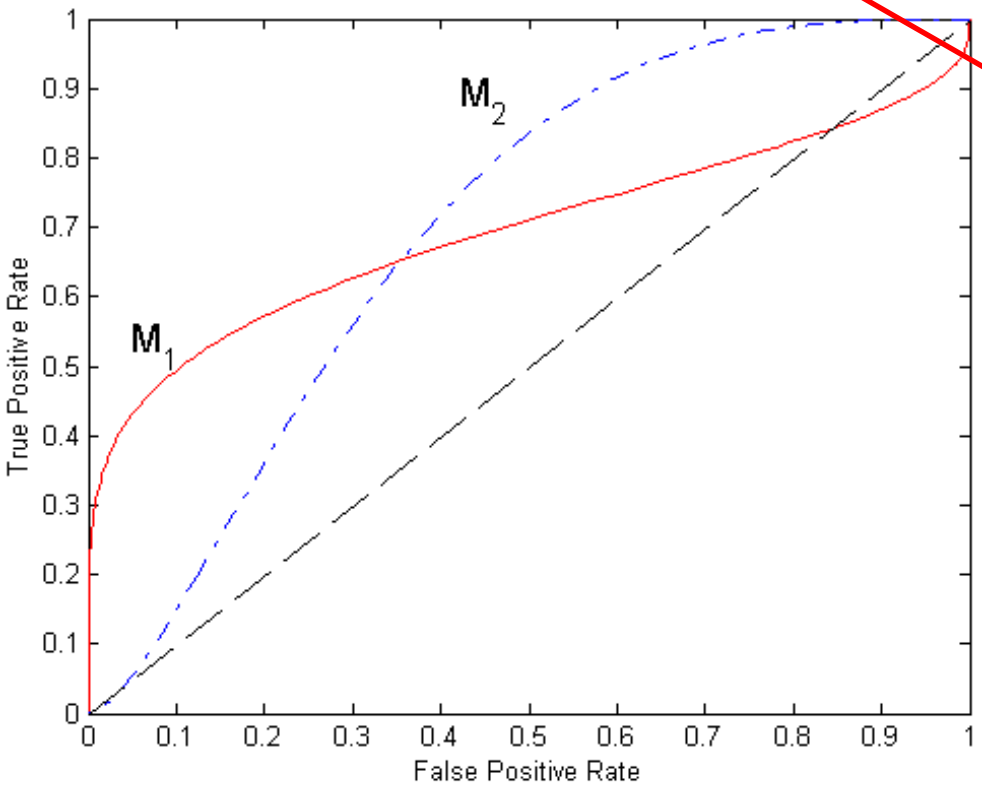
特点：

- 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

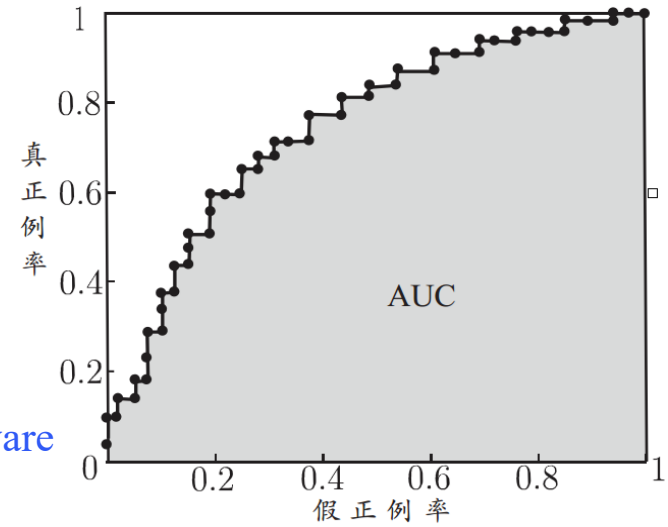
分类模型的评价

- 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



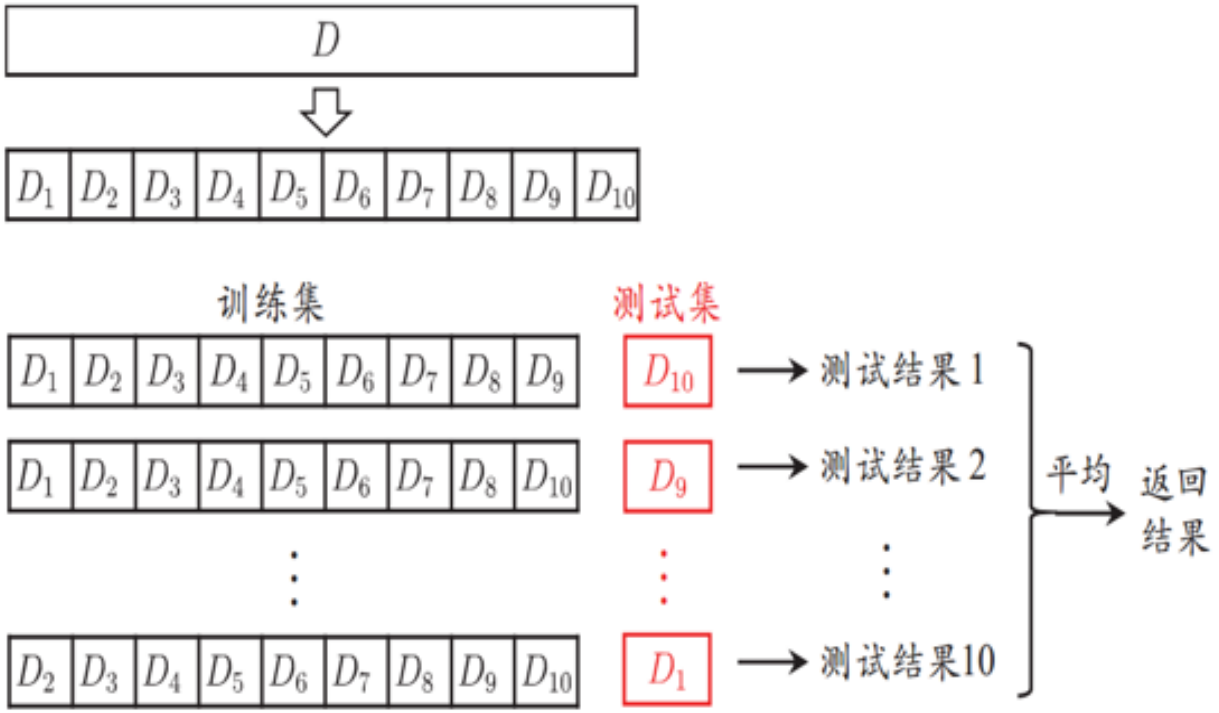
Qi Liu, Zhenya Huang, Yu Yin, Enhong Chen, et al, EKT: Exercise-aware Knowledge Tracing for Student Performance Prediction, IEEE TKDE,

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