



*Лекционные слайды по курсу*

Введение в  
*Машинное обучение*

ETHEM ALPAYDIN  
© The MIT Press, 2004

*alpaydin@boun.edu.tr*

*<http://www.cmpe.boun.edu.tr/~ethem/i2ml>*



Глава 14:

*Оценочная и сравнительная  
классификация алгоритмов*

# Введение

- Вопросы:
  - Оценка ожидаемой ошибки обучающего алгоритма: будет ли погрешность метода ближайшего соседа ( $k$ -NN) при  $k=1$  (1-NN) менее 2%?
  - Сравнение ожидаемых ошибок двух алгоритмов: метод ближайшего соседа ( $k$ -NN) более точен чем многослойный персептрон (MLP) ?
- Обучение/проверка/тестирование выборки
- Методы ресамплинга: Кросс-валидация по  $K$  блокам ( $K$ -fold cross-validation)

# Предпочтение алгоритма

- Критерии (зависимые от применения):
  - Ошибка неверной классификации, или риск (функции потерь)
  - Время обучения/ уровень сложности
  - Время тестирования/ уровень сложности
  - Интерпретируемость
  - Лёгкая программируемость
- Обучение с учетом издержек классификации (Cost-sensitive learning)

# Ресамплинг и кросс-валидация по $K$ блокам

- Необходимость многократного обучения/ оценки выборки  $\{X_i, V_i\}_i$ : Обучения/оценки выборка из  $i$  блоков
- Кросс-валидация по  $K$  блокам: разделение  $X$  на  $k$  блоков,  $X_i, i=1, \dots, K$

$$V_1 = X_1 \quad T_1 = X_2 \cup X_3 \cup \boxtimes \cup X_K$$

$$V_2 = X_2 \quad T_2 = X_1 \cup X_3 \cup \boxtimes \cup X_K$$

$\boxtimes$

$$V_K = X_K \quad T_K = X_1 \cup X_2 \cup \boxtimes \cup X_{K-1}$$

- $T_i$  делится на  $K-2$  частей

# Кросс-валидация 5×2

- Кросс-валидация: 5 раз по 2 блока (Dietterich, 1998)

$$T_1 = X_1^{(1)} \quad V_1 = X_1^{(2)}$$

$$T_2 = X_1^{(2)} \quad V_2 = X_1^{(1)}$$

$$T_3 = X_2^{(1)} \quad V_3 = X_2^{(2)}$$

$$T_4 = X_2^{(2)} \quad V_4 = X_2^{(1)}$$

⊠

$$T_9 = X_5^{(1)} \quad V_9 = X_5^{(2)}$$

$$T_{10} = X_5^{(2)} \quad V_{10} = X_5^{(1)}$$

# Выборка с возвратом (Bootstrapping)

- Возьмём образцы из выборки с последующим их возвратом
- Вероятность того, что мы не выберем образец после  $N$  попыток

$$\left(1 - \frac{1}{N}\right)^N \approx e^{-1} = 0.368$$

то есть, только 36.8% образцов являются новыми!

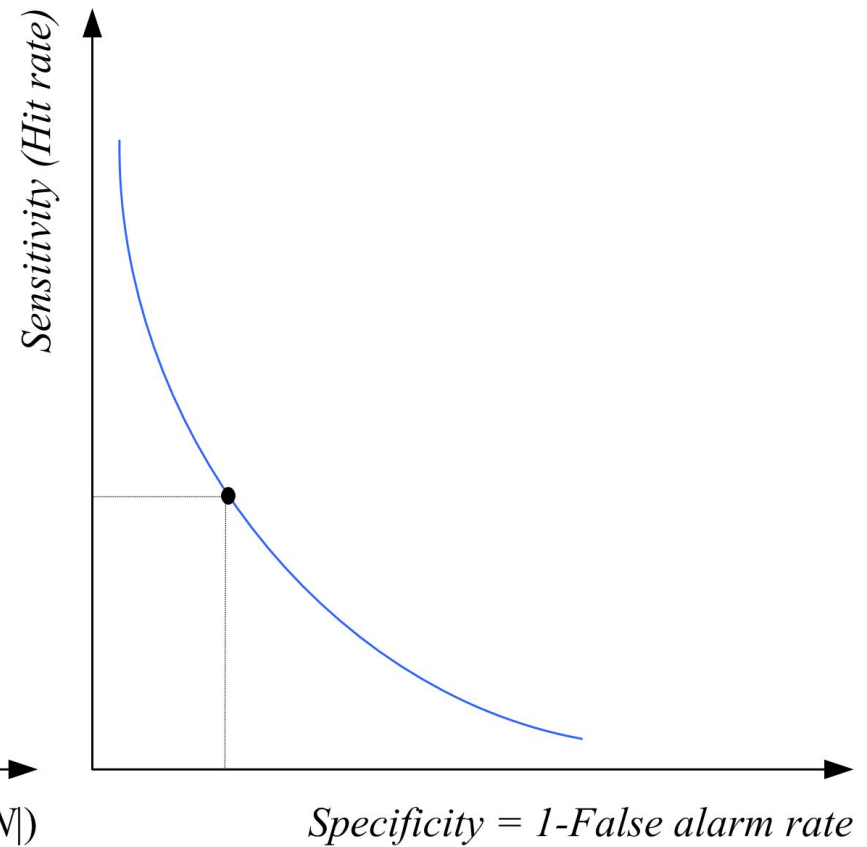
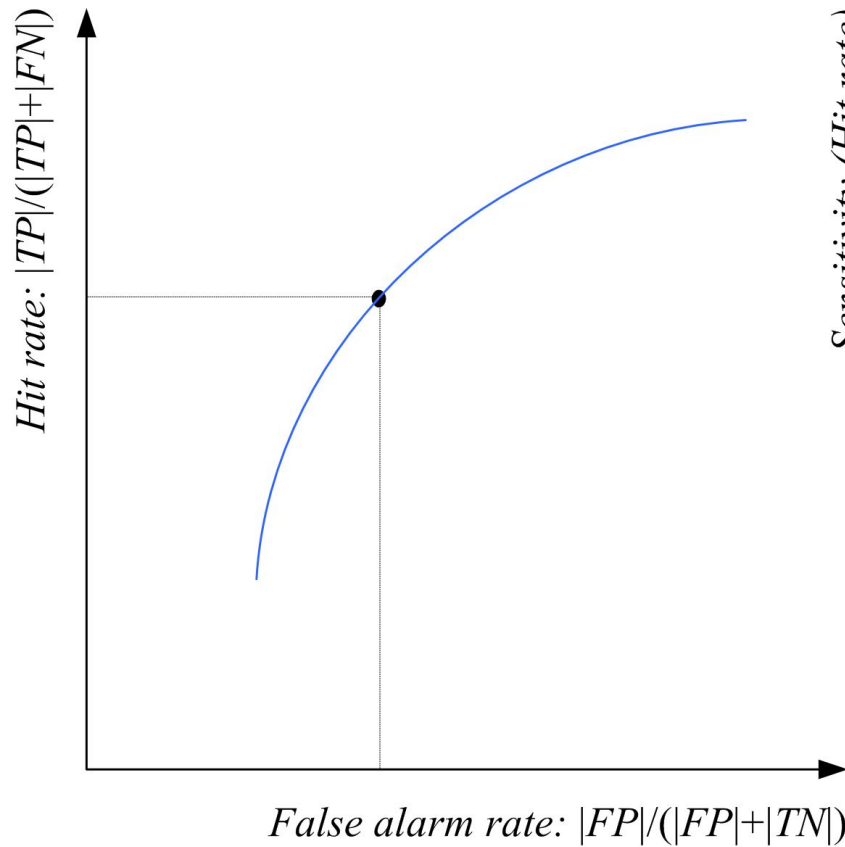
# Ошибки измерения

Исходный класс	Спрогнозированный класс	
	Yes	No
Yes	TP: True Positive	FN: False Negative
No	FP: False Positive	TN: True Negative

- **Уровень ошибки** =  $(FN+FP) / N$
- **Возврат** =  $TP / (TP+FN)$  = **чувствительность** = коэффициент совпадений
- **Точность** =  $TP / (TP+FP)$
- **Определенность** =  $TN / (TN+FP)$
- **Частота ложных тревог** =  $FP / (FP+TN)$  =  $1 - \text{Specificity}$



# Кривая ошибок (*ROC Curve*)



# Интервальная оценка

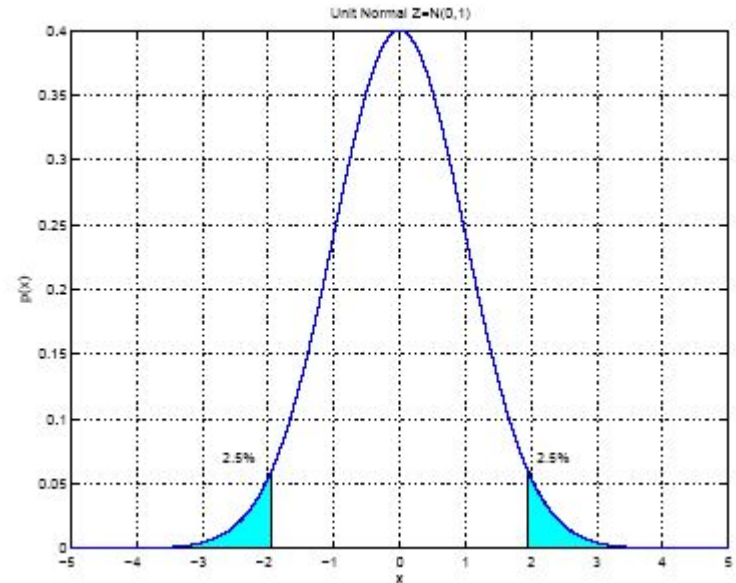
- $X = \{x^t\}_t$  where  $x^t \sim N(\mu, \sigma^2)$
- $m \sim N(\mu, \sigma^2/N)$

$$\sqrt{N} \frac{(m - \mu)}{\sigma} \sim Z$$

$$P\left\{-1.96 < \sqrt{N} \frac{(m - \mu)}{\sigma} < 1.96\right\} = 0.95$$

$$P\left\{m - 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} < \mu < m + 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right\} = 0.95$$

$$P\left\{m - z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{N}} < \mu < m + z_{\alpha/2} \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right\} = 1 - \alpha$$



100(1-  $\alpha$ ) %  
доверительный  
интервал

$$P\left\{\sqrt{N} \frac{(m - \mu)}{\sigma} < 1.64\right\} = 0.95$$

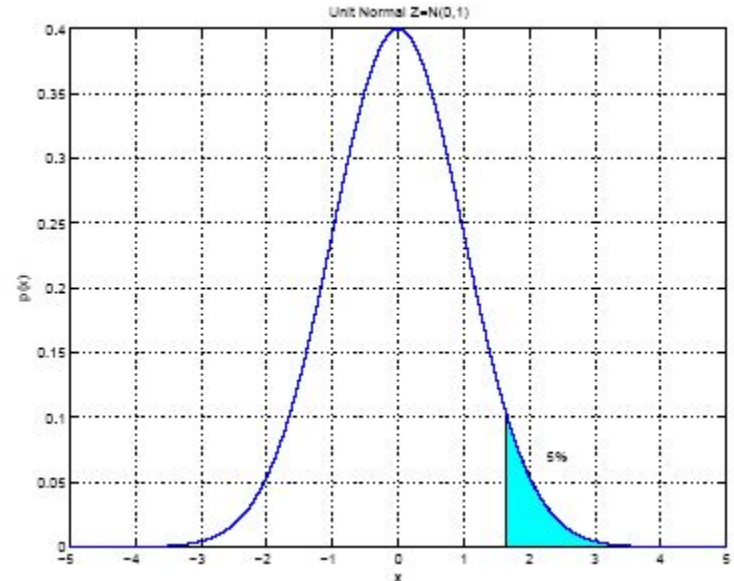
$$P\left\{m - 1.64 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} < \mu\right\} = 0.95$$

$$P\left\{m - z_{\alpha} \frac{\sigma}{\sqrt{N}} < \mu\right\} = 1 - \alpha$$

Когда  $\sigma^2$  не известна:

$$S^2 = \sum_t (x^t - m)^2 / (N - 1) \quad \frac{\sqrt{N} (m - \mu)}{S} \sim t_{N-1}$$

$$P\left\{m - t_{\alpha/2, N-1} \frac{S}{\sqrt{N}} < \mu < m + t_{\alpha/2, N-1} \frac{S}{\sqrt{N}}\right\} = 1 - \alpha$$



# Проверка гипотезы

- Отклоняем **недостовверную гипотезу** если она не подкреплена выборкой с достаточной достоверностью

- $X = \{x^t\}_t$  где  $x^t \sim N(\mu, \sigma^2)$

$$H_0: \mu = \mu_0 \text{ или } H_1: \mu \neq \mu_0$$

Принимаем  $H_0$  с **уровнем значимости**  $\alpha$  если  $\mu_0$  находится в  $\frac{100(1-\alpha)}{\sqrt{N}}$  доверительном интервале

$$\frac{m - \mu_0}{\sigma} \in (-z_{\alpha/2}, z_{\alpha/2})$$

Двусторонний тест

	Решение	
Правильность	Принять	Отклонить
True	Correct	Type I error
False	Type II error	Correct (Power)

- Односторонняя проверка:  $H_0: \mu \leq \mu_0$  или  $H_1: \mu > \mu_0$

Принимаем если

$$\frac{\sqrt{N} (m - \mu_0)}{\sigma} \in (-\infty, z_\alpha)$$

- Дисперсия неизвестна: используем  $t$ , вместо  $z$

Принимаем  $H_0: \mu = \mu_0$  если

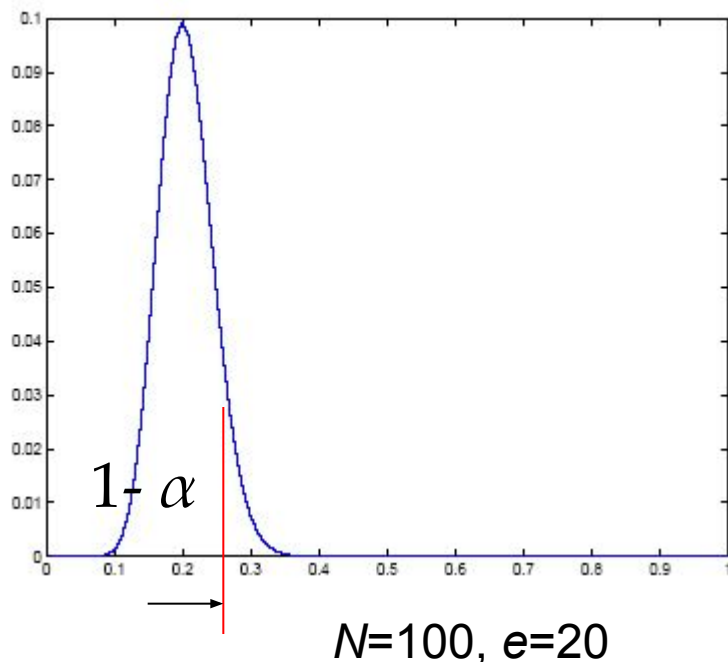
$$\frac{\sqrt{N} (m - \mu_0)}{S} \in (-t_{\alpha/2, N-1}, t_{\alpha/2, N-1})$$

# Оценка ошибки:

$H_0: p \leq p_0$  или  $H_1: p > p_0$

- Одиночная обучающая/оценочная выборка:  
биномиальный тест

Если вероятность ошибки  $p_0$ , то вероятность того что в  $N$  проверочных выборках будет  $e$  или менее ошибок

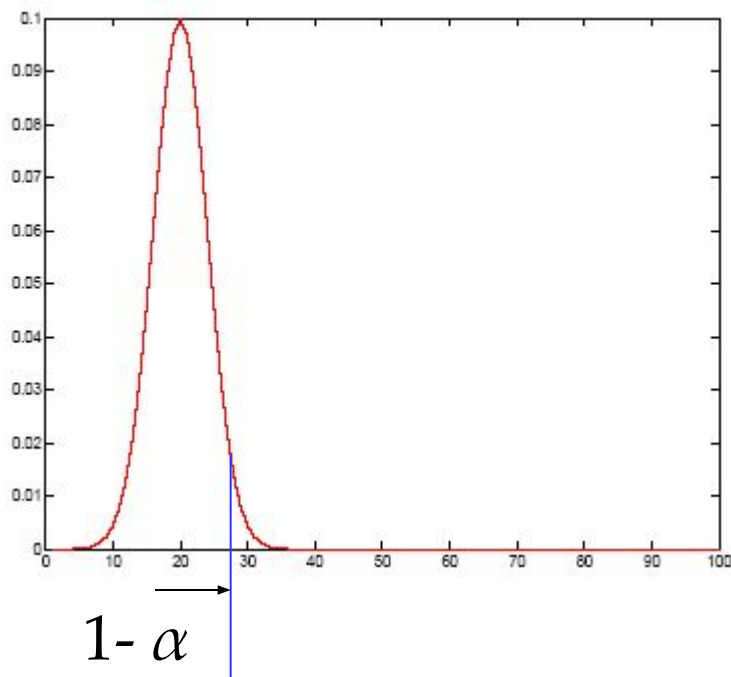


$$P\{X \leq e\} = \sum_{j=1}^e \binom{N}{j} p_0^j (1 - p_0)^{N-j}$$

Принимается если эта  
вероятность  
меньше чем  $1 - \alpha$

# Нормальная аппроксимация биномиального распределения

- Количество ошибок  $X$  приблизительно равно  $N$  со средним значением  $Np_0$  и дисперсией  $Np_0(1-p_0)$



$$\frac{X - Np_0}{\sqrt{Np_0(1-p_0)}} \sim Z$$

Принимается, если  
вероятность  
того, что  $X = e$  меньше чем  
 $Z_{1-\alpha}$

# *t*-тест для парных выборок

- Многократное обучение/оценка выборки
- $x_i^t = 1$  если объект  $t$  неверно классифицирован на свертке  $i$
- Уровень ошибки на свертке  $i$ :  $p_i = \frac{\sum_{t=1}^N x_i^t}{N}$
- С помощью  $m$  и  $s^2$  - математического ожидания и дисперсии  $p_i$  мы принимаем  $p_0$  или меньшую ошибку если

$$\frac{\sqrt{K} (m - p_0)}{S} \sim t_{K-1}$$

меньше чем  $t_{\alpha, K-1}$



# Сравнительные классификаторы:

- $H_0: \mu_0 = \mu_1$  или  $H_1: \mu_0 \neq \mu_1$
- Однократное обучение/оценка выборки: тест Мак-Нимара

$e_{00}$ : неправильная классификация для обоих примеров	$e_{01}$ : неправильная классификация для 1, но не для 2
$e_{10}$ : неправильная классификация для 2, но не для 1	$e_{11}$ : корректна для обоих примеров

- Под  $H_0$ , мы понимаем  $e_{01} = e_{10} = (e_{01} + e_{10})/2$

Принимаем если <

$$\chi^2_{\alpha, 1}$$

$$\frac{(|e_{01} - e_{10}| - 1)^2}{e_{01} + e_{10}} \sim \chi^2_1$$

# Кросс-валидация по $K$ блокам CV

## $t$ -тест для парных выборок

- Используем кросс-валидацию по  $K$  блокам cv чтобы получить  $K$  обучающих/оценочных блоков
- $p_i^1, p_i^2$ : Ошибки функции классификации 1 и 2 на блоке  $i$
- $p_i = p_i^1 - p_i^2$  : спаренное различие на блоке  $i$
- Нулевая гипотеза это имеет ли  $p_i$  среднее значение,

$$H_0 : \mu = 0 \quad \text{или} \quad H_0 : \mu \neq 0$$

$$m = \frac{\sum_{i=1}^K p_i}{K} \quad s^2 = \frac{\sum_{i=1}^K (p_i - m)^2}{K - 1}$$

$$\frac{\sqrt{K}(m - 0)}{s} = \frac{\sqrt{K} \cdot m}{s} \sim t_{K-1} \quad \begin{array}{l} \text{принимаем, если} \\ \text{находится в интервале } (-t_{\alpha/2, K-1}, t_{\alpha/2, K-1}) \end{array}$$

# Кросс-валидация 5×2 cv t-тест для парных выборок

- Используем 5×2 cv чтобы получить 2 блока из 5 обучений/оценок репликаций (Dietterich, 1998)
- $p_i^{(j)}$  : разница между ошибками 1 и 2 на блоках  $j=1, 2$  репликации  $i=1, \dots, 5$

$$\bar{p}_i = (p_i^{(1)} + p_i^{(2)}) / 2 \quad s_i^2 = (p_i^{(1)} - \bar{p}_i)^2 + (p_i^{(2)} - \bar{p}_i)^2$$

$$\frac{p_1^{(1)}}{\sqrt{\sum_{i=1}^5 s_i^2 / 5}} \sim t_5$$

Двусторонняя проверка: принимаем  $H_0: \mu_0 = \mu_1$  если

находится в интервале  $(-t_{\alpha/2,5}, t_{\alpha/2,5})$

Односторонняя проверка: принимаем  $H_0: \mu_0 \leq \mu_1$

если  $< t_{\alpha,5}$

# Кросс-валидация 5×2 cv F-тест для парных выборок

$$\frac{\sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^2 (p_i^{(j)})^2}{2 \sum_{i=1}^5 s_i^2} \sim F_{10,5}$$

Двусторонняя проверка: Принимаем  $H_0: \mu_0 = \mu_1$  если  $< F_{\alpha,10,5}$

# Сравнение $L > 2$ алгоритмов: анализ отклонений (Дисперсионный анализ)

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_L$$

- Ошибки  $L$  алгоритмов на  $K$  блоках

$$X_{ij} \sim N(\mu_j, \sigma^2), j = 1, \dots, L, i = 1, \dots, K$$

- Мы строим две оценочные функции для  $\sigma^2$ .

Первая действительна если  $H_0$  истина, другая действительна всегда.

Мы отклоняем  $H_0$  если две оценочные функции не совпадают.

Если  $H_0$  верна:

$$m_j = \sum_{i=1}^K \frac{X_{ij}}{K} \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2 / K)$$

$$m = \frac{\sum_{j=1}^L m_j}{L} \quad S^2 = \frac{\sum_j (m_j - m)^2}{L-1}$$

Таким образом оценочной функцией для  $\sigma^2$  является  $K \cdot S^2$ , а именно

$$\hat{\sigma}^2 = K \sum_{j=1}^L \frac{(m_j - m)^2}{L-1}$$

$$\sum_j \frac{(m_j - m)^2}{\sigma^2 / K} \sim \chi_{L-1}^2 \quad SSb \equiv K \sum_j (m_j - m)^2$$

И когда  $H_0$  верно, мы получим

$$\frac{SSb}{\sigma^2} \sim \chi_{L-1}^2$$

В не зависимости от  $H_0$  наша вторая оценочная функция для  $\sigma^2$  это среднее значение групповой дисперсии  $S_j^2$ :

$$S_j^2 = \frac{\sum_{i=1}^K (X_{ij} - m_j)^2}{K-1} \quad \hat{\sigma}^2 = \sum_{j=1}^L \frac{S_j^2}{L} = \sum_j \sum_i \frac{(X_{ij} - m_j)^2}{L(K-1)}$$

$$SSW \equiv \sum_j \sum_i (X_{ij} - m_j)^2$$

$$(K-1) \frac{S_j^2}{\sigma^2} \sim \chi_{K-1}^2 \quad \frac{SSW}{\sigma^2} \sim \chi_{L(K-1)}^2$$

$$\left( \frac{SSb / \sigma^2}{L-1} \right) / \left( \frac{SSW / \sigma^2}{L(K-1)} \right) = \frac{SSb / (L-1)}{SSW / (L(K-1))} \sim F_{L-1, L(K-1)}$$

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_L \text{ if } < F_{\alpha, L-1, L(K-1)}$$

# Другие тесты

- Оценка диапазона (Ньюмена-Койлса): 45 23
- Непараметрические тесты (Критерий знаков, Крускала — Уоллиса)
- Противопоставление: Проверить отличаются ли 1 и 2 от 3,4, и 5
- Множественные сравнения требуют **Поправки Бонферрони** если для достижения уровня  $\alpha$  есть  $m$  гипотез, то каждая из них должна иметь значение  $\alpha/m$ .
- Регрессия: Центральная предельная теорема утверждает что сумма независимых одинаково распределённых случайных величин переменных любого распределения есть величина приблизительно нормальная и к ней могут быть применены предшествующие методы