华东师范大学数据学院人工智能机器学习报告

课程名称： 人工智能	年级：2017
指导教师：罗轶凤	姓名：熊双宇

一、实验目的

1. 回归（Air quality dataset）： 逻辑回归
2. 分类（BLE&RSSI dataset）： SVM、决策树、随机森林
3. 聚类（BLE&RSSI dataset）： DBScan、kmeans、GMM、层次聚类算法

二、实验思路

1. 回归和分类中的算法（监督学习）
    - 划分训练集（training set）和测试集（test set）；
    - 训练集用于训练模型；
    - 测试集用于评估模型。
2. 聚类中的算法为（无监督学习）
    - 所有数据用于训练模型；
    - sklearn.metrics.silhouette_score用于评估模型。

三、实验过程

(一)回归

1. 数据预处理
    - drop(): 除去feature为-200（无效值）的samples；
    - fit_transform(): 先拟合数据，再标准化数据，保证每个维度的特征数据方差为1，均值为0，防止某些维度过大的特征值主导预测结果；
    - train_test_split()：将数据随机划分为训练集和测试集：
        - 训练集X_train包含：Time PT08.S1(CO) NMHC(GT) C6H6(GT) PT08.S2(NMHC) NOx(GT) PT08.S3(NOx) NO2(GT) PT08.S4(NO2) PT08.S5(O3) T RH AH 的samples

          y_train包含：CO(GT)的samples
        - 测试集X_test同训练集X_train, y_test同y_train
2. 实现回归算法
    - rgs=LinearRegression(): 使用scikit-learn的线性回归算法（最小二乘法实现该算法）；
    - rgs.fit(X_train, y_train)：用训练集训练模型；
    - rgs.predict(X_test): 预测测试集labels；

3. 模型评估
    - cross_val_score()：交叉验证模型准确度（cv=10）

```
array([0.95865698, 0.97753118, 0.97882282, 0.95293484, 0.9774073 ,
       0.97068455, 0.9543947 , 0.94802814, 0.95844381, 0.96888202])
Accuracy: 0.96 (+/- 0.02)
```

(二)分类

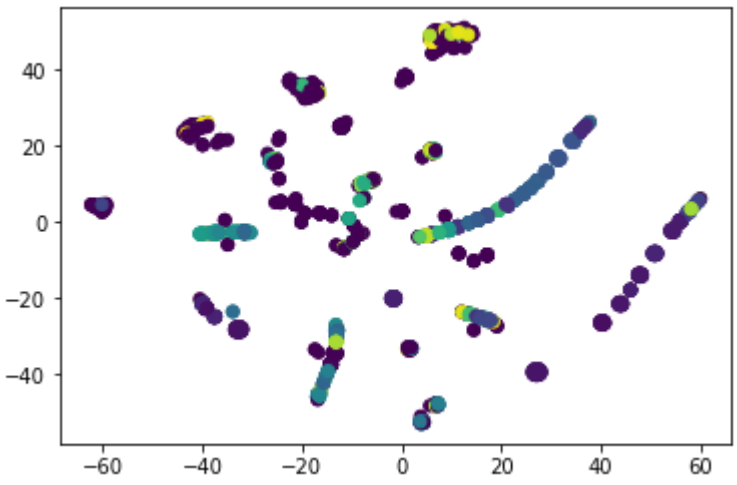
1. 数据预处理
    - LabelEncoder()：分别将date和location由string对应成number；
2. 实现分类算法
    - train_test_split()：将数据随机划分为训练集和测试集;
        - 训练集X_train包含：date b3001 b3002 b3003 b3004 b3005 b3006 b3007 b3008 b3009 b3010 b3011 b3012 b3013的samples

          y_train包含：location 的samples
        - 测试集X_test同训练集X_train, y_test同y_train
    - 用训练集数据训练模型，三种算法：
        - svm.SVC().fit();
        - tree.DecisionTreeClassifier().fit()
        - RandomForestClassifier().fit();
    - predict()：预测labels
    - inverse_transform(): 将分类结果由number转化为对应的string（即location）
3. 评估模型
    - cross_val_score()：交叉验证得出准确度，三种算法效果分别为：（cv=5）
        - ```
          array([0.34055728, 0.46278317, 0.42657343, 0.56226415, 0.5021097 ])
          Accuracy: 0.46 (+/- 0.15)
          ```
        - ```
          array([0.43343653, 0.47572816, 0.43706294, 0.5245283 , 0.38818565])
          Accuracy: 0.45 (+/- 0.09)
          ```
        - ```
          array([0.38080495, 0.33980583, 0.33916084, 0.39245283, 0.35443038])
          Accuracy: 0.36 (+/- 0.04)
          ```

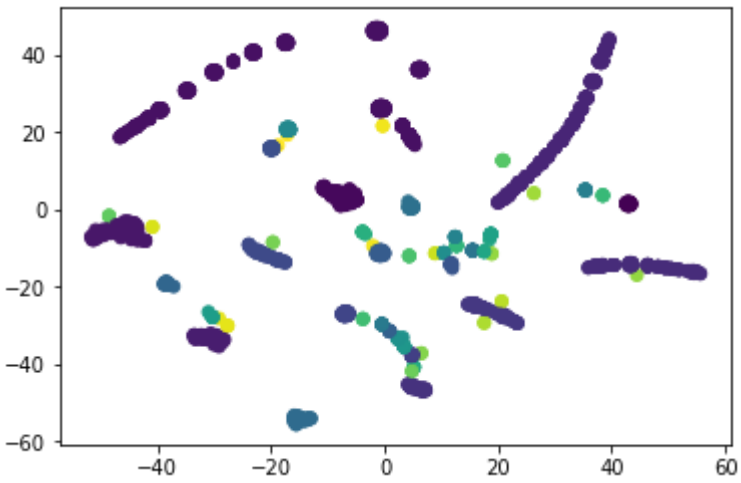
(三)聚类

1. 实现聚类算法：
    - 选择features：date b3001 b3002 b3003 b3004 b3005 b3006 b3007 b3008 b3009 b3010 b3011 b3012 b3013 对应的samples
    - 四种算法进行聚类：
        - DBSCAN().fit()
        - KMeans().fit()
          ```

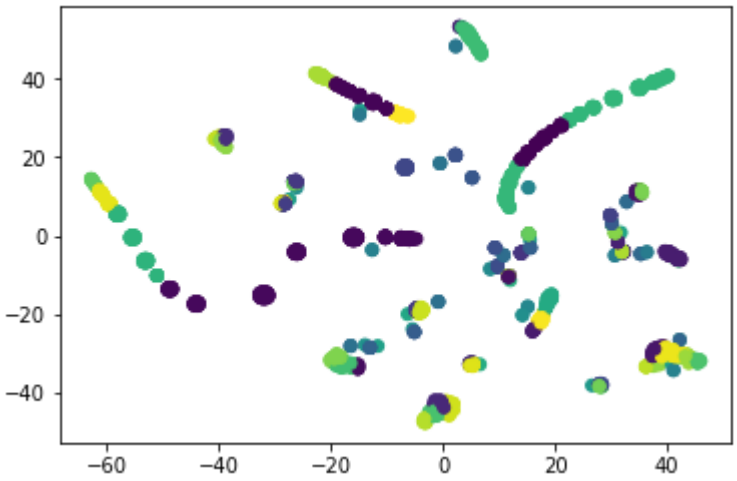
    - GaussianMixture().fit()
    - AgglomerativeClustering().fit()
- 对于每一种聚类算法的结果，进行评估：metrics.silhouette_score()，四种算法聚类效果分别为：
    - DBScan：0.4128485921118394
    - KMeans：0.9275119837253877
    - GMM：0.8719717201085537
    - 层次聚类法：0.2729861875905149
- 对于每一种聚类算法的结果，使用tSNE进行将13维降低至2维：TSNE(n_components=2).fit_transform()
- 可视化：
    - DBScan：



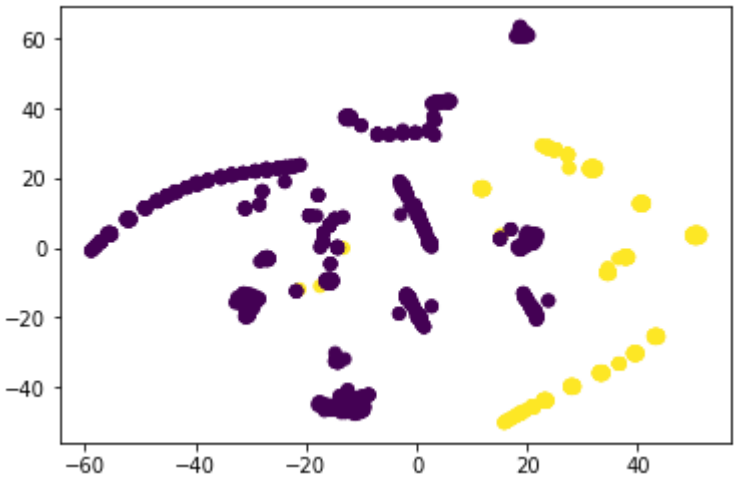
    - KMeans:



    - GMM:

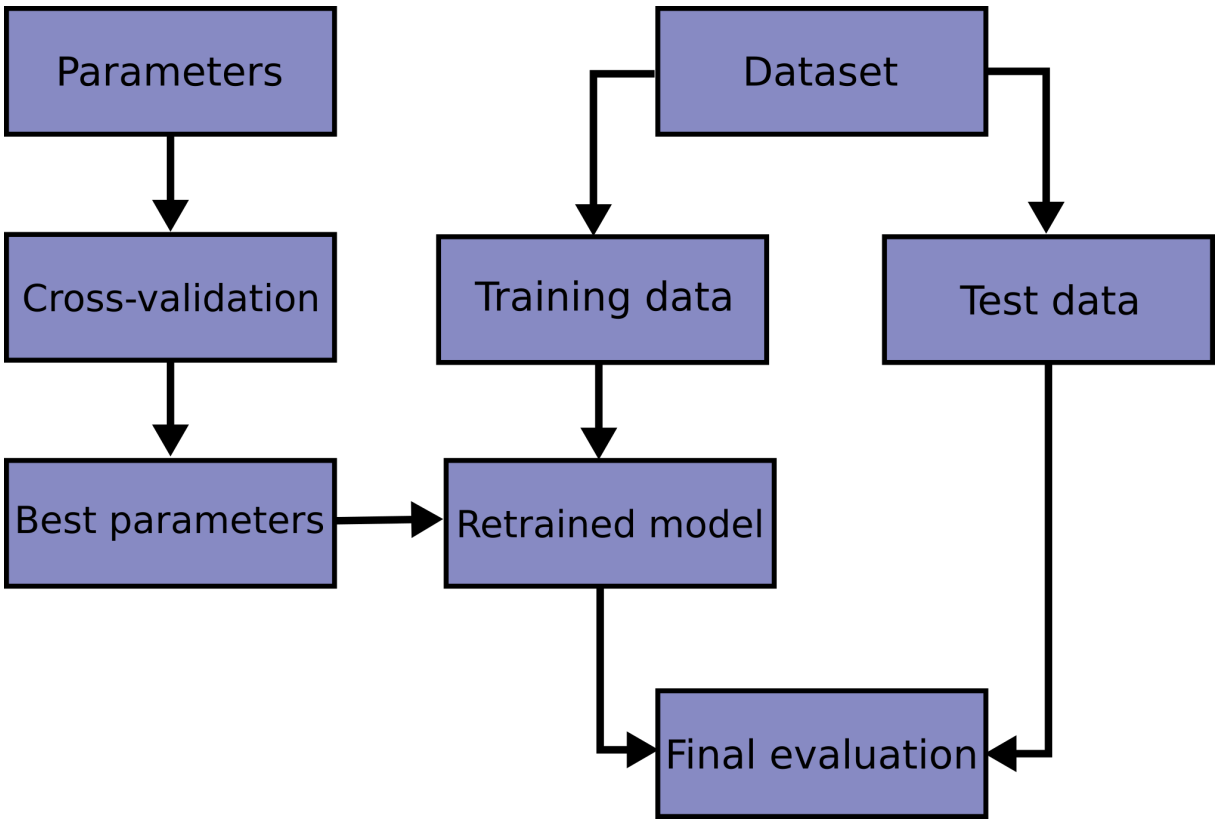


- 层次聚类法：



四、实验反思

1. 交叉验证评估模型，防止过拟合：
    - 流程图：



- 原理：

  在给定的建模样本中，拿出大部分样本进行建模型，留小部分样本用刚建立的模型进行预报，并求这小部分样本的预报误差，记录它们的平方加和。

  交叉验证的一个round包含：

  - partitioning a sample of data into complementary subsets；
  - performing the analysis on one subset (called the *training set*)；
  - validating the analysis on the other subset (called the *validation set* or *testing set*)

  交叉验证往往是在multiple rounds中使用不同的partitions，并且组合validation的结果（比如用平均数）给出模型预测的效果。

- 判断过拟合：
  - 过拟合概念：
    - Overfitting is a modeling error which occurs when a function is too closely fit to a limited set of data points.
    - The model has extracted some of the residual variation (i.e. the noise) ;
    - The model contains more parameters than can be justified by the data;
    - The model shows **high variance and low bias**.
  - 欠拟合概念：
    - The model can't adequately capture the underlying structure of the data.
    - Underfitting occurs if the model or algorithm shows **low variance but high bias**;

2. 轮廓系数对无监督学习进行评估: 结合内聚度和分离度

假设我们已经通过一定算法，将待分类数据进行了聚类。常用的比如使用K-means ，将待分类数据分为了 k 个簇 。对于簇中的每个向量。分别计算它们的轮廓系数。

对于其中的一个点 i 来说：

计算 a(i) = average(i向量到所有它属于的簇中其它点的距离)

计算 b(i) = min (i向量到各个非本身所在簇的所有点的平均距离)

那么 i 向量轮廓系数就为：

$$S(i) = \frac{b(i) - a(i)}{max\{a(i), b(i)\}}$$

可见轮廓系数的值是介于 [-1,1] ，越趋近于1代表内聚度和分离度都相对较优。 [1]

将所有点的轮廓系数求平均，就是该聚类结果总的轮廓系数。

a(i) ：i向量到同一簇内其他点**不相似程度**的平均值

b(i) ：i向量到其他簇的平均**不相似程度**的最小值