Keras深度学习笔记

一 基本概念

1 机器学习基础

1.1 机器学习分类

机器学习根据训练数据和学习目标的关系可分为四类：

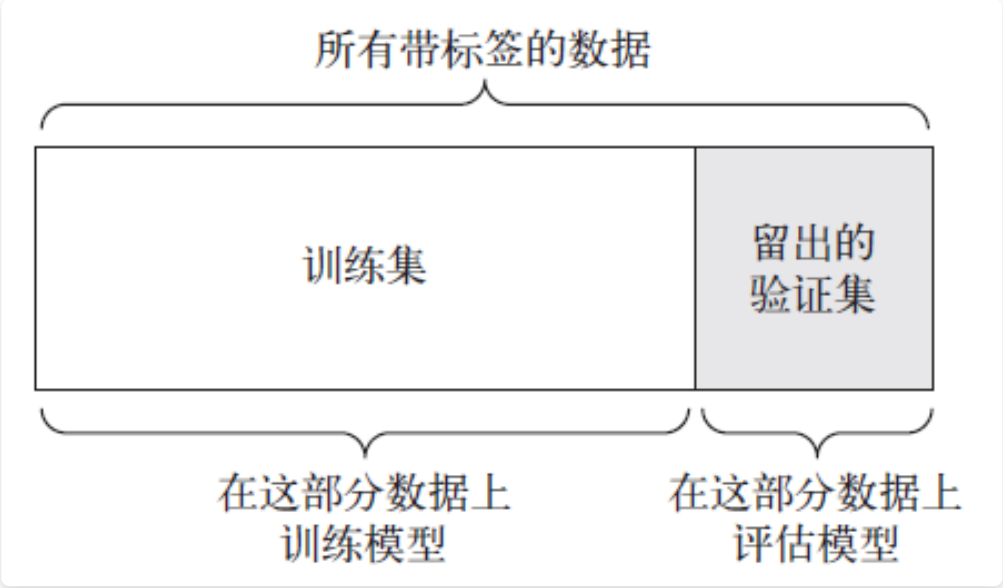
- **监督学习**：监督学习是目前最常见的机器学习类型，给定一组标注过的样本，模型将通过输入数据映射到已知目标。常用的是分类和回归（这两个都是预测，前者对离散数据预测，后者对连续数据预测）。
- **无监督学习**：无监督学习是指在没有目标的情况下寻找输入数据的有趣变换，其目的在于数据可视化、 数据压缩、数据去噪或更好地理解数据中的相关性。常用的是降维和聚类。
- **自监督学习**：自监督学习是没有人工标注的标签的监督学习，可将它看作没有人类参与的监督学习，它是监督学习和无监督学习的过渡阶段。
- **强化学习**：使用奖惩机制，模型接收有关其环境的信息，并学会选择使某种奖励最大化。

1.2 训练集、验证集和测试集

开发模型时总是需要调节模型配置，即调节超参数，所以需要额外使用一部分数据（验证集）来支持该工作的进行。如果直接将数据划为训练集和测试集两部分，前者用于训练模型，后者用于评价模型并调整参数，这样将会导致模型过拟合。造成这一现象的关键在于信息泄露（*information leak*），每次基于模型在验证集上的性能来调节模型超参数，都会有一些关于验证数据的信息泄露到模型中。训练集、验证集和测试集的配比通常6:2:2，如数据量很大（过百万）可以调整为98:1:1。数据量小时，可使用简单的留出验证、K 折验证以及带有打乱数据的重复K 折验证。

1. **简单的留出验证（*hold-out validation*）**

留出一定比例的数据作为测试集。在剩余的数据上训练模型，然后在测试集上评估模型。这是最简单的评估方法，但有一个缺点：如果可用的数据很少，那么可能验证集和测试集包含的样本就太少，从而无法在统计学上代表数据。



简单的留出验证数据划分

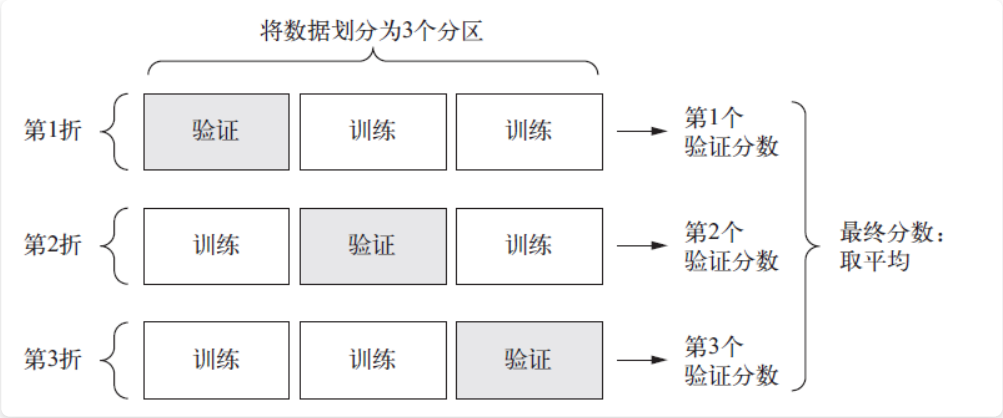
> **注：**上图是在测试集划分后，对训练集和测试集进行划分

> **代码模板：**

```
num_validation_samples = 10000
# 打乱数据
np.random.shuffle(data)
validation_data = data[:num_validation_samples]
data = data[num_validation_samples:]
training_data = data[:]
model = get_model()
model.train(training_data)
validation_score = model.evaluate(validation_data)
# 现在你可以调节模型、重新训练、评估，然后再次调节
model = get_model()
model.train(np.concatenate([training_data,validation_data]))
test_score = model.evaluate(test_data)
```

2. **K折验证（*K-fold validation*）**

将数据划分为大小相同的K 个分区。对于每个分区i，在剩余的K-1 个分区上训练模型，然后在分区i上评估模型。最终分数等于K 个分数的平均值。对于不同的训练集- 测试集划分，如果模型性能的变化很大，那么这种方法很有用。



3 折验证

> **代码模板：**

```
k = 4
num_validation_samples = len(data) // k

np.random.shuffle(data)

validation_scores = []
for fold in range(k):
 validation_data = data[num_validation_samples * fold:
                        num_validation_samples * (fold + 1)]
 training_data = np.concatenate([data[:num_validation_samples * fold],
                                 data[num_validation_samples * (fold +
1):]],
                                 axis=0)
 model = get_model()
 model.train(training_data)
 validation_score = model.evaluate(validation_data)
 validation_scores.append(validation_score)
```

```
validation_score = np.average(validation_scores)

model = get_model()
model.train(data)
test_score = model.evaluate(test_data)
```

3. **带有打乱数据的重复K 折验证（*iterated K-fold validation with shuffling*）**

具体做法是多次使用K 折验证，在每次将数据划分为K 个分区之前都先将数据打乱。最终分数是每次K 折验证分数的平均值。注意，这种方法一共要训练和评估P×K 个模型（P是重复次数），计算代价很大。（**Kaggle常用**）

> **注：**
>
> 1. 在将数据划分为训练集和测试集 之前，通常应该随机打乱数据。
>
> 2.如果是时序数据，那么在划分数据前不应该随机打乱数据，因为这么做会造成时间泄露（temporal leak）。
>
> 3.一 定要确保训练集和验证集之间没有交集。

1.3 数据预处理

- **向量化：**神经网络的所有输入和目标都必须是浮点数张量（在特定情况下可以是整数张量）。
- **值标准化：**一般来说，将取值相对较大的数据（比如多位整数，比网络权重的初始值大很多）或异质数据（*heterogeneous data*，比如数据的一个特征在0~1 范围内，另一个特征在100~200 范围内）输入到神经网络中是不安全的。这么做可能导致较大的梯度更新，进而导致网络无法收敛。

  输入数据应有以下特征。

  - **取值较小：**大部分值都应该在 0~1 范围内。
  - **同质性（*homogenous*）：**所有特征的取值都应该在大致相同的范围内。
- **处理缺失值：**对于神经网络，将缺失值设置为0 是安全的，只要0 不是一个有意义的值。（注：不能训练集无缺失值，而测试集有缺失值，在这种情况下，网络不可能学会忽略缺失值。）

1.4 特征工程

特征工程的本质：用更简单的方式表述问题，从而使问题变得更容易。它通常需要深入理解问题。

但对于现代深度学习，大部分特征工程都是不需要的，因为神经网络能够从原始数据中自动提取有用的特征。但也需要注重特征工程，因为：

- 良好的特征仍然可以让你用更少的资源更优雅地解决问题。
- 良好的特征可以让你用更少的数据解决问题。

1.5 过拟合和欠拟合

训练数据上的损失越小，测试数据上的损失也越小。这时的模型是欠拟合（*underfit*）的，即仍有改进的空间，网络还没有对训练数据中所有相关模式建模，解决方案是继续学习或增加模型复杂度。但在训练数据上迭代一定次数之后，泛化不再提高，验证指标先是不变，然后开始变差，即模型开始过拟合，最优解决方法是获取更多的训练数据或者使用正则化。

过拟合的解决方法：

- 获得更多数据
- 减少网络容量
- 权重正则化

```
from keras import regularizers
regularizers.l1(0.001) # L1正则化
regularizers.l1_l2(l1=0.001, l2=0.001) # L2正则化

model.add(layers.Dense(16, kernel_regularizer=regularizers.l2(0.001),
activation='relu'))
```

- dropout正则化

  `model.add(layers.Dropout(0.5))`

1.6 机器学习一般流程

- 定义问题与要训练的数据。收集这些数据，有需要的话用标签来标注数据。
- 选择衡量问题成功的指标。你要在验证数据上监控哪些指标？
- 确定评估方法：留出验证？ K折验证？你应该将哪一部分数据用于验证？
- 开发第一个比基准更好的模型，即一个具有统计功效的模型。
- 开发过拟合的模型。
- 基于模型在验证数据上的性能来进行模型正则化与调节超参数。

2 Keras基础

2.1 层的概念

简单的向量数据保存在形状为 `(samples, features)` 的**2D 张量**中，通常用**密集连接层** [densely connected layer，也叫全连接层（fully connected layer）或密集层（dense layer），对应于 `Keras` 的 `Dense` 类] 来处理。**序列数据**保存在形状为 `(samples, timesteps, features)` 的**3D 张量**中，通常用循环层（recurrent layer，比如 `Keras` 的 `LSTM` 层）来处理。**图像数据**保存在**4D 张量**中，通常用二维卷积层（`Keras` 的 `Conv2D`）来处理。

```
from keras import models
from keras import layers
# 模型中添加的层都会自动匹配输入层的形状
model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(32, input_shape=(784,)))
model.add(layers.Dense(32)) # 输入神经元数量为上一层的输出数量
```

2.2 损失值与优化器

对于**二分类问题**，可以使用**二元交叉熵**（`binary_crossentropy`）损失函数；对于**多分类问题**，可以用**分类交叉熵**（`categorical_crossentropy`）损失函数；对于**回归问题**，可以用**均方误差（mean-squared error）**损失函数；对于**序列**学习问题，可以用**联结主义时序分类（CTC**，connectionist temporal classification）损失函数，等等。

问题类型	最后一层激活	损失函数
二分类问题	sigmoid	binary_crossentropy
多分类、单标签问题	softmax	categorical_crossentropy
多分类、多标签问题	sigmoid	binary_crossentropy
回归到任意值	无	mse
回归到0~1范围内的值	sigmoid	mse 或binary_crossentropy

2.3 Keras开发流程

1. 定义训练数据：输入张量和目标张量。
2. 定义层组成的网络（或模型），将输入映射到目标。
3. 配置学习过程：选择损失函数、优化器和需要监控的指标。
4. 调用模型的`fit`方法在训练数据上进行迭代。

> **注：**
>
> 1. 定义模型有两种方法，一种是使用`Sequential`类（仅用于层的线性堆叠，这是目前最常见的网络架构），另一种是函数式API（functional API，用于层组成的有向无环图，让你可以构建任意形式的架构）；
>
> 2.编译模型中的优化器、损失和指标可自定义，通过`optimizer`、`loss`和`metrics`类设置。

> **代码模板：**

```
from keras import models
from keras import layers
from keras import optimizers
# Sequential 类
model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(32, activation='relu', input_shape=(784,)))
model.add(layers.Dense(10, activation='softmax'))
# 函数API定义
input_tensor = layers.Input(shape=(784,))
x = layers.Dense(32, activation='relu')(input_tensor)
output_tensor = layers.Dense(10, activation='softmax')(x)
model = models.Model(inputs=input_tensor, outputs=output_tensor)

# 编译
model.compile(optimizer=optimizers.RMSprop(lr=0.001),
              loss='mse',
              metrics=['accuracy'])
# 拟合
model.fit(input_tensor, target_tensor, batch_size=128, epochs=10)

# 评估
model.evaluate(x_test, y_test)

# 预测
model.predict(x_test) # 模型精度合理，可用于实践
```

二 常见问题基本模板

1 二分类问题

> **问题描述**：预测电影评论的情绪，即电影评论分类
>
> **数据**：IMDB数据集
>
> **损失函数**：二分交叉熵（`binary_crossentropy`）
>
> **评估指标**：精度（`accuracy`）

代码模板：

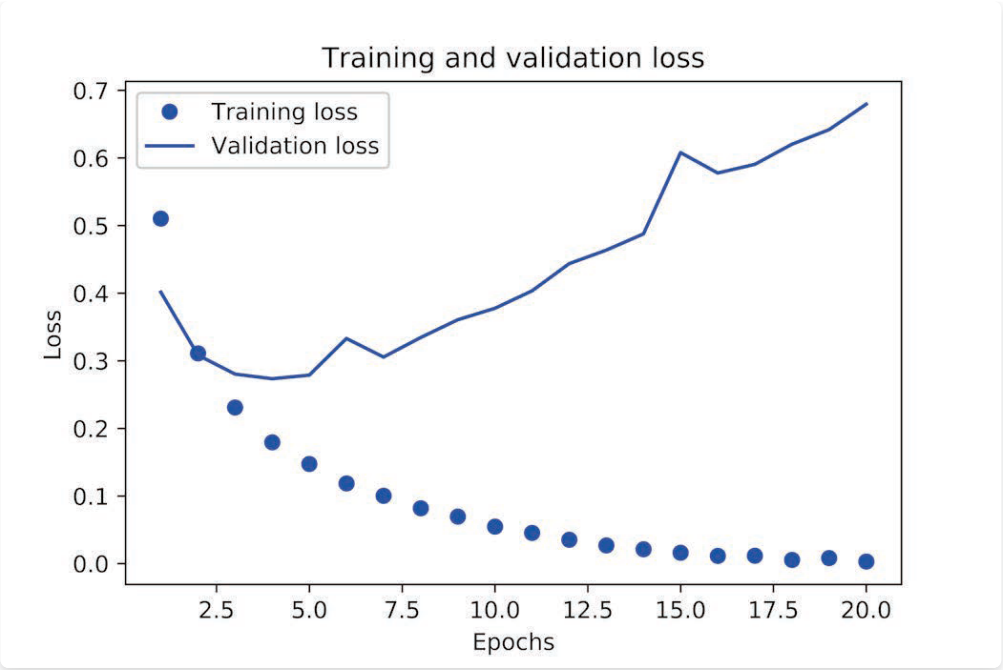
- **模型构建与测试**

```
model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(16, activation="relu", input_shape=(10000,)))
model.add(layers.Dense(16, activation="relu"))
model.add(layers.Dense(1, activation="sigmoid"))
# 使用验证集，该验证集非test，是developement数据集，
x_val = x_train[:10000]
partial_x_train = x_train[10000:]
y_val = y_train[:10000]
partial_y_train = y_train[10000:]

model.compile(optimizer='rmsprop',
              loss='binary_crossentropy',
              metrics=['acc'])
# fit方法返回一个History对象
history = model.fit(partial_x_train,
                    partial_y_train,
                    epochs=20,
                    batch_size=512,
                    validation_data=(x_val, y_val))
# 该对象有loss和accuracy的字典
history_dict = history.history
```

- **绘制学习曲线**

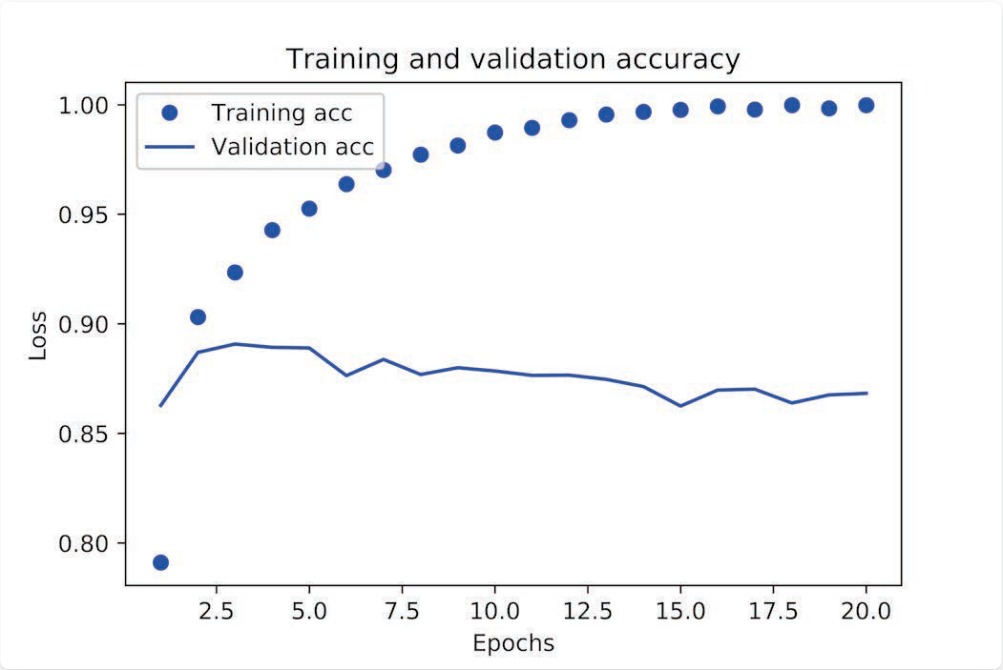
```
#使用matplotlib绘制训练成本图
loss_values = history_dict['loss']
val_loss_values = history_dict['val_loss']
epochs = range(1, len(loss_values) + 1)
plt.plot(epochs, loss_values, 'bo', label='Training loss')
plt.plot(epochs, val_loss_values, 'b', label='Validation loss')
plt.title('Training and validation loss')
plt.xlabel('Epochs')
plt.ylabel('Loss')
plt.legend()
```



loss曲线

- **绘制精度曲线**

```
#使用matplotlib绘制训练精度图
acc = history_dict['acc']
val_acc = history_dict['val_acc']
plt.plot(epochs, acc, 'bo', label='Training acc')
plt.plot(epochs, val_acc, 'b', label='Validation acc')
plt.title('Training and validation accuracy')
plt.xlabel('Epochs')
plt.ylabel('Accuracy')
plt.legend()
```



accuracy曲线

> **分析：**根据两幅图，可知发生了过拟合，在第3轮时应该停止训练（或者使用其他降低过拟合的方法）

- **模型调整**

```
model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(16, activation='relu', input_shape=(10000,)))
model.add(layers.Dense(16, activation='relu'))
model.add(layers.Dense(1, activation='sigmoid'))
model.compile(optimizer='rmsprop',
loss='binary_crossentropy',
metrics=['accuracy'])
model.fit(x_train, y_train, epochs=4, batch_size=512)
results = model.evaluate(x_test, y_test)
model.predict(x_test) # 模型精度合理，可用于实践
```

> **注：**无论你的问题是什么，`rmsprop`优化器通常都是足够好的选择

2 多分类问题

> **问题描述：**预测新闻的主题，即对新闻进行多分类
>
> **数据：**路透社数据集
>
> **损失函数：**分类交叉熵（`categorical_crossentropy`）
>
> **评估指标：**精度（`accuracy`）

> **代码模板：**
>
> - **数据清洗—独热编码**
>
> *极大可能会用到，由于这是`Keras`笔记，故不介绍`skleran`等其他实现方法*
>
> `one_hot_train_labels = to_categorical(train_labels)`
>
> - **模型构建与测试**
>
> 曲线和分析什么的同上，故不介绍，直接贴模型

```
model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(64, activation="relu", input_shape=(10000,)))
model.add(layers.Dense(64, activation="relu"))
model.add(layers.Dense(64, activation="relu"))
model.add(layers.Dense(46, activation="softmax")) #输出层维数的等于独热编码的维数
model.compile(optimizer='rmsprop',
       loss='categorical_crossentropy',
       metrics=['accuracy'])

x_val = x_train[:1000]
partial_x_train = x_train[1000:]
y_val = one_hot_train_labels[:1000]
partial_y_train = one_hot_train_labels[1000:]

model.fit(partial_x_train,
          partial_y_train,
          epochs=20,
          batch_size=512,
          validation_data=(x_val, y_val))
model.evaluate(x_test, one_hot_test_labels)
```

> **注：**

> 1.如果要对 *N*个类别的数据点进行分类，网络的最后一层应该是大小为 *N*的`Dense`层。一种合理的解释为，试图将大量信息（这些信息足够恢复 *N*个类别的分割超平面）压缩到维度很小的中间空间，从而导致信息丢失、精度下降。
>
> 2. 对于单标签、多分类问题，网络的最后一层应该使用softmax 激活，这样可以输出在N个输出类别上的概率分布。
>
> 3. 这种问题的损失函数几乎总是应该使用**分类交叉熵**。它将网络输出的概率分布与目标的真实分布之间的距离最小化。
>
> 4. 处理多分类问题的标签有两种方法：
>
> - 通过分类编码（也叫`one-hot`编码）对标签进行编码，然后使用`categorical_crossentropy`作为损失函数。
> - *将标签编码为整数，然后使用`sparse_categorical_crossentropy`损失函数。

3 回归问题

> **问题描述**：预测房价
>
> **数据**：波士顿房价数据集
>
> **损失函数**：均方误差（`MSE, mean squared error`）
>
> **评估指标**：平均绝对误差（`MAE, mean absolute error`）

> **代码模板**：
>
> - **数据清洗—标准化**

建模时基本会用到，这也不是回归问题的专属，前者分类问题也需用到

这里只介绍如何实现，也可使用`skleran.preprocessing.StandardScaler`实现

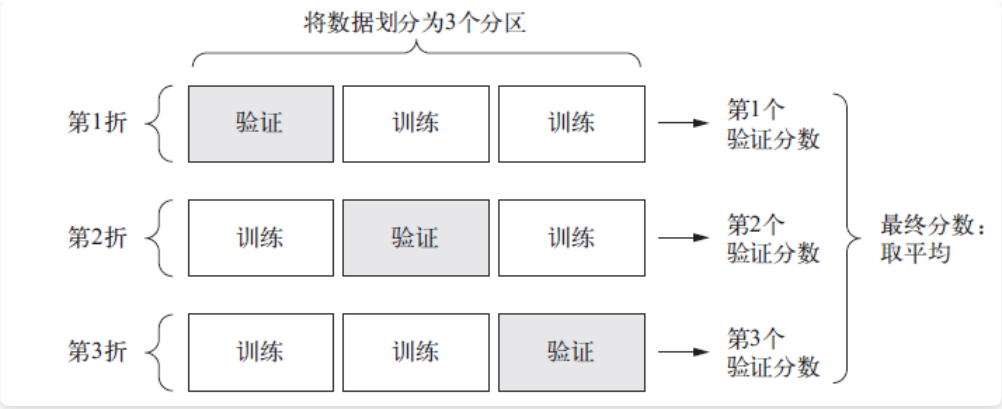
```
mean = train_data.mean(axis=0)
train_data -= mean
std = train_data.std(axis=0)
train_data /= std

# 虽然已知测试集，但也要用训练集的均值和标准差来计算
test_data -= mean
test_data /= std
```

> - **模型构建与测试**

```
def build_model():
    model = models.Sequential()
    model.add(layers.Dense(64, activation='relu',
         input_shape=(train_data.shape[1],)))
    model.add(layers.Dense(64, activation='relu'))
    model.add(layers.Dense(1))
    model.compile(optimizer='rmsprop', loss='mse', metrics=['mae'])
    return model
```

> - **K折交叉验证（取决于数据量）**



3折交叉验证

曲线和分析什么的同上，故不介绍，直接贴模型

```
k = 4
num_val_samples = len(train_data) // k
num_epochs = 100
all_scores = []

for i in range(k):
    print("processing fold # ", i)
    val_data = train_data[i * num_val_samples : (i + 1) * num_val_samples]
    val_targets = train_targets[i * num_val_samples : (i + 1) *
num_val_samples]

    # 合并剩下来的数据
    partial_train_data =  np.concatenate([train_data[:i * num_val_samples],
                        train_data[(i + 1) * num_val_samples:]],
                        axis=0)
    partial_train_targets =  np.concatenate([train_targets[:i *
num_val_samples],
                          train_targets[(i + 1) * num_val_samples:]],
                          axis=0)

    model = build_model()
    model.fit(partial_train_data, partial_train_targets,
          epochs=num_epochs, batch_size=1, verbose=0)
    val_mse, val_mae = model.evaluate(val_data, val_targets, verbose=0)
    all_scores.append(val_mae)
```

注：

1.回归常用的损失函数为均方误差（*MSE*），常用的评估指标为平均绝对误差（*MAE*）。

2.如果可用的数据很少，可使用K折验证评估模型，此时也应使用小的网络，即隐藏层较少，否则将造成过拟合。

Author：钱小z

Email：qz_gis@163.com

Bio：GISer，Spatiotemporal data mining

GItHub：QianXzhen