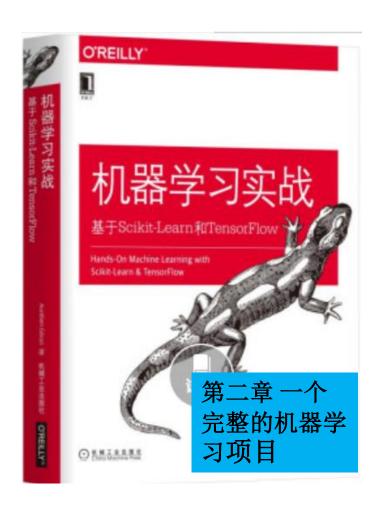
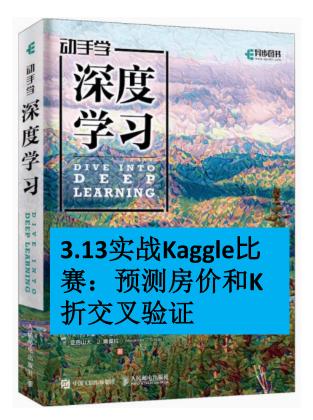
第2章一个完整的机器学习项目

参考资料





基于MXNet开源深度学习框架 https://zh.d2l.ai/

https://github.com/ageron/handson-ml

机器学习项目的通用工作流程

- 1定义问题:软件架构设计、确定评价指标
- 2 获取数据: 自动化方式
- 3 研究数据: 可视化方式, 相关性研究等
- 4准备数据:数据清理、特征选择及处理
- 5 研究模型:确定评估方法、列出可能的模型并训练,选择最有希望的3~5个模型
- 6微调模型:寻找最佳超参数,模型融合,评估泛化性能
- 7展示解决方案:将工作进行文档化总结展示
- 8启动、监视、维护系统:投入使用

1定义问题

- 1.1 了解可用的开放数据集
- 1.2 进行业务需求分析
- 1.3 设定问题
- 1.4 选择模型评估指标
- 1.5 检查问题假设是否正确

1.1 了解可用的开放数据集

- 常见的开放数据集:
 - 流行的开源数据仓库:
 - UC Irvine Machine Learning Repository
 - Kaggle datasets
 - Amazon's AWS datasets
 - 准入口(提供开源数据列表)
 - http://dataportals.org/
 - http://opendatamonitor.eu/
 - http://quandl.com/
 - 其它列出流行开源数据仓库的网页:
 - Wikipedia's list of Machine Learning datasets
 - Quora.com question
 - Datasets subreddit

1.1 了解可用的开放数据集

• 本章中用到的数据集:来自StatLib库的加州住房

价格的数据集

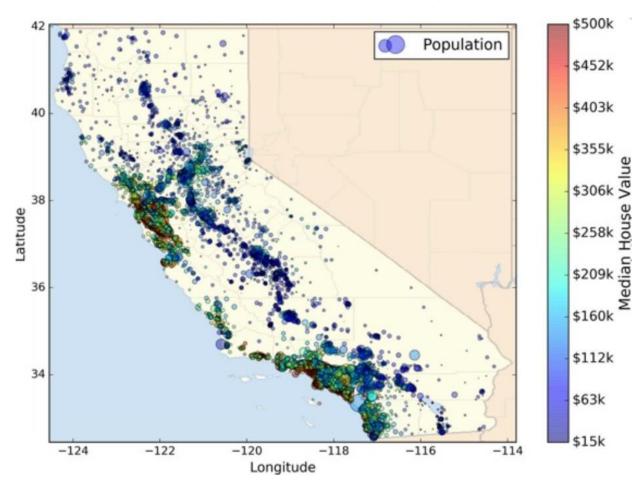


图 2-1 加州房产价格

1.2 进行业务需求分析——What & Why & How?

- 需求分析是: 明确客户的真正需求
- · 需求分析的结果将决定: (从SE角度)
 - 问题设定(概要设计)
 - 算法选择(详细设计)
 - 模型评估指标(测试)
- 如何进行需求分析?
 - 以问问题的形式
 - Q1: 本项目的商业目标是什么? 即: 公司要如何使用、并从模型受益?
 - Q2: 现在有解决方案吗? 效果如何?
 - 老板通常会给一个参考性能,以及如何解决问题。

1.2 进行业务需求分析——示例

项目概述:利用加州普查数据,建立一个加州房价模型。这个数据包含每个街区组的人口、收入中位数、房价中位数等指标。

	longitude	latitude	housing_median_age	total_rooms	total_bedrooms	population
0	-122.23	37.88	41.0	880.0	129.0	322.0
1	-122.22	37.86	21.0	7099.0	1106.0	2401.0
2	-122.24	37.85	52.0	1467.0	190.0	496.0
3	-122.25	37.85	52.0	1274.0	235.0	558.0
4	-122.25	37.85	52.0	1627.0	280.0	565.0

每行数据代表一个街区,每条数据包含**10**个属性:经度、纬度、房龄中位数,房间总数,卧室总数,人口数,家庭数,收入中位数,房价中位数,海洋临近度。

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 20640 entries, 0 to 20639
Data columns (total 10 columns):
longitude
                      20640 non-null float64
latitude
                      20640 non-null float64
housing median age 20640 non-null float64
total rooms
                      20640 non-null float64
total bedrooms
                      20433 non-null float64
population
                      20640 non-null float64
households
                      20640 non-null float64
median income
                      20640 non-null float64
median house value
                      20640 non-null float64
ocean proximity
                      20640 non-null object
```

符号约定说明

x 标量(整数或实数)

x: 向量

X: 矩阵

X: 张量

第i个样本: x⁽ⁱ⁾

第i个样本的第j个属性的取值: x⁽ⁱ⁾[j]

真实值(标签): y

预测的值: y

• Q1: 本项目的商业目标是什么? 即: 公司要如何使用、并从模型受益?

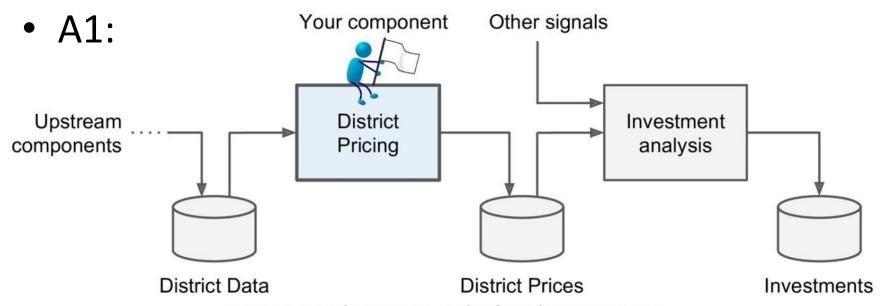


Figure 2-2. A Machine Learning pipeline for real estate investments

输入: 区域数据,每条数据包含每个街区组的人口、收入中位数、

房价中位数等指标

输出: 区域价格,该价格被用来决策一个给定的区域是否值得投资

- Q2: 现在有解决方案吗? 效果如何?
- A2: 现在街区的房价是靠专家手工估计的,专家队伍收集最新的关于一个区的信息 (不包括房价中位数),他们使用复杂的 规则进行估计。这种方法费钱费时间,而 且估计结果不理想,误差率大概有15%。

1.3 设定问题

- 确定应用场景:
 - 监督学习? 无监督学习? 半监督学习?
- 确定任务:
 - 回归? 分类? 其他?
- 确定学习类型: (取决于训练数据集是否需要不断在线更新)
 - 批量学习? 在线学习?

1.3 设定问题——示例

• 回顾: 项目需求分析

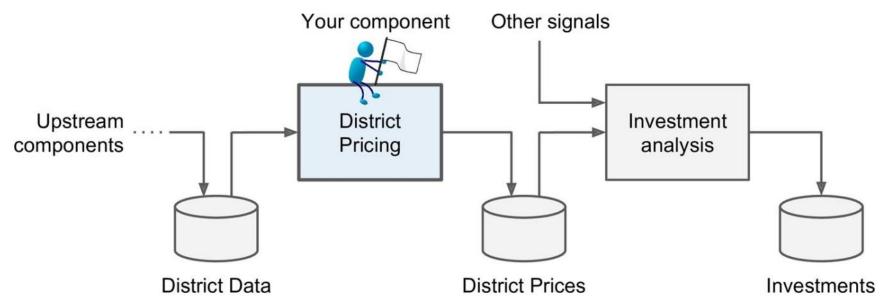


Figure 2-2. A Machine Learning pipeline for real estate investments

输入: 区域数据,每条数据包含每个街区组的人口、收入中位数、 房价中位数等指标

输出: 区域价格, 该价格被用来决策一个给定的区域是否值得投资

1.3 设定问题——示例

• 回顾: 项目需求分析

应用场景: 监督学习 任务: 回归 学习类型: 批量学习

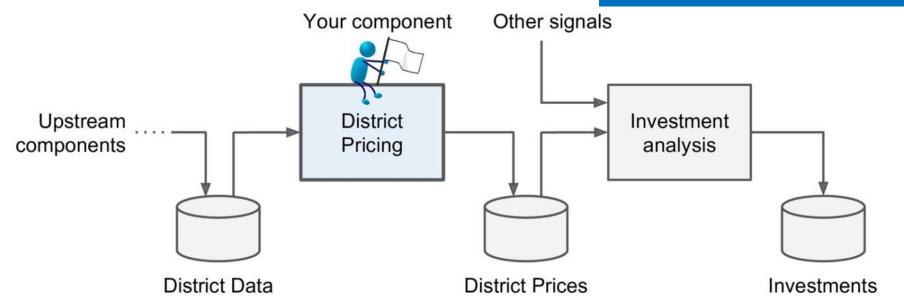


Figure 2-2. A Machine Learning pipeline for real estate investments

输入: 区域数据,每条数据包含每个街区组的人口、收入中位数、 房价中位数等指标

输出: 区域价格,该价格被用来决策一个给定的区域是否值得投资

1.4 选择模型评估指标

- 测量预测值和目标值两个向量距离的方法: RMSE 和MAE
- 回归问题的典型指标是<mark>均方根误差(RMSE)</mark>

RMSE
$$(X, h) = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2}$$

- 均方根误差测量的是系统预测误差的标准差。例如,RMSE等于50000,意味着,68%的系统预测值位于实际值的50000美元以内,95%的预测值位于实际值的100000美元以内(一个特征通常都符合高斯分布,即满足"68-95-99.7"规则:大约68%的值落在1σ内,95%的值落在2σ内,99.7%的值落在3σ内,这里的σ等于50000)。

• MAE: 平均绝对误差(Mean Absolute Error, 也称作平均绝对偏差)

MAE
$$(X, h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} |h(x^{(i)}) - y^{(i)}|$$

1.5 检查问题假设是否正确

- 检查问题设定是否正确
 - 确认模型的输出正是下游环节所需要的输入。

2 获取数据

- 2.1 安装Python, Jupyter Notebook, Scikit-Learn, Pandas, Numpy, Matplotlib等
- 2.2 启动Jupyter,编写"Hello word"测试程序。
- 2.3 编程实现数据的获取、加载和观察
 - 自动获取数据:从指定地址自动获取数据,并 解压保存到指定目录下。
 - 加载数据: 使用Pandas
 - 快速查看数据结构:

- -快速查看数据结构:
 - 使用DataFrame的head()方法和info()方法
 - -head()方法可查看该数据集的前5行
 - info()方法可以快速查看数据的描述,特别是总行数、每个属性的类型和非空值的数量
 - 使用value_counts()方法查看Object类型的项中都有哪些类别,每个类别中都包含有多少条数据
 - describe()方法展示了数值属性的概括
 - 调用hist()方法画出每个数值属性的柱状图

 每一行都表示一个街区。共有10个属性 (截图中可以看到6个):经度、维度、房 屋年龄中位数、总房间数、总卧室数、人 口数、家庭数、收入中位数、房屋价值中 位数、离大海距离。

housing = load housing data() housing.head() Out[5]: longitude latitude housing median age total rooms total bedrooms population 0 -122.23 37.88 41.0 880.0 129.0 322.0 1 -122.22 37.86 21.0 7099.0 1106.0 2401.0 2 -122.24 37.85 52.0 1467.0 496.0 190.0 3 -122.25 37.85 52.0 1274.0 235.0 558.0 4 -122.25 37.85 52.0 1627.0 280.0 565.0

图 2-5 数据集的前五行

• info()方法可以快速查看数据的描述,特别是总行数、每个属性的类型和非空值的数量

```
In [6]: housing.info()
        <class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
        RangeIndex: 20640 entries, 0 to 20639
        Data columns (total 10 columns):
                             20640 non-null float64
        longitude
        latitude
                             20640 non-null float64
        housing_median_age 20640 non-null float64
        total rooms
                           20640 non-null float64
        total bedrooms
                           20433 non-null float64
        population
                             20640 non-null float64
        households
                             20640 non-null float64
        median income
                             20640 non-null float64
        median house value 20640 non-null float64
       ocean proximity
                             20640 non-null object
        dtypes: float64(9), object(1)
        memory usage: 1.6+ MB
```

• info()方法可以快速查看数据的描述,特别是总行数、每个属性的类型和非空值的数量

```
In [6]: housing.info()
       <class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
       RangeIndex: 20640 entries, 0 to 20639
       Data columns (total 10 columns):
       longitude
                            >>> housing["ocean_proximity"].value_counts(
       latitude
                            <1H OCEAN
                                           9136
       housing median age
                            TNLAND
                                           6551
       total rooms
                            NEAR OCEAN 2658
       total bedrooms
                            NEAR BAY
                                      2290
       population
                            ISLAND
       households
                            Name: ocean_proximity, dtype: int64
       median income
                             20640 non-null float64
       median house value
       ocean proximity
                             20640 non-null object
       dtypes: float64(9), object(1)
       memory usage: 1.6+ MB
```

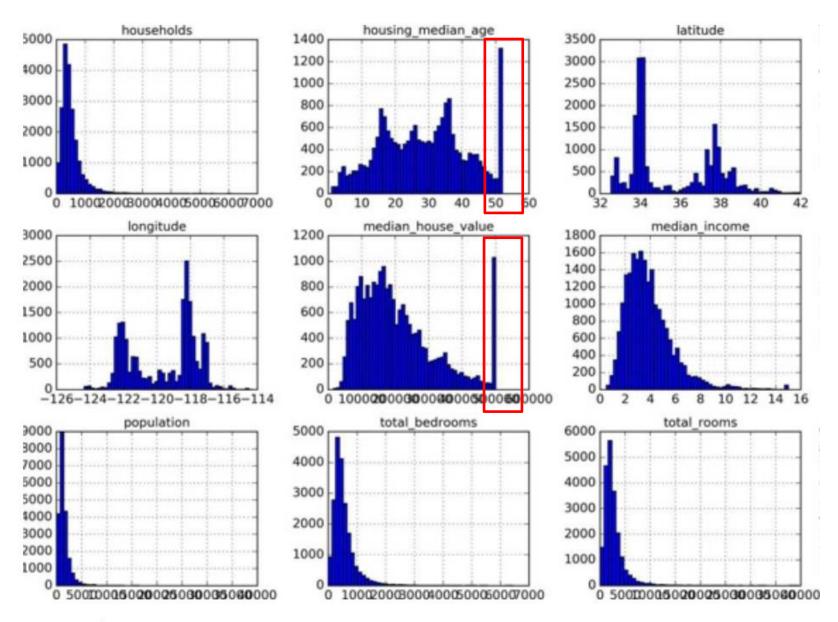


图 2-8 每个数值属性的柱状图

2 获取数据

- 2.4 创建测试集:从完整数据集中随机选择一些实例作为测试集
 - Why? 避免数据透视偏差
 - How?
 - 抽样方法的选择: 纯随机抽样? 分层抽样?
 - 需设置随机数生成器的种子。为什么?
 - 若应用场景中完整数据集总是会更新时,如何创建数据集?
 - 如何判断哪种抽样方法更好?
 - 评判依据:需避免抽样偏差,即测试集中数据的分布规律应与完整数据集是一致的。

- 如何创建测试集? 避免数据透视偏差
 - 纯随机抽样

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
train_set, test_set = train_test_split(housing, test_size=0.2, random_state=42)
```

- 分层抽样

- 如何创建测试集? 避免数据透视偏差
 - 纯随机抽样

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
train_set, test_set = train_test_split(housing, test_size=0.2, random_state=42)
```

- 分层抽样
 - 增加"收入类别"属性

```
housing["income_cat"] = np.ceil(housing["median_income"] / 1.5)
housing["income_cat"].where(housing["income_cat"] < 5, 5.0, inplace=True)</pre>
```

• 根据收入类别,进行分层抽样

```
from sklearn.model_selection import StratifiedShuffleSplit

split = StratifiedShuffleSplit(n_splits=1, test_size=0.2, random_state=42)

for train_index, test_index in split.split(housing, housing["income_cat"]):
    strat_train_set = housing.loc[train_index]
    strat_test_set = housing.loc[test_index]
```

- 创建测试集时,若应用场景中数据集总是 更新,那如何保证新的测试数据集中不会 出现以前的训练集中的实例呢?
 - 利用Hash值

```
import hashlib

def test_set_check(identifier, test_ratio, hash):
    return hash(np.int64(identifier)).digest()[-1] < 256 * test_ratio

def split_train_test_by_id(data, test_ratio, id_column, hash=hashlib.md5):
    ids = data[id_column]
    in_test_set = ids.apply(lambda id_: test_set_check(id_, test_ratio, hash))
    return data.loc[~in_test_set], data.loc[in_test_set]</pre>
```

- -房价预测问题中,ID值如何选择?
- housing_with_id = housing.reset_index() # adds an `index` column
 train_set, test_set = split_train_test_by_id(housing_with_id, 0.2, "index")
- housing_with_id["id"] = housing["longitude"] * 1000 + housing["latitude"] train_set, test_set = split_train_test_by_id(housing_with_id, 0.2, "id")

2.4 创建测试集

- 如何判断哪种抽样方法更好?
- 图2-10对比了总数据集、分层采样的测试集、纯随机采样测试集的收入分类比例。可以看到,分层采样测试集的收入分类比例与总数据集的收入分类比例与总数据集几乎相同,而随机采样数据集偏差严重。
- 评判依据: 需避免抽样偏差,即测试集中数据的分布规律应与完整数据集是一致的。

• 纯随机抽样 VS. 分层抽样

	Overall	Random	Stratified	Rand. %error	Strat. %error
1.0	0.039826	0.040213	0.039738	0.973236	-0.219137
2.0	0.318847	0.324370	0.318876	1.732260	0.009032
3.0	0.350581	0.358527	0.350618	2.266446	0.010408
4.0	0.176308	0.167393	0.176399	-5.056334	0.051717
5.0	0.114438	0.109496	0.114369	-4.318374	-0.060464

图 2-10 分层采样和纯随机采样的样本偏差比较

- 可视化地理数据和房价数据
- 寻找数值类属性之间的相关性

• Tips:

- 只研究训练集。Why?
- 先备份训练集,再研究它。Why?

• 可视化地理数据: 建立各区域的房产的分布图

housing.plot(kind="scatter", x="longitude", y="latitude", alpha=0.1)

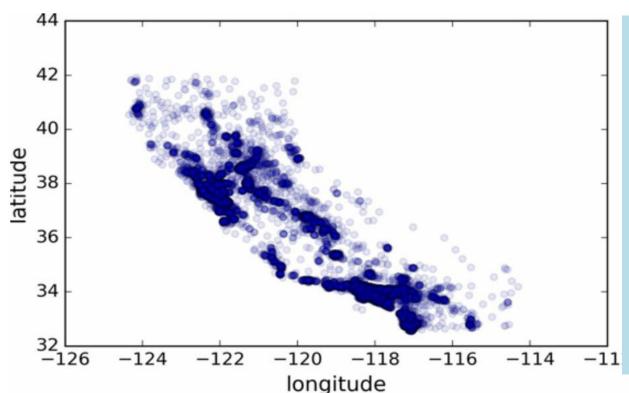


图 2-12 显示高密度区域的散点图

```
housing.plot(kind="scatter", x="longitude", y="latitude", alpha=0.4,
    s=housing["population"]/100, label="population",
    c="median_house_value", cmap=plt.get_cmap("jet"), colorbar=True,
)
plt.legend()
```

420000

360000

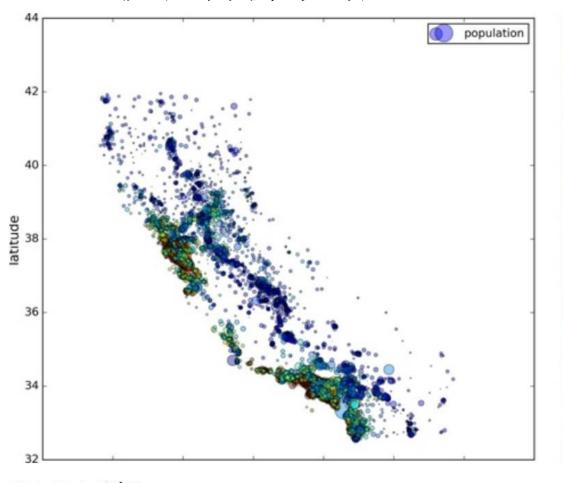
240000

180000

120000

60000

• 可视化房价数据



每个圈的半径表示街区的人口(选项s),颜色代表价格(选项c)。我们用预先定义的名为jet的颜色图(选项cmap),它的范围是从蓝色(低价)到红色(高价)

结论:这张图说明 房价和位置(比如, 靠海)和人口密度 联系密切

图 2-13 加州房价

• 寻找数值类属性之间的相关性: 使用corr()方法 计算出每对属性间的标准相关系数(standard correlation coefficient,也称作皮尔逊相关系数)

corr_matrix = housing.corr()

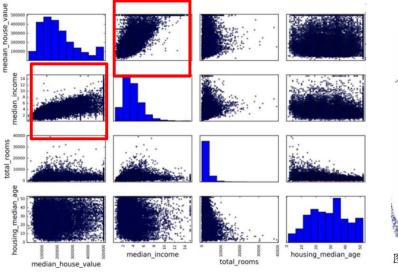
每个属性和房价中位数的关联度如下:

>>> corr_matrix["median_house_value"].sort_values(ascending=False)

median house value 1.000000 median income 0.687170 total_rooms 0.135231 housing_median_age 0.114220 households 0.064702 total_bedrooms 0.047865 population -0.026699 longitude -0.047279 latitude -0.142826Name: median_house_value, dtype:

相关系数的范围是-1到1。 当接近1时,意味强正相关;例 如,当收入中位数增加时,房 价中位数也会增加。 当相关系数接近-1时,意味强负 相关;你可以看到,纬度和房 价中位数有轻微的负相关性 (即越往北,房价越可能降低)

• 寻找数值类属性之间的相关性: 使用Pandas的 scatter_matrix函数, 画出每个数值属性对每个其它数值属性的图



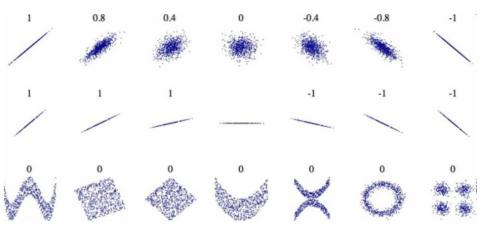
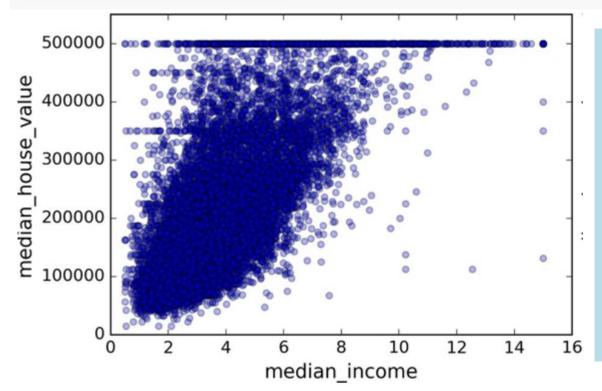


图 2-14 不同数据集的标准相关系数 (来源:Wikipedia;公共领域图片)

• 深入观察: 收入中位数与房价中位数之间的相关性



结论:

- 1) 相关性非常高;
- 2)最高价,清晰地呈现为一条位于500000美元的水平线,和一些不太明显的直线:一条位于450000美元的直线,一条位于350000美元的直线,一条在280000美元的线。

• 试验不同属性的组合, 创建新的属性

dtype: float64

```
housing["rooms_per_household"] = housing["total_rooms"]/housing["households"]
housing["bedrooms_per_room"] = housing["total_bedrooms"]/housing["total_rooms"]
housing["population_per_household"]=housing["population"]/housing["households"]
```

```
>>> corr_matrix = housing.corr()
>>> corr_matrix["median_house_value"].sort_values(ascending=False)
median_house_value
                             1.000000
median_income
                             0.687170
rooms_per_household
                             0.199343
total rooms
                             0.135231
housing_median_age
                             0.114220
households
                             0.064702
total_bedrooms
                             0.047865
population_per_household
                            -0.021984
population
                            -0.026699
longitude
                            -0.047279
latitude
                            -0.142826
bedrooms_per_room
                            -0.260070
```

Name: median_house_value,

结论:与总房间数或卧室数相 比,新的bedrooms_per_room 属性与房价中位数的关联更强。 显然,卧室数/总房间数的比例 越低,房价就越高。每户的房 间数也比街区的总房间数的更 有信息,很明显,房屋越大, 房价就越高。

4准备数据

- 4.1 数据清理: 处理缺失值
 - 去掉对应的街区:用DataFrame的dropna()方法
 - 去掉整个属性:用DataFrame的drop()方法
 - 进行赋值(0、平均值、中位数等等): 用 DataFrame的fillna()方法 或者Scikit-Learn中的 imputer

```
housing.dropna(subset=["total_bedrooms"]) # 选项1
housing.drop("total_bedrooms", axis=1) # 选项2
median = housing["total_bedrooms"].median()
housing["total_bedrooms"].fillna(median) # 选项3
```

```
from sklearn.preprocessing import Imputer
imputer = Imputer(strategy="median")
```

4准备数据

- 4.2 处理文本和分类属性:将文本类型的属性转换为数字类型
 - 利用转换器LabelEncoder
 - 利用<mark>编码器</mark>OneHotEncoder
- 4.3 自定义转换器
- 4.4 特征缩放(最重要的转换之一): 让所有的属性有相同的量度
- 4.5 转换流水线:保障数据转换的步骤以正确的顺序来执行

4准备数据

- 4.4 特征缩放 (最重要的转换之一): 让所有的属性有相同的量度
 - 线性函数<mark>归一化</mark>(Min-Maxscaling)
 - 通过减去最小值,然后再除以最大值与最小值的差值,来进行 归一化
 - Scikit-Learn提供了一个转换器MinMaxScaler来实现这个功能, 该转换器中的超参数feature range可以指定缩放后的范围
 - 标准化 (standardization)
 - 首先减去平均值(所以标准化值的平均值总是0),然后除以 方差,使得到的分布具有单位方差
 - Scikit-Learn提供了一个转换器StandardScaler来进行标准化
- Tips:与所有的转换一样,缩放器只能基于训练集进行拟合, 而不是面向完整的数据集(包括测试集)

5 研究模型

- 5.1 在训练集上训练
 - "三步曲":
 - 选择模型
 - 设计一个损失函数
 - 找到最佳函数(在训练集上进行训练/学习/拟合)
 - 在Scikit-Learn中训练一个线性回归模型:

```
from sklearn.linear_model import LinearRegression
lin_reg = LinearRegression()
lin_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)
```

只需要 两步?? fit函数已经内置了损失函数,并自动寻找最佳函数来实现拟合

• 5.2 在训练集上评估性能

- 尝试做下预测?

- 使用Scikit-Learn的mean_squared_error函数,在全部训练集上计算改回归模型的RMSE来评估其性能

```
>>> from sklearn.metrics import mean_squared_error
>>> housing_predictions = lin_reg.predict(housing_prepared)
>>> lin_mse = mean_squared_error(housing_labels, housing_predictions)
>>> lin_rmse = np.sqrt(lin_mse)
>>> lin_rmse
68628.413493824875
```

• 换个模型?训练一个DecisionTreeRegressor

from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor

```
tree_reg = DecisionTreeRegressor()
tree_reg.fit(housing_prepared, housing_labels)

>>> housing_predictions = tree_reg.predict(housing_prepared)
>>> tree_mse = mean_squared_error(housing_labels, housing_predictions)
>>> tree_rmse = np.sqrt(tree_mse)
>>> tree_rmse
0.0

完美模型?
```

完美模型? 讨拟合?

- 5.3 跨模型的选择更佳的模型: 基于验证集
 - 用函数train_test_split来分割训练集,得到一个更小的训练集和一个验证集,然后用更小的训练集来训练模型,用验证集来评估。
 - 使用Scikit-Learn的交叉验证功能: K折交叉验证
- (K-fold cross-validation): 它随机地将训练集分成十个不同的子集,成为"折",然后训练评估决策树模型K次,每次选一个不用的折来做评估,用其它(K-1)个来做训练。

• 使用10折交叉验证来对比决策树和线性回归模型的性能:

```
from sklearn.model_selection import cross_val_score
scores = cross_val_score(tree_reg, housing_prepared, housing_labels,
                         scoring="neg_mean_squared_error", cv=10)
rmse_scores = np.sqrt(-scores)
>>> def display_scores(scores):
        print("Scores:", scores)
        print("Mean:", scores.mean())
        print("Standard deviation:", scores.std())
>>> display_scores(tree_rmse_scores)
Scores: [ 74678.4916885 64766.2398337 69632.86942005
                                                          69166.67693232
          71486.76507766 73321.65695983
                                         71860.04741226
                                                          71086.32691692
                          69060.93319262]
          76934.2726093
Mean: 71199,4280043
Standard deviation: 3202.70522793
```

```
>>> lin_scores = cross_val_score(lin_reg, housing_prepared, housing_labels, scoring="neg_mean_squared_error", cv=10)
...
>>> lin_rmse_scores = np.sqrt(-lin_scores)
>>> display_scores(lin_rmse_scores)
Scores: [ 70423.5893262 65804.84913139 66620.84314068 72510.11362141 66414.74423281 71958.89083606 67624.90198297 67825.36117664 72512.36533141 68028.11688067]
Mean: 68972.377566
```

• 结论: 决策树模型过拟合很严重, 它的性能比线性回归模型还差

Standard deviation: 2493.98819069

• 再尝试第三种模型: 随机森林模型 RandomForestRegressor

6微调模型

• 目标: 提高模型泛化性能

- 6.1 选择最佳超参数, 找到最好的模型
 - 网格搜索: 使用Scikit-Learn的GridSearchCV
 - 随机搜索: 当超参数的搜索空间很大时,最好使用 RandomizedSearchCV
- 6.2 集成模型: 将表现最好的模型组合起来

- 6.3 分析最佳模型和它们的误差:便于搞清为什么会有些误差,以及如何改正问题(添加更多的特征,或相反,去掉没有什么信息的特征,清洗异常值等等)
- 6.4 用测试集评估系统
 - 用测试集评估最后的模型。
 - 具体处理过程:从测试集得到预测值和标签,运行full_pipeline转换数据(调用transform(),而不是fit_transform()!),再用测试集评估最终模型

7展示解决方案

- 文档化你所做的工作
- 创建完美的演示
- 解释为什么你的解决方案达到了业务目标
- 其他需说明之处:
 - 列出你的假设和系统的局限

8启动、监视、维护系统

- 接入输入数据源,并编写测试
- 编写监控代码
- 自动化地定期用新数据训练模型

谢谢!