Rossmann 销售额预测

机器学习工程师纳米学位毕业项目

薛威

2018 年 02 月 19 日

I. 定义

项目概述

该项目是 Kaggle 上由 Rossmann 两年前建立的一个预测比赛。比赛的目标是取得一个能够正确预测六周后的日销售情况。

Rossmann 在欧洲经营 7 国经营着 3000 家药店，目前，Rossmann 商店的经理被要求预测他们未来六周的日销售情况，商店销售收很多因素的影响，包括促销，竞争，学校放假和法定节假日，节气性和区域性。由于数千经营者依据他们独特的情况预测销售情况，结果的准确性可能有很大不同。 在这个项目中，将挑战预测 6 周的 1115 家德国境内的 Rossmann 商店的每日销售额，可靠的销售预报可以让商店经营者增加工作效率和积极性创建更高效的工作人员安排。通过帮助 Rossmann 创建一个强壮的预测模型，你将帮助经营者保持关注对他们来说最重要的是：他们的客户和他们的团队。

本项目将使用目前 Kaggle 上线性预测普遍表现很好的 XGBoost 算法模型来建模，并验证所取得的结果。

问题陈述

我要通过对旧的销售记录的学习建模，然后预测六周后的日销售情况。具体步骤和可能遇到的问题如下：

- 对数据做清洗和整理，可能遇到的问题有异常值的处理，缺失值的处理。我将针对存在缺失数据的特征的具体情况来补充或丢弃训练数据，对于每个特征的异常值做一次筛选判断。
- 对数据做单个变量分析，多个变量分析，对变量做特征处理，可能会遇到整合多个变量为一个有效特征的问题。我将通过对问题的理解来对某几个特征做一些基本运算将其转换为更直观的特征展现出来。
- 使用 XGBoost 来建模，如何调整训练模型的数据用来适合 XGBoost 模型的输入要求。我将依照 XGBoost 模型的传入参数的要求来对输入特征做数据转换。
- 在使用 XGBoost 的基础上如何找到最合适的超参。我将使用 CV 来筛选出最好的参数进行建模。
- 预测并评价结果，根据 Kaggle 的描述使用 RMSPE 来做为评价标准，需要对我建立的模型做一个评估。我将使用建立好的模型对于 test 数据进行预测然后将其上传到 Kaggle 上查看正确率。

评价指标

我将使用 Kaggle 在该项目建议的 RMSPE 来做为验证函数，该值越低代表差异性越小。它是指模型的预测值和实际观察值之间的差异的一种衡量方式。

$$\mathrm{RMSPE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i}\right)^2}$$

y 是真实的销售数据而 y_hat 是预测数据，任何的为 0 的销售数据不参加此评价。采用该评价函数的好处是该问题是一个线性回归的问题，预测的结果是一个具体的数值向量，相关的预测数据只能是一个大概无法精确匹配，所以计算预测值和实际值之间的差额平方并累加起来平均最后再开方得到的结果相比直接实际值和预测值做差额来说的大大减少了预测值与实际值之间过于详细的数值匹配要求。

II. 分析

数据的探索

Rossmann 提供了相关的数据集，包含训练的和预测比赛所需要的。

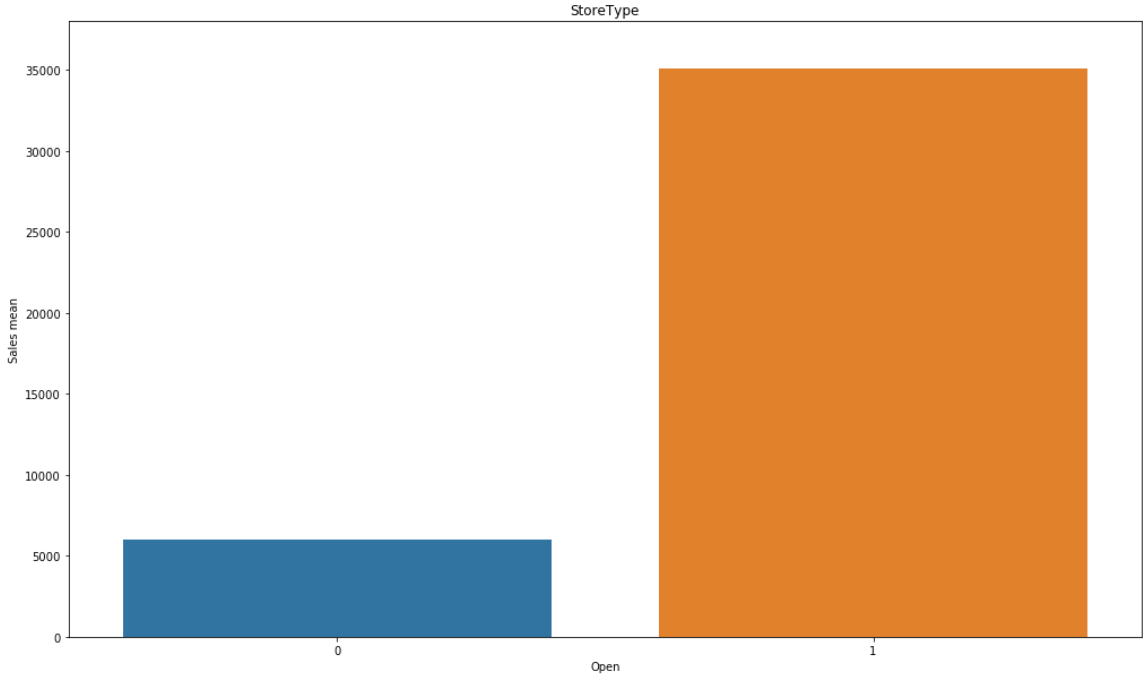
- 输入数据集如下
  train.csv - 包括销售额的历史数据训练用
  包含有
  "Store","DayOfWeek","Date","Sales","Customers","Open","Promo","StateHoliday","SchoolHoliday"字段。
  test.csv - 包括销售额的历史数据测试用 historical data excluding Sales
  包含有
  "Id","Store","DayOfWeek","Date","Open","Promo","StateHoliday","SchoolHoliday"字段。
  sample_submission.csv - 预测数据格式样本
  包含有"Id","Sales"字段。
  store.csv - 关于商店的附加信息
  包含有
  "Store","StoreType","Assortment","CompetitionDistance","CompetitionOpenSinceMonth",
  "CompetitionOpenSinceYear","Promo2","Promo2SinceWeek","Promo2SinceYear","PromoInterval"字段。
- 数据集特征如下
  Id - 测试集中表示一条记录的编号。
  Store - 每个商店的唯一编号。
  Sales - 任意一个给定日期的销售营业额。
  Customers - 给定那一天的消费者数。
  Open - 商店是否开门标志，0 为关，1 为开。

StateHoliday - 表明影响商店关门的节假日，正常来说所有商店，除了极少数，都会在节假日关门，a=所有的节假日，b=复活节，c=圣诞节，所有学校都会在公共假日和周末关门。
SchoolHoliday - 表明商店的时间是否受到公共学校放假影响。
StoreType - 四种不同的商店类型 a，b，c 和 d。
Assortment - 描述种类的程度，a = basic, b = extra, c = extended。
CompetitionDistance - 最近的竞争对手的商店的距离。
CompetitionOpenSince[Month/Year] - 最近的竞争者商店大概开业的年和月时间。
Promo - 表明商店该天是否在进行促销。
Promo2 - 指的是持续和连续的促销活动。: 0 = 商店没有参加, 1 = 商店正在参加。 Promo2Since[Year/Week] - 表示参加连续促销开始的年份和周。
PromoInterval - 描述持续促销间隔开始，促销的月份代表新的一轮，月份意味着每一轮的开始在哪几个月。

- 相关的初步统计分析如下
  test.csv 有 41088 条数据其中缺失数据是在特征 Open 上缺失了 11 条，根据缺失的 Date，StateHoliday 和 SchoolHoliday 来判断推测 Open 均为 1 并填入。
  store.csv 有 1115 条数据其中缺失数据特征是 CompetitionDistance，CompetitionOpenSinceMonth，CompetitionOpenSinceYear，Promo2SinceWeek，Promo2SinceYear 和 PromoInterval。CompetitionDistance 缺失 3 条，我推测这三家商店在有效的距离内没有竞争对手用一个特别大的值来处理，CompetitionOpenSinceMonth 和 CompetitionOpenSinceYear 缺失的情况一直，我推测就在很早之前或者说在 train 数据之前就存在这个竞争对手了我给一个默认的之前的时间 2010 年，Promo2SinceWeek，Promo2SinceYear 和 PromoInterval。这三个特征的确是情况也都一样，也就是没有参加 Promo2 的这三项均为空，那我就将时间设置为一个未来时间 2030 年，PromoInterval 用“0，0，0，0”来填补。train.csv 有 1017209 条数据，无数据缺失情况，所有提供的数据总体来看没有异常值情况。

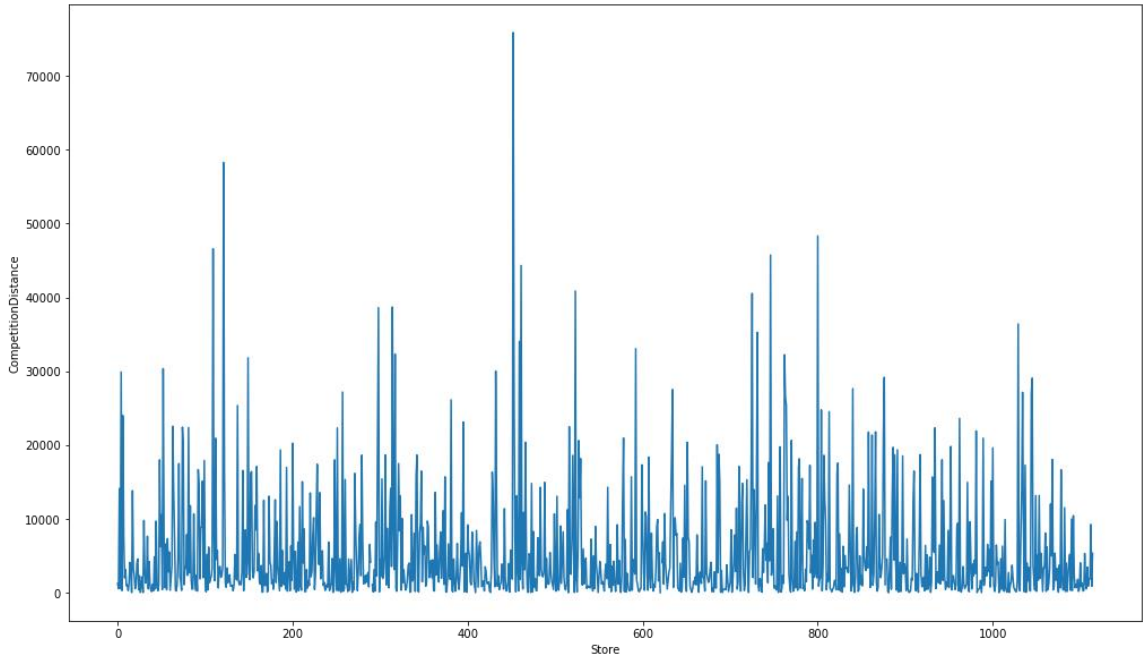
探索性可视化

针对 test 数据集做特征 open 的可视化



test 数据集里的 Open 为 0 的直接将预测值设置为 0

针对 store 数据集查看特征 CompetitionDistance 来看各个距离的商店的分布



并查看该特征的详细情况

```
store['CompetitionDistance'].describe()
```

```
count     1112.000
mean      5404.901
std       7663.175
min         20.000
25%        717.500
50%       2325.000
75%       6882.500
max      75860.000
Name: CompetitionDistance, dtype: float64
```

中位数在 2325m，还有部分大于 20km 的，对于三个缺失的值我也做一个最大值 99999 来填充，表示有效距离内无竞争对手。 20km 以上我之后都将标记为无竞争对手

针对 store 数据集查看特征 CompetitionOpenSinceYear 来看竞争对手的开店时

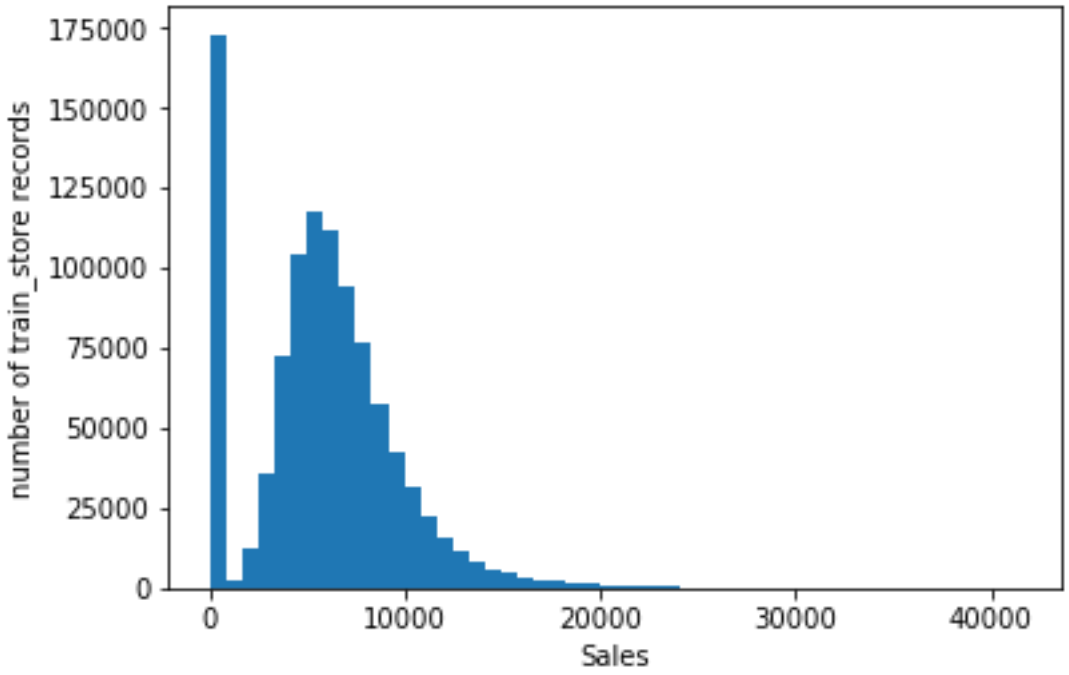
间

```
store['CompetitionOpenSinceYear'].describe()
```

```
count    764.000
mean    2008.753
std        6.326
min     1900.000
25%     2006.000
50%     2010.000
75%     2013.000
max     2030.000
Name: CompetitionOpenSinceYear, dtype: float64
```

缺失值就用中位数 2010 来填。

对于 train 数据集对 Sales 做可视化



发现有大量为 0 的数据，Sales 为 0 对于训练来说并无意义，而且会干扰最终结果

应该只训练 Sales 不为 0 的，同时发现 Open 特征为 0 和 Sales 为 0 表现一致

```
print(train.query('Open=="0"')['Sales'].value_counts())
print(train.query('Open=="0"')['Customers'].value_counts())
```

```
0    172817
Name: Sales, dtype: int64
0    172817
Name: Customers, dtype: int64
```

我将只训练 Open 为 1 的数据集

算法和技术

该问题属于监督学习里的回归问题，也就是依据已有的数据集建模预测测试集的问题。
在特征上通过预处理将空值根据相关的业务场景做填补，对于异常值经行处理避免过拟合数据，对日期做转换，然后对于部分分类特征比如 Assortment，StoreType 和 StateHoliday 做 one-hot，让 train 和 test 与 store 数据集做连接，最后只考虑 Open 的训练数据。
模型选择上，XGBoost 非常适合于这个领域。XGBoost 是对一堆的 CART 树（分类回归树）做预测，然后再将各个树的预测分数相加。模型用公式表示就是:

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^{K} f_k(x_i), f_k \in \mathcal{F}$$

简答说 K 代表树的数量，F 是所有的 CART 树，f 是某一个树。
在具体的 xgb 使用的时候需要考虑的参数有
General parameters：参数控制在提升（boosting）过程中使用哪种 booster，本项目使用默认值 gbtree。
Booster parameters：这取决于使用哪种 booster，设置如下：
eta [default=0.3]
max_depth [default=6]
Learning Task parameters：控制学习的场景的相关参数 。
objective [“reg:linear”] 。
feval 设置为 RMSPE 为评价函数。
num_boost_round 设置 boosting 的次数。
early_stopping_rounds 可以提前终止程序，这样可以找到最优的迭代次数。

设置完 XGBoost 模型后使用 train_test_split 将 train 数据分割为 train 和 valid 来训练，最后用 test 数据上传 kaggle 来评估结果。

基准模型

由于是销售预测模型，我对数据预测的错误率认为假设为 20%都是可以接受的范围，我的选择是 XGBoost 来作为我的预测模型，衡量结果的方式是 Kaggle 推荐的 RMSPE。

由于是监督学习的线性回归问题，所以我还将采用 Ridge 回归模型和 Lasso 回归模型来作为基准回归模型计算其结果。

III. 方法

数据预处理

整理 test 数据集的缺失数据，仅有 Open 特征通过判断日期推测出缺失的均为 1，对于 DATE 做数据转换，变成 Year，Month，Day，对 StateHoliday 做 One-Hot。
整理 store 数据集的缺失数据，处理 CompetitionOpenSinceMonth,CompetitionOpenSinceYear 缺失通过取中位数来填补，Promo2SinceWeek，Promo2SinceYear 和 PromoInterval 的缺失通过设置为 0，远大于目前的时间 2030，（0，0，0，0）来处理为了后面连接 train 和 test 来设置没有参加 Promo2 活动，对于 Date 也做相同的数据转换，将 PromoInterval 里的 string 用数字来做替换，对 StoreType 做 One-Hot。
整理 train 数据集，转换特征 Date，对 StateHoliday 做 One-Hot，但是只对 Open=1 的做训练。
将 train 和 test 都与 store 数据通过 store 特征做连接得出 train_data 和 test_data。对这两个数据集相同的处理，将 CompetitionOpenSinceMonth,CompetitionOpenSinceYear 合并为一个特征 CompetitionMonths 表示竞争对手的开业持续月份。将 Promo2SinceWeek Promo2SinceYear PromoInterval 合并为一个特征 IsPromo2 表示当前时间里是否在参加 Promo2。

执行过程

- 先建立测试函数 rmspe
  rmspe = np.sqrt(np.mean(w * (y - yhat)**2))
  用来评价模型的准确率。
- 采用 Ridge 算法建模
  使用 Sklearn 的 linear_model 里的 Ridge 建模，
  clf = Ridge(alpha=1)
- 采用 Lasso 算法建模
  使用 Sklearn 的 linear_model 里的 Lasso 建模，
  clf = Lasso (alpha=1)
- 采用 Xgboost 算法建模
  通过在 windows 平台下重新编译 xgboost 库调用 python 接口来使用我选择的是 CPU 版本
  gbm = xgb.train(params, dtrain, num_trees, evals=watchlist, early_stopping_rounds=100, feval=rmspe_xg, verbose_eval=True)

完善

Ridge 的初始结果是 0.427237
然后对于 Ridge 算法模型的使用了 RidgeCV 来做参数的选优
clf = RidgeCV(alphas=[0.1, 0.5, 1.0, 10.0], cv=10, fit_intercept=True,scoring=rmpse_estimator)
优化后结果变化不大基本还是在 0.42。

Lasso 的初始结果是 0.494385
然后对于 Lasso 模型采用了 LassoCV 的方式来优化参数
clf = LassoCV(cv=20)
优化后的结果是 0.489961。

xgboost 的初始结果是 0.14

对于 xgboost 模型采用了增加"learning_rate": 0.05 的方式来提高训练结果
最后的结果是 0.122

IV. 结果

模型的评价与验证

Ridge 建模使用 RidgeCV 方法训练数据集大小为 759952
训练使用时间是 35.861344 秒
需要预测的 test_data 数据集大小为 35104
预测所用时间是 0.008522
预测结果上传 Kaggle 进行评分是 0.41700

Lasso 建模使用 LassoCV 方法训练数据集大小为 759952
训练使用时间是 22.310587 秒
需要预测的 test_data 数据集大小为 35104
预测所用时间是 0.009526
预测结果上传 Kaggle 进行评分是 0.43365

XGBoost 建模使用 xgb.train 方法训练数据集大小为 759952
训练使用时间是 12 分 26.466745 秒
需要预测的 test_data 数据集大小为 35104
预测所用时间是 1.973393
预测结果上传 Kaggle 进行评分是 0.12074

合理性分析

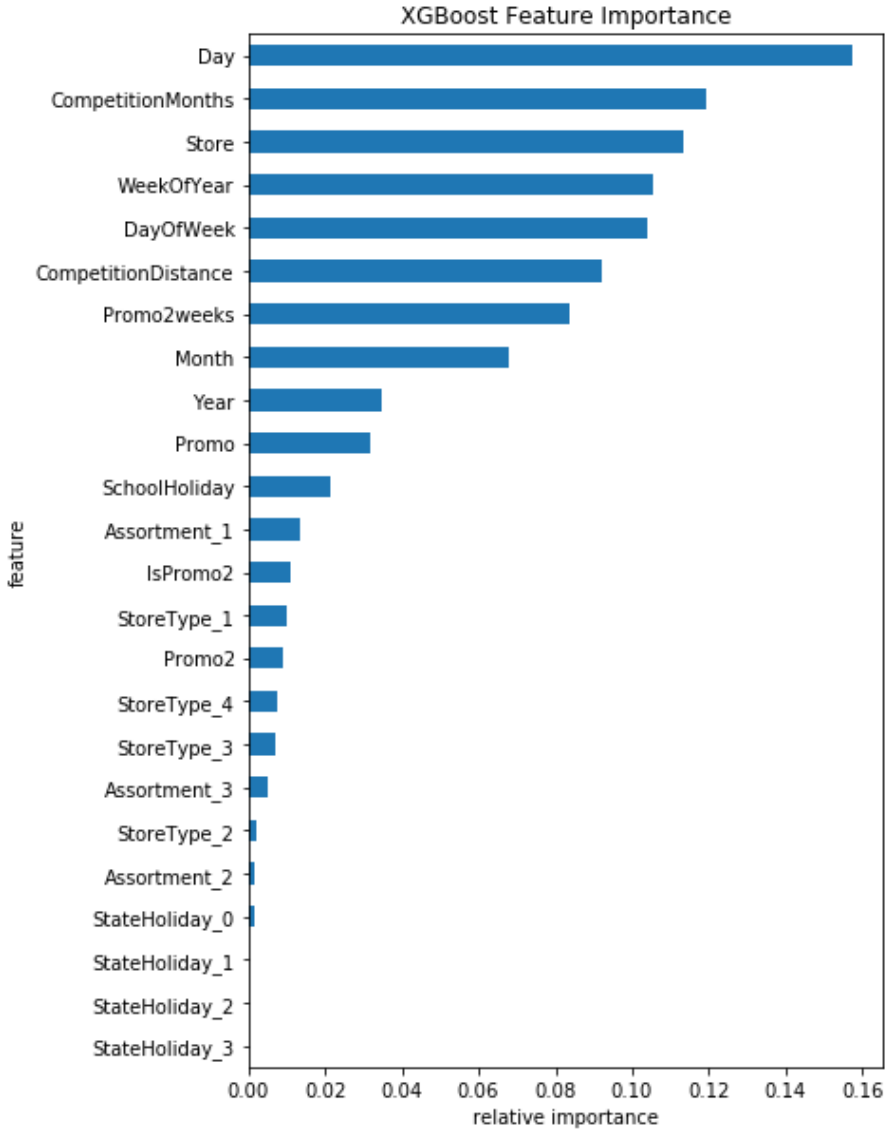
Ridge 和 Lasso 模型成本低于预期主要是训练时间短，对复杂输入数据无法很好的拟合，它的惩罚方式也造成它很难校准，根据本项目的输入特征来看得出 0.4-0.45 左右的结果也不算意外。

XGBoost 训练时间比较长，特别是深度增加，树的数量增加以后，但是模型的预测表现很好，已经满足了一开始制定的 0.2 的目标，进行初步的设置和参数的优化之后达到了 0.12074，这和它自身的特点分不开，它在代价函数里加入正则项可以很好的控制复杂度，作为树型的模型然后还可以从底到顶反向减枝避免陷入局部最优，因此可以相对比较轻松的拿下这个成绩。

V. 项目结论

结果可视化

展现 Xgboost 训练过程中特征重要性的排序



对项目的思考

项目应该分为数据整理，模型选择，评估及优化三个部分，后面两个部分可以合并互相影响。

最重要的地方是在数据整理，这也是最有意思，最困难的地方，需要了解这个问题

的背景和各个特征的意义，根据各个特征的实际情况和常识来补充缺失值，然后找出那些有密切实际联系的特征，将其转换为新的更直观更适合算法模型的特征。
模型选择方面，该项目是一个监督学习的回归问题，主流的监督学习回归算法都是可以适用的，通过设定一个基准分数尝试多个回归模型来比较选择其中表现最好的。模型训练时间在建模的时候成本很高，但是在建模成功使用其进行预测的时候建模成本并不影响。
模型的评估和优化是一个永恒的主题，训练建模的时间制约了尝试训练的次数，可以采用 cv 的方式寻找到最佳的参数。但是最好的优化还是在第一步数据整理上，一个项目的数据整理决定了模型的上限，再好的模型和优化都只是无限逼近这个上限。
目前我的 XGBOOST 建立的模型达到了我的预期，在通用场景的话可以按照这个思路来训练建立模型，但还是要考虑每个场景的具体情况。

对于该项目我觉得还有些特征的理解我有疑问，商店里的商品那么多做 Promo2 的商品是哪个牌子的哪个型号，难道预测的是笼统销售活动；竞争对手开店时间 1900 应该是个默认值所以应该不是很准确；顾客数在预测工作中应该是很重要的，而我在这个模型里却没有想到改如何使用。

需要作出的改进

在数据整理分析阶段我还可以进一步的尝试处理 CompetitionDistance 这个特征，将其分段离散化，可以更好的正则化模型，CompetitionMonths 这个特征也可以考虑分段离散化，而且它们都是重要性排名靠前的特征，深入研究应该会有不错的提升。
算法方面通过 CV 来找到 XGBOOST 的最佳参数继续做试验优化，还可以尝试使用微软刚开源不久的 lightGBM 算法来做一个比较看看成绩会不会更好。
补充：我通过调大树的数量来提高成绩在 20000 颗树的情况下耗费 1 小时 57 分成绩提升到 0.11470，但是再提高到 40000 除了训练时间变长，分数没有进一步的提高。
调参技巧方面升级到 GPU 版本进行尝试缩短调参后跑数据的时间。

VI.相关引用

http://xgboost.readthedocs.io/en/latest/model.html

http://scikit-learn.org/stable/modules/classes.html#module-sklearn.linear_model

https://www.kaggle.com/beiwenwu/xgboost-in-python-with-rmspe