常见机器学习算法比较

[日期：2016-07-11] 来源：数据分析网 作者： [字体：大 中 小]

机器学习算法太多了，分类、回归、聚类、推荐、图像识别领域等等，要想找到一个合适算法真的不容易，所以在实际应用中，我们一般都是采用启发式学习方式来实验。通常最开始我们都会选择大家普遍认同的算法，诸如SVM，GBDT，Adaboost，现在深度学习很火热，神经网络也是一个不错的选择。假如你在乎精度（accuracy）的话，最好的方法就是通过交叉验证（cross-validation）对各个算法一个个地进行测试，进行比较，然后调整参数确保每个算法达到最优解，最后选择最好的一个。但是如果你只是在寻找一个“足够好”的算法来解决你的问题，或者这里有些技巧可以参考，下面来分析下各个算法的优缺点，基于算法的优缺点，更易于我们去选择它。

偏差&方差

在统计学中，一个模型好坏，是根据偏差和方差来衡量的，所以我们先来普及一下偏差和方差：

- 偏差：描述的是预测值（估计值）的期望E’ 与真实值Y之间的差距。偏差越大，越偏离真实数据。

$$\mathrm{Bias}\left[\hat{f}(x)\right] = \mathrm{E}\left[\hat{f}(x)\right] - f(x)$$

- 方差：描述的是预测值P的变化范围，离散程度，是预测值的方差，也就是离其期望值E的距离。方差越大，数据的分布越分散。

$$\mathrm{Var}\left[\hat{f}(x)\right] = \mathrm{E}\left[\left(\hat{f}(x) - \mathrm{E}[\hat{f}(x)]\right)^2\right]$$

模型的真实误差是两者之和，如下图：

$$\mathrm{E}\left[\left(y - \hat{f}(x)\right)^2\right] = \mathrm{Bias}\left[\hat{f}(x)\right]^2 + \mathrm{Var}\left[\hat{f}(x)\right] + \sigma^2$$

如果是小训练集，高偏差/低方差的分类器（例如，朴素贝叶斯NB）要比低偏差/高方差大分类的优势大（例如，KNN），因为后者会过拟合。但是，随着你训练集的增长，模型对于原数据的预测能力就越好，偏差就会降低，此时低偏差/高方差分类器就会渐渐的表现其优势（因为它们有较低的渐近误差），此时高偏差分类器此时已经不足以提供准确的模型了。

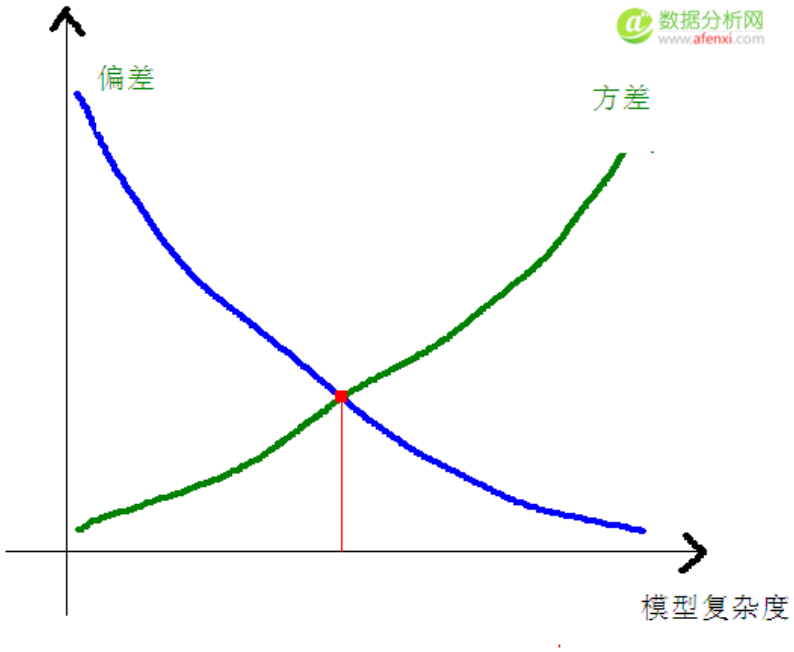
当然，你也可以认为这是生成模型（NB）与判别模型（KNN）的一个区别。

为什么说朴素贝叶斯是高偏差低方差?

以下内容引自知乎：

> 首先，假设你知道训练集和测试集的关系。简单来讲是我们要在训练集上学习一个模型，然后拿到测试集去用，效果好不好要根据测试集的错误率来衡量。但很多时候，我们只能假设测试集和训练集的是符合同一个数据分布的，但却拿不到真正的测试数据。这时候怎么在只看到训练错误率的情况下，去衡量测试错误率呢?
> 由于训练样本很少（至少不足够多），所以通过训练集得到的模型，总不是真正正确的。（就算在训练集上正确率100%，也不能说明它刻画了真实的数据分布，要知道刻画真实的数据分布才是我们的目的，而不是只刻画训练集的有限的数据点）。而且，实际中，训练样本往往还有一定的噪音误差，所以如果太追求在训练集上的完美而采用一个很复杂的模型，会使得模型把训练集里面的误差都当成了真实的数据分布特征，从而得到错误的数据分布估计。这样的话，到了真正的测试集上就错的一塌糊涂了（这种现象叫过拟合）。但是也不能用太简单的模型，否则在数据分布比较复杂的时候，模型就不足以刻画数据分布了（体现为连在训练集上的错误率都很高，这种现象较欠拟合）。过拟合表明采用的模型比真实的数据分布更复杂，而欠拟合表示采用的模型比真实的数据分布要简单。
> 在统计学习框架下，大家刻画模型复杂度的时候，有这么个观点，认为Error = Bias + Variance。这里的Error大概可以理解为模型的预测错误率，是有两部分组成的，一部分是由于模型太简单而带来的估计不准确的部分（Bias），另一部分是由于模型太复杂而带来的更大的变化空间和不确定性（Variance）。
> 所以，这样就容易分析朴素贝叶斯了。它简单的假设了各个数据之间是无关的，是一个被**严重简化了的模型**。所以，对于这样一个简单模型，大部分场合都会Bias部分大于Variance部分，也就是说高偏差而低方差。
> 在实际中，为了让Error尽量小，我们在选择模型的时候需要平衡Bias和Variance所占的比例，也就是平衡over-fitting和under-fitting。

偏差和方差与模型复杂度的关系使用下图更加明了：



当模型复杂度上升的时候，偏差会逐渐变小，而方差会逐渐变大。

常见算法优缺点

1.朴素贝叶斯

朴素贝叶斯属于生成式模型（关于生成模型和判别式模型，主要还是在于是否是要求联合分布），非常简单，你只是做了一堆计数。如果注有条件独立性假设（一个比较严格的条件），朴素贝叶斯分类器的收敛速度将快于判别模型，如逻辑回归，所以你只需要较少的训练数据即可。即使NB条件独立假设不成立，NB分类器在实践中仍然表现的很出色。它的主要缺点是它不能学习特征间的相互

作用，用mRMR中R来讲，就是特征冗余。引用一个比较经典的例子，比如，虽然你喜欢Brad Pitt和Tom Cruise的电影，但是它不能学习出你不喜欢他们在一起演的电影。

优点：

- 朴素贝叶斯模型发源于古典数学理论，有着坚实的数学基础，以及稳定的分类效率。
- 对小规模的数据表现很好，能个处理多分类任务，适合增量式训练；
- 对缺失数据不太敏感，算法也比较简单，常用于文本分类。

缺点：

- 需要计算先验概率；
- 分类决策存在错误率；
- 对输入数据的表达形式很敏感。

2.Logistic Regression（逻辑回归）

属于判别式模型，有很多正则化模型的方法（L0， L1，L2，etc），而且你不必像在用朴素贝叶斯那样担心你的特征是否相关。与决策树与SVM机相比，你还会得到一个不错的概率解释，你甚至可以轻松地利用新数据来更新模型（使用在线梯度下降算法，online gradient descent）。如果你需要一个概率架构（比如，简单地调节分类阈值，指明不确定性，或者是要获得置信区间），或者你希望以后将更多的训练数据快速整合到模型中去，那么使用它吧。

Sigmoid函数：

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

优点：

- 实现简单，广泛的应用于工业问题上；
- 分类时计算量非常小，速度很快，存储资源低；
- 便利的观测样本概率分数；
- 对逻辑回归而言，多重共线性并不是问题，它可以结合L2正则化来解决该问题；

缺点：

- 当特征空间很大时，逻辑回归的性能不是很好；
- 容易**欠拟合**，一般准确度不太高
- 不能很好地处理大量多类特征或变量；
- 只能处理两分类问题（在此基础上衍生出来的softmax可以用于多分类），且必须**线性可分**；
- 对于非线性特征，需要进行转换；

3.线性回归

线性回归是用于回归的，而不像Logistic回归是用于分类，其基本思想是用**梯度下降法**对最小二乘法形式的误差函数进行优化，当然也可以用normal equation直接求得参数的解，结果为：

$$\hat{w} = (X^T X)^{-1} X^T y$$

而在LWLR（局部加权线性回归）中，参数的计算表达式为:

$$\hat{w} = (X^T W X)^{-1} X^T W y$$

由此可见LWLR与LR不同，LWLR是一个非参数模型，因为每次进行回归计算都要遍历训练样本至少一次。

优点：实现简单，计算简单；
缺点：不能拟合非线性数据.

4.最近领算法——KNN

KNN即最近邻算法，其主要过程为：

1.计算训练样本和测试样本中每个样本点的距离（常见的距离度量有欧式距离，马氏距离等）；2.对上面所有的距离值进行排序；3.选前k个最小距离的样本；4.根据这k个样本的标签进行投票，得到最后的分类类别；

如何选择一个最佳的K值，这取决于数据。一般情况下，在分类时较大的K值能够减小噪声的影响。但会使类别之间的界限变得模糊。一个较好的K值可通过各种启发式技术来获取，比如，交叉验证。另外噪声和非相关性特征向量的存在会使K近邻算法的准确性减小。

近邻算法具有较强的一致性结果。随着数据趋于无限，算法保证错误率不会超过贝叶斯算法错误率的两倍。对于一些好的K值，K近邻保证错误率不会超过贝叶斯理论误差率。

KNN算法的优点

- 理论成熟，思想简单，既可以用来做分类也可以用来做回归；
- 可用于非线性分类；
- 训练时间复杂度为O(n)；
- 对数据没有假设，准确度高，对outlier不敏感；

缺点

- 计算量大；
- 样本不平衡问题（即有些类别的样本数量很多，而其它样本的数量很少）；
- 需要大量的内存；

5.决策树

易于解释。它可以毫无压力地处理特征间的交互关系并且是非参数化的，因此你不必担心异常值或者数据是否线性可分（举个例子，决策树能轻松处理好类别A在某个特征维度x的末端，类别B在中间，然后类别A又出现在特征维度x前端的情况）。它的缺点之一就是不支持在线学习，于是在新样本到来后，决策树需要全部重建。另一个缺点就是容易出现过拟合，但这也就是诸如随机森林RF（或提升树boosted tree）之类的集成方法的切入点。另外，随机森林经常是很多分类问题的赢家（通常比支持向量机好上那么一丁点），它训练快速并且可调，同时你无须担心要像支持向量机那样调一大堆参数，所以在以前都一直很受欢迎。

决策树中很重要的一点就是选择一个属性进行分枝，因此要注意一下信息增益的计算公式，并深入理解它。

信息熵的计算公式如下:

$$H = -\sum_{i=1}^{n} p(x_i) log_2 p(x_i)$$

其中的n代表有n个分类类别（比如假设是2类问题，那么n=2）。分别计算这2类样本在总样本中出现的概率p1和p2，这样就可以计算出未选中属性分枝前的信息熵。

现在选中一个属性xixi用来进行分枝，此时分枝规则是：如果xi=vxi=v的话，将样本分到树的一个分支；如果不相等则进入另一个分支。很显然，分支中的样本很有可能包括2个类别，分别计算这2个分支的熵H1和H2,计算出分枝后的总信息熵H′ =p1 *H1+p2*H2,则此时的信息增益ΔH = H – H′ 。以信息增益为原则，把所有的属性都测试一边，选择一个使增益最大的属性作为本次分枝属性。

决策树自身的优点

- 计算简单，易于理解，可解释性强；
- 比较适合处理有缺失属性的样本；
- 能够处理不相关的特征；
- 在相对短的时间内能够对大型数据源做出可行且效果良好的结果。

缺点

- 容易发生过拟合（随机森林可以很大程度上减少过拟合）；
- 忽略了数据之间的相关性；
- 对于那些各类别样本数量不一致的数据，在决策树当中,信息增益的结果偏向于那些具有更多数值的特征（只要是使用了信息增益，都有这个缺点，如RF）。

5.1 Adaboosting

Adaboost是一种加和模型，每个模型都是基于上一次模型的错误率来建立的，过分关注分错的样本，而对正确分类的样本减少关注度，逐次迭代之后，可以得到一个相对较好的模型。是一种典型的boosting算法。下面是总结下它的优缺点。

优点

- adaboost是一种有很高精度的分类器。
- 可以使用各种方法构建子分类器，Adaboost算法提供的是框架。
- 当使用简单分类器时，计算出的结果是可以理解的，并且弱分类器的构造极其简单。
- 简单，不用做特征筛选。
- 不容易发生overfitting。

关于随机森林和GBDT等组合算法，参考这篇文章：机器学习-组合算法总结

缺点：对outlier比较敏感

6.SVM支持向量机

高准确率，为避免过拟合提供了很好的理论保证，而且就算数据在原特征空间线性不可分，只要给个合适的核函数，它就能运行得很好。在动辄超高维的文本分类问题中特别受欢迎。可惜内存消耗大，难以解释，运行和调参也有些烦人，而随机森林却刚好避开了这些缺点，比较实用。

优点

- 可以解决高维问题，即大型特征空间；
- 能够处理非线性特征的相互作用；
- 无需依赖整个数据；
- 可以提高泛化能力；

缺点

- 当观测样本很多时，效率并不是很高；
- 对非线性问题没有通用解决方案，有时候很难找到一个合适的核函数；
- 对缺失数据敏感；

对于核的选择也是有技巧的（libsvm中自带了四种核函数：线性核、多项式核、RBF以及sigmoid核）：

- 第一，如果样本数量小于特征数，那么就没必要选择非线性核，简单的使用线性核就可以了；
- 第二，如果样本数量大于特征数目，这时可以使用非线性核，将样本映射到更高维度，一般可以得到更好的结果；
- 第三，如果样本数目和特征数目相等，该情况可以使用非线性核，原理和第二种一样。

对于第一种情况，也可以先对数据进行降维，然后使用非线性核，这也是一种方法。

---

7. 人工神经网络的优缺点

人工神经网络的优点：

- 分类的准确度高；
- 并行分布处理能力强,分布存储及学习能力强，
- 对噪声神经有较强的鲁棒性和容错能力，能充分逼近复杂的非线性关系；
- 具备联想记忆的功能。

人工神经网络的缺点：

- 神经网络需要大量的参数，如网络拓扑结构、权值和阈值的初始值；
- 不能观察之间的学习过程，输出结果难以解释，会影响到结果的可信度和可接受程度；
- 学习时间过长,甚至可能达不到学习的目的。

8、K-Means聚类

之前写过一篇关于K-Means聚类的文章，博文链接：机器学习算法-K-means聚类。关于K-Means的推导，里面有着很强大的EM思想。

优点

- 算法简单，容易实现 ；
- 对处理大数据集，该算法是相对可伸缩的和高效率的，因为它的复杂度大约是O(nkt)，其中n是所有对象的数目，k是簇的数目,t是迭代的次数。通常k<<n。这个算法通常局部收敛。
- 算法尝试找出使平方误差函数值最小的k个划分。当簇是密集的、球状或团状的，且簇与簇之间区别明显时，聚类效果较好。

缺点

- 对数据类型要求较高，适合数值型数据；
- 可能收敛到局部最小值，在大规模数据上收敛较慢
- K值比较难以选取；
- 对初值的簇心值敏感，对于不同的初始值，可能会导致不同的聚类结果；
- 不适合于发现非凸面形状的簇，或者大小差别很大的簇。
- 对于”噪声”和孤立点数据敏感，少量的该类数据能够对平均值产生极大影响。

算法选择参考

之前翻译过一些国外的文章，有一篇文章中给出了一个简单的算法选择技巧：

1. 首当其冲应该选择的就是逻辑回归，如果它的效果不怎么样，那么可以将它的结果作为基准来参考，在基础上与其他算法进行比较；
2. 然后试试决策树（随机森林）看看是否可以大幅度提升你的模型性能。即便最后你并没有把它当做为最终模型，你也可以使用随机森林来移除噪声变量，做特征选择；
3. 如果特征的数量和观测样本特别多，那么当资源和时间充足时（这个前提很重要），使用SVM不失为一种选择。

通常情况下：【GBDT>=SVM>=RF>=Adaboost>=Other...】，现在深度学习很热门，很多领域都用到，它是以神经网络为基础的，目前我自己也在学习，只是理论知识不是很厚实，理解的不够深，这里就不做介绍了。

算法固然重要，**但好的数据却要优于好的算法**，设计优良特征是大有裨益的。假如你有一个超大数据集，那么无论你使用哪种算法可能对分类性能都没太大影响（此时就可以根据速度和易用性来进行抉择）。

参考文献

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Bias%E2%80%93variance_tradeoff
[2] http://blog.echen.me/2011/04/27/choosing-a-machine-learning-classifier/
[3] http://www.csuldw.com/2016/02/26/2016-02-26-choosing-a-machine-learning-classifier/

> 作者：刘帝伟
> 链接：http://www.csuldw.com/2016/02/26/2016-02-26-choosing-a-machine-learning-classifier/