

機器學習

訓練/測試集切分



出題教練

楊証琨

知識地圖 機器學習- 模型選擇 - 訓練/測試集切分

機器學習概論 Introduction of Machine Learning

監督式學習 Supervised Learning



非監督式學習 Unsupervised Learning



模型選擇 Model selection

概論

驗證基礎

預測類型

評估指標

基礎模型 Basic Model

線性回歸 Linear Regression

邏輯斯回歸 Logistic Regression

套索算法 LASSO

嶺回歸 Ridge Regression

樹狀模型 Tree based Model

決策樹 Decision Tree

隨機森林 Random Forest

梯度提升機 Gradient Boosting Machine

本日知識點目標

- 了解機器學習中資料的切分
- 為何要進行訓練/測試集切分
- 不同的切分方法以及意義

為何需要切分訓練/測試集

- 機器學習模型需要資料才能訓練
- 若將手上所有資料都送進模型訓練，這樣就沒有額外資料來評估模型訓練情形！
- 機器學習模型可能會有過擬合 (Over-fitting) 的情形發生，需透過**驗證/測試集**評估模型是否過擬合



圖片來源：[slowlydownward](#)

使用 Python Scikit-learn 進行資料切分

Python 中的機器學習套件 Scikit-learn 提供了一個 train-test split 函數，可以幫助快速對資料進行切分

`sklearn.model_selection.train_test_split`

```
sklearn.model_selection. train_test_split (*arrays, **options)
```

[\[source\]](#)

Split arrays or matrices into random train and test subsets

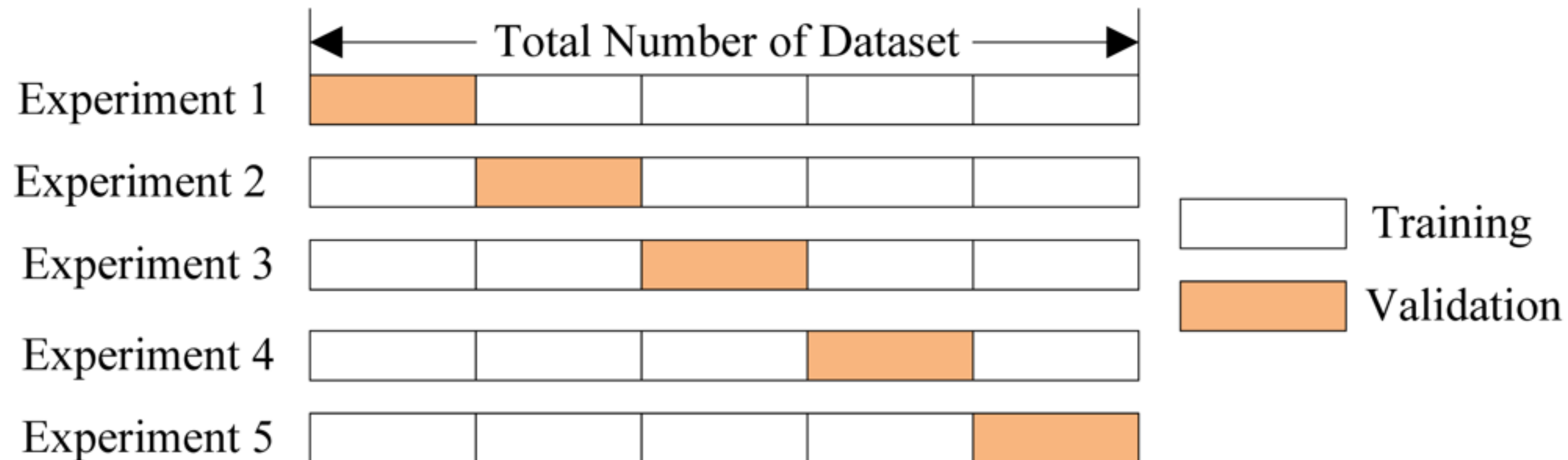
Quick utility that wraps input validation and `next(ShuffleSplit().split(X, y))` and application to input data into a single call for splitting (and optionally subsampling) data in a oneliner.

Read more in the [User Guide](#).

K-fold Cross-validation

- 若僅做一次訓練/測試集切分，有些資料會沒有被拿來訓練過，因此後續就有 cross-validation 的方法，可以讓結果更為穩定，K 為 fold 數量
- 每筆資料都曾經當過一次驗證集，再取平均得到最終結果。

下圖為 5-fold cross-validation



使用 Python Scikit-learn 進行 Cross-validation

Python 中的機器學習套件 Scikit-learn 提供了一個 KFold 函數，可以幫助你快速運用 Cross-validation

`sklearn.model_selection.KFold`

```
class sklearn.model_selection. KFold (n_splits='warn', shuffle=False, random_state=None)
```

[\[source\]](#)

K-Folds cross-validator

Provides train/test indices to split data in train/test sets. Split dataset into k consecutive folds (without shuffling by default).

Each fold is then used once as a validation while the k - 1 remaining folds form the training set.

Read more in the [User Guide](#).



Q：驗證集 (validation set) 與測試集 (testing set) 有甚麼差異？

A：驗證集常用來評估不同超參數或不同模型的結果。而測試集則是在機器學習專案開始前先保留一小部分資料，專案進行中都不能使用，最終再拿來做測試，Kaggle 競賽的最終排名也是根據測試集的分數來評定。

解題時間 It's Your Turn

請跳出PDF至官網Sample Code & 作業
開始解題

