# 机器学习纳米学位

毕业项目

王珏

优达学城

2019年10月24日

# I. 问题的定义

# 项目概述

Rossman 是欧洲的一家连锁药店,其在欧洲 7 个国家/地区拥有 3,000 多家店铺。因经营需要,Rossman 的经理需要提前 6 周来预期店铺的销售额。不同的店铺面临的经营情况大相径庭,他们的销售受到许多因素的影响,包括促销,竞争,学校和州假期,季节性和地区性。

该项目是一个典型的监督学习问题,关于监督学习,我已经学习了许多模型,包括感知机,决策树,随机森林,朴素贝叶斯等。由于我个人的工作行业关系,时常会遇到这类监督学习的问题,因此,希望利用这个机会来提高自己的分析能力,因此我选择了Rossman 销售额预测。

### 问题陈述

监督学习可以分为回归问题和分类问题,我们需要根据 Rossman 商店过去的销售情况来预测未来的销售额,因此这是一个回归问题。一个店铺的销售额受到了诸多因素的影响,从参赛者经验上看,只使用其给出的特征难以得到一个较好的效果,创造衍生特征成为了必选项。同时,该数据集较大,其训练集包含了上百万条数据,因此在模型训练时,还需要兼顾运算速度。

### 评价指标

本次项目的评估指标由 Kaggle 给出,为均方根百分比误差(RMSPE),其计算公式如下图:

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

RMSPE 与 均方误差 RMSE 相比,区别在于在计算误差时要除以真实值 yi,我认为这样的好处当 yi 的取值范围很大时,比如最大值与最小值相差几十万倍,那么当高值预测出现误差时,产生的误差就会非常大,从而影响到了对其他值预测误差的评估。通过将误差除以 yi,相当于在归一化这些误差,这样能够平等对待较大值与较小值。

# II. 分析

# 数据的探索

在 Rossman 项目中,数据一共被包含在 3 个表格中,分别为 Store, train 和 test。 Store 表记录了店铺的相关信息,train 表则是某个店铺一天的营业情况,test 则是我们需要 去预测的数据。所有表格中包含的特征可见下表:

#### 特征释义

- 1. Id:测试集内(商店、日期)的组合。
- 2. Store:表示每个商店的唯一 Id。
- 3. Sales:任意一天的销售额,也是我们要预测的字段。
- 4. Open:是否开门, 0=关门, 1=开门。
- 5. StateHoliday:国家假日,一般假日国家假期都会关门,所有学校在公共假日都会关门,a=公共假日,b=东部假日,c=圣诞节,0=不是假日。
- 6. SchoolHoliday:校园假日,指当日学校是否关闭。
- 7. StoreType:商店类型,有四种,abcd。
- 8. Assortment:分类级别, a=基础, b=额外, c=扩展。
- 9. CompetitionDistance:竞争对手距离。
- 10. CompetitionOpenSince\[Month/Year\]:给出最近竞争对手的开张时间。
- 11. Promo:表示商店当天是否进行促销
- 12. Promo2:表示商店是否进行持续的促销活动, 0=没有参数, 1=参与。
- 13. Promo2Since\[Year/Week\]:商店开始持续促销的年/星期。
- 14. PromoInterval:持续促销活动开始的间隔,"Feb, May, Aug, Nov"表示给定商店某一年的 2589 月开始持续促销活动。

接下来需要查看数据的完整性。首先查看 Store 表。发现总店铺是 1115 个,但是有些数据是缺失的。

```
1115 non-null int64
Store
StoreType
                             1115 non-null object
                            1115 non-null object
Assortment
CompetitionDistance
                            1112 non-null float64
                            761 non-null float64
CompetitionOpenSinceMonth
CompetitionOpenSinceYear
                            761 non-null float64
Promo2
                             1115 non-null int64
Promo2SinceWeek
                             571 non-null float64
Promo2SinceYear
                             571 non-null float64
PromoInterval
                             571 non-null object
dtypes: float64(5), int64(2), object(3)
memory usage: 87.2+ KB
```

首先查看 CompetitionDistance,发现 3 个缺失值不光距离数据缺失了,连后面的开业年月也没有了。推测应该是数据收集的时候就没有找到这些信息。

store_data[pd.isnull(store_data['CompetitionDistance'])]												
	Store	StoreType	Assortment	CompetitionDistance	CompetitionOpenSinceMonth	CompetitionOpenSinceYear	Promo2					
290	291	d	a	NaN	NaN	NaN	0					
621	622	а	С	NaN	NaN	NaN	0					
878	879	d	а	NaN	NaN	NaN	1					
<												

在继续查看促销信息,虽然 3 个特征都是 571 个 (却 544 个),但是还是需要确下是不是缺失在同一家店铺中。

确认完毕,的确是缺失在相同的店铺了。那么促销信息和竞争者的信息我就用0值来补完。

接下来是 train 和 test 表的数据。从下图可以看到, train 表的数据完整, test 在 Open 特征有缺失。本来此处我对 Open 均按照 1 补全了, 但是在建模的时候, 认为 Open 是没用的特征, 就给剔除了。

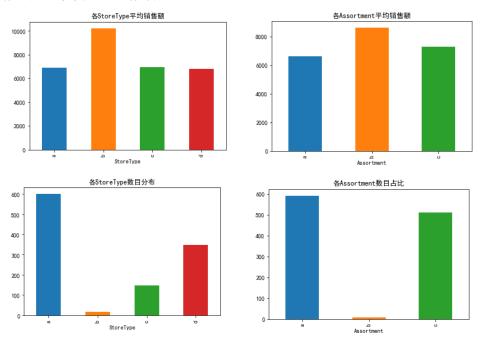
```
In [9]: train_data.info()
                                                             test_data.info()
          <class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
                                                              <class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
         RangeIndex: 1017209 entries, 0 to 1017208
Data columns (total 9 columns):
                                                              RangeIndex: 41088 entries, 0 to 41087
                                                             Data columns (total 8 columns):
                            1017209 non-null int64
1017209 non-null int64
                                                                                41088 non-null int64
                                                              Id
         DayOfWeek
                                                                                41088 non-null int64
                                                             Store
                             1017209 non-null object
                                                              DayOfWeek
                                                                                41088 non-null int64
                            1017209 non-null int64
         Sales
                                                              Date
                                                                               41088 non-null object
41077 non-null float64
                             1017209 non-null int64
         Customers
                                                              Open
         Open
                            1017209 non-null int64
                                                                                41088 non-null int64
                                                              Promo
                            1017209 non-null int64
         Promo
                                                              StateHoliday
                                                                                41088 non-null object
         StateHoliday
                            1017209 non-null object
                                                              SchoolHoliday
                                                                               41088 non-null int64
                            1017209 non-null int64
         SchoolHoliday
         dtypes: int64(7), object(2)
                                                              dtypes: float64(1), int64(5), object(2)
                                                             memory usage: 2.5+ MB
         memory usage: 69.8+ MB
```

# 探索性可视化

可视化是分析数据十分直观和方便的方式之一, 为了更好的理解特征背后的含义, 我们

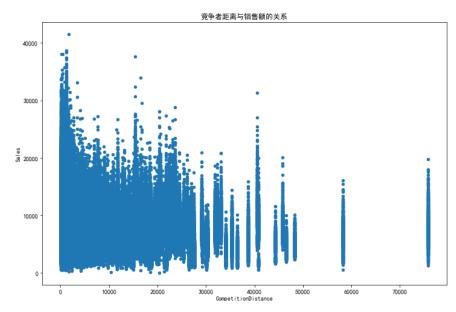
需要对数据进行一些分析。为了可视化分析,首先我们需要将 train 表和 Store 表进行合并,通过 Store 值进行关联,然后就可以进行分析了。

首先,查看一下 StoreType, Assortment 对于最终销售的影响,方法是查看每个类别的平均销量以及每个类别店铺的数目:



发现在这两个特征上, b 类型都意味着较高的平均收入, 但是该类型都太少。可能这些店铺属于精品店或者旗舰店或者特殊位置的店铺, 难以在其他地区推广。

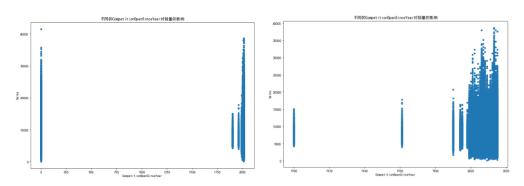
然后是竞争者的一些变量,首先是竞争者距离(CompetitionDistance),对于没有该特征的店铺,我用 0 代替,在排除 0 销售额的数据后,将不同距离的店铺的每日销售额做散点图,结果如下:



和我们常规的想法不同,在这个项目中,竞争者距离店铺近的情况更多,且两个店铺挨的比较近的话,反而会促进店铺的销售,这可能是因为店铺聚集在一起,形成了一定规模,促进了消费者进店消费。

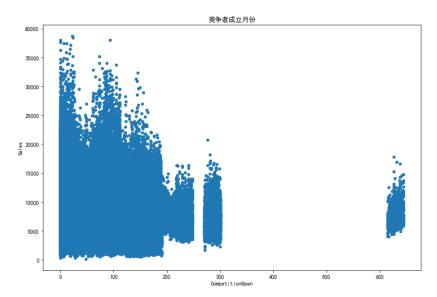
然后是 CompetitionSinceYear 这个值,由于有缺失值,为此将缺失值填为 0,得到如下

### 图:



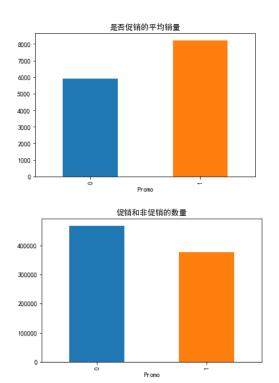
左图是将 CompetitionSinceYear=0 的店铺纳入的数据,右边是将 CompetitionSinceYear=0 的店铺排除的数据,可以看到即使排除了数据,该特征仍然很不直观。

因而此处我构建了一个特征,即店铺成立多少个月,用这边特征和销量进行分析。得到下图:



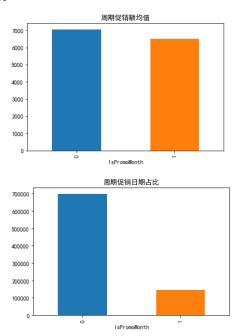
可以看到, 竞争者成立的时间越长, 那么店铺的销售额的上限就越低, 反之, 则上限越高。这说明竞争者成立时间的长短能够影响到两个店铺的竞争优劣。

然后,分析一下促销活动对销量的影响。同样,需要排除销量为 0 的数据。先看 Promo 的情况,Promo 可以我理解就是临时促销,它不是周期性的,

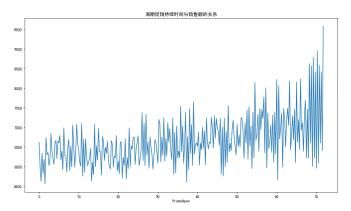


0 代表了没有促销, 1 代表了促销, 可以看到, 促销对销售额的影响是非常显著的, 平均销量高出 2000 左右。而且, 促销的天数非常的多, 大概 40%左右。

然后看 Promo2,这个是周期性的,他没有直接告诉你哪天后面有关于促销开始年分和月份,那么需要对其进行处理,获得其某一天是否进入 Promo2,同时我还增加了一个特征,即这个促销活动持续了多久。

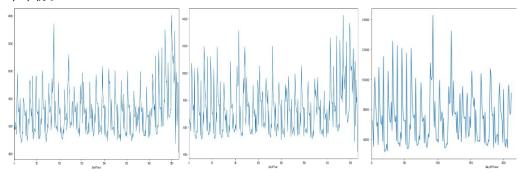


从促销日期来看, 当日是否在周期促销中对销售额的影响很小, 而且周期促销在所有日期中占比数量有限。

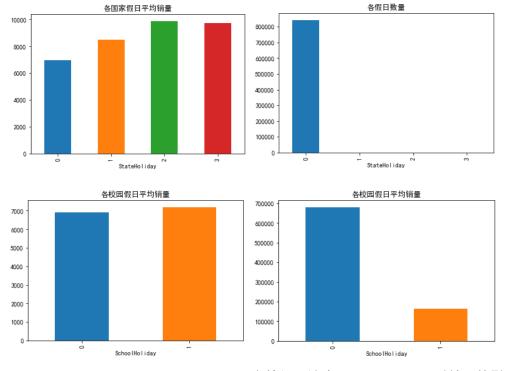


但是促销持续时间变量与销量相关性较高,即周期促销持续的越久,那么销量的均值约高。

然后查看日期与销售额的关系,首先需要将日期转化为数字,代表当年的第几天,然后观察其与销售额的关系。此图的纵轴为平均销售额,横轴为当年的某一天。3幅图分别代表了3个年份。



如图可知, 销售额是一个与日期强相关的数据, Rossman 店铺的销售有很强的相关性。



最后是 StateHoliday 和 SchoolHoliday2 个特征,结论是 StateHoliday 对销量的影响很大,但是国家假日数量太小了。SchoolHoliday 对销量的影响不大,但是数量会相对多一点。

# 算法和技术

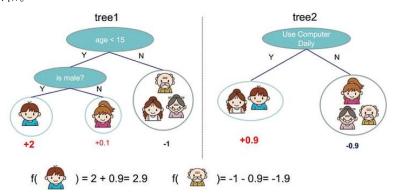
根据该项目获奖者的介绍,本项目我将使用 XGBoost 作为基准模型, XGBoost 是经过优化的分布式梯度提升库,旨在高效,灵活且可移植。它在 Gradient Boosting 框架下实现了机器学习算法。其特点是速度快,模型表现较好。

XGBoost 实现的是一种通用的 Tree Boosting 算法,此算法的一个代表为梯度提升决策树(Gradient Boosting Decision Tree, GBDT), 又名 MART(Multiple Additive Regression Tree)。

GBDT 的原理是,首先使用训练集和样本真值(即标准答案)训练一棵树,然后使用这棵树预测训练集,得到每个样本的预测值,由于预测值与真值存在偏差,所以二者相减可以得到"残差"。接下来训练第二棵树,此时不再使用真值,而是使用残差作为标准答案。两棵树训练完成后,可以再次得到每个样本的残差,然后进一步训练第三棵树,以此类推。树的总棵数可以人为指定,也可以监控某些指标(例如验证集上的误差)来停止训练。

在预测新样本时,每棵树都会有一个输出值,将这些输出值相加,即得到样本最终的预 测值。

使用两棵树来预测一个人是否喜欢电脑游戏的示意图如下, 小男孩和老人的预测值为两棵树预测值的加和。



#### XGBoost 所做的改进

2.1. 损失函数从平方损失推广到二阶可导的损失

GBDT 的核心在于后面的树拟合的是前面预测值的残差,这样可以一步步逼近真值。然而,之所以拟合残差可以逼近到真值,是因为使用了平方损失作为损失函数,公式如下

$$l(y_i, \hat{y}_i) = (y_i - \hat{y}_i)^2$$

如果换成是其他损失函数,使用残差将不再能够保证逼近真值。XGBoost 的方法是,将损失函数做泰勒展开到第二阶,使用前两阶作为改进的残差。可以证明,传统 GBDT 使用的残差是泰勒展开到一阶的结果,因此,GBDT 是 XGBoost 的一个特例。

#### 2.2. 加入了正则化项

正则化方法是数学中用来解决不适定问题的一种方法,后来被引入机器学习领域。通俗的讲,

正则化是为了限制模型的复杂度的。模型越复杂,就越有可能"记住"训练数据,导致训练误差达到很低,而测试误差却很高,也就是发生了"过拟合"。在机器学习领域,正则化项大多以惩罚函数的形式存在于目标函数中,也就是在训练时,不仅只顾最小化误差,同时模型复杂度也不能太高。

在决策树中,模型复杂度体现在树的深度上。XGBoost 使用了一种替代指标,即叶子节点的个数。此外,与许多其他机器学习模型一样,XGBoost 也加入了 L2 正则项,来平滑各叶子节点的预测值。

### 2.3. 支持列抽样

列抽样是指,训练每棵树时,不是使用所有特征,而是从中抽取一部分来训练这棵树。这种方法原本是用在随机森林中的,经过试验,使用在 GBDT 中同样有助于效果的提升。

#### XGBoost 模型主要参数:

1、eta[默认 0.3]

和 GBM 中的 learning rate 参数类似。通过减少每一步的权重,可以提高模型的鲁棒性。

2、min\_child\_weight[默认 1]

决定最小叶子节点样本权重和。和 GBM 的 min\_child\_leaf 参数类似,但不完全一样。 XGBoost 的这个参数是最小样本权重的和,而 GBM 参数是最小样本总数。这个参数用于避免过拟合。当它的值较大时,可以避免模型学习到局部的特殊样本。但是如果这个值过高,会导致欠拟合。这个参数需要使用 CV 来调整。

3、max depth[默认 6]

和 GBM 中的参数相同,这个值为树的最大深度。这个值也是用来避免过拟合的。 max\_depth 越大,模型会学到更具体更局部的样本。需要使用 CV 函数来进行调优。

5、gamma[默认 0]

在节点分裂时,只有分裂后损失函数的值下降了,才会分裂这个节点。Gamma 指定了节点分裂所需的最小损失函数下降值。这个参数的值越大,算法越保守。这个参数的值和损失函数息息相关,所以是需要调整的。

6、max\_delta\_step[默认 0]

这参数限制每棵树权重改变的最大步长。如果这个参数的值为 0, 那就意味着没有约束。如果它被赋予了某个正值, 那么它会让这个算法更加保守。通常, 这个参数不需要设置。但是当各类别的样本十分不平衡时, 它对逻辑回归是很有帮助的。

这个参数一般用不到,但是你可以挖掘出来它更多的用处。

7、subsample[默认 1]

和 GBM 中的 subsample 参数一模一样。这个参数控制对于每棵树,随机采样的比例,减小这个参数的值,算法会更加保守,避免过拟合。但是,如果这个值设置得过小,它可能会导致欠拟合。

8、colsample bytree[默认 1]

和 GBM 里面的 max\_features 参数类似。用来控制每棵随机采样的列数的占比(每一列是一个特征)。

9、colsample\_bylevel[默认 1]

用来控制树的每一级的每一次分裂,对列数的采样的占比。我个人一般不太用这个参数,

因为 subsample 参数和 colsample\_bytree 参数可以起到相同的作用。但是如果感兴趣,可以挖掘这个参数更多的用处。

10、lambda[默认 1]

权重的 L2 正则化项。(和 Ridge regression 类似)。这个参数是用来控制 XGBoost 的正则 化部分的。虽然大部分数据科学家很少用到这个参数,但是这个参数在减少过拟合上还是可以挖掘出更多用处的。

11、alpha[默认 1]

权重的 L1 正则化项。(和 Lasso regression 类似)。可以应用在很高维度的情况下,使得算法的速度更快。

12、scale\_pos\_weight[默认 1]

在各类别样本十分不平衡时,把这个参数设定为一个正值,可以使算法更快收敛。

# 基准模型

基准模型我选择随机森林作为参照,用来评判 XGBoost 模型的效果。

随机森林的预测准确率为: 0.22005568995148558

本次项目的评估指标由 Kaggle 给出,为均方根百分比误差(RMSPE),其计算公式如下图:

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

RMSPE 与 均方误差 RMSE 相比,区别在于在计算误差时要除以真实值 yi,我认为这样的好处当 yi 的取值范围很大时,比如最大值与最小值相差几十万倍,那么当高值预测出现误差时,产生的误差就会非常大,从而影响到了对其他值预测误差的评估。通过将误差除以 yi,相当于在归一化这些误差,这样能够平等对待较大值与较小值。

随机森林测得的 RMSPE 大概在 0.22 左右。

### III. 方法

### 数据预处理

Train 数据集中有几个变量采用的是枚举值,包括 StateHoliday, StoreType, Assortment。对这 3 个数据,我首先采用了 One-Hot 编码,但是事后发现被拆分出来的特征,显著性基本排在靠后位置,后来直接采用自然数代替。代码如下:

```
def stateholiday(data):
    Holiday={'0':0,'a':1,'b':2,'c':3}
    data['StateHoliday'] = data.StateHoliday.map(Holiday)

def storetype(data):
    storetype={'0':0,'a':1,'b':2,'c':3,'d':4}
    data['StoreType'] = data.StoreType.map(storetype)

def assortment(data):
    assortment={'0':0,'a':1,'b':2,'c':3,'d':4}
    data['Assortment'] = data.Assortment.map(assortment)
```

然后,将日期中的年、月、日单独拆分出来

```
train_data['Month']=train_data.Date.map(lambda x :int(x.strftime('%m')))
train_data['Week']=train_data.Date.map(lambda x :int(x.strftime('%w')))
train_data['Year']=train_data.Date.map(lambda x :int(x.strftime('%Y')))
```

完成上述操作后,再回顾一下全体数据,发现部分特征的格式是浮点值:

```
In [173]: train_data.info()
            (class 'pandas, core, frame, DataFrame')
            Int64Index: 1017209 entries, 0 to 1017208
Data columns (total 29 columns):
                                           1017209 non-null int64
            Store
            DayOfWeek
                                           1017209 non-null int64
            Date
                                           1017209 non-null datetime64[ns]
            Sales
                                           1017209 non-null int64
            Customers
                                           1017209 non-null int64
            Open
                                           1017209 non-null int64
                                           1017209 non-null int64
            Promo
                                           1017209 non-null int64
1017209 non-null int64
            StateHoliday
            SchoolHoliday
            StoreType
                                           1017209 non-null int64
            Assortment
                                           1017209 non-null int64
                                           1017209 non-null float64
            CompetitionDistance
            CompetitionOpenSinceMonth
                                           1017209 non-null float64
                                           1017209 non-null float64
           CompetitionOpenSinceYear
            Promo2
                                           1017209 non-null int64
            Promo2SinceWeek
                                           1017209 non-null float64
                                           1017209 non-null float64
           Promo2SinceYear
            PromoInterval
                                           1017209 non-null object
                                           1017209 non-null float64
            shopavgopen
            shopavgsalespercustomer
                                           1017209 non-null float64
            DayOfYear
                                           1017209 non-null int64
            Month
                                           1017209 non-null int64
            Week
                                           1017209 non-null int64
                                           1017209 non-null int64
            CompetitionOpen
                                           1017209 non-null float64
            monthStr
                                           1017209 non-null object
           PromoOpen
                                           1017209 non-null float64
                                           1017209 non-null float64
            avgcustomer
            dtypes: datetime64[ns](1), float64(10), int64(16), object(2)
            memory usage: 232.8+ MB
```

#### 将其转换成整数:

```
F=['CompetitionDistance'
,'CompetitionOpenSinceMonth'
,'CompetitionOpenSinceYear'
,'Promo2SinceWeek'
,'Promo2SinceWeek'
,'CompetitionOpen']

train_data[F]=train_data[F].apply(pd.to_numeric,downcast='integer')
```

接下来需要删除不需要的特征,并且将 train 的数据划分一部分出来用作验证:

```
#排除不言业的数据
train_data=train_data[(train_data['Open']==1)&(train_data['Sales']>0)]

#差許不需要的变量
drop_paramater=['Month', 'Week', 'Year', 'Date', 'Customers', 'Open', 'PromoInterval', 'monthStr']
train=train_data.drop(['Date', 'Customers', 'Open', 'PromoInterval', 'monthStr'], axis=1)
test=test_data.drop(['Date', 'Open', 'PromoInterval', 'monthStr'], axis=1)
```

### 将train数据集分为训练集和测试集

```
y_train=train['Sales']
X_train=train.drop('Sales', axis=1)
```

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_val, y_train, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=0.1, random_state=0)
```

完成这些操作,接下来可以进行模型训练了。

# 执行过程

首先设置一个初始的参数进行训练, 先开始第一轮的训练, 训练结果如下:

```
XGBoost Model Valid Start....
Valid RMSPE:0.11785026135483434
XGBoost Model Valid End, Time: 5.344712 s....
```

感觉结果非常的不错,明显比随机森林要好上许多。然后上传 Kaggle 进行了测试,结果如下:

sample_submission.csv 3 days ago by Darren.wang	0.12948	0.12214	
add submission details			

离预期目标差一点, 但是感觉

# 完善

在调整参数的刚开始,我认为模型已经足够复杂,因此在参数的调整上,着重于防止其 过拟合。结果往往是训练的效果较号,但是提交给 Kaggle 上就得到比较差的效果。

```
sample_submission.csv
2 days ago by Darren.wang
add submission details
```

通过多次尝试,发现模型并不是过拟合,而是欠拟合了。因此,我增加了模型的复杂度,最终得到了比较好的效果,最终的参数如下:

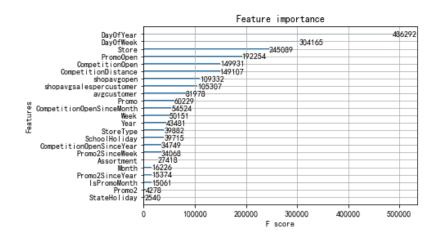
```
xgboost_tree = xgb.XGBRegressor(
   n_{jobs} = -1,
   n_estimators = 6000,
   eta = 0.03,
max_depth = 12,
    min_child_weight = 9,
   subsample = 0.9,
   colsample_bytree = 0.9,
   silent = 0,
   gamma=. 7,
   random_state = 66,
   booster='gbtree',
reg_lambda=15,
   tree_method= 'gpu_hist',
   objective="reg:linear
eval_metric = rmspe_xg,
              early_stopping_rounds = 100
```

### 在训练集上,得到了如下效果:

```
In [192]: rmspe(y_val, np.expml(xgboost_tree.predict(X_val)))
Out[192]: 0.10926603952528588
```

#### 各特征的有效性如下:

```
In [106]: xgb.plot_importance(xgboost_tree)
Out[106]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at Oxleb1f616780>
```



### 将 submission 文件上传到 Kaggle 后,得到的结果如下:

Submission and Description	Private Score	Public Score	Use for Final Score
sample_submission.csv an hour ago by Darren.wang add submission details	0.12071	0.11725	

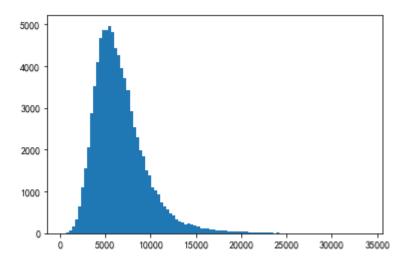
达到了10%的目标。

# IV. 结果

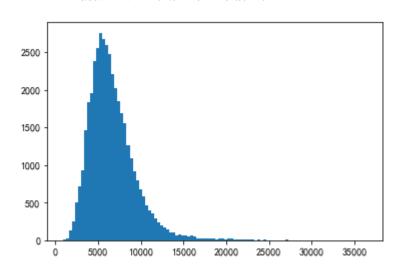
# 模型的评价与验证

为了校验分析的结论是否符合现实,需要对这部分数据进行交叉验证。首先,观察到模

型最有效的变量就是 DayOfYear, 然后, test 数据的该特征全部包含在 213 于 260 之间。因此, 我们查看了该区间销售额的分布情况, 如下图:



然后查看我们预测数据的销售额分布情况,如下图:



上面 2 图,横轴代表销售额,纵轴代表天数。可以看到,两者形状几乎相同,因此,我认为我做出的预测是合理的。

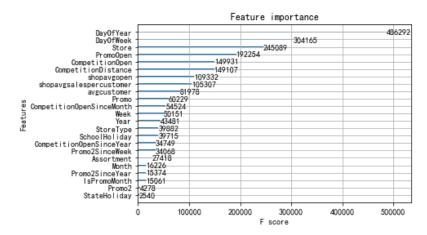
# V. 项目结论

# 结果可视化

在这个部分,我还是要采用特征有效性的图做说明,即我认为,在这个项目中,特征工程真的是非常重要的,对结果影响较大的变量很多都要通过特征工程得到,而特征工程又是建立在前期的数据探索和数据可视化之上的。因此,我认为这些步骤看似繁琐,但对结果确具有决定性的作用,因此该步骤是不能省略和忽视的。

In [106]: xgb.plot\_importance(xgboost\_tree)

Out[106]: <matplotlib.axes.\_subplots.AxesSubplot at Ox1eb1f616780>



# 对项目的思考

我认为最有意思的地方就是调参了,在这个过程中,我陷入了一个怪圈,就是我在训练集上的模型表现都非常的好,但是以到上传给 Kaggle 的时候,表现就很差,根据学习到的知识,我一直认为这是过拟合的表现,所以调参也是一直往防止过拟合的方向弄。所以,最后总结下来,就是调参有的时候可以多试试不同的组合,不用困死在一个圈子中。

# 需要作出的改进

其实在开始项目前浏览其他人的讨论的时候,大家普遍添加了天气数据用于分析,我认为这是合理的,如果时间充裕又能找到数据的话,我认为天气数据也是可以纳入进来的。那么拓展开来说,数据没必要局限于对方提供,所有有用的数据都可以考虑添加进来。