1.2 机器学习的步骤

机器学习具体要做哪些事情呢？本节的目标就是使读者了解机器学习的大致步骤。通过阅读本节，读者将对作为机器学习算法基础的处理流程有所理解，并学到机器学习的基本概念。

数据的重要性

在使用机器学习时，必须要有汇总并整理到一定程度的数据。以数据为基础，按规定的法则进行学习，最终才能进行预测。

没有数据，就不能进行机器学习。换言之，收集数据是首先要做的事情。

本节将说明机器学习的训练过程的一系列流程。为了便于理解，本节基于示例数据进行讲解，使用的是主流机器学习库 scikit-learn 包内置的数据，这个数据便于入手，可自由使用。

专栏 数据收集、数据预处理的重要性

在实际用机器学习解决问题之前，要先收集数据，有时还需要做问卷调查，甚至购买数据。然后，需要为收集到的数据人工标注答案标签，或者将其加工为机器学习算法易于处理的形式，删除无用的数据，加入从别的数据源获得的数据等。另外，基于平均值和数据分布等统计观点查看数据，或者使用各种图表对数据进行可视化，把握数据的整体情况也很重要。此外，有时还需要对数据进行正则化处理。

这些操作被称为数据预处理。有这样一种说法：机器学习工作 80% 以上的时间花在了数据预处理上。

专栏 scikit-learn 包

scikit-learn 是一个机器学习库，包含了各种用于机器学习的工具。

这个库以 BSD 许可证开源，谁都可以免费、自由地使用。在写作本书时（2019 年 3 月），它的最新版本是 0.20.3。scikit-learn 实现了许多有监督学习和无监督学习的算法，是一套包含了用于评估的工具、方便的函数、示例数据集等的工具套件。在机器学习领域，scikit-learn 已成为事实上的标准库，它具有两大优点：一是操作方法统一；二是易于在 Python 中使用。关于 Python 环境的设置和 scikit-learn 的安装方法，请参考第 5 章。

数据和学习的种类

前面说过，没有数据，就不能进行机器学习。具体来说，机器学习需要的是什么样的数据呢？

机器学习需要的是二维的表格形式的数据（根据解决问题的目的不同，存在例外的情况）。表格的列中含有表示数据本身特征的多种信息，行则是由多个信息构成的数据集。接下来，我们看一个更具体的例子：学校的某个社团有 4 名学生，下面的表 1-4 是每个学生的姓名、身高、体重、出生日期和性别信息的数据。

▼表 1-4　表格形式的学生数据

姓　　名	身高（cm）	体重（kg）	出生日期	性　　别
赵小刚	165	60	1995–10–02	男
钱小花	150	45	1996–01–20	女
孙小明	170	70	1995–05–29	男
李小芳	160	50	1995–08–14	女

我们思考一下用机器学习进行性别预测的问题。

因为要预测的是性别，所以性别列的男或女的数据就是预测对象。本书把预测对象的数据称为**目标变量**。不过，根据分类的场景的不同，有时也称为**标签**或**类别标签数据**，对应的英文单词为 target。

除了性别之外的 4 个列（姓名、身高、体重、出生日期）是用于预测的原始数据。本书将用于预测的原始数据称为**特征值**，根据场景的不同，有时也称为**特征变量**或**输入变量**，对应的英文单词为 feature。

了解示例数据

我们看一下 scikit-learn 包中内置的示例数据。这里显示了部分鸢尾花（iris）数据（表 1-5）。Python 生态圈中用于处理数据的工具有 pandas，它常与 scikit-learn 搭配使用。关于使用 pandas 处理数据的方法，请参考后文的“使用 pandas 理解和处理数据”部分。

下面输出数据的基本信息。

▼示例代码

```
import pandas as pd
from sklearn.datasets import load_iris
data = load_iris()
X = pd.DataFrame(data.data, columns=data.feature_names)
y = pd.DataFrame(data.target, columns=["Species"])
df = pd.concat([X, y], axis=1)
df.head()
```

▼表 1-5 部分鸢尾花数据

	sepal length (cm)	sepal width (cm)	petal length (cm)	petal width (cm)	Species
0	5.1	3.5	1.4	0.2	0
1	4.9	3.0	1.4	0.2	0
2	4.7	3.2	1.3	0.2	0
3	4.6	3.1	1.5	0.2	0
4	5.0	3.6	1.4	0.2	0

列方向上有 sepal length（cm）、sepal width（cm）、petal length（cm）、petal width（cm）、Species 这 5 种信息，意思分别是鸢尾花的萼片长度、萼片宽度、花瓣长度、花瓣宽度、品种。前面 4 列是表示特征的特征值，最后 1 列是目标变量。在这个数据集中，目标变量的值为 0、1、2 这 3 个值之一。

本书在讲解的过程中使用了基于 scikit-learn 库编写的代码。下面将讲解 scikit-learn 的大致用法。不过本书不会全面讲解 scikit-learn 的功能。关于 scikit-learn 的详细信息，请参考官方文档和其他图书。

有监督学习（分类）的例子

本节将介绍基于有监督学习解决分类问题的实现方法。

下面依次来看例题和实现方法。

例题

例题采用的是美国威斯康星州乳腺癌数据集。这个数据集中包含 30 个特征值，目标变量的值为“良性”或者“恶性”。数据数量有 569 条，其中“恶性”（M）数据 212 条，“良性”（B）数据 357 条。换言之，这是根据 30 个特征值判断结果是恶性还是良性的二元分类问题。

下面看一下数据长什么样子（表 1-6）。

▼表 1-6　部分乳腺癌数据

	mean radius	mean texture	mean perimeter	mean area	mean smoothness	mean compactness	mean concavity	mean concave points	mean symmetry	mean fractal dimension
0	17.99	10.38	122.80	1001.0	0.118 40	0.277 60	0.3001	0.147 10	0.2419	0.078 71
1	20.57	17.77	132.90	1326.0	0.084 74	0.078 64	0.0869	0.070 17	0.1812	0.056 67
2	19.69	21.25	130.00	1203.0	0.109 60	0.159 90	0.1974	0.127 90	0.2069	0.059 99
3	11.42	20.38	77.58	386.1	0.142 50	0.283 90	0.2414	0.105 20	0.2597	0.097 44
4	20.29	14.34	135.10	1297.0	0.100 30	0.132 80	0.1980	0.104 30	0.1809	0.058 83

...	worst radius	worst texture	worst perimeter	worst area	worst smoothness	worst compactness	worst concavity	worst concave points	worst symmetry	worst fractal dimension
...	25.38	17.33	184.60	2019.0	0.1622	0.6656	0.7119	0.2654	0.4601	0.118 90
...	24.99	23.41	158.80	1956.0	0.1238	0.1866	0.2416	0.1860	0.2750	0.089 02
...	23.57	25.53	152.50	1709.0	0.1444	0.4245	0.4504	0.2430	0.3613	0.8758
...	14.91	26.50	98.87	567.7	0.2098	0.8663	0.6869	0.2575	0.6638	0.173 00
...	22.54	16.67	152.20	1575.0	0.1374	0.2050	0.4000	0.1625	0.2364	0.076 78

这份数据可以通过 scikit-learn 包读取。

▼示例代码

```
from sklearn.datasets import load_breast_cancer
data = load_breast_cancer()
```

这段代码用于导入 scikit-learn 内置的读取数据集的函数，并将所读取的数据保存在变量 `data` 中。

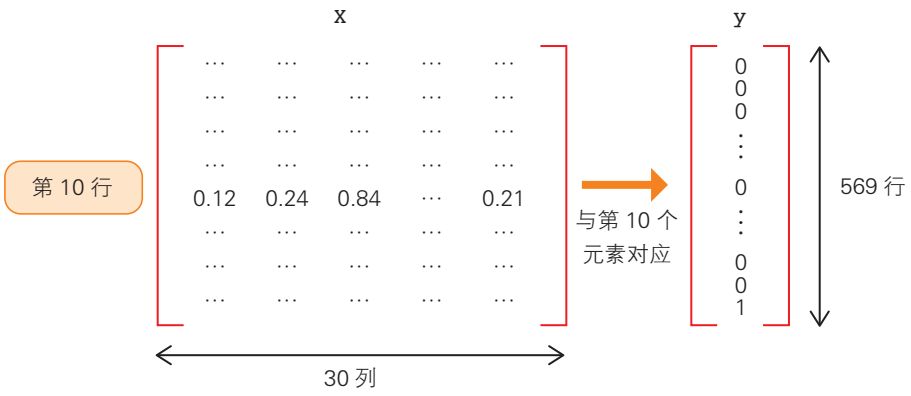
接下来，从数据集中取出特征值赋给 `X`，取出目标变量赋给 `y`。

▼示例代码

```
X = data.data
y = data.target
```

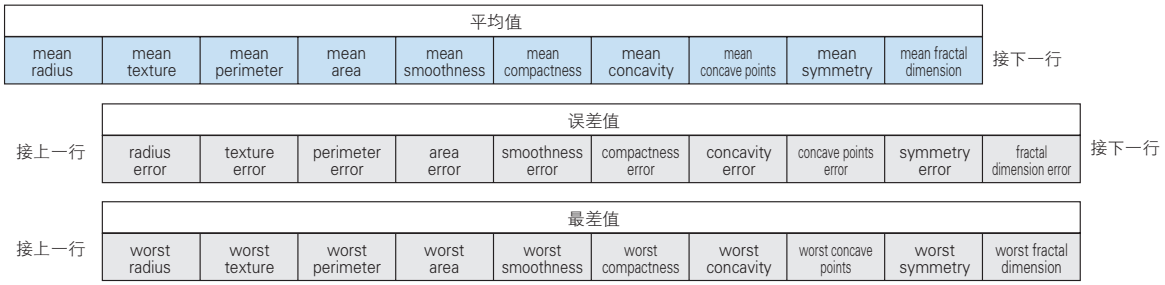
`X` 由多个特征值向量构成，我们将其作为矩阵处理，因此遵照惯例使用大写字母作为变量名。`y` 是目标变量的向量，其元素值的含义为：0 表示恶性（M），1 表示良性（B）。

`X` 是大小为 569 × 30 的数据，可将其看作 569 行 30 列的矩阵。虽然 `y` 是向量，但把它当作 569 行 1 列的矩阵后，`X` 和 `y` 的行就能一一对应了。比如特征值 `X` 的第 10 行与目标变量 `y` 的第 10 个元素相对应（图 1-7）。



▲图 1-7 与 y 的第 10 个元素对应

要想详细了解这个数据集，需要具备相应的医学知识，但是这里我们仅将其作为数值，对其进行有监督学习的二元分类。特征值共有 30 个，分为平均值、误差值、最差值 3 类，每类包括 10 项，分别为半径、纹理、面积等。这次我们着眼于平均值、误差值、最差值这 3 类数据中的平均值（图 1-8）。



▲图 1-8 特征值的种类

▼示例代码

```
X = X[:, :10]
```

这行操作使得只有平均值被重新赋值给了变量 X，用作特征值的数据现在缩减到了 10 项。

实现方法

下面趁热打铁，基于美国威斯康星州乳腺癌数据集创建并训练进行二元分类的模型。这里使用

的分类算法是逻辑回归。虽然算法名中有“回归”二字，却能用于分类，详细内容请参考 2.3 节。

▼示例代码

```
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
model = LogisticRegression()
```

> **注意** 在使用 scikit-learn 进行模型的初始化和训练时，读者有可能会看到输出的警告信息。警告信息是 FutureWarning，即对将来有可能会变更的功能的通知，在训练不收敛时有可能会出现。本书没有提及警告的输出，如果读者在实践中发现有警告输出，请根据警告内容采取相应的措施。

为了使用逻辑回归模型，上面的代码导入了 scikit-learn 的 `LogisticRegression` 类，然后创建了 `LogisticRegression` 类的实例，并将已初始化的模型赋给了 `model`。

▼示例代码

```
model.fit(X, y)
```

上面的代码使用 `model`（`LogisticRegression` 的实例）的 `fit` 方法训练模型，方法的参数是特征值 `X` 和目标变量 `y`。

在调用 `fit` 方法后，`model` 成为学习后的模型。

▼示例代码

```
y_pred = model.predict(X)
```

上面的代码使用学习后的模型 `model` 的 `predict` 方法对学习时用到的特征值 `X` 进行预测，并将预测结果赋给变量 `y_pred`。

评估方法

下面介绍分类的评估方法。

首先看一下正确率（详见第 4 章）。这里使用 scikit-learn 的 `accuracy_score` 函数查看正确率。

▼示例代码

```
from sklearn.metrics import accuracy_score
accuracy_score(y, y_pred)
```

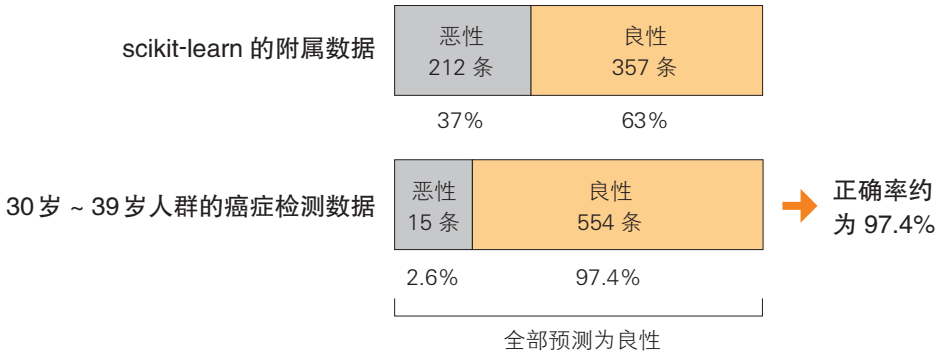
```
0.9086115992970123
```

代码的输出结果是学习后的模型预测的结果 y_pred 相对于作为正确答案的目标变量 y 的正确率。

这个验证通常应使用另外准备的一些不用于学习的数据来进行，否则会产生**过拟合**（overfitting）问题。过拟合是有监督学习的一个严重问题。有监督学习追求的是正确预测未知的数据，但是现在输出的正确率是使用学习时用过的数据计算出来的。这就意味着我们不知道模型对于未用于学习的未知数据的预测性能的好坏，不知道得到的学习后的模型是不是真正优秀。关于过拟合，详见 4.1 节的“模型的过拟合”部分。

关于评估方法，还有其他问题需要考虑。比如，只看正确率就能判断结果是否正确吗？根据数据的特性不同，有些情况下不能保证分类是正确的。这次用的数据中有“恶性”数据 212 条，“良性”数据 357 条，可以说是在一定程度上均衡的数据。

对于“良性”“恶性”极不均衡的数据，光看正确率无法判断结果是否正确。我们再以另外一组数据为例，看一下 30 岁 ~ 39 岁人群的癌症检测数据。通常来说，诊断为恶性的数据只占整体的百分之几，大多数人没有肿瘤或者肿瘤是良性的。对于这样的数据，如果模型将所有的样本都判断为良性的，那么尽管正确率很高，但光看正确率也不能正确评估这个模型（图 1-9）。



▲图 1-9　光看正确率无法正确评估模型

关于这些内容，第 4 章会详细介绍。

无监督学习（聚类）的例子

下面看一下无监督学习的聚类问题的实现方法的各个步骤。与前面一样，这里我们也使用 scikit-learn 包。

例题

例题采用的是 scikit-learn 包内置的与葡萄酒种类有关的数据集。这个数据集有 13 个特征值，目标变量是葡萄酒种类（表 1-7）。由于这次介绍的是无监督学习的聚类算法，所以不使用目标变量。简单起见，本次只使用 13 个特征值中的 alcohol（酒精度）和 color_intensity（色泽）两个特征值（表 1-8）。我们对这个数据集应用 *k*-means 聚类算法，将其分割为 3 个簇。

▼表 1-7　葡萄酒数据的特征值

	alcohol	malic_acid	ash	alcalinity_of_ash	magnesium	total_phenols	flavanoids	nonflavanoid_phenols	proanthocyanins	color_intensity	hue	od280/od315_of_diluted_wines	proline
0	14.23	1.71	2.43	15.6	127.0	2.80	3.06	0.28	2.29	5.64	1.04	3.92	1065.0
1	13.20	1.78	2.14	11.2	100.0	2.65	2.76	0.26	1.28	4.38	1.05	3.40	1050.0
2	13.16	2.36	2.67	18.6	101.0	2.80	3.24	0.30	2.81	5.68	1.03	3.17	1185.0
3	14.37	1.95	2.50	16.8	113.0	3.85	3.49	0.24	2.18	7.80	0.86	3.45	1480.0
4	13.24	2.59	2.87	21.0	118.0	2.80	2.69	0.39	1.82	4.32	1.04	2.93	735.0

▼表 1-8　本次使用的两个特征值

	alcohol	color_intensity
0	14.23	5.64
1	13.20	4.38
2	13.16	5.68
3	14.37	7.80
4	13.24	4.32

下面使用 scikit-learn 包加载这个数据集。

▼示例代码

```
from sklearn.datasets import load_wine
data = load_wine()
```

上面的代码用于导入 scikit-learn 内置的读取葡萄酒数据集的函数，并将读取的数据保存在变量 data 中。

接着，仅从数据集中选择 alcohol 列和 color_intensity 列作为特征值赋给 X。这么做是为了在显示结果时，只用二维图形对结果进行可视化。

▼示例代码

```
X = data.data[:, [0, 9]]
```

特征值 X 是 178 行 2 列的数据。

实现方法

下面使用 *k*-means 算法实现聚类。

▼示例代码

```
from sklearn.cluster import KMeans
n_clusters = 3
model = KMeans(n_clusters=n_clusters)
```

上面的代码导入并使用了实现 *k*-means 算法的 KMeans 类。

初始化 KMeans 类，把它作为学习前的模型赋给变量 model。通过 n_clusters 参数，指示模型将数据分为 3 个簇。

▼示例代码

```
pred = model.fit_predict(X)
```

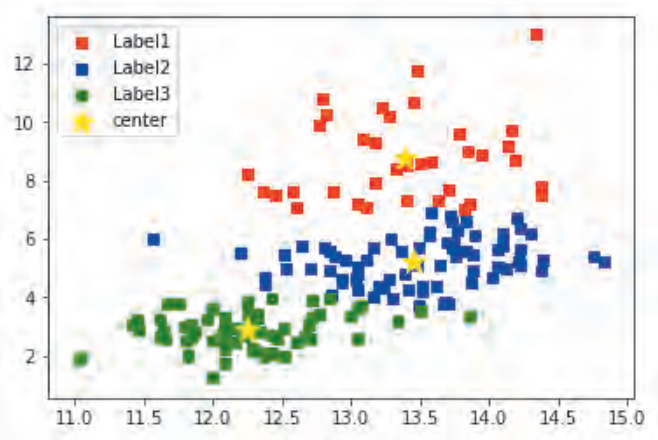
上面的代码用于向学习前的模型 model 的 fit_predict 方法传入特征值数据。预测结果赋给变量 pred。

下面看一下赋给 pred 的数据是如何聚类的。

查看结果

这里将聚类的结果可视化。

由于本次使用的特征值只有两种，所以绘制二维图形即可实现结果的可视化。图 1-10 是以图形展示的聚类结果。图形中每个数据点对应的是一种葡萄酒。从数据点的颜色可以看出每种酒属于哪个簇。3 个黄色的星星是各个簇的重心，是这 3 个簇的代表点。



▲图 1-10　特征值的可视化

原本以酒精度、色泽变量表示的葡萄酒，现在以“属于哪个簇”这种简洁直观的形式展示了出来。此外，要想了解各个簇具有什么特征，只需查看作为代表点的重心的值即可。比如，第 3 个簇的特点是“酒精度低、色泽淡”。

通过 *k*-means 算法实现的聚类是以“将酒精度百分之多少以上的数据分到第 1 个簇”之类的规则进行聚类的，这些规则不是由人预先设置的，而是由算法自动进行聚类得出的。这一点很重要，说明这个算法具有通用性，可应用于葡萄酒之外的数据。

无监督学习的评估方法将在第 3 章介绍各个算法时进行说明，请参考相应内容。

可视化

可视化是利用图形等把握数据的整体情况的方法。在机器学习领域中，许多场景下需要进行可视化。有时用于了解数据的概况，有时用于以图形展示机器学习的结果。

这里介绍一下使用 Python 进行可视化的方法，书中也将展示作为可视化结果的图形等。