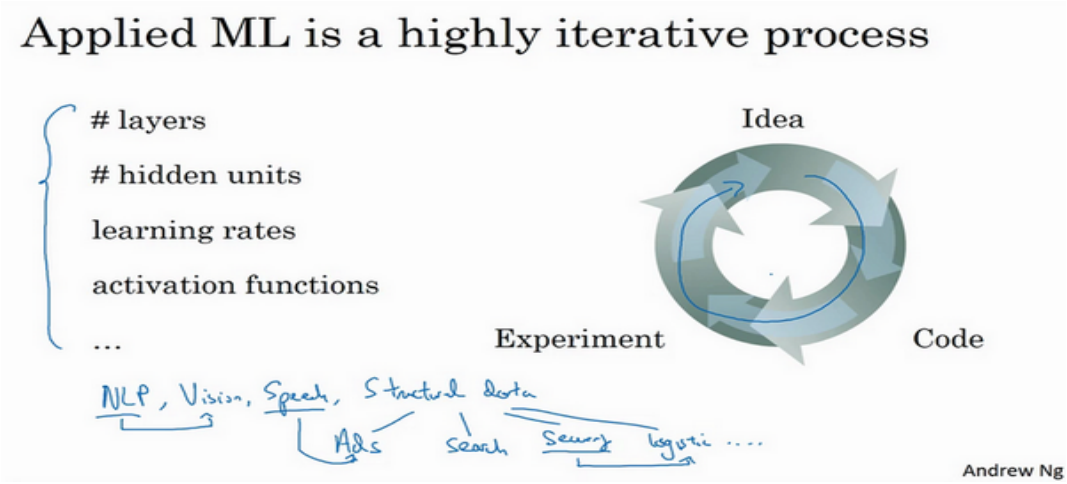
1.1 训练，验证，测试集（Train / Dev / Test sets）

第一周，我们首先说说神经网络机器学习中的问题，然后是随机神经网络，还会学习一些确保神经网络正确运行的技巧，带着这些问题，我们开始今天的课程。

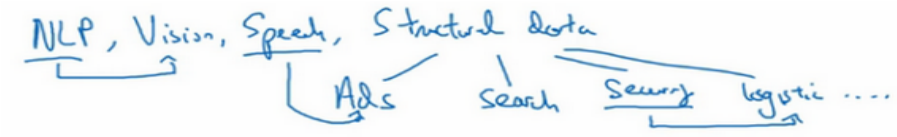
在配置训练、验证和测试数据集的过程中做出正确决策会在很大程度上帮助大家创建高效的神经网络。训练神经网络时，我们需要做出很多决策，例如：

神经网络分多少层；每层含有多少个隐藏单元；学习速率是多少；各层采用哪些激活函数。



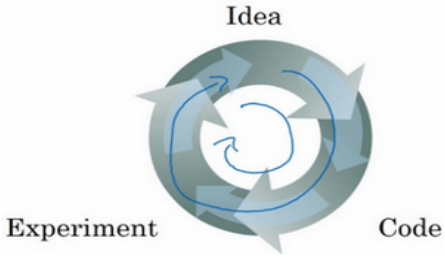
创建新应用的过程中，我们不可能从一开始就准确预测出这些信息和其他超级参数。实际上，应用型机器学习是一个高度迭代的过程，通常在项目启动时，我们会先有一个初步想法，比如构建一个含有特定层数，隐藏单元数量或数据集个数等等的神经网络，然后编码，并尝试运行这些代码，通过运行和测试得到该神经网络或这些配置信息的运行结果，你可能会根据输出结果重新完善自己的想法，改变策略，或者为了找到更好的神经网络不断迭代更新自己的方案。

在我看来，从一个领域或者应用领域得来的直觉经验，通常无法转移到其他应用领域，最佳决策取决于你所拥有的数据量，计算机配置中输入特征的数量，用 **GPU** 训练还是 **CPU**，**GPU** 和 **CPU** 的具体配置以及其他诸多因素。



应用深度学习是一个典型的迭代过程，需要多次循环往复，才能为应用程序找到一个称

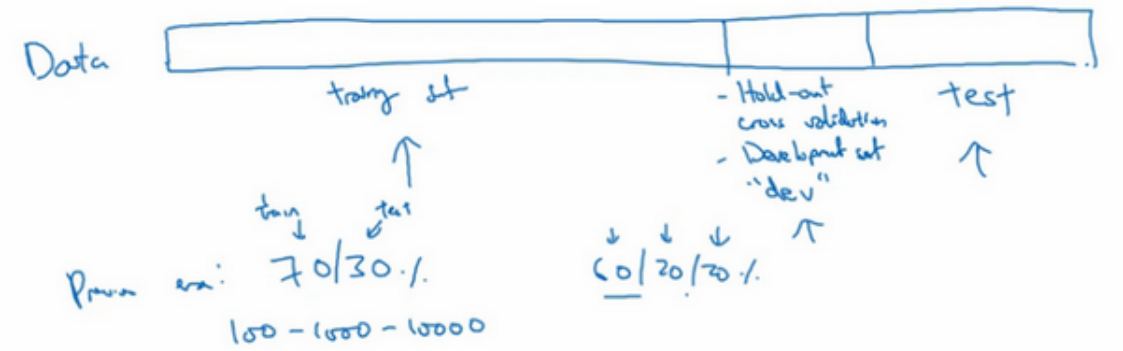
心的神经网络，因此循环该过程的效率是决定项目进展速度的一个关键因素，而创建高质量的训练数据集，验证集和测试集也有助于提高循环效率。



假设这是训练数据，我用一个长方形表示，我们通常会将这些数据划分成几部分，一部分作为训练集，一部分作为简单交叉验证集，有时也称之为验证集，方便起见，我就叫它验证集（**dev set**），其实都是同一个概念，最后一部分则作为测试集。

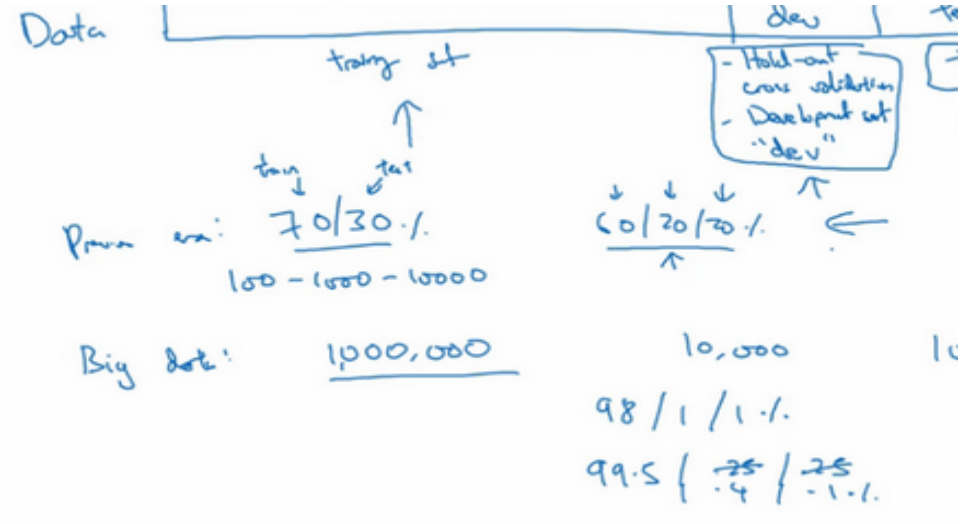
接下来，我们开始对训练执行算法，通过验证集或简单交叉验证集选择最好的模型，经过充分验证，我们选定了最终模型，然后就可以在测试集上进行评估了，为了无偏评估算法的运行状况。

在机器学习发展的小数据量时代，常见做法是将所有数据三七分，就是人们常说的 **70%验证集，30%测试集**，如果没有明确设置验证集，**也可以按照 60%训练，20%验证和 20%测试**集来划分。这是前几年机器学习领域普遍认可的最好的实践方法。



如果只有 100 条，1000 条或者 1 万条数据，那么上述比例划分是非常合理的。

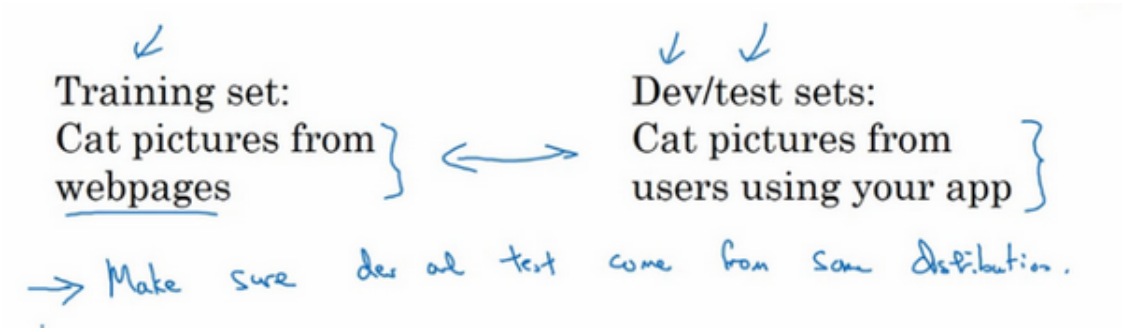
但是在大数据时代，我们现在的数据量可能是百万级别，那么验证集和测试集占数据总量的比例会趋向于变得更小。因为验证集的目的就是验证不同的算法，检验哪种算法更有效，因此，验证集要足够大才能评估，比如 2 个甚至 10 个不同算法，并迅速判断出哪种算法更有效。我们可能不需要拿出 20%的数据作为验证集。



比如我们有 100 万条数据，那么取 1 万条数据便足以进行评估，找出其中表现最好的 1-2 种算法。同样地，根据最终选择的分类器，测试集的主要目的是正确评估分类器的性能，所以，如果拥有百万数据，我们只需要 1000 条数据，便足以评估单个分类器，并且准确评估该分类器的性能。假设我们有 100 万条数据，其中 1 万条作为验证集，1 万条作为测试集，100 万里取 1 万，比例是 1%，即：训练集占 98%，验证集和测试集各占 1%。对于数据量过百万的应用，训练集可以占到 99.5%，验证和测试集各占 0.25%，或者验证集占 0.4%，测试集占 0.1%。

总结一下，在机器学习中，**我们通常将样本分成训练集，验证集和测试集三部分**，数据集规模相对较小，适用传统的划分比例，数据集规模较大的，验证集和测试集要小于数据总量的 20%或 10%。后面我会给出如何划分验证集和测试集的具体指导。

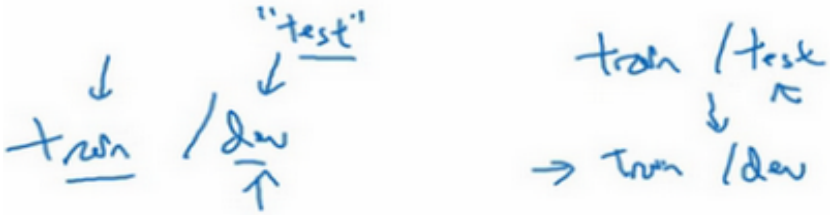
现代深度学习的另一个趋势是越来越多的人在训练和测试集分布不匹配的情况下进行训练，假设你要构建一个用户可以上传大量图片的应用程序，目的是找出并呈现所有猫咪图片，可能你的用户都是爱猫人士，训练集可能是从网上下载的猫咪图片，而验证集和测试集是用户在这个应用上上传的猫的图片，就是说，训练集可能是从网络上抓下来的图片。而验证集和测试集是用户上传的图片。结果许多网页上的猫咪图片分辨率很高，很专业，后期制作精良，而用户上传的照片可能是用手机随意拍摄的，像素低，比较模糊，这两类数据有所不同，针对这种情况，根据经验，我建议大家**要确保验证集和测试集的数据来自同一分布**，关于这个问题我也会多讲一些。因为你们要用验证集来评估不同的模型，尽可能地优化性能。如果验证集和测试集来自同一个分布就会很好。



但由于深度学习算法需要大量的训练数据，为了获取更大规模的训练数据集，我们可以采用当前流行的各种创意策略，例如，网页抓取，代价就是训练集数据与验证集和测试集数据有可能不是来自同一分布。但只要遵循这个经验法则，你就会发现机器学习算法会变得更快。我会在后面的课程中更加详细地解释这条经验法则。

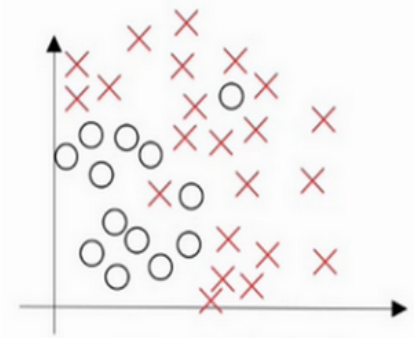
最后一点，就算没有测试集也不要紧，测试集的目的是对最终所选定的神经网络系统做出无偏估计，如果不需要无偏估计，也可以不设置测试集。所以如果只有验证集，没有测试集，我们要做的就是，在训练集上训练，尝试不同的模型框架，在验证集上评估这些模型，然后迭代并选出适用的模型。因为验证集中已经涵盖测试集数据，其不再提供无偏性能评估。当然，如果你不需要无偏估计，那就再好不过了。

在机器学习中，如果只有一个训练集和一个验证集，而没有独立的测试集，遇到这种情况，训练集还被人们称为训练集，而验证集则被称为测试集，不过在实际应用中，人们只是把测试集当成简单交叉验证集使用，并没有完全实现该术语的功能，因为他们把验证集数据过度拟合到了测试集中。如果某团队跟你说他们只设置了一个训练集和一个测试集，我会很谨慎，心想他们是不是真的有训练验证集，因为他们把验证集数据过度拟合到了测试集中，让这些团队改变叫法，改称其为“训练验证集”，而不是“训练测试集”，可能不太容易。即便我认为“训练验证集“在专业用词上更准确。实际上，如果你不需要无偏评估算法性能，那么这样是可以的。



1.2 偏差，方差（Bias /Variance）

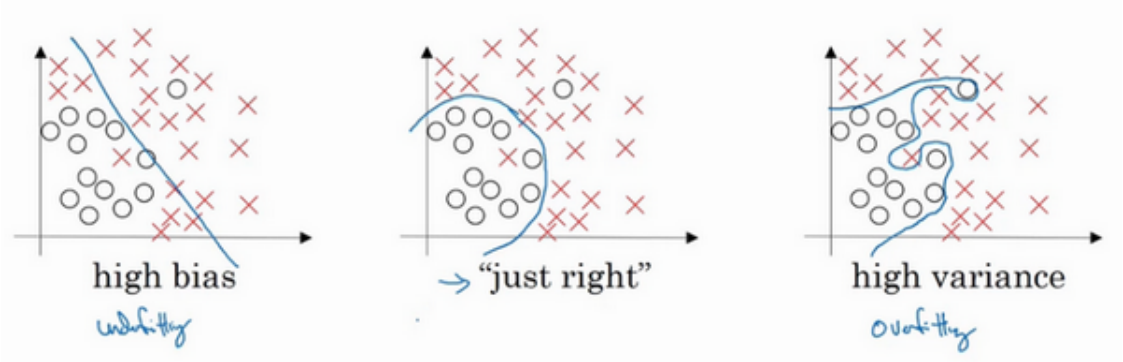
我注意到，几乎所有机器学习从业人员都期望深刻理解偏差和方差，这两个概念易学难精，即使你自己认为已经理解了偏差和方差的基本概念，却总有一些意想不到的新东西出现。关于深度学习的误差问题，另一个趋势是对偏差和方差的权衡研究甚浅，你可能听说过这两个概念，但深度学习的误差很少权衡二者，我们总是分别考虑偏差和方差，却很少谈及偏差和方差的权衡问题，下面我们来一探究竟。



假设这就是数据集，如果给这个数据集拟合一条直线，可能得到一个逻辑回归拟合，但它并不能很好地拟合该数据，这是高偏差（**high bias**）的情况，我们称为“欠拟合”（**underfitting**）。

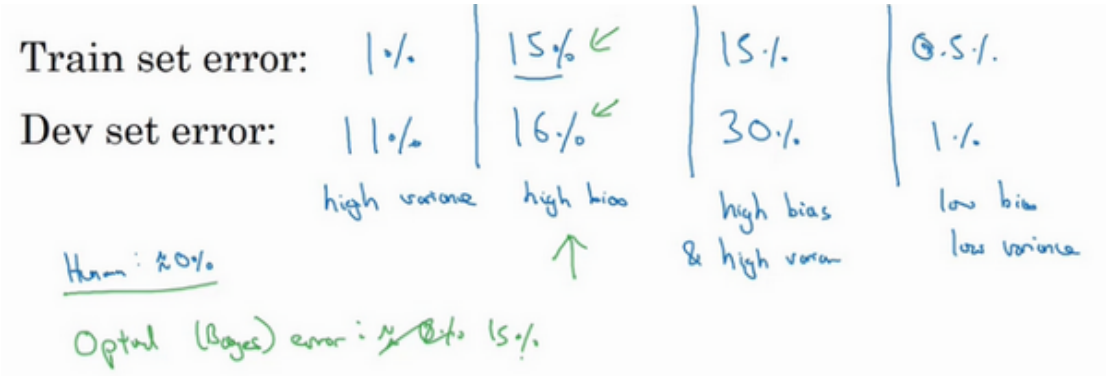
相反的如果我们拟合一个非常复杂的分类器，比如深度神经网络或含有隐藏单元的神经网络，可能就非常适用于这个数据集，但是这看起来也不是一种很好的拟合方式分类器方差较高（**high variance**），数据过度拟合（**overfitting**）。

在两者之间，可能还有一些像图中这样的，复杂程度适中，数据拟合适度的分类器，这个数据拟合看起来更加合理，我们称之为“适度拟合”（**just right**）是介于过度拟合和欠拟合中间的一类。



在这样一个只有x_1和x_2两个特征的二维数据集中，我们可以绘制数据，将偏差和方差可视化。在多维空间数据中，绘制数据和可视化分割边界无法实现，但我们可以通过几个指标，来研究偏差和方差。

我们沿用猫咪图片分类这个例子，左边一张是猫咪图片，右边一张不是。理解偏差和方差的两个关键数据是训练集误差（Train set error）和验证集误差（Dev set error），为了方便论证，假设我们可以辨别图片中的小猫，我们用肉眼识别几乎是不会出错的。



假定训练集误差是 1%，为了方便论证，假定验证集误差是 11%，可以看出训练集设置得非常好，而验证集设置相对较差，我们可能过度拟合了训练集，在某种程度上，验证集并没有充分利用交叉验证集的作用，像这种情况，我们称之为“高方差”。

通过查看训练集误差和验证集误差，我们便可以诊断算法是否具有高方差。也就是说衡量训练集和验证集误差就可以得出不同结论。

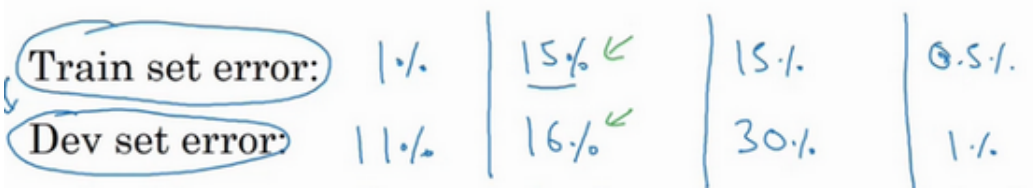
假设训练集误差是 15%，我们把训练集误差写在首行，验证集误差是 16%，假设该案例中人的错误率几乎为 0%，人们浏览这些图片，分辨出是不是猫。算法并没有在训练集中得到很好训练，如果训练数据的拟合度不高，就是数据欠拟合，就可以说这种算法偏差比较高。相反，它对于验证集产生的结果却是合理的，验证集中的错误率只比训练集的多了 1%，所以这种算法偏差高，因为它甚至不能拟合训练集，这与上一张幻灯片最左边的图片相似。

再举一个例子，训练集误差是 15%，偏差相当高，但是，验证集的评估结果更糟糕，错误率达到 30%，在这种情况下，我会认为这种算法偏差高，因为它在训练集上结果不理想，而且方差也很高，这是方差偏差都很糟糕的情况。

再看最后一个例子，训练集误差是 0.5%，验证集误差是 1%，用户看到这样的结果会很开心，猫咪分类器只有 1%的错误率，偏差和方差都很低。

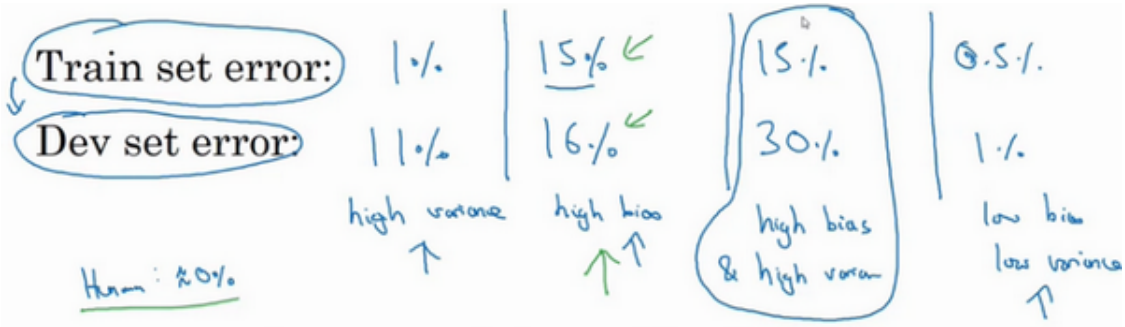
有一点我先在这个简单提一下，具体的留在后面课程里讲，这些分析都是基于假设预测的，假设人眼辨别的错误率接近 0%，一般来说，最优误差也被称为贝叶斯误差，所以，最优误差接近 0%，我就不在这里细讲了，如果最优误差或贝叶斯误差非常高，比如 15%。我们再看看这个分类器（训练误差 15%，验证误差 16%），15%的错误率对训练集来说也是非常合理的，偏差不高，方差也非常低。

当所有分类器都不适用时，如何分析偏差和方差呢？比如，图片很模糊，即使是人眼，或者没有系统可以准确无误地识别图片，在这种情况下，最优误差会更高，那么分析过程就要做些改变了，我们暂时先不讨论这些细微差别，重点是通过查看训练集误差，我们可以判断数据拟合情况，至少对于训练数据是这样，可以判断是否有偏差问题，然后查看错误率有多高。当完成训练集训练，开始使用验证集验证时，我们可以判断方差是否过高，从训练集到验证集的这个过程中，我们可以判断方差是否过高。

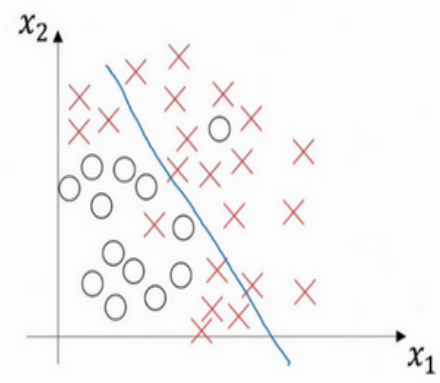


以上分析的前提都是假设基本误差很小，训练集和验证集数据来自相同分布，如果没有这些假设作为前提，分析过程更加复杂，我们将会在稍后课程里讨论。

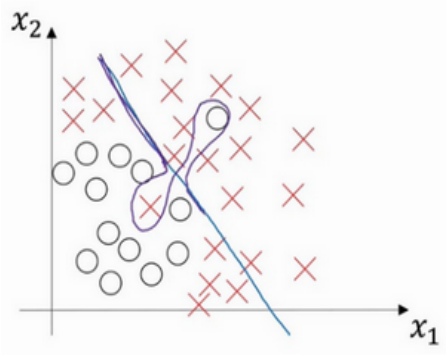
上一张幻灯片，我们讲了高偏差和高方差的情况，大家应该对优质分类器有了一定的认识，偏差和方差都高是什么样子呢？这种情况对于两个衡量标准来说都是非常糟糕的。



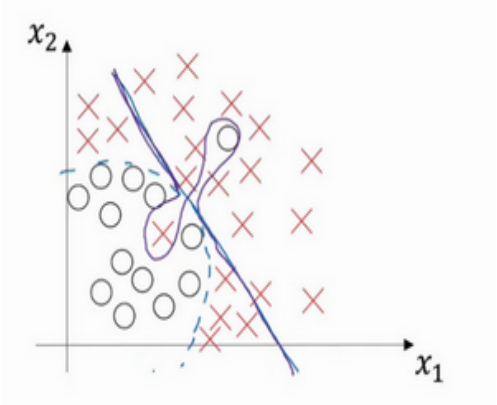
我们之前讲过，这样的分类器，会产生高偏差，因为它的数据拟合度低，像这种接近线性的分类器，数据拟合度低。



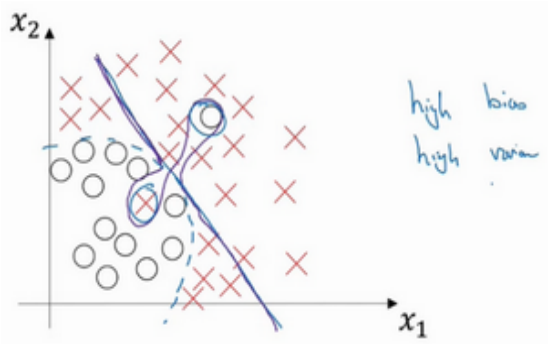
但是如果我们稍微改变一下分类器，我用紫色笔画出，它会过度拟合部分数据，用紫色线画出的分类器具有高偏差和高方差，偏差高是因为它几乎是一条线性分类器，并未拟合数据。



这种二次曲线能够很好地拟合数据。



这条曲线中间部分灵活性非常高，却过度拟合了这两个样本，这类分类器偏差很高，因为它几乎是线性的。



而采用曲线函数或二次元函数会产生高方差，因为它曲线灵活性太高以致拟合了这两个错误样本和中间这些活跃数据。

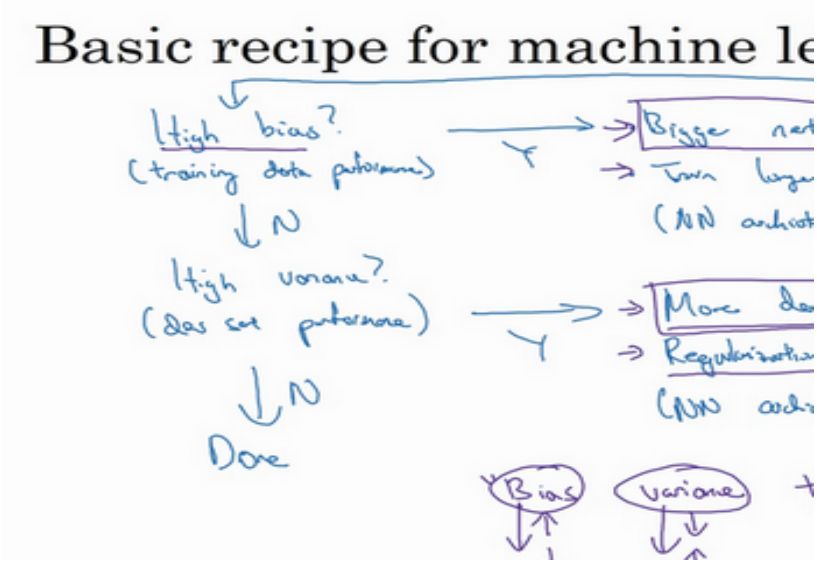
这看起来有些不自然，从两个维度上看都不太自然，但对于高维数据，有些数据区域偏差高，有些数据区域方差高，所以在高维数据中采用这种分类器看起来就不会那么牵强了。

总结一下，我们讲了如何通过分析在训练集上训练算法产生的误差和验证集上验证算法产生的误差来诊断算法是否存在高偏差和高方差，是否两个值都高，或者两个值都不高，根据算法偏差和方差的具体情况决定接下来你要做的工作，下节课，我会根据算法偏差和方差的高低情况讲解一些机器学习的基本方法，帮助大家更系统地优化算法，我们下节课见。

1.3 机器学习基础（Basic Recipe for Machine Learning）

上节课我们讲的是如何通过训练误差和验证集误差判断算法偏差或方差是否偏高，帮助我们更加系统地在机器学习中运用这些方法来优化算法性能。

下图就是我在训练神经网络用到的基本方法：（尝试这些方法，可能有用，可能没用）



这是我在训练神经网络时用到地基本方法，初始模型训练完成后，我首先要知道算法的偏差高不高，如果偏差较高，试着评估训练集或训练数据的性能。如果偏差的确很高，甚至无法拟合训练集，那么你要做的就是选择一个新的网络，比如含有更多隐藏层或者隐藏单元的网络，或者花费更多时间来训练网络，或者尝试更先进的优化算法，后面我们会讲到这部分内容。你也可以尝试其他方法，可能有用，也可能没用。

一会儿我们会看到许多不同的神经网络架构，或许你能找到一个更合适解决此问题的新的网络架构，加上括号，因为其中一条就是你必须去尝试，可能有用，也可能没用，不过采用规模更大的网络通常都会有所帮助，延长训练时间不一定有用，但也没什么坏处。训练学习算法时，我会不断尝试这些方法，直到解决掉偏差问题，这是最低标准，反复尝试，直到可以拟合数据为止，至少能够拟合训练集。

如果网络足够大，通常可以很好的拟合训练集，只要你能扩大网络规模，如果图片很模糊，算法可能无法拟合该图片，但如果有人可以分辨出图片，如果你觉得基本误差不是很高，那么训练一个更大的网络，你就应该可以……至少可以很好地拟合训练集，至少可以拟合或者过拟合训练集。一旦偏差降低到可以接受的数值，检查一下方差有没有问题，为了评估方差，我们要查看验证集性能，我们能从一个性能理想的训练集推断出验证集的性能是否也理

想，如果方差高，最好的解决办法就是采用更多数据，如果你能做到，会有一定的帮助，但有时候，我们无法获得更多数据，我们也可以尝试通过正则化来减少过拟合，这个我们下节课会讲。有时候我们不得不反复尝试，但是，如果能找到更合适的神经网络框架，有时它可能会一箭双雕，同时减少方差和偏差。如何实现呢？想系统地说出做法很难，总之就是不断重复尝试，直到找到一个低偏差，低方差的框架，这时你就成功了。

有两点需要大家注意：

第一点，高偏差和高方差是两种不同的情况，我们后续要尝试的方法也可能完全不同，我通常会用训练验证集来诊断算法是否存在偏差或方差问题，然后根据结果选择尝试部分方法。举个例子，如果算法存在高偏差问题，准备更多训练数据其实也没什么用处，至少这不是更有效的方法，所以大家要清楚存在的问题是偏差还是方差，还是两者都有问题，明确这一点有助于我们选择出最有效的方法。

第二点，在机器学习的初期阶段，关于所谓的偏差方差权衡的讨论屡见不鲜，原因是我们能尝试的方法有很多。可以增加偏差，减少方差，也可以减少偏差，增加方差，但是在深度学习的早期阶段，我们没有太多工具可以做到只减少偏差或方差却不影响到另一方。但在当前的深度学习和大数据时代，只要持续训练一个更大的网络，只要准备了更多数据，那么也并非只有这两种情况，我们假定是这样，那么，只要正则适度，通常构建一个更大的网络便可以，在不影响方差的同时减少偏差，而采用更多数据通常可以在不过多影响偏差的同时减少方差。这两步实际要做的工作是：训练网络，选择网络或者准备更多数据，现在我们有工具可以做到在减少偏差或方差的同时，不对另一方产生过多不良影响。我觉得这就是深度学习对监督式学习大有裨益的一个重要原因，也是我们不用太过关注如何平衡偏差和方差的一个重要原因，但有时我们有很多选择，减少偏差或方差而不增加另一方。最终，我们会得到一个非常规范化的网络。从下节课开始，我们将讲解正则化，训练一个更大的网络几乎没有任何负面影响，而训练一个大型神经网络的主要代价也只是计算时间，前提是网络是比较规范化的。