Broadview
www.broadview.com.cn

人生苦短，我用Python
算法偷懒，我看笔记学霸版

数据科学家成长之路

Python大战机器学习

数据科学家的第一个小目标

华校专 王正林 编著

中国工信出版集团
電子工業出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY
http://www.phei.com.cn

数据科学家成长之路

Python大战机器学习

数据科学家的第一个小目标

华校专 王正林 编著

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京•BEIJING

内容简介

数据科学家是当下炙手可热的职业，机器学习则是他们的必备技能。机器学习在大数据分析中居于核心地位，在互联网、金融保险、制造业、零售业、医疗等产业领域发挥了越来越大的作用且日益受到关注。

Python 是最好最热门的编程语言之一，以简单易学、应用广泛、类库强大而著称，是实现机器学习算法的首选语言。

本书以快速上手、四分理论六分实践为出发点，讲述机器学习的算法和 Python 编程实践，采用“原理笔记精华 + 算法 Python 实现 + 问题实例 + 代码实战 + 运行调参”的形式展开，理论与实践结合，算法原理与编程实战并重。

全书从内容上分为 13 章分 4 篇展开：第一篇：机器学习基础篇（第 1~6 章），讲述机器学习的基础算法，包括线性模型、决策树、贝叶斯分类、k 近邻法、数据降维、聚类和 EM 算法；第二篇：机器学习高级篇（第 7~10 章），讲述经典而常用的高级机器学习算法，包括支持向量机、人工神经网络、半监督学习和集成学习；第三篇：机器学习工程篇（第 11~12 章），讲述机器学习工程中的实际技术，包括数据预处理，模型评估、选择与验证等；第四篇：Kaggle 实战篇（第 13 章），讲述一个 Kaggle 竞赛题目的实战。

本书内容丰富、深入浅出，算法与代码双管齐下，无论你是新手还是有经验的读者，都能快速学到你想要的知识。本书可供为高等院校计算机、金融、信息、自动化及相关理工科专业的本科生或研究生使用，也可供对机器学习感兴趣的研究人员和工程技术人员阅读参考。

图书在版编目（CIP）数据

Python 大战机器学习：数据科学家的第一个小目标 / 华校专，王正林编著.—北京：电子工业出版社，2017.3

（数据科学家成长之路）

ISBN 978-7-121-30894-9

I. ① P…II. ① 华… ② 王…III. ① 软件工具 – 程序设计 IV. ① TP311.561

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2017）第 022099 号

策划编辑：张月萍

责任编辑：徐津平

特约编辑：顾慧芳

印　　刷：北京京科印刷有限公司

装　　订：三河市良远印务有限公司

出版发行：电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱　　邮编：100036

开　　本：787×1092　1/16　　印张：28　　字数：716 千字

版　　次：2017 年 3 月第 1 版

印　　次：2017 年 5 月第 3 次印刷

定　　价：69.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：（010）88254888，88258888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

本书咨询联系方式：（010）51260888-819　faq@phei.com.cn。

自序

本人华校专，性别男，爱好女 ^_^，湖北黄冈人。2004 年我考入清华大学航天学院工程力学系，喜欢读书，在清华的四年我每年的成绩都是本系的 Top 1。在清华园里我养成了记笔记的习惯，大学四年我做了大量的学习笔记，这一良好的习惯一直坚持到现在，十多年的时间我已经记了三千多页的笔记，如图 1 和图 2 所示。

研究生阶段我被免试保送到国防科大计算机学院读研并入伍，研究生毕业之后一直在某部队工作至 2016 年。工作期间我阅读了大量的计算机书籍并编写了大量的代码，从操作系统底层开发到应用 App 开发。这个阶段是我从学生到工程师的一个转变阶段，也是我个人知识体系的建设阶段。对于不理解的内容我反复读、反复研究。记得学习《算法导论》的时候，我阅读了不下四轮，做了两轮笔记，并且仿照 C++ STL 的风格实现了其中的各种算法（算法导论的 C++ 实现我已经放在个人的 github 上）。

我个人超喜欢研究算法，也比较有优势。一是我数学能力比较强，作为曾经的清华学霸 ^_^，我数学相关的课程平均分不低于 95 分（我本科四年的平均学分积不低于 90 分）。另一方面是我编程功底比较强，尤其是精通 C/C++/Python 三门语言。在自学机器学习时，理论方面我结合了斯坦福大学的机器学习公开课，李航老师的《统计学习方法》和周志华老师的《机器学习》等课程，实践方面我使用 Python 的 scikit-learn 包提供的 API 函数，包里面所涵盖的算法接口非常全面，更令人振奋的是，其用户手册写得非常好，我发现这是一条快捷的学习路径。

机器学习是一门理论与实践结合非常紧密的学科，理论提供了各种算法处理问题的边界，即有的算法适合处理问题 A，不适合问题 B；而另外一些算法适合处理问题 B 不适合处理问题 A。如果不懂得理论，那么对于某个具体问题，你就完全不知道应该采用哪种算法，以及当你采用了某个算法时各类超参数的物理意义。如果没有扎实的写代码实践，那么你可能采用了一个看起来很美好的算法，但是实际操作中因为各种条件不满足，最后要么预测性能很差，要么运行时间能让你崩溃，停留在“看上去很美”的尴尬状态。

2016 年，我顺利从部队退役，一次在北京旅游时，抱着试试的态度，我轻松拿到了阿里的算法 offer，2017 年年初，我在美丽的杭州入职！

学习机器学习绝不是“吃饭，睡觉，打豆豆”就能搞定，我觉得一定要做好三件事：看书、做笔记、编程，我已经验证了，该你了！

在机器学习的路上，我们一起同行！

2017 年 1 月，入职日于杭州阿里总部大楼前

二十七次：函数的高级特性

1. 在Python中，函数的递归通常比for循环要慢且空间消耗大，但递归的优点是可以遍历分层形状的结构。

2. Python函数是对象，自身存储在内存块中，它可以自由地传递与引用：

① 函数对象支持一个特殊操作：可以通过跟随参数列表调用。

② 我们可以通用地检查函数对象的属性。

如 func.__name__ , func.__code__ ... 可以利用这些信息来管理函数

③ 可以向函数附加任意的用户自定义属性。

func.count = 0 ... 这样的属性可以用来直接把状态信息附加到函数对象，类似于C注言的静态局部变量 static。

④ Python 3.0中，可以给函数对象附加注解。注解不做什么事情，它是可选的，只是附加在函数对象的 __annotations__ 属性中。

图1 《Python学习手册》（中文第4版）笔记摘选

10. 每对顶点间的最短路径：

a. 解法一：对|V|个顶点，每次选中其中一个作为源点来运行单源最短路径算法，则运行|V|次之后即可求得 …… 采用 Bellman-Ford 算法，则总时间为 $O(V^2E)$

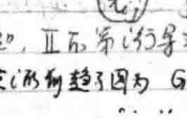
b. 本问题的数据描述：

邻接矩阵表示权值：$W=(w_{ij})_{n\times n}$ 其中 $w_{ij}=\begin{cases}0 & \text{若 } i=j\\ \text{有向边}(i,j)\text{的权} & \text{若 } i\neq j \text{ 且 } (i,j)\in E\\ \infty & \text{若 } i\neq j \text{ 且 } (i,j)\notin E\end{cases}$

结果输出为 $D=(d_{ij})_{n\times n}$，其中 d_{ij} 是从 i 到 j 的最短路径权值。

结果前驱矩阵 $\Pi=(\pi_{ij})_{n\times n}$，其中：

$\pi_{i,j}=\begin{cases}NIL & \text{若 } i=j \text{ 或 } i \text{ 到 } j \text{ 没有通路}\\ \text{从 } i \text{ 出发的某条最短路径上} & \text{若 } i \text{ 到 } j \text{ 有通路}\\ j \text{ 的前驱顶点} & \end{cases}$



从定义可知，Π 的第 i 行导出的子图是以 i 为根的一棵最短路径树。

对于顶点 i 的前驱子图为 $G_{\pi,i}=(V_{\pi,i}, E_{\pi,i})$，其中：

…… 为根的一棵最短路径树

图2 《算法导论》（中文第2版）笔记摘选

前言

拥抱智能时代

“大家还没搞清 PC 时代的时候，移动互联网来了，还没搞清移动互联网的时候，大数据时代来了。”马云在 2013 年淘宝十周年晚会上的这句话，仿佛一下子拉开了大数据时代的序幕。

2016 年下半年，著名的计算机科学家，超级畅销书《浪潮之巅》和《数学之美》的作者吴军博士，携他的全新力作《智能时代：大数据与智能革命重新定义未来》，宣告“智能时代，未来已来”，智能时代到来了！

新的时代，需要新的技术；新的技术，需要新的人才。2016 年年底，全球最著名的管理咨询公司麦肯锡在《分析的时代：在大数据的世界竞争（*The Age of Analytics: Competing in a Data-Driven World*）》的报告里指出“在美国，2012 年到 2014 年数据科学家的平均工资每年平均增长约 16%，远远高于美国劳工部统计的不到 2% 的所有工种的名义工资平均增长率。预测每年数据科学专业的应届毕业生将增加 7%，然而高质量项目对于专业数据科学家的需求每年增加 12%，这使得缺口约为 25 万人……到 2018 年，美国在‘深度分析’人才方面将面临 14 万至 19 万的人才缺口；在‘能够分析数据帮助公司做出商业决策’方面将面临 150 万的人才缺口”。清华大学计算机系教授武永卫 2016 年 5 月透露了一组数据：未来 3~5 年，中国需要 180 万数据人才，但目前只有约 30 万人。

麦肯锡还为这个时代把脉“大数据分析正在改变竞争的基础，领先的公司如苹果、谷歌、亚马逊、Facebook、微软、通用以及阿里巴巴集团用自己的优势建立了全新的商业模式，数字化平台的网络结果在一些市场导致了“赢家通吃”的局面。……数据正在被商业化，而价值很大可能属于稀缺数据的所有者、用独特方式将数据整合起来的玩家、以及提供有价值的数据分析的人。”

大数据时代，做大数据分析的人有了一个更“性感”的名字，叫做数据科学家（Data Scientist）。《哈佛商业评论》声称，21 世纪最富挑战的工作是数据科学家。时下最热门的职业是数据科学家，而不是传统的信息科学家，也不是大数据工程师。

在数据科学家必备的技能中，机器学习和 Python 应该是位列前五的两项。机器学习炙手可热，在互联网、金融保险、电商、电信、制造业、零售业、医疗等产业领域发挥了越来越大的作用，关注度也越来越高。而 Python 则是最 in 的语言，“人生苦短，我用 Python”^_^

怎么用这本书?

机器学习既有算法又有实现，还是比较高深的，算法太难，啃不动，代码太浅，钻不下去。我们的目标是让您快速上手，在内容组织上我们是动了心思的，采用“原理笔记精华 + 算法 Python 实现 + 问题实例 + 实际代码 + 运行调参”的形式，理论与实践交织着展开，算法原理与编程实战并重。

全书分 13 章进行展开，从内容上分为四篇：机器学习基础篇、机器学习高级篇、机器学习工程篇和 Kaggle 实战篇。

第一篇：机器学习基础篇（第 1~6 章）

包括线性模型、决策树、贝叶斯分类、k 近邻法、数据降维、聚类和 EM 算法等内容。

这些基础算法非常经典，原理也相对简单，是入门的最佳选择，掌握这些算法，才能更好地理解后续的高级算法。老司机可以直接忽略这部分。

第二篇：机器学习高级篇（第 7~10 章）

包括支持向量机、人工神经网络、半监督学习和集成学习等内容。

这些高级算法是目前应用非常广泛，也是效果不错的算法，需要深入理解算法的原理、优劣势等特点以及应用场景，要能达到应用自如的程度。

第三篇：机器学习工程篇（第 11~12 章）

讲述机器学习工程中的实际技术，包括数据预处理，模型评估、选择与验证等内容。

数据清洗、数据预处理和模型评估选择在实际中非常重要，在整个工程项目的开发过程中通常占到一半以上的时间，这部分给出的一些步骤和方法是实践的精华，值得熟练掌握。

第四篇：Kaggle 实战篇（第 13 章）

Step-by-step 讲述一个 Kaggle 竞赛题目的实战，有代码，有分析，有惊喜，有收获。

Kaggle 是目前顶级的数据科学比赛平台，很多机器学习的牛人都在这里玩过，咱们可以学习牛人好的算法，也可以启发自己的思路。对于梦想成为牛人的您，还是去里面混混先:）万一拿了个好的名次呢，拿个一流公司的 offer 还是很 easy 的。

本书的代码全部开源，请自行下载`https://github.com/huaxz1986/git_book`，也欢迎在这上面交流。

由于作者水平和经验有限，书中错漏之处在所难免，敬请读者指正，我的电子邮箱是`wa_2003@126.com`。

作者

2017 年元旦于北京

目录

第一篇

机器学习基础篇

线性模型

1.1 概述

给定样本 $\vec{x}$，我们用列向量表示该样本 $\vec{x}=(x^{(1)},x^{(2)},\cdots,x^{(n)})^T$。样本有 n 种特征，我们用 $x^{(i)}$ 表示样本 $\vec{x}$ 的第 i 个特征。线性模型 (linear model) 的形式为：

$$f(\vec{x})=\vec{w}\cdot\vec{x}+b$$

其中 $\vec{w}=(w^{(1)},w^{(2)},\cdots,w^{(n)})^T$ 为每个特征对应的权重生成的权重向量，称为权重向量，权重向量直观地表达了各个特征在预测中的重要性。

线性模型中的“线性”其实就是一系列一次特征的线性组合，在二维空间中是一条直线，在三维空间中是一个平面，然后推广到 n 维空间，这样可以理解为广义线性模型。

线性模型非常简单，易于建模，应用广泛，它还有多种推广形式，常见的有广义线性模型，包括岭回归、lasso 回归、Elastic Net、逻辑回归、线性判别分析等。本章将介绍这些模型的基本思想、优缺点以及如何用 Python 实现。

1.2 算法笔记精华

1.2.1 普通线性回归

线性回归是一种回归分析技术，回归分析本质上就是一个函数估计的问题（函数估计包括参数估计和非参数估计两类），就是找出因变量和自变量之间的因果关系。回归分析的因变量应该是连续变量，若因变量为离散变量，则问题转化为分类问题，回归分析是一个有监督学习的问题。

给定数据集 $T=\{(\vec{x}_1,y_1),(\vec{x}_2,y_2),\cdots,(\vec{x}_N,y_N)\},\vec{x}_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^n,y_i\in\mathcal{Y}\subseteq\mathbb{R},i=1,2,\cdots,N$，其中 $\vec{x}_i=(x_i^{(1)},x_i^{(2)},\cdots,x_i^{(n)})^T$。我们需要学习的模型为：

$$f(\vec{x})=\vec{w}\cdot\vec{x}+b$$

也即：根据已知的数据集 T 来计算参数 $\vec{w}$ 和 b。

对于给定的样本 $\vec{x}_i$，其预测值为 $\hat{y}_i=f(\vec{x}_i)=\vec{w}\cdot\vec{x}_i+b$。我们采用平方损失函数，则在训练集 T 上，模型的损失函数为：

$$L(f)=\sum_{i=1}^{N}\left(\hat{y}_i-y_i\right)^2=\sum_{i=1}^{N}\left(\vec{w}\cdot\vec{x}_i+b-y_i\right)^2$$

我们的目标是损失函数最小化，即：

$$(\vec{w}^*,b^*)=\arg\min_{\vec{w},b}\sum_{i=1}^{N}\left(\vec{w}\cdot\vec{x}_i+b-y_i\right)^2$$

可以用梯度下降法来求解上述最优化问题的数值解。在使用梯度下降法时，要注意特征归一化（Feature Scaling），这也是许多机器学习模型都需要注意的问题，这么重要的问题，我们一定要讲三遍！

特征归一化有两个好处。(1) 提升模型的收敛速度，比如两个特征 x_1 和 x_2，x_1 的取值为 0~2000，而 x_2 的取值为 1~5，假如只有这两个特征，对其进行优化时，会得到一个窄长的椭圆形，导致在梯度下降时，梯度的方向为垂直等高线的方向而走之字形路线，这样会使迭代很慢。相比之下，归一化之后，是一个圆形，梯度的方向为直接指向圆心，迭代就会很快。可见，归一化可以大大减少寻找最优解的时间。(2) 提升模型精度，归一化的另一好处是提高精度，这在涉及一些距离计算的算法时效果显著，比如算法要计算欧氏距离，上面 x_2 的取值范围比较小，涉及距离计算时其对结果的影响远比 x_1 带来的小，所以这就会造成精度的损失。所以归一化很有必要，它可以让各个特征对结果做出的贡献相同。在求解线性回归的模型时，还有一个问题要注意，那就是特征组合问题，比如房子的长度和宽度作为两个特征参与模型的构造，不如把其相乘得到面积作为一个特征来进行求解，这样在特征选择上就做了减少维度的工作。

回过头来，上述最优化问题实际上是有解析解的，可以用最小二乘法求解解析解，该问题称为多元线性回归 (`multivariate linear regression`)。

令：

$$\vec{\tilde{w}}=(w^{(1)},w^{(2)},\cdots,w^{(n)},b)^T=(\vec{w}^T,b)^T$$

$$\vec{\tilde{x}}=(x^{(1)},x^{(2)},\cdots,x^{(n)},1)^T=(\vec{x}^T,1)^T$$

$$\vec{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_N)^T$$

则有：

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\vec{w}\cdot\vec{x}_i+b-y_i\right)^2=\left(\vec{y}-(\vec{\tilde{x}}_1,\vec{\tilde{x}}_2,\cdots,\vec{\tilde{x}}_N)^T\vec{\tilde{w}}\right)^T\left(\vec{y}-(\vec{\tilde{x}}_1,\vec{\tilde{x}}_2,\cdots,\vec{\tilde{x}}_N)^T\vec{\tilde{w}}\right)$$

令：

$$\vec{x}=(\vec{\tilde{x}}_1,\vec{\tilde{x}}_2,\cdots,\vec{\tilde{x}}_N)^T=\begin{bmatrix}\vec{\tilde{x}}_1^T\\ \vec{\tilde{x}}_2^T\\ \vdots\\ \vec{\tilde{x}}_N^T\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \cdots & x_1^{(n)} & 1\\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_2^{(n)} & 1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 1\\ x_N^{(1)} & x_N^{(2)} & \cdots & x_N^{(n)} & 1\end{bmatrix}$$

则：

$$\vec{\tilde{w}}^*=\arg\min_{\vec{\tilde{w}}}(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})^T(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})$$

令 $E_{\vec{\tilde{w}}}=(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})^T(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})$，求它的极小值。对 $\vec{\tilde{w}}$ 求导令导数为零，得到解析解：

$$\frac{\partial E_{\vec{\tilde{w}}}}{\partial\vec{\tilde{w}}}=2\vec{x}^T(\vec{x}\vec{\tilde{w}}-\vec{y})=\vec{0}\Longrightarrow\vec{x}^T\vec{x}\vec{\tilde{w}}=\vec{x}^T\vec{y}$$

- 当 $\vec{x}^T\vec{x}$ 为满秩矩阵或者正定矩阵时，可得：

$$\vec{\tilde{w}}^*=(\vec{x}^T\vec{x})^{-1}\vec{x}^T\vec{y}$$

  其中 $(\vec{x}^T\vec{x})^{-1}$ 为 $\vec{x}^T\vec{x}$ 的逆矩阵。于是学得的多元线性回归模型为：

$$f(\vec{\tilde{x}}_i)=\vec{\tilde{x}}_i^T\vec{\tilde{w}}^*$$

- 当 $\vec{x}^T\vec{x}$ 不是满秩矩阵时。比如 $N<n$（样本数量小于特征种类的数量），根据 $\vec{x}$ 的秩小于等于 (N,n) 中的最小值，即小于等于 N（矩阵的秩一定小于等于矩阵的行数和列数）；而矩阵 $\vec{x}^T\vec{x}$ 是 $n\times n$ 大小的，它的秩一定小于等于 N，因此不是满秩矩阵。此时存在多个解析解。常见的做法是引入正则化项，如 L_1 正则化或者 L_2 正则化。以 L_2 正则化为例：

$$\vec{\tilde{w}}^*=\arg\min_{\vec{\tilde{w}}}\left[(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})^T(\vec{y}-\vec{x}\vec{\tilde{w}})+\lambda||\vec{\tilde{w}}||_2^2\right]$$

  其中，$\lambda>0$ 调整正则化项与均方误差的比例；$||...||_2$ 为 L_2 范数。

根据上述原理，我们得到多元线性回归算法：

- 输入：数据集 $T=\{(\vec{x}_1,y_1),(\vec{x}_2,y_2),\cdots,(\vec{x}_N,y_N)\},\vec{x}_i\in\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^n,y_i\in\mathcal{Y}\subseteq\mathbb{R},i=1,2,\cdots,N$，正则化项系数 $\lambda>0$。