

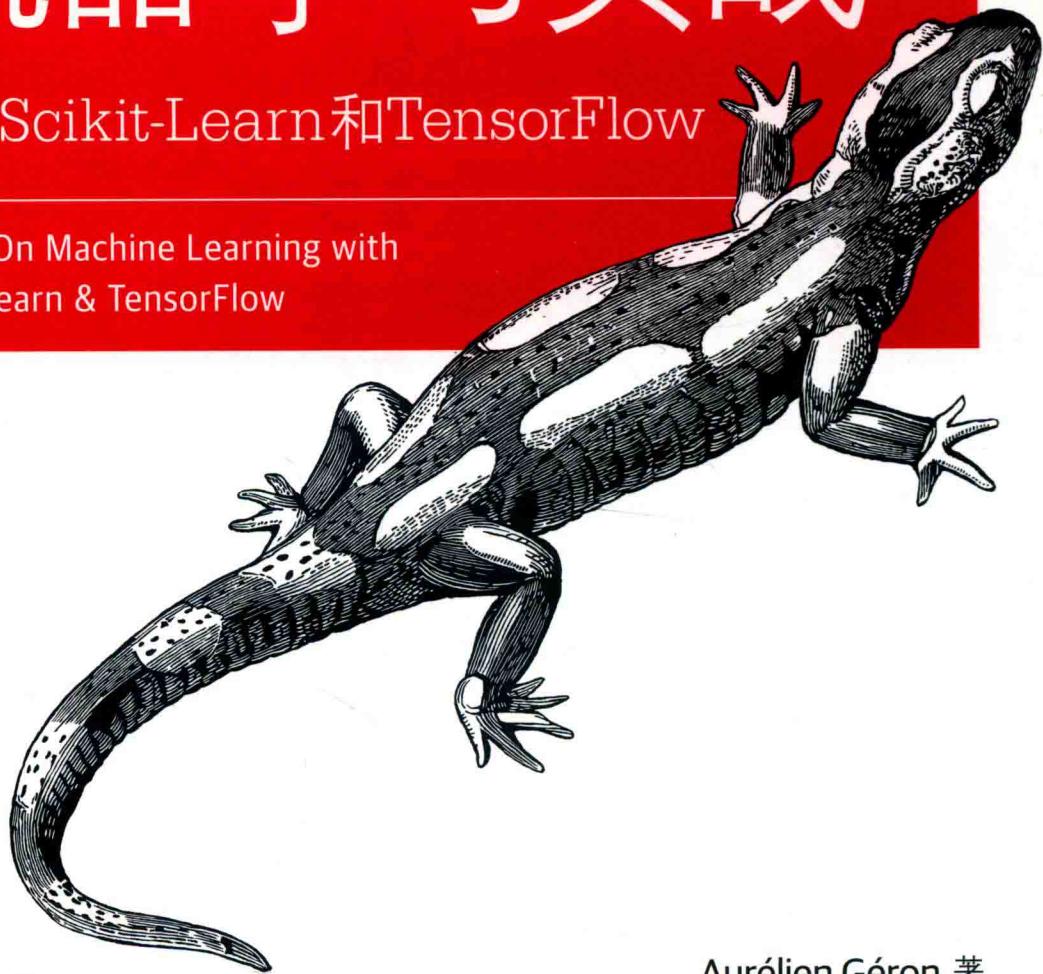
O'REILLY®



# 机器学习实战

基于Scikit-Learn和TensorFlow

Hands-On Machine Learning with  
Scikit-Learn & TensorFlow



Aurélien Géron 著  
王静源 贾玮 边蕤 邱俊涛 译

---

# 机器学习实战：基于 Scikit-Learn 和 TensorFlow



Aurelien Géron 著

王静源 贾玮 边蕤 邱俊涛 译

Beijing • Boston • Farnham • Sebastopol • Tokyo

O'REILLY®

dia, Inc. 授权机械工业出版社出版

机械工业出版社

## 图书在版编目（CIP）数据

机器学习实战：基于 Scikit-Learn 和 TensorFlow/（法）奥雷利安·杰龙著；王静源等译。—北京：机械工业出版社，2018.7

（O'Reilly 精品图书系列）

书名原文：Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques for Building Intelligent Systems

ISBN 978-7-111-60302-3

I. 机… II. ①奥… ②王… III. 机器学习 IV. TP181

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2018）第 174102 号

北京市版权局著作权合同登记

图字：01-2017-3412 号

© 2017 Aurélien Géron.

Simplified Chinese Edition, jointly published by O'Reilly Media, Inc. and China Machine Press, 2018. Authorized translation of the English edition, 2017 O'Reilly Media, Inc., the owner of all rights to publish and sell the same.

All rights reserved including the rights of reproduction in whole or in part in any form.

英文原版由 O'Reilly Media, Inc. 出版 2017。

简体中文版由机械工业出版社出版 2018。英文原版的翻译得到 O'Reilly Media, Inc. 的授权。此简体中文版的出版和销售得到出版权和销售权的所有者——O'Reilly Media, Inc. 的许可。

版权所有，未得书面许可，本书的任何部分和全部不得以任何形式重制。

封底无防伪标均为盗版

本书法律顾问

北京大成律师事务所 韩光 / 邹晓东

书 名 / 机器学习实战：基于 Scikit-Learn 和 TensorFlow

书 号 / ISBN 978-7-111-60302-3

责任编辑 / 陈佳媛

封面设计 / Randy Comer, 张健

出版发行 / 机械工业出版社

地 址 / 北京市西城区百万庄大街 22 号（邮政编码 100037）

印 刷 / 北京市兆成印刷有限责任公司

开 本 / 178 毫米 × 233 毫米 16 开本 29.75 印张

版 次 / 2018 年 9 月第 1 版 2018 年 9 月第 1 次印刷

定 价 / 119.00 元（册）

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

客服热线：(010)88379426; 88361066

购书热线：(010)68326294; 88379649; 68995259

投稿热线：(010)88379604

读者信箱：hzit@hzbook.com

# O'Reilly Media, Inc. 介绍

O'Reilly Media 通过图书、杂志、在线服务、调查研究和会议等方式传播创新知识。自 1978 年开始，O'Reilly 一直都是前沿发展的见证者和推动者。超级极客们正在开创着未来，而我们关注真正重要的技术趋势——通过放大那些“细微的信号”来刺激社会对新科技的应用。作为技术社区中活跃的参与者，O'Reilly 的发展充满了对创新的倡导、创造和发扬光大。

O'Reilly 为软件开发人员带来革命性的“动物书”；创建第一个商业网站（GNN）；组织了影响深远的开放源代码峰会，以至于开源软件运动以此命名；创立了 Make 杂志，从而成为 DIY 革命的主要先锋；公司一如既往地通过多种形式缔结信息与人的纽带。O'Reilly 的会议和峰会集聚了众多超级极客和高瞻远瞩的商业领袖，共同描绘出开创新产业的革命性思想。作为技术人士获取信息的选择，O'Reilly 现在还将先锋专家的知识传递给普通的计算机用户。无论是通过书籍出版，在线服务或者面授课程，每一项 O'Reilly 的产品都反映了公司不可动摇的理念——信息是激发创新的力量。

## 业界评论

“O'Reilly Radar 博客有口皆碑。”

——Wired

“O'Reilly 凭借一系列（真希望当初我也想到了）非凡想法建立了数百万美元的业务。”

——Business 2.0

“O'Reilly Conference 是聚集关键思想领袖的绝对典范。”

——CRN

“一本 O'Reilly 的书就代表一个有用、有前途、需要学习的主题。”

——Irish Times

“Tim 是位特立独行的商人，他不光放眼于最长远、最广阔的视野并且切实地按照 Yogi Berra 的建议去做了：‘如果你在路上遇到岔路口，走小路（岔路）。’回顾过去 Tim 似乎每一次都选择了小路，而且有几次都是一闪即逝的机会，尽管大路也不错。”

——Linux Journal

# 译者序

随着 AlphaGo 在人机大战中一举成名，关于机器学习的研究开始广受关注，数据科学家也一跃成为“21世纪最性感的职业”。关于机器学习和神经网络的广泛应用虽然兴起不久，但是对这两个密切关联的领域的研究其实已经持续了好几十年，早已形成了系统化的知识体系。对于想要踏入机器学习领域的初学者而言，理论知识的获取并非难事。

本书作者 Aurélien Géron 曾经是谷歌工程师，在 2013 年至 2016 年，主导了 YouTube 的视频分类工程，拥有丰富的机器学习项目经验。作者的写作初衷是希望从实践出发，手把手地帮助开发者从零开始搭建起一个神经网络。这也正构成了本书区别于其他机器学习教程的最重要的特质——不再偏向于原理研究的角度，而是从开发者的实践角度出发，在动手写代码的过程中，循序渐进地了解机器学习的理论知识和工具的实践技巧。对于想要快速上手机器学习的开发者来说，本书不啻为一个非常值得尝试的起点项目。

本书主要分为两个部分。第一部分为第 1~8 章，涵盖机器学习的基础理论知识和基本算法——从线性回归到随机森林等，帮助读者掌握 Scikit-Learn 的常用方法；第二部分为第 9~16 章，探讨深度学习和常用框架 TensorFlow，一步一个脚印地带领读者使用 TensorFlow 搭建和训练深度神经网络，以及卷积神经网络。

书中涉及不少数学公式，作者对抽象的公式背后的含义也都一一做出了阐释，因此即便是对数学不敏感的初学者，也同样能够理解机器学习任务的实质。

书中所涉及的专业术语与概念较多，部分概念及术语尚无公认的中文译法，因此我们较多地参考了网络上和研究论文中常用的译法，若有不适合读者朋友的术语，可根据原词确认其原始词意。在翻译过程中虽然力求准确地反映原著内容，但由于译者水平有限，如有错漏之处，恳请读者批评指正。

本书译者均来自于 ThoughtWorks 咨询公司，王静源翻译了第 1~8 章，贾玮翻译了第

13~16 章，边蕤翻译了第 11 章和第 12 章，邱俊涛翻译了第 9 章和第 10 章，并对全书译文进行校对和最后定稿。

最后要感谢华章公司的编辑，他们为保证本书的质量做出了大量的编辑和校正工作，在此深表谢意。

译者

2018 年 3 月

# 目录

前言 .....	1
----------	---

## 第一部分 机器学习基础

第 1 章 机器学习概览 .....	11
--------------------	----

什么是机器学习 .....	12
为什么要使用机器学习 .....	12
机器学习系统的种类 .....	15
监督式 / 无监督式学习 .....	16
批量学习和在线学习 .....	21
基于实例与基于模型的学习 .....	24
机器学习的主要挑战 .....	29
训练数据的数量不足 .....	29
训练数据不具代表性 .....	30
质量差的数据 .....	32
无关特征 .....	32
训练数据过度拟合 .....	33
训练数据拟合不足 .....	34
退后一步 .....	35
测试与验证 .....	35
练习 .....	37

第 2 章 端到端的机器学习项目 .....	39
------------------------	----

使用真实数据 .....	39
.....	40

框架问题	41
选择性能指标	42
检查假设	45
获取数据	45
创建工作区	45
下载数据	48
快速查看数据结构	49
创建测试集	52
从数据探索和可视化中获得洞见	56
将地理数据可视化	57
寻找相关性	59
试验不同属性的组合	61
机器学习算法的数据准备	62
数据清理	63
处理文本和分类属性	65
自定义转换器	67
特征缩放	68
转换流水线	68
选择和训练模型	70
培训和评估训练集	70
使用交叉验证来更好地进行评估	72
微调模型	74
网格搜索	74
随机搜索	76
集成方法	76
分析最佳模型及其错误	76
通过测试集评估系统	77
启动、监控和维护系统	78
试试看	79
练习	79
<b>第3章 分类</b>	<b>80</b>
MNIST	80
训练一个二元分类器	82
性能考核	83

使用交叉验证测量精度 .....	83
混淆矩阵 .....	84
精度和召回率 .....	86
精度 / 召回率权衡 .....	87
ROC 曲线 .....	90
多类别分类器 .....	93
错误分析 .....	95
多标签分类 .....	98
多输出分类 .....	99
练习 .....	100
<b>第 4 章 训练模型 .....</b>	<b>102</b>
线性回归 .....	103
标准方程 .....	104
计算复杂度 .....	106
梯度下降 .....	107
批量梯度下降 .....	110
随机梯度下降 .....	112
小批量梯度下降 .....	114
多项式回归 .....	115
学习曲线 .....	117
正则线性模型 .....	121
岭回归 .....	121
套索回归 .....	123
弹性网络 .....	125
早期停止法 .....	126
逻辑回归 .....	127
概率估算 .....	127
训练和成本函数 .....	128
决策边界 .....	129
Softmax 回归 .....	131
练习 .....	134
<b>第 5 章 支持向量机 .....</b>	<b>136</b>
线性 SVM 分类 .....	136

软间隔分类	137
非线性 SVM 分类	139
多项式核	140
添加相似特征	141
高斯 RBF 核函数	142
计算复杂度	143
SVM 回归	144
工作原理	145
决策函数和预测	146
训练目标	146
二次规划	148
对偶问题	149
核化 SVM	149
在线 SVM	151
练习	152

<b>第 6 章 决策树</b>	<b>154</b>
决策树训练和可视化	154
做出预测	155
估算类别概率	157
CART 训练算法	158
计算复杂度	158
基尼不纯度还是信息熵	159
正则化超参数	159
回归	161
不稳定性	162
练习	163

<b>第 7 章 集成学习和随机森林</b>	<b>165</b>
投票分类器	165
bagging 和 pasting	168
Scikit-Learn 的 bagging 和 pasting	169
包外评估	170
Random Patches 和随机子空间	171

随机森林	172
极端随机树	173
特征重要性	173
提升法	174
AdaBoost	175
梯度提升	177
堆叠法	181
练习	184

## 第 8 章 降维 ..... 185

维度的诅咒	186
数据降维的主要方法	187
投影	187
流形学习	189
PCA	190
保留差异性	190
主成分	191
低维度投影	192
使用 Scikit-Learn	192
方差解释率	193
选择正确数量的维度	193
PCA 压缩	194
增量 PCA	195
随机 PCA	195
核主成分分析	196
选择核函数和调整超参数	197
局部线性嵌入	199
其他降维技巧	200
练习	201

## 第二部分 神经网络和深度学习

### 第 9 章 运行 TensorFlow ..... 205

安装	207
创建一个计算图并在会话中执行	208

管理图	209
节点值的生命周期	210
TensorFlow 中的线性回归	211
实现梯度下降	211
手工计算梯度	212
使用自动微分	212
使用优化器	214
给训练算法提供数据	214
保存和恢复模型	215
用 TensorBoard 来可视化图和训练曲线	216
命名作用域	219
模块化	220
共享变量	222
练习	225
<b>第 10 章 人工神经网络简介</b>	<b>227</b>
从生物神经元到人工神经元	227
生物神经元	228
具有神经元的逻辑计算	229
感知器	230
多层感知器和反向传播	233
用 TensorFlow 的高级 API 来训练 MLP	236
使用纯 TensorFlow 训练 DNN	237
构建阶段	237
执行阶段	240
使用神经网络	241
微调神经网络的超参数	242
隐藏层的个数	242
每个隐藏层中的神经元数	243
激活函数	243
练习	244
<b>第 11 章 训练深度神经网络</b>	<b>245</b>
梯度消失 / 爆炸问题	245

Xavier 初始化和 He 初始化 .....	246
非饱和激活函数 .....	248
批量归一化 .....	250
梯度剪裁 .....	254
重用预训练图层 .....	255
重用 TensorFlow 模型 .....	255
重用其他框架的模型 .....	256
冻结低层 .....	257
缓存冻结层 .....	257
调整、丢弃或替换高层 .....	258
模型动物园 .....	258
无监督的预训练 .....	259
辅助任务中的预训练 .....	260
快速优化器 .....	261
Momentum 优化 .....	261
Nesterov 梯度加速 .....	262
AdaGrad .....	263
RMSProp .....	265
Adam 优化 .....	265
学习速率调度 .....	267
通过正则化避免过度拟合 .....	269
提前停止 .....	269
$\ell_1$ 和 $\ell_2$ 正则化 .....	269
dropout .....	270
最大范数正则化 .....	273
数据扩充 .....	274
实用指南 .....	275
练习 .....	276
<b>第 12 章 跨设备和服务器的分布式 TensorFlow .....</b>	<b>279</b>
一台机器上的多个运算资源 .....	280
安装 .....	280
管理 GPU RAM .....	282
在设备上操作 .....	284
并行执行 .....	287

控制依赖	288
多设备跨多服务器	288
开启一个会话	290
master 和 worker 服务	290
分配跨任务操作	291
跨多参数服务器分片变量	291
用资源容器跨会话共享状态	292
使用 TensorFlow 队列进行异步通信	294
直接从图中加载数据	299
在 TensorFlow 集群上并行化神经网络	305
一台设备一个神经网络	305
图内与图间复制	306
模型并行化	308
数据并行化	309
练习	314
<b>第 13 章 卷积神经网络</b>	<b>315</b>
视觉皮层的组织结构	315
卷积层	317
过滤器	318
多个特征图的叠加	319
TensorFlow 实现	321
内存需求	323
池化层	323
CNN 架构	325
LeNet-5	326
AlexNet	327
GoogLeNet	328
ResNet	331
练习	334
<b>第 14 章 循环神经网络</b>	<b>337</b>
循环神经元	337
记忆单元	339
输入和输出序列	340

TensorFlow 中的基本 RNN .....	341
通过时间静态展开 .....	342
通过时间动态展开 .....	344
处理长度可变输入序列 .....	344
处理长度可变输出序列 .....	345
训练 RNN .....	346
训练序列分类器 .....	346
训练预测时间序列 .....	348
创造性的 RNN .....	352
深层 RNN .....	353
在多个 GPU 中分配一个深层 RNN .....	354
应用丢弃机制 .....	355
多个时间迭代训练的难点 .....	356
LSTM 单元 .....	357
窥视孔连接 .....	359
GRU 单元 .....	359
自然语言处理 .....	361
单词嵌入 .....	361
用于机器翻译的编码器 – 解码器网络 .....	362
练习 .....	364
<b>第 15 章 自动编码器 .....</b>	<b>366</b>
高效的数据表示 .....	366
使用不完整的线性自动编码器实现 PCA .....	368
栈式自动编码器 .....	369
TensorFlow 实现 .....	370
权重绑定 .....	371
一次训练一个自动编码器 .....	372
重建可视化 .....	374
特征可视化 .....	375
使用堆叠的自动编码器进行无监控的预训练 .....	376
去噪自动编码器 .....	377
TensorFlow 实现 .....	378
稀疏自动编码器 .....	379
TensorFlow 实现 .....	380

变分自动编码器 .....	381
生成数字 .....	384
其他自动编码器 .....	385
练习 .....	386
<b>第 16 章 强化学习 .....</b>	<b>388</b>
学习奖励最优化 .....	389
策略搜索 .....	390
OpenAI gym 介绍 .....	391
神经网络策略 .....	394
评估行为：信用分配问题 .....	396
策略梯度 .....	397
马尔可夫决策过程 .....	401
时间差分学习与 Q 学习 .....	405
探索策略 .....	406
逼近 Q 学习 .....	407
使用深度 Q 学习玩吃豆人游戏 .....	407
练习 .....	414
致谢 .....	415
<b>附录 A 练习答案 .....</b>	<b>416</b>
<b>附录 B 机器学习项目清单 .....</b>	<b>438</b>
<b>附录 C SVM 对偶问题 .....</b>	<b>444</b>
<b>附录 D 自动微分 .....</b>	<b>447</b>
<b>附录 E 其他流行的 ANN 架构 .....</b>	<b>453</b>

# 前言

## 机器学习浪潮

2006年，Geoffrey Hinton等人发表了一篇论文<sup>注1</sup>，展示了如何训练能够高精度（>98%）识别手写数字的深度神经网络。他们将这种技术称为“深度学习”。在当时，深度神经网络的训练被普遍认为是不可能的。这篇论文<sup>注2</sup>重新激起了科学界的兴趣，不久之后，许多新的论文展示了深度学习不仅是可行的，而且（在超级计算能力和大数据的帮助下）能够取得令人瞩目的成就，是其他机器学习技术所难以企及的。这种热情很快扩展到机器学习相关的许多其他领域。

历经十年的快速发展，机器学习已经征服了整个行业。它已经成为众多高科技产品中的黑科技核心：对你的网络搜索结果进行排名，实现智能手机的语音识别，为你推荐视频，打败世界围棋冠军。在你意识到之前，它甚至会驾驶你的汽车。

## 你的项目中的机器学习

你已对机器学习充满了兴趣，并迫不及待想要投入其中了吧？

可能你想让自己制作的机器人有思想？让它可以识别人脸？或者学会走路？

或者你们公司有大量的数据（用户日志、财务数据、产品数据、机器传感器数据、热线数据、HR报告等），如果知道去哪儿找，你会挖掘出一些隐藏的宝石，比如：

- 细分客户群，并为每个群体设置最佳的市场策略

注1：详见Hinton的主页 <http://www.cs.toronto.edu/~hinton/>。

注2：虽然Yann LeCun的深卷积神经网络自20世纪90年代以来在图像识别方面运作良好，但这并非一般用途。