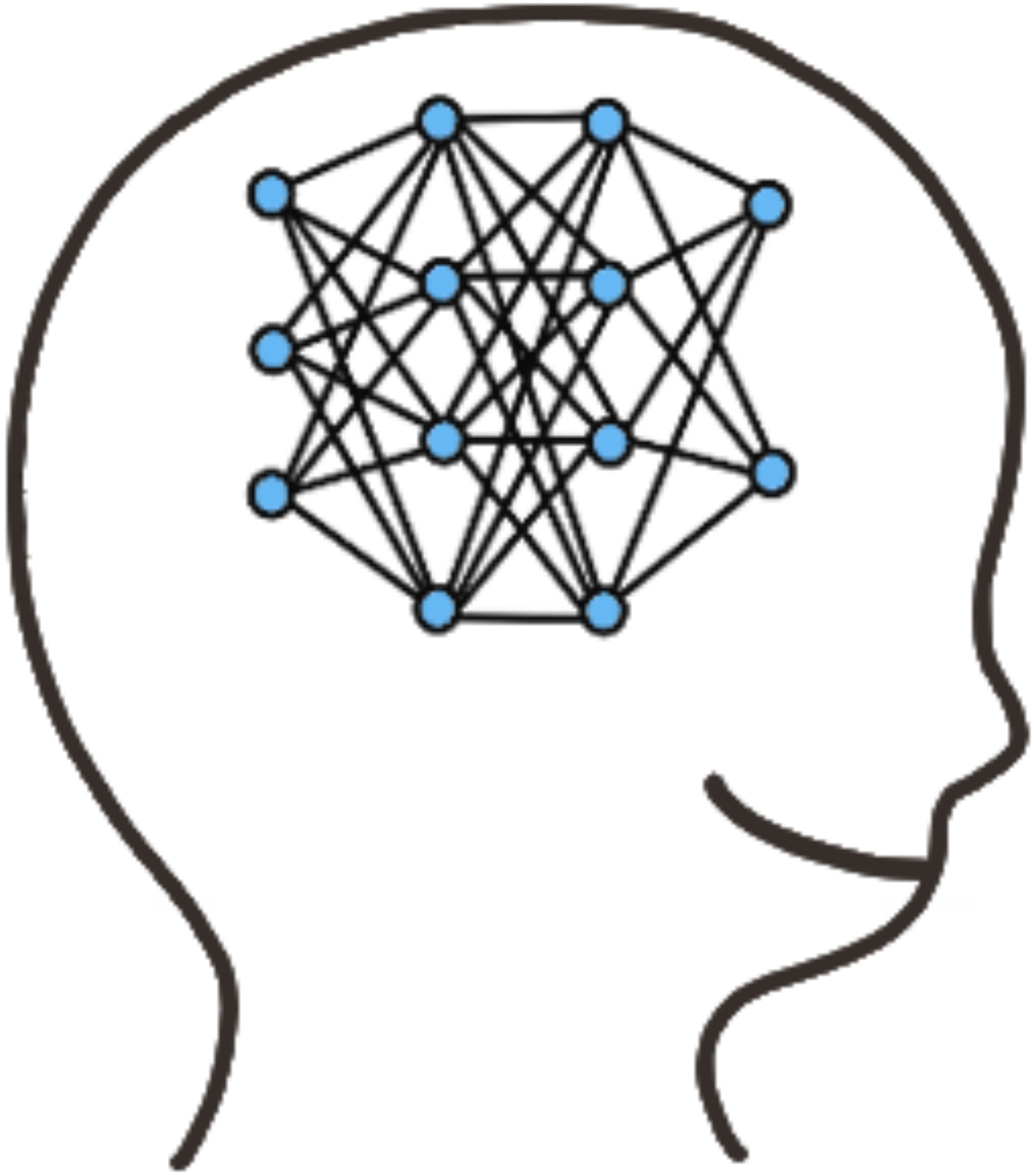
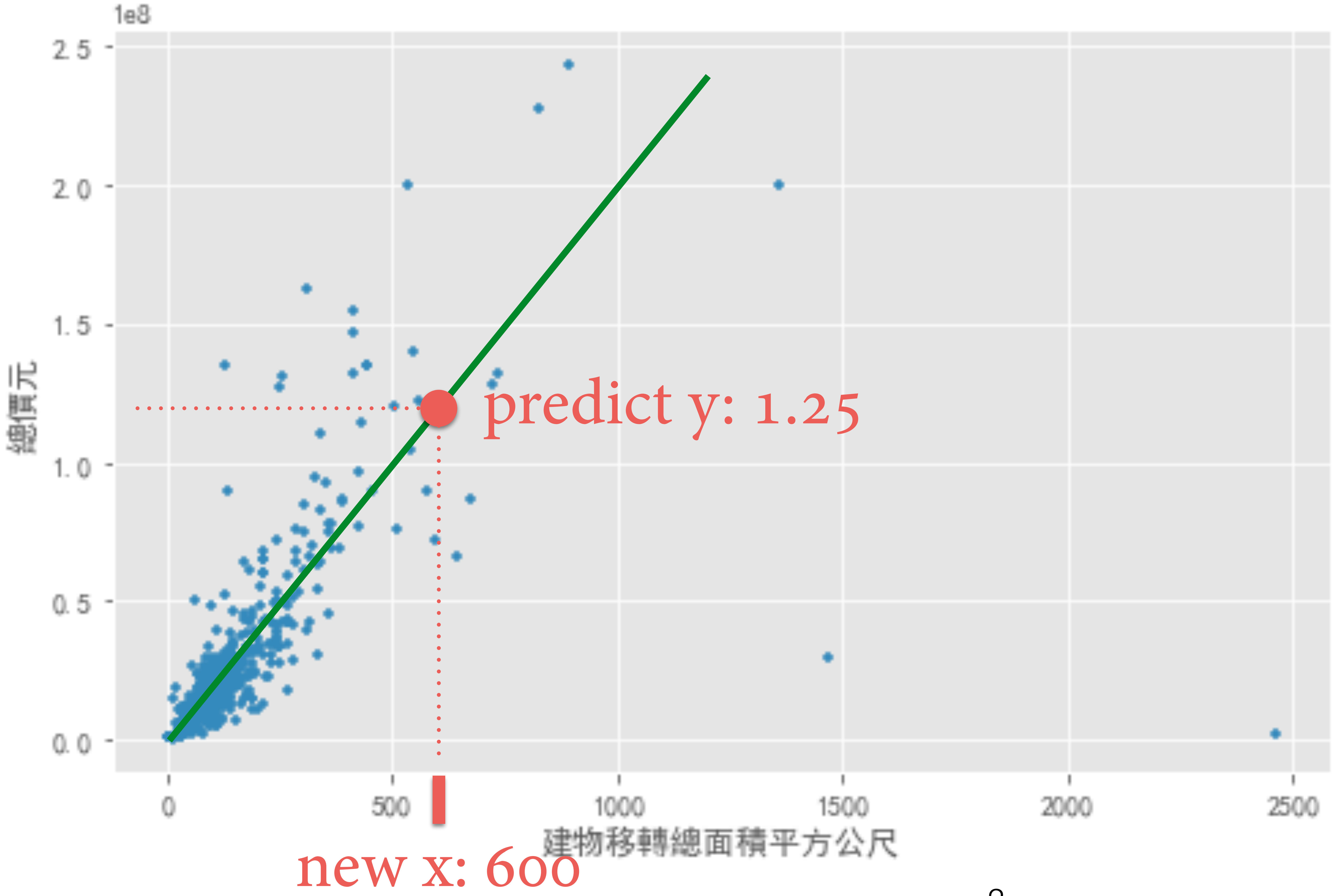


監督式學習
Supervised Learning

Starting from a real case…

- 預測房價：從坪數(x_1)、幾房幾廳(x_2)、地址(x_3)...預測房價(y)

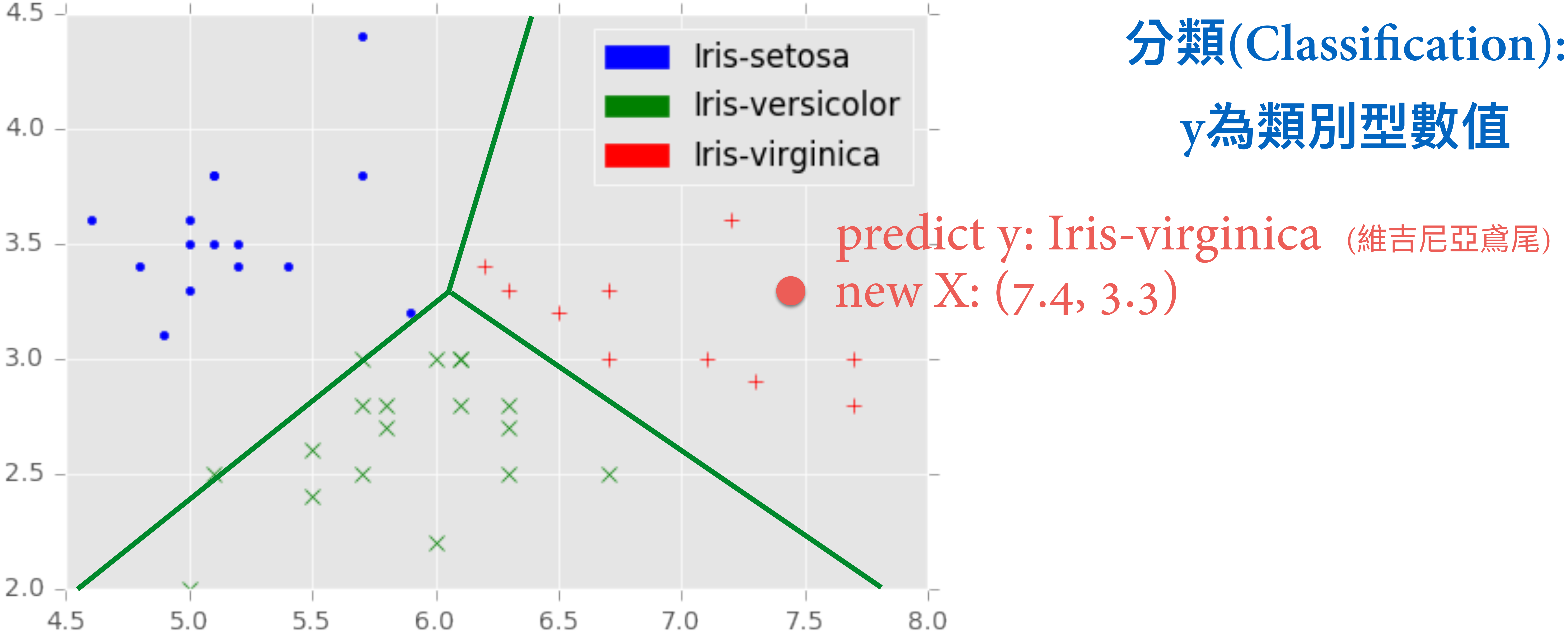


迴歸(Regression):

y為連續型數值

Starting from a real case…

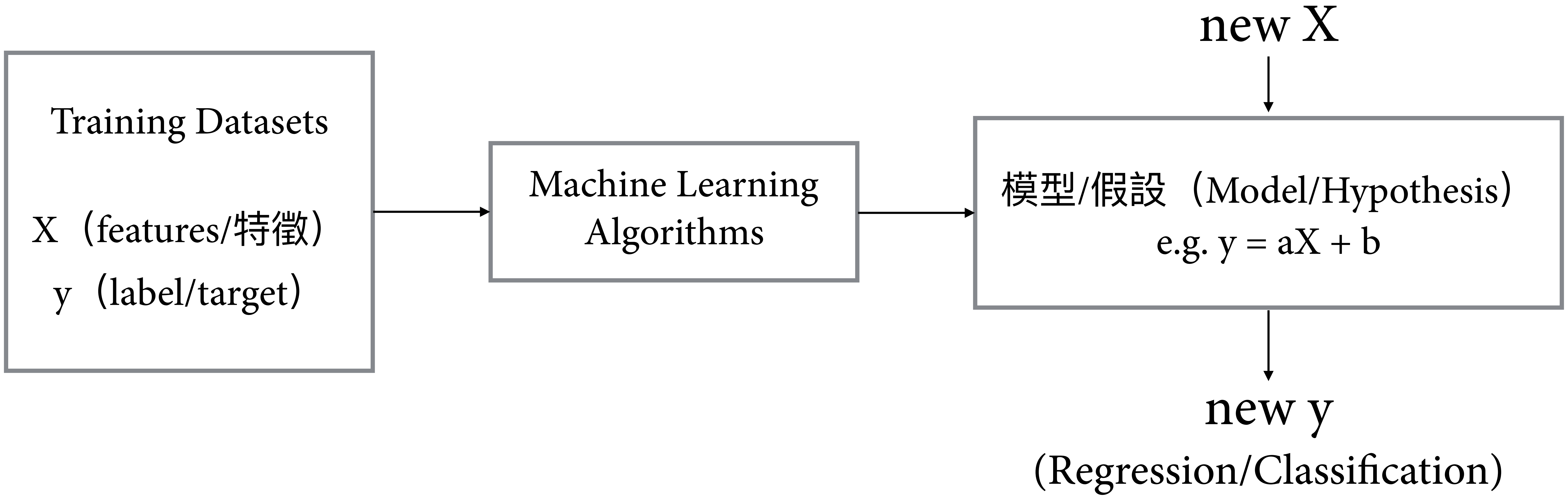
- 預測品種：從花萼寬度、長度判斷鳶尾花品種



分類(Classification):

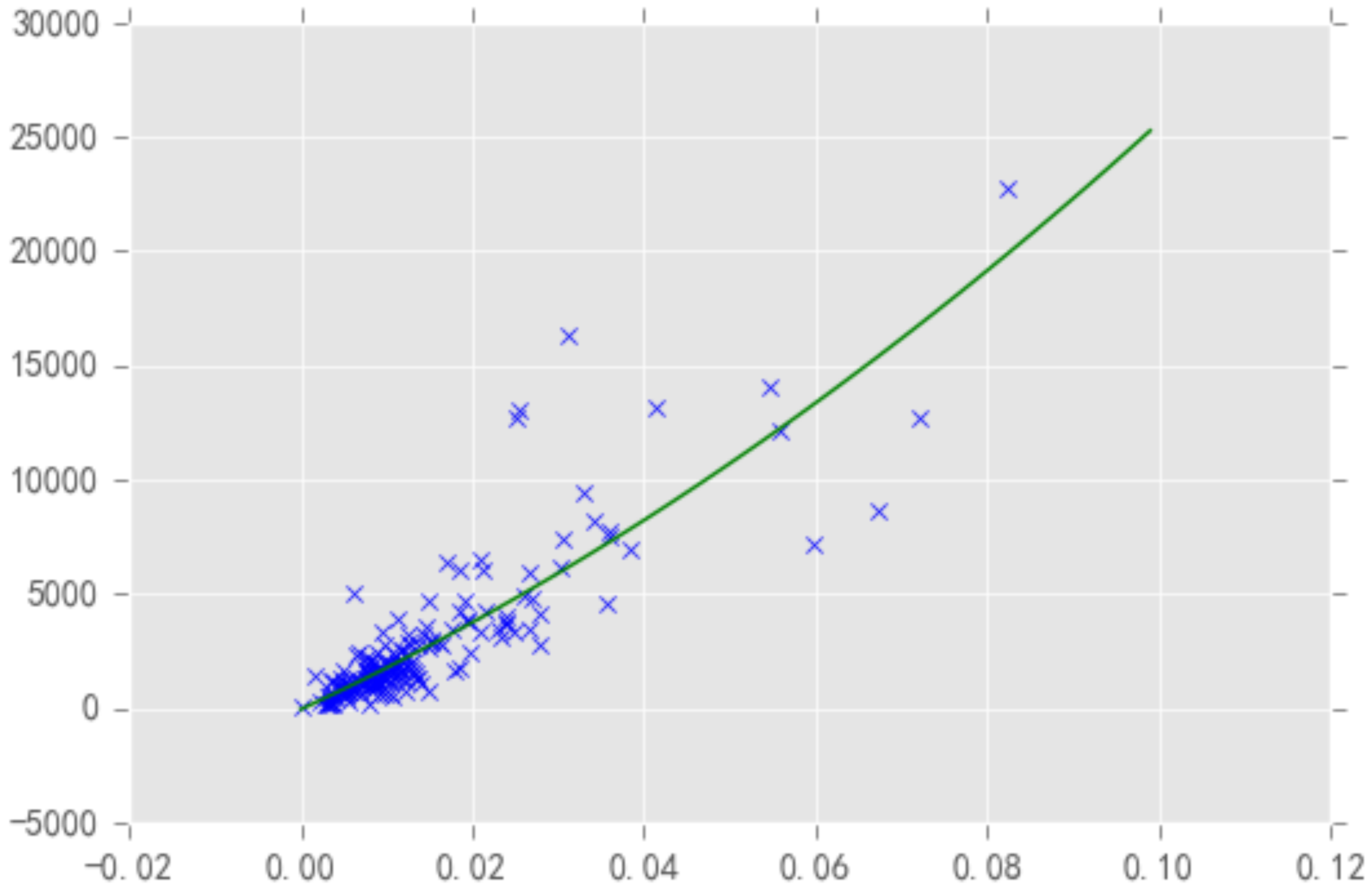
y為類別型數值

學習模式


Training Datasets
X（features/特徵）
y（label/target）
Machine Learning Algorithms
new X
模型/假設（Model/Hypothesis）
e.g. y = aX + b
new y
(Regression/Classification)

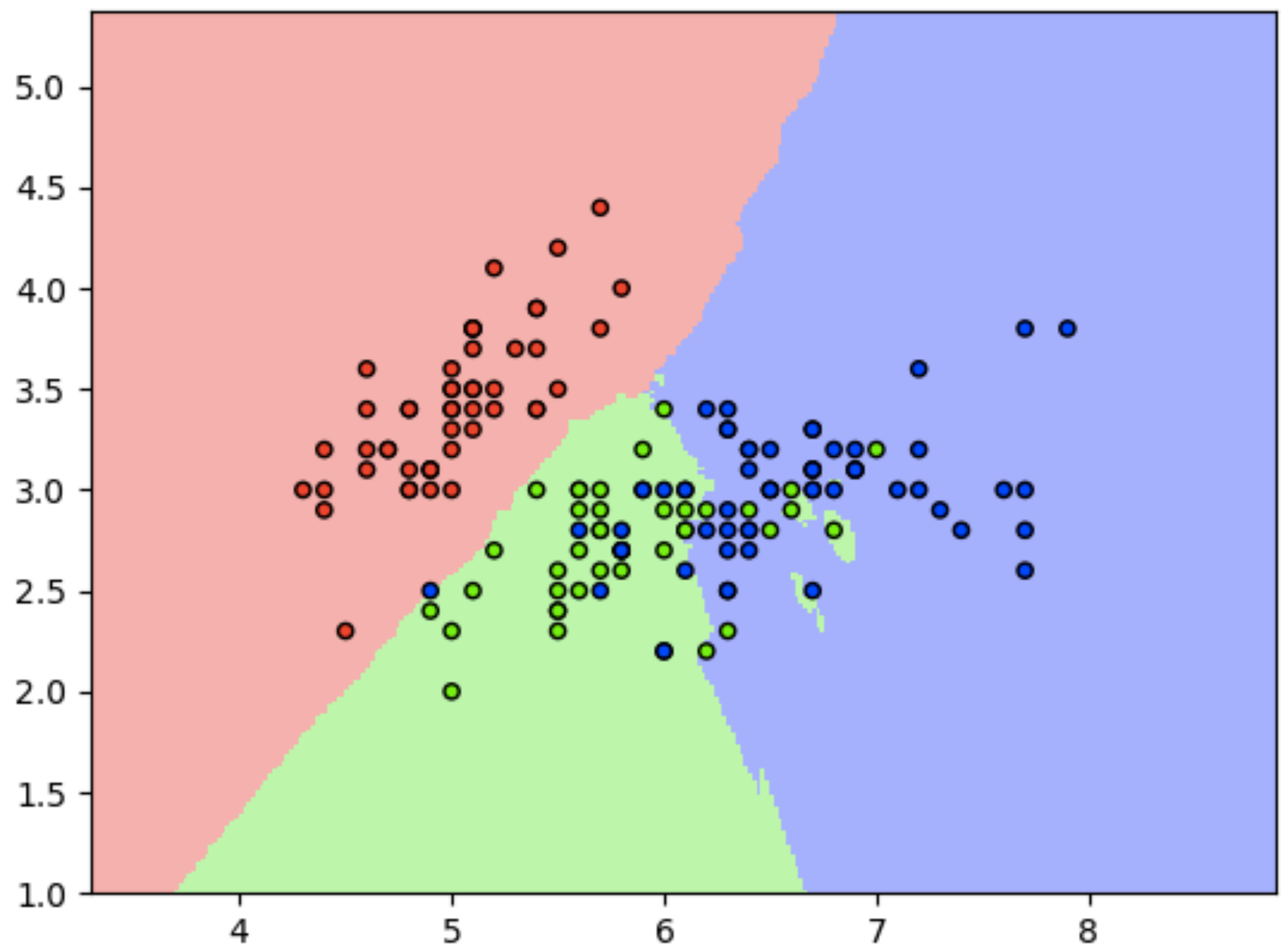
監督式學習

- 迴歸(Regression)

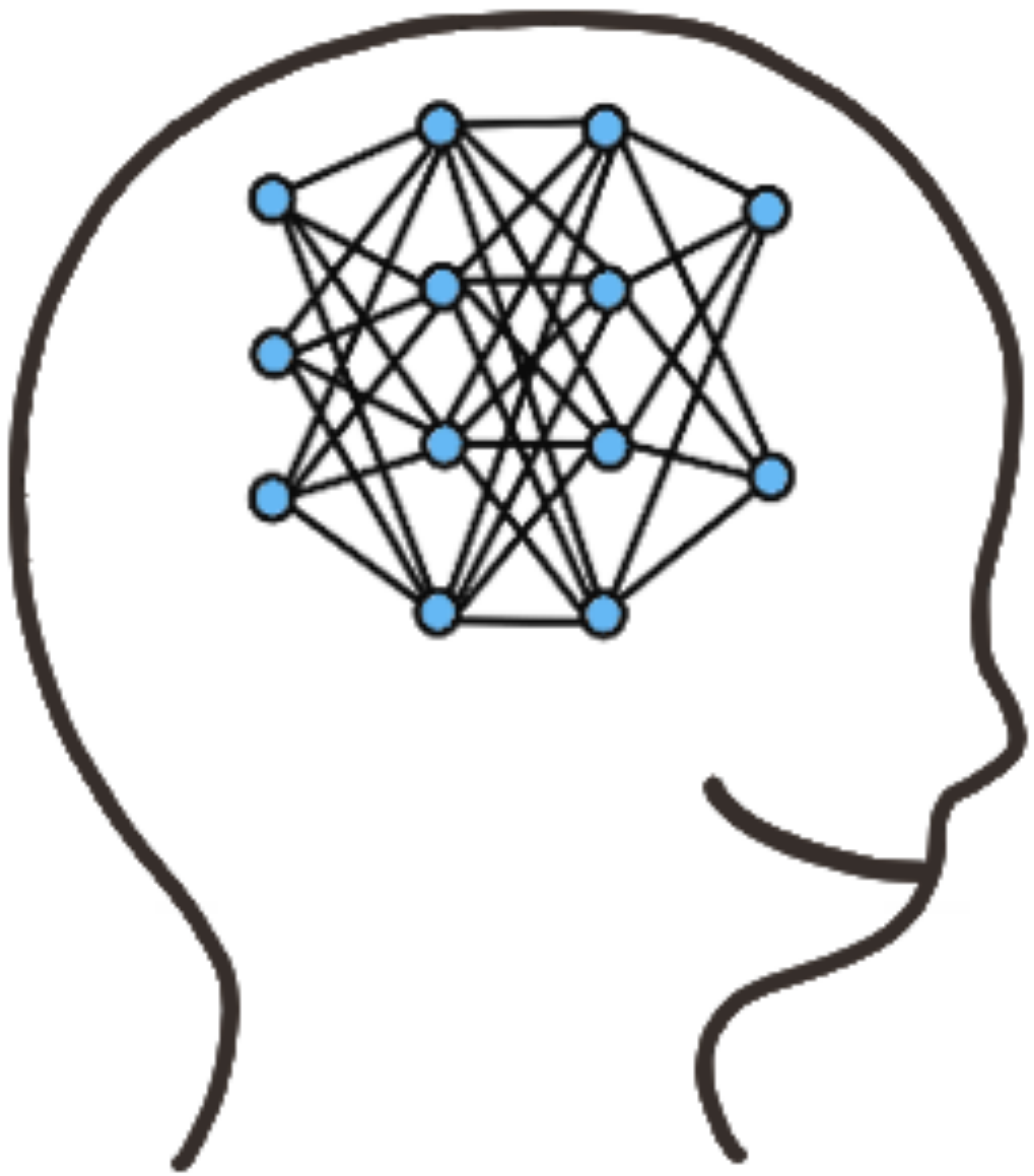


e.g. 房價、股價、成績

- 分類(Classification)

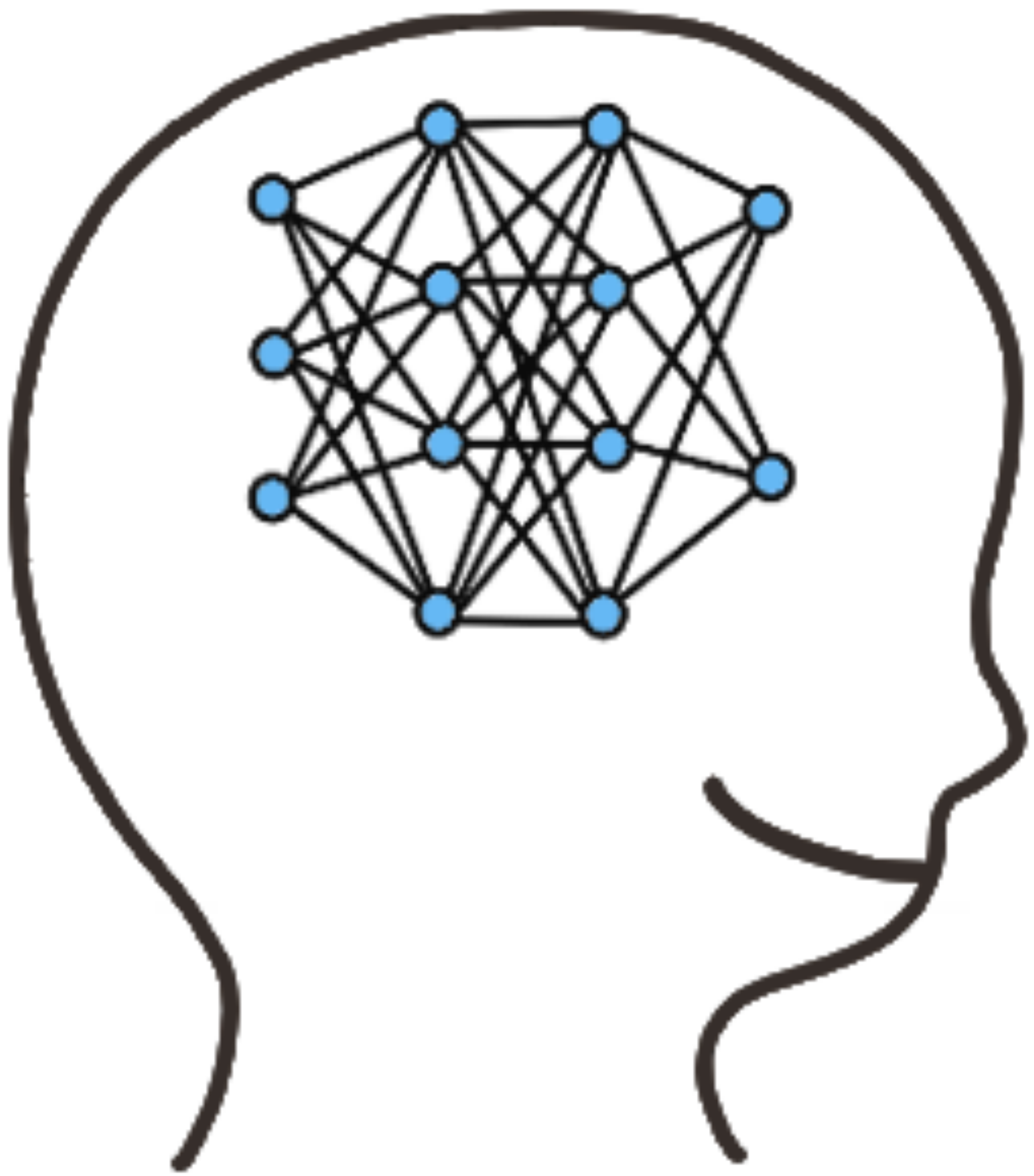


e.g. 是否為垃圾郵件、
是否罹患疾病、生物品種



機器如何學習？
從線性迴歸開始

How does a machine learn?
Let's start with Linear Regression



機器學習路徑

Roadmap of Machine Learning

Roadmap

Q: 如何選擇假設函式？

假設(Hypothesis) → 成本函數(Cost function) → 學習方法 → 模型評估 → 學習曲線/驗證曲線 → Good Model

資料擷取 → 資料預處理 → 資料切分 → 學習方法

Q: 如何最小化cost？

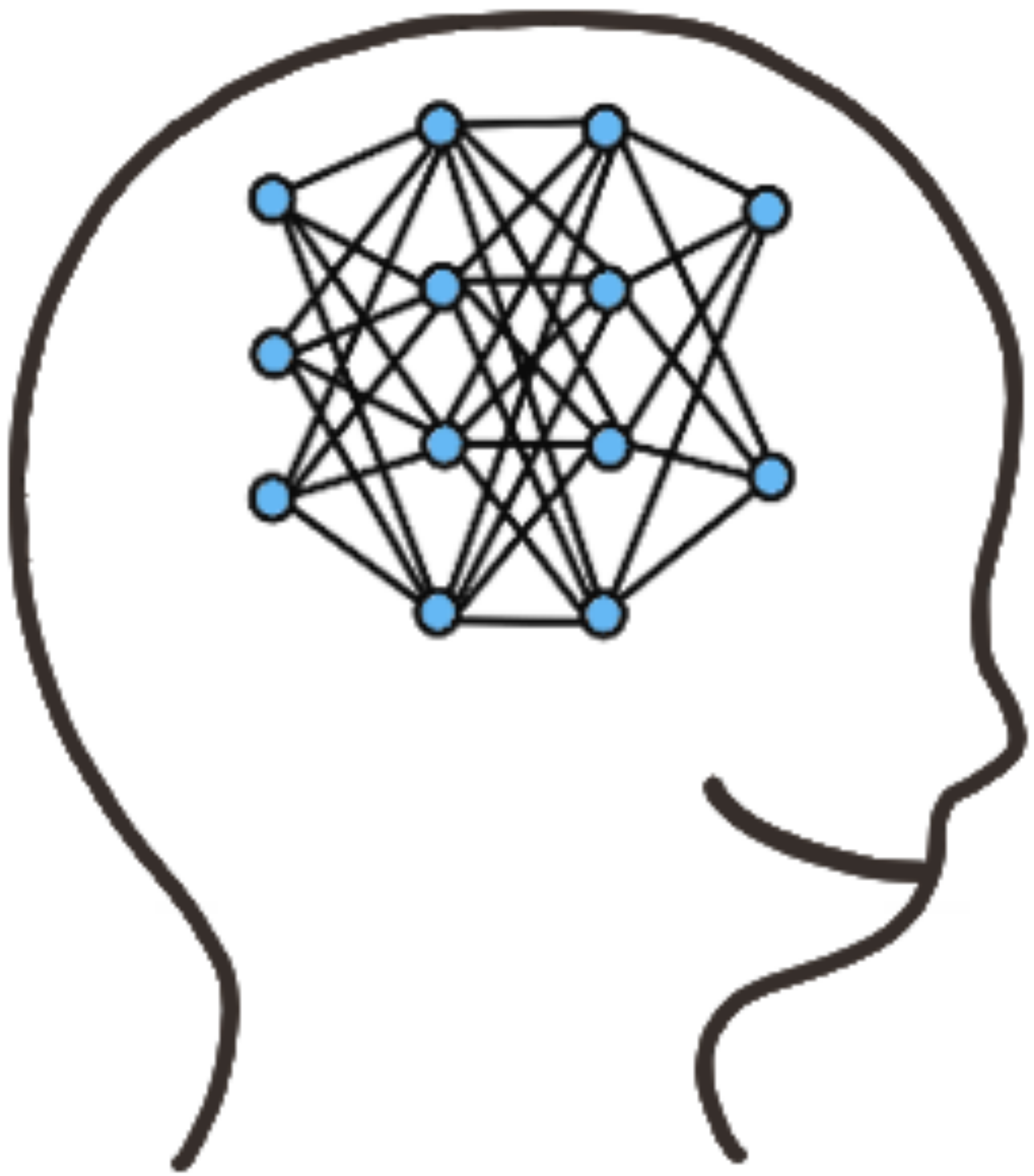
Q: 如何處理不同種類資料？

Q: 如何調節超參數？
Q: 如何選擇學習演算法？

Q: 如何切分資料？

Q: 如何評估模型預測效果？

Q: 模型是否有過適現象？



線性迴歸方程式

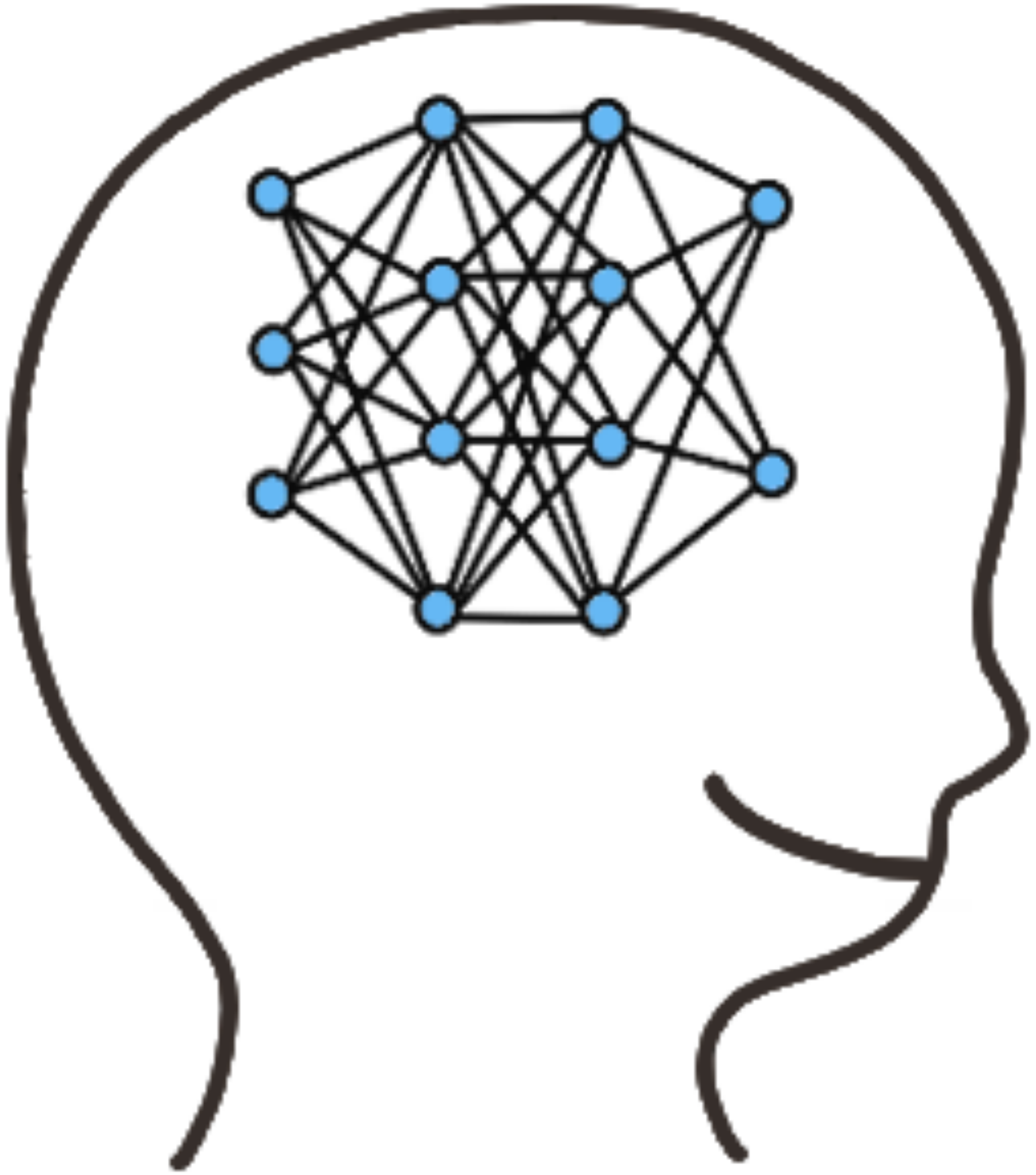
Linear Regression Equation

線性迴歸 (Linear Regression)

- 簡單線性迴歸（Simple Linear Regression）
  - $y = w^{(0)} + w^{(1)}x$ (e.g. $y = 3 + 2x$)
- 多變項線性迴歸（Multiple Linear Regression）
  - $y = w^{(0)} + w^{(1)}x_1 + \ldots + w^{(n)}x_n$ (e.g. $y = 1 + 2x_1 + 3x_2$)
- 模型假設(Hypothesis)：
  - $y = w^{(0)} + w^{(1)}x_1 + \ldots + w^{(n)}x_n$
  - $y = w^{T}x$

Notes

- w^T 是矩陣w ($w_1, w_2 \ldots w_n$)的轉置矩陣(transpose)

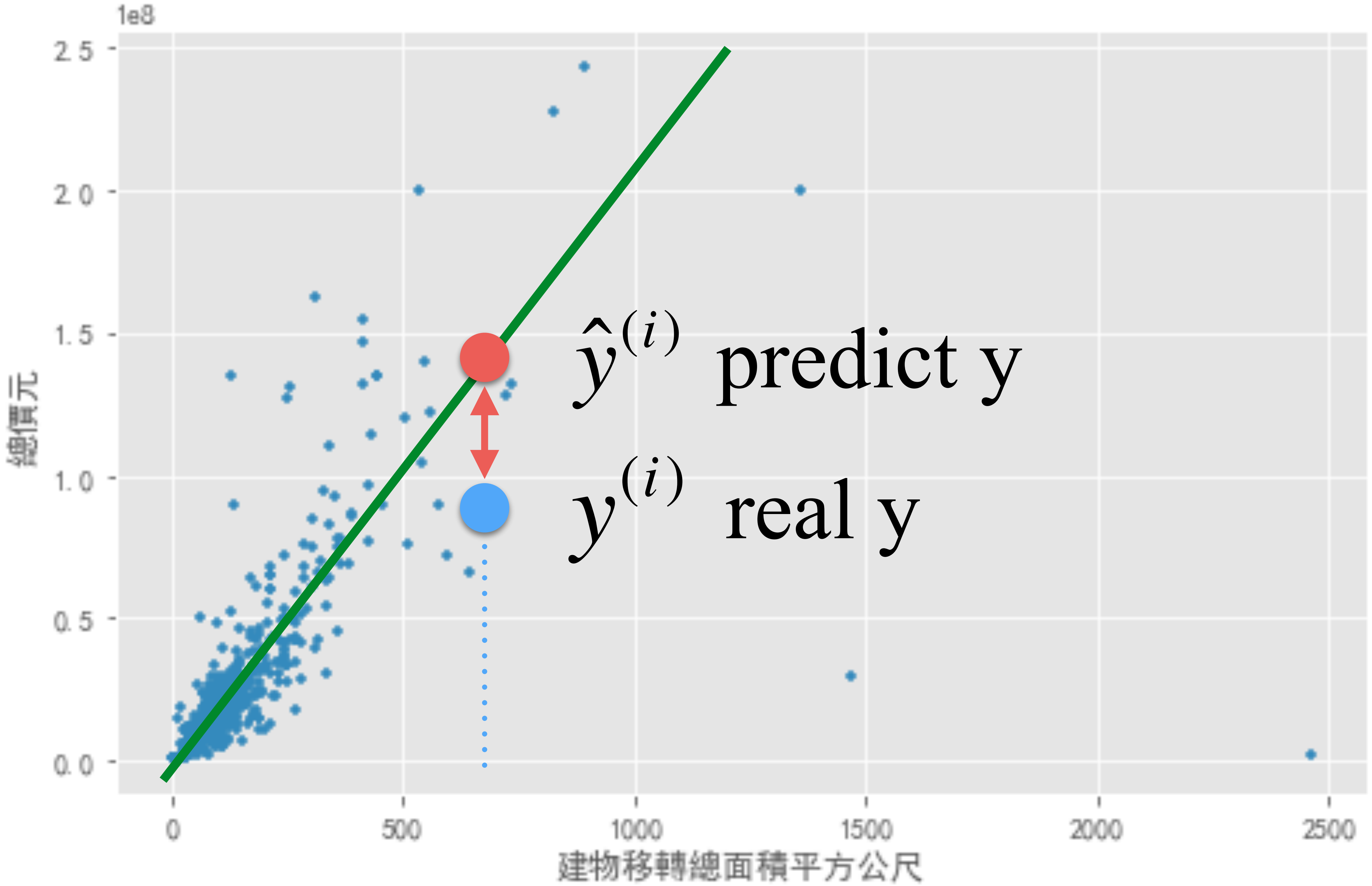


成本函數與梯度下降

Cost Function & Gradient Descent

Cost Function

- 成本函數(Cost function)：均方誤差(Mean Squared Error, MSE)
- J(w) = $\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}\right)^2$



Notes

- $\hat{y}^{(i)}$ 為預測值，唸作 y hat
- m 為資料筆數

How to minimize cost function

- 梯度下降(Gradient Descent)
- 正規方程(Normal Equation)：公式解

$$(X^T X)^{-1} X^T y$$

Notes

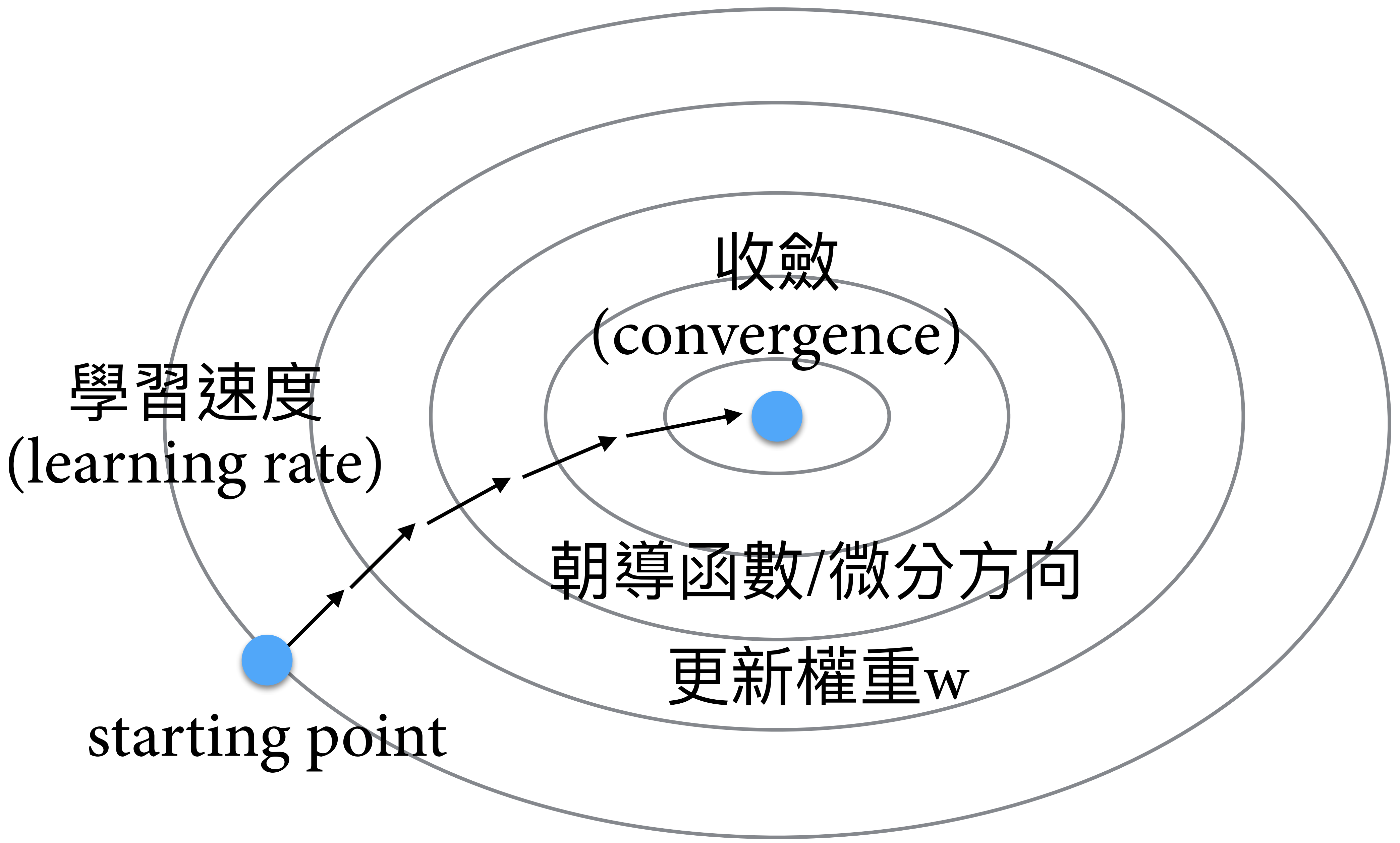
- X^T 是矩陣X的轉置矩陣(transpose)
- X^{-1} 是矩陣X的反矩陣(inverse)
- 梯度下降為機器學習重要解法，適合用於大數據建模
- scikit-learn 解線性迴歸使用正規方程

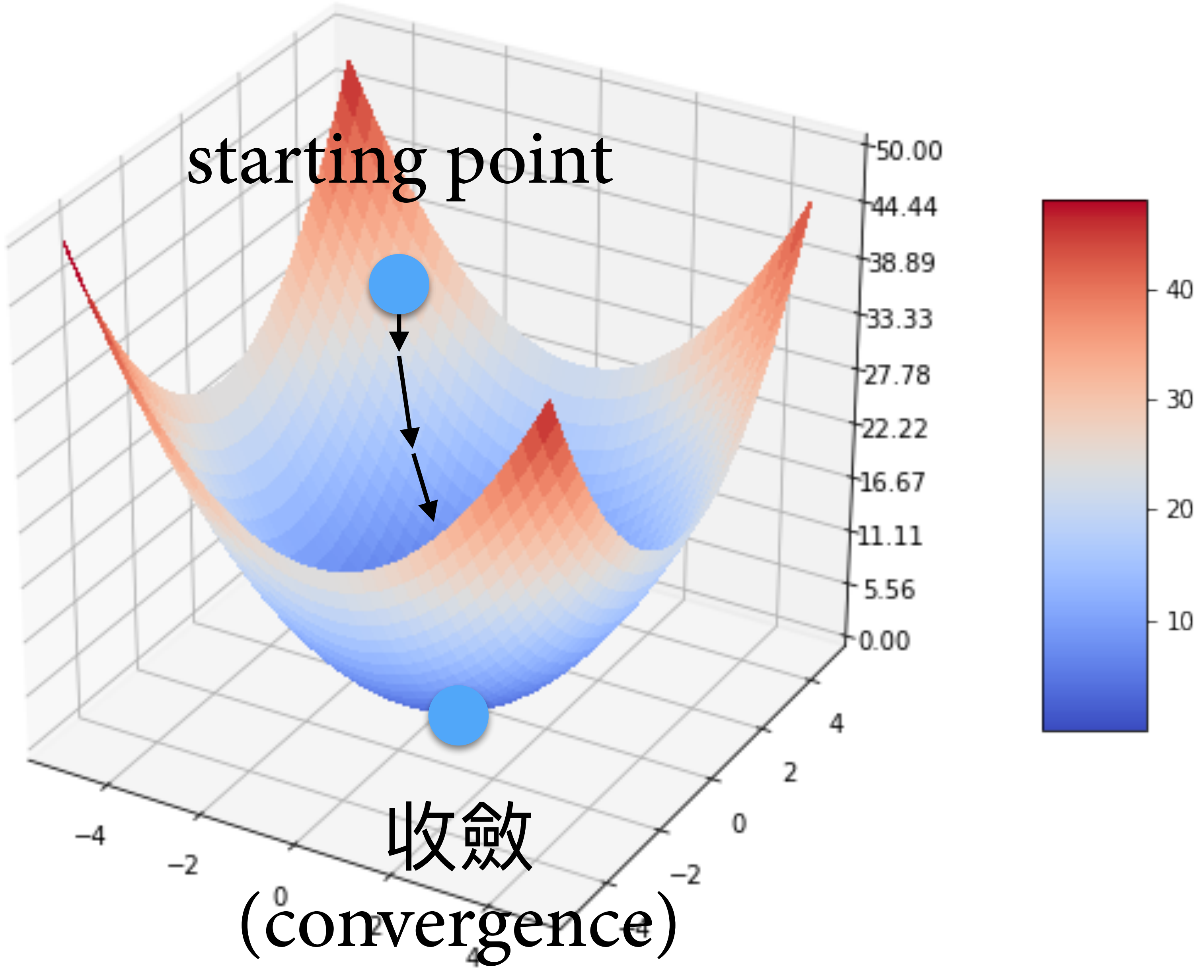
Gradient Descent

- $J(w) = \dfrac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}\right)^2$
- 梯度下降法（Gradient Descent, GD）

Notes

- Cost Function of Linear Regression
- **區域最佳解**(local optimal) = **全域最佳解**(global optimal)





計算梯度

- $J(w) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}\right)^2 = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(\hat{y}^{(i)2} - 2\hat{y}^{(i)}y^{(i)} + y^{(i)2})$
- $\hat{y}^{(i)} = w^{(0)} + w^{(1)}x^{(i)}$

$$\frac{\partial}{\partial w_0}J(w) = \frac{\partial}{\partial w_0}\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(w^{(0)} + w^{(1)}x^{(i)})^2 - 2(w^{(0)} + w^{(1)}x^{(i)})y^{(i)} + y^{(i)2}$$

$$= \frac{\partial}{\partial w_0}\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}w^{(0)2} + 2(w^{(0)}w^{(1)}x^{(i)}) + (w^{(1)}x^{(i)})^2 - (2w^{(0)} + 2w^{(1)}x^{(i)})y^{(i)} + y^{(i)2}$$

$$= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}w^{(0)} + w^{(1)}x^{(i)} - y^{(i)}$$

$$= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}$$

Notes

- $(a-b)^2 = a^2 - 2ab + b^2$

計算梯度

- $$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial w_1}J(w) &= \frac{\partial}{\partial w_1}\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(w^{(0)}+w^{(1)}x^{(i)})^2-2(w^{(0)}+w^{(1)}x^{(i)})y^{(i)}+y^{(i)2}\\ &= \frac{\partial}{\partial w_1}\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}w^{(0)2}+2(w^{(0)}w^{(1)}x^{(i)})+(w^{(1)}x^{(i)})^2-2w^{(0)}+2w^{(1)}x^{(i)})y^{(i)}+y^{(i)2}\\ &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}w^{(0)}x^{(i)}+x^{(i)2}w^{(1)}-x^{(i)}y^{(i)}\\ &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}(w^{(0)}+x^{(1)}w^{(1)}-y^{(i)})\\ &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}(\hat{y}^{(i)}-y^{(i)})\end{aligned}$$

計算權重與超參數

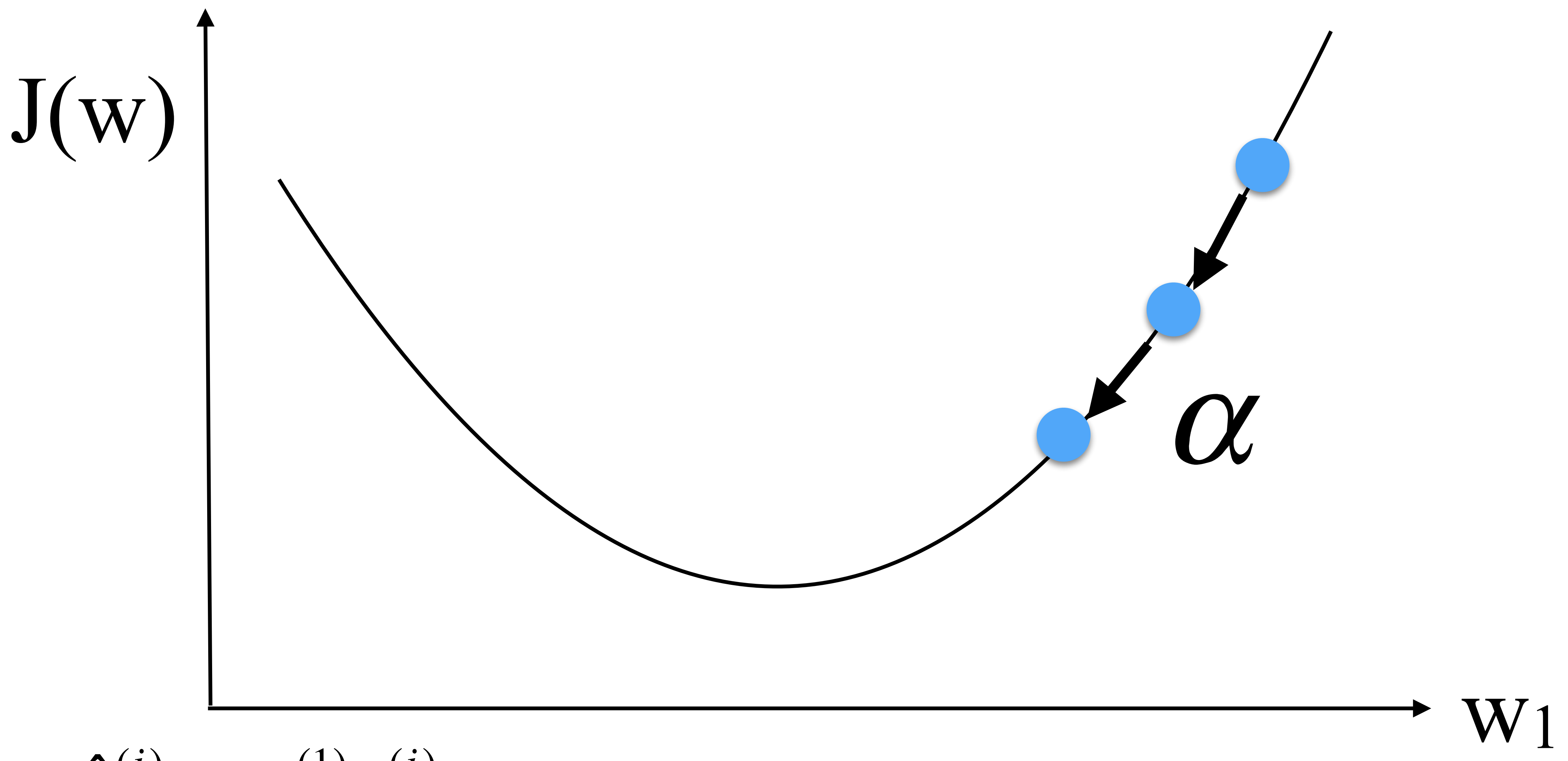
repeat {

$$w^{(0)} = w^{(0)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

$$w^{(1)} = w^{(1)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x^{(i)} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

$$\vdots$$

}



$$\hat{y}^{(i)} = w^{(1)} x^{(i)}$$

- 超參數(Hyperparameter)：
  - 步數(step)
  - 學習速率 α

多變項線性迴歸

- 多變項線性迴歸計算權重

repeat {

$$w^{(0)} = w^{(0)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

$$w^{(1)} = w^{(1)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_1^{(i)} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

$$w^{(2)} = w^{(2)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_2^{(i)} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

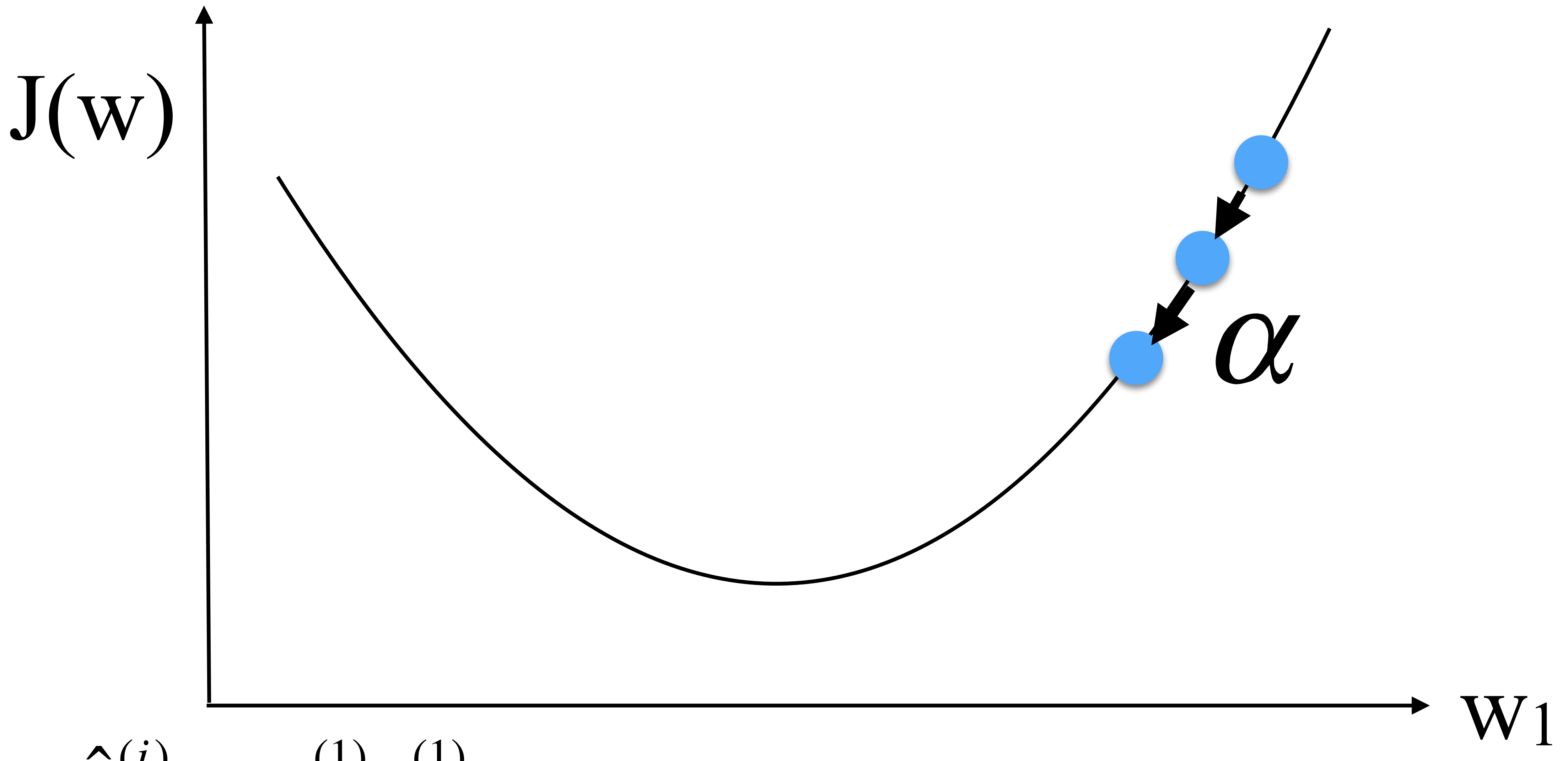
$$w^{(3)} = w^{(3)} - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x_3^{(i)} (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})$$

$$\vdots$$

}

學習速度

- 如何選擇學習速度？
    - 若學習速度過慢 => 收斂速度慢



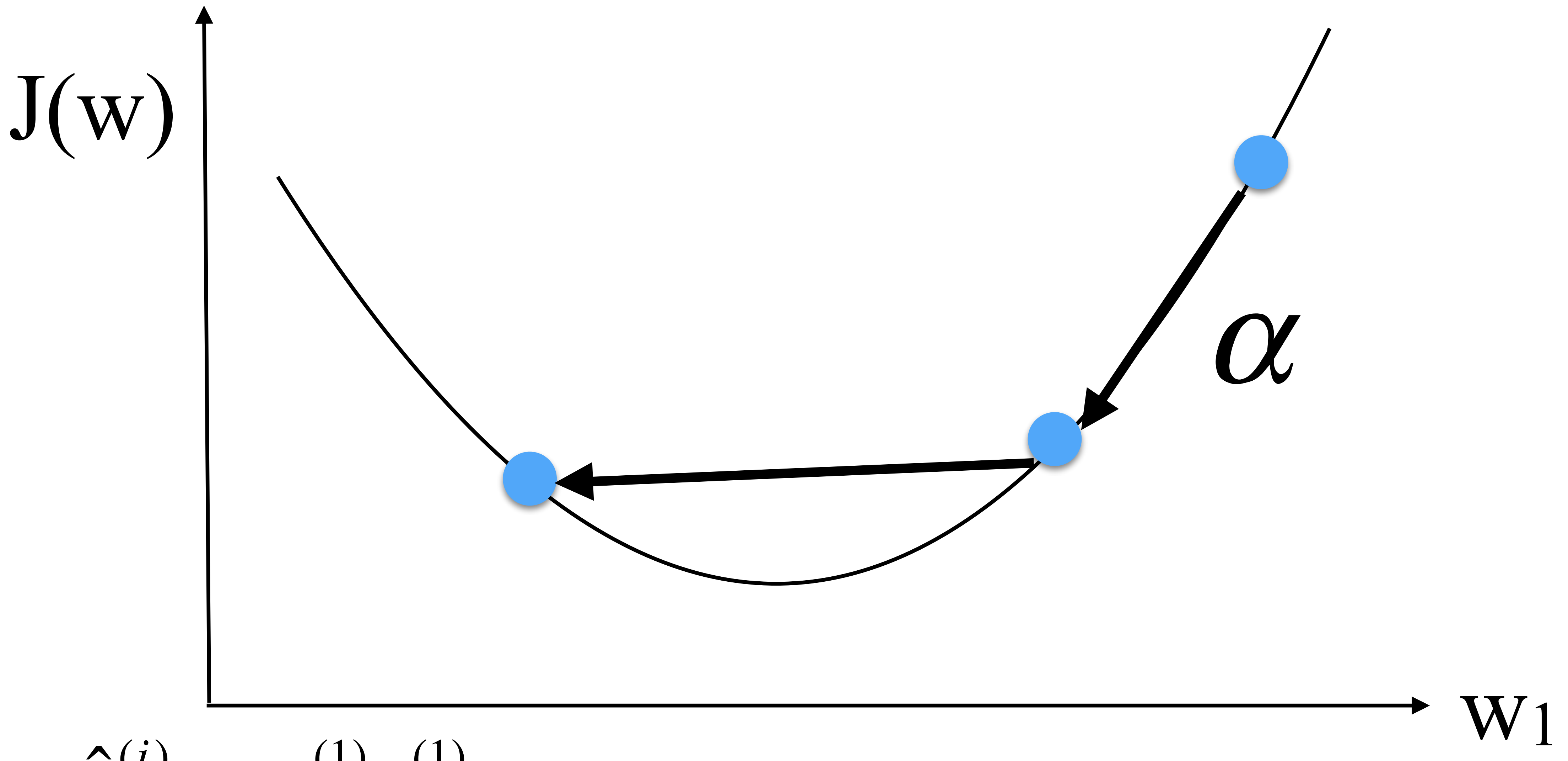
$$\hat{y}^{(i)} = w^{(1)}x^{(1)}$$

學習速度

- 如何選擇學習速度？
    - 若學習速度過快 => 無法收斂(過頭)

Notes

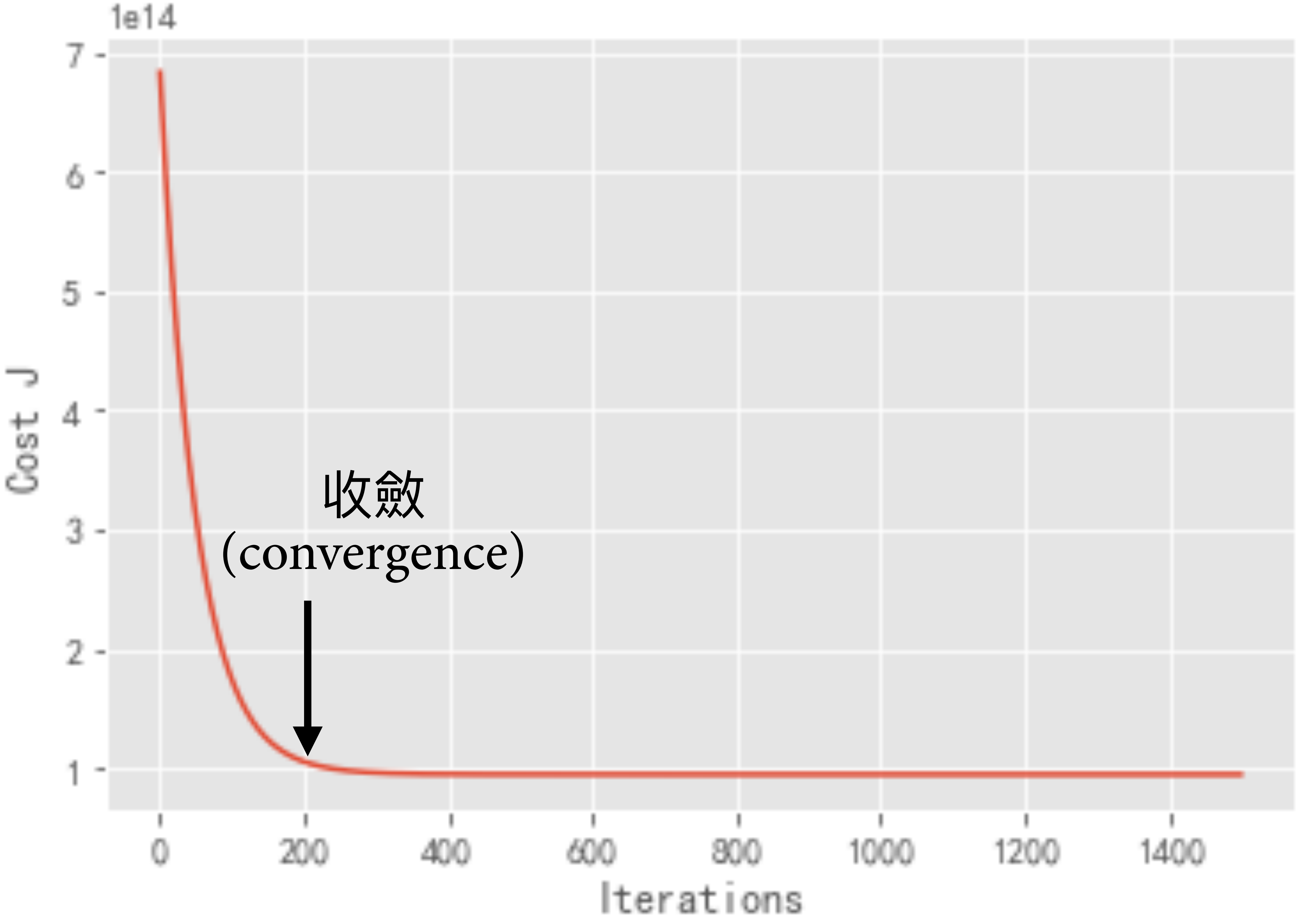
- sklearn.linear_model.SGDRegressor
- 預設α初始值(etao)為0.01，α隨時間縮小為: 1.0 / (α * (t + t_0))
- 後續Deep Learning會再詳細說明學習速度的選擇演算法



$$\hat{y}^{(i)} = w^{(1)}x^{(1)}$$

步數

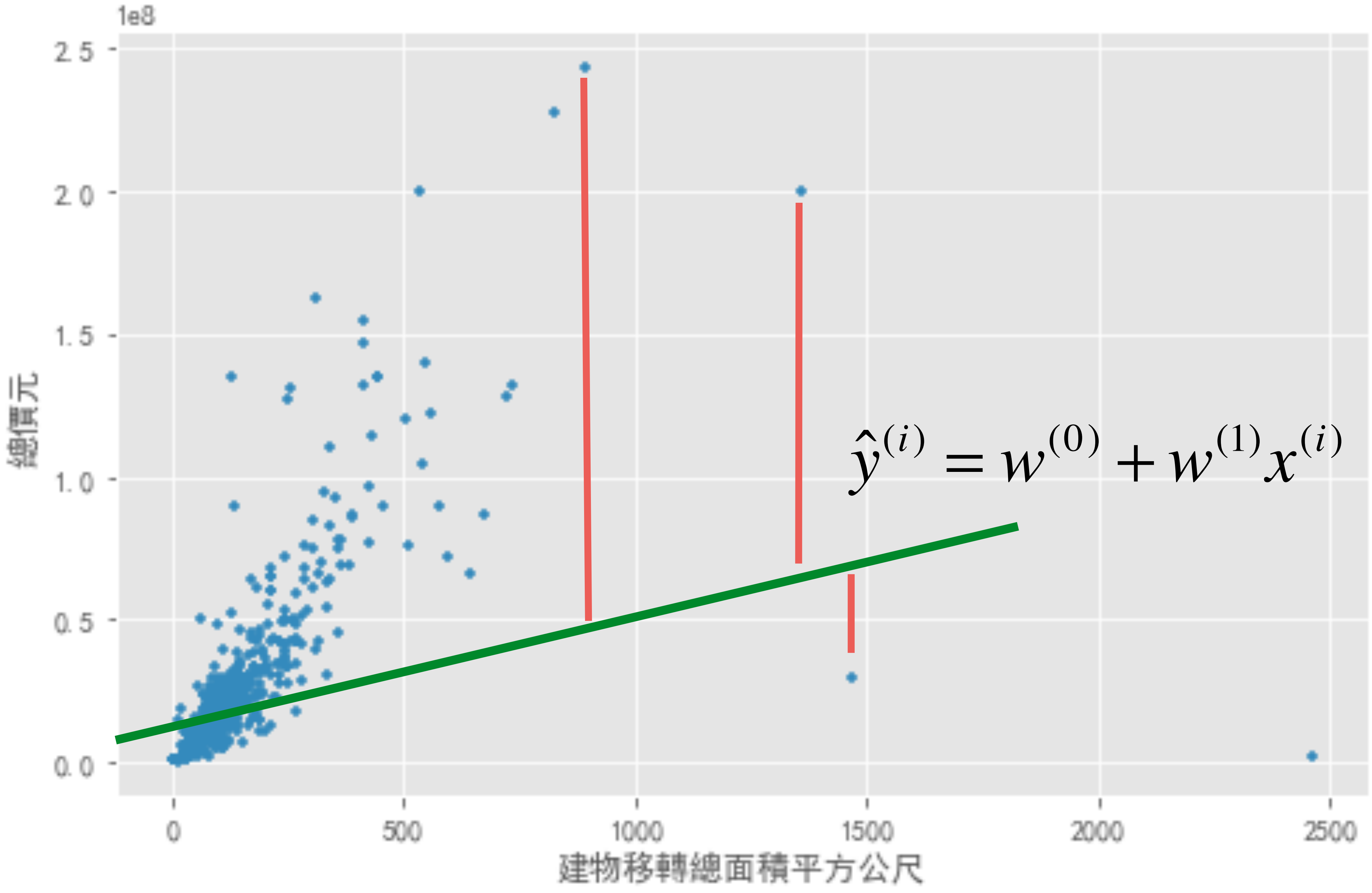
- 如何選擇步數？(iterations)

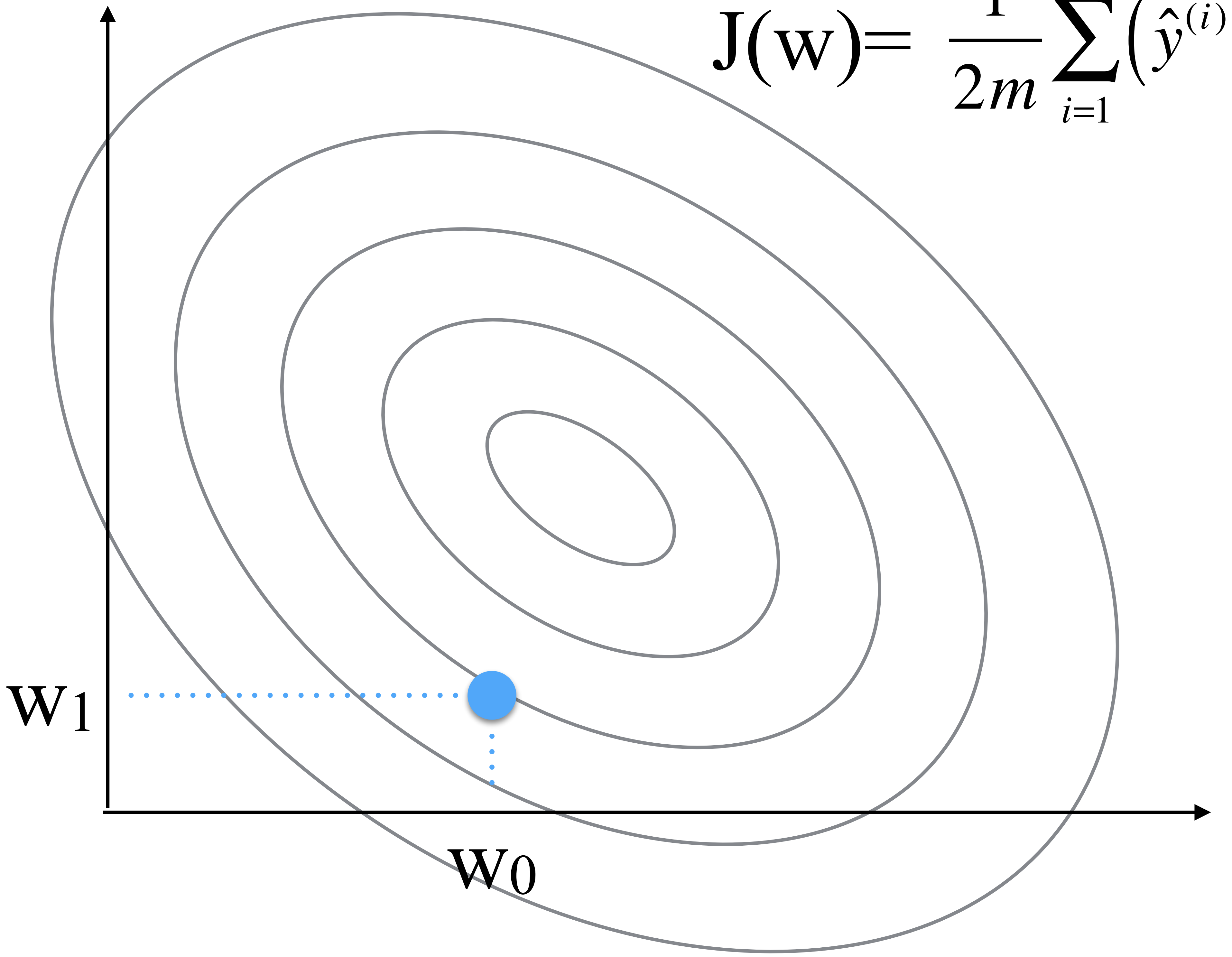


Notes

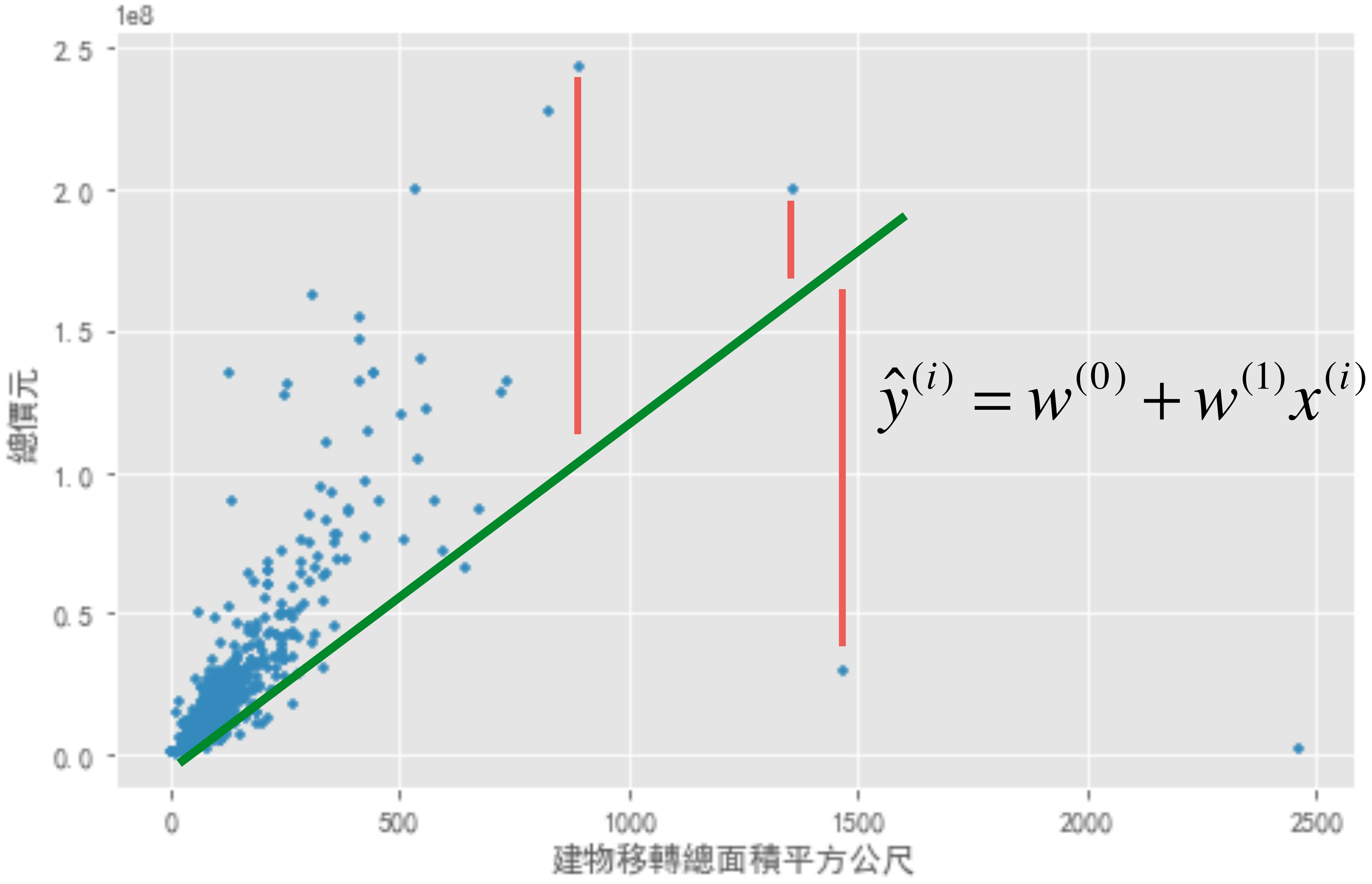
- sklearn.linear_model.SGDRegressor
- 預設步數(max_iter) 為1000

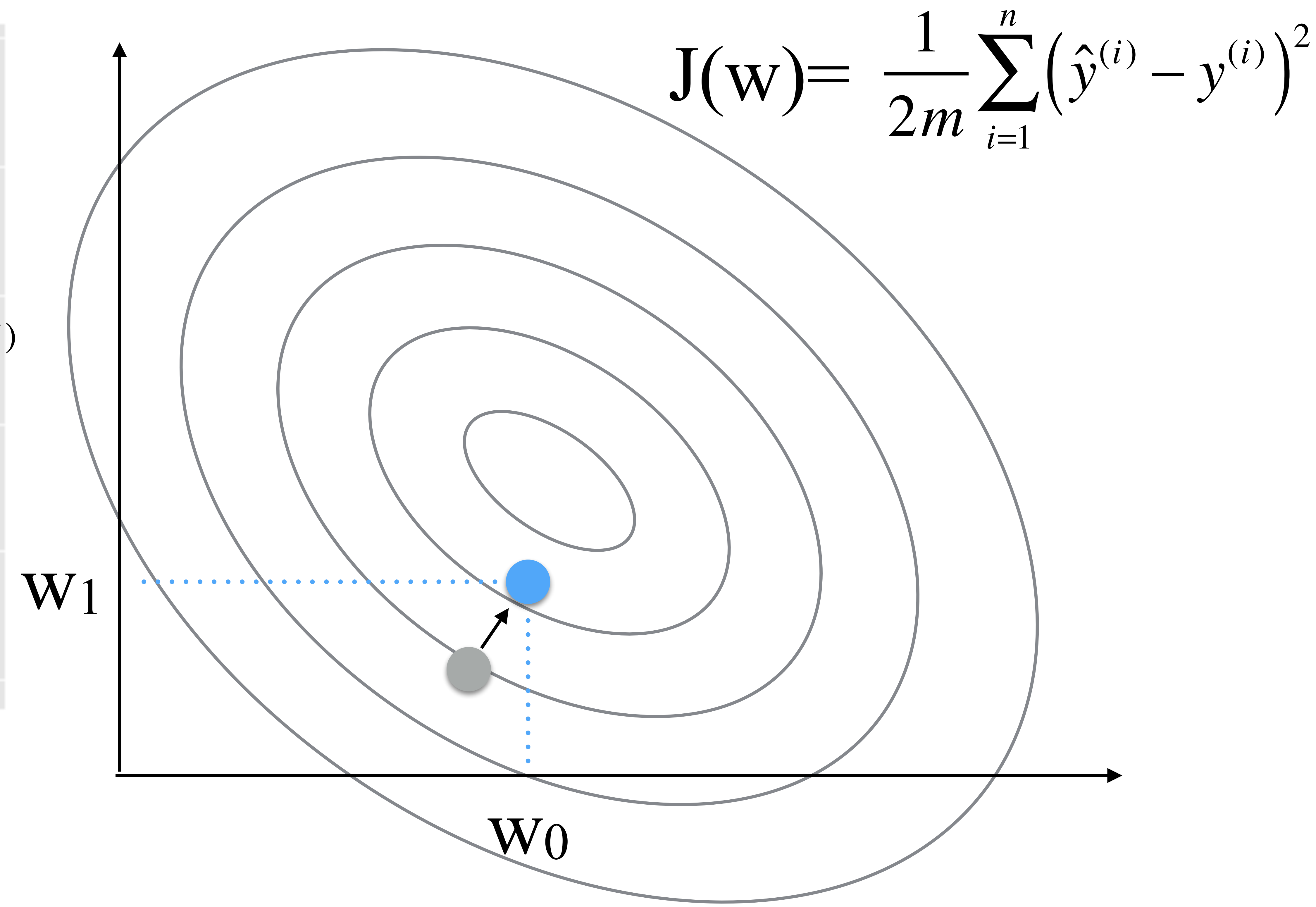
Gradient Descent Example



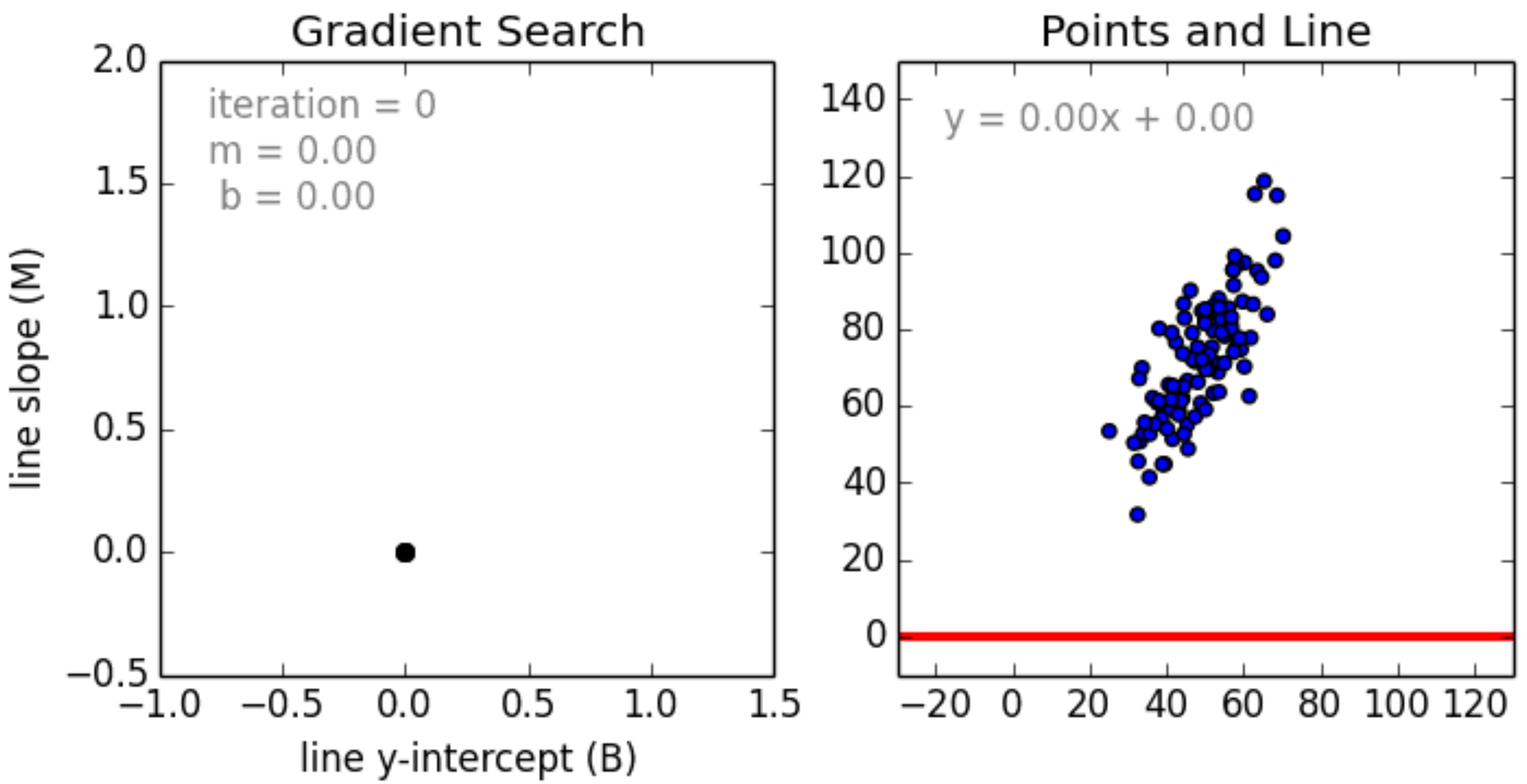


Gradient Descent Example





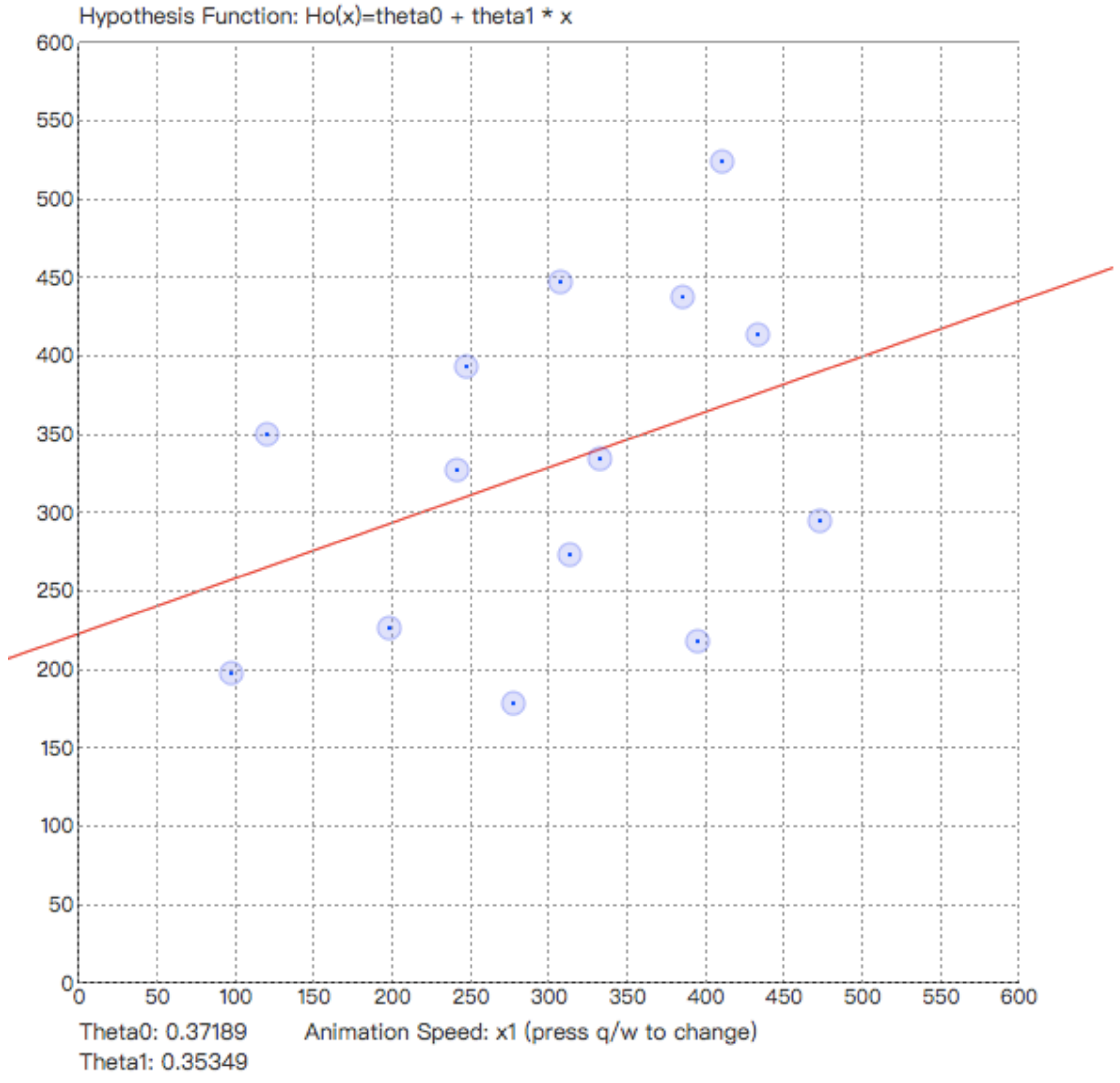
Gradient Descent 動態變化圖

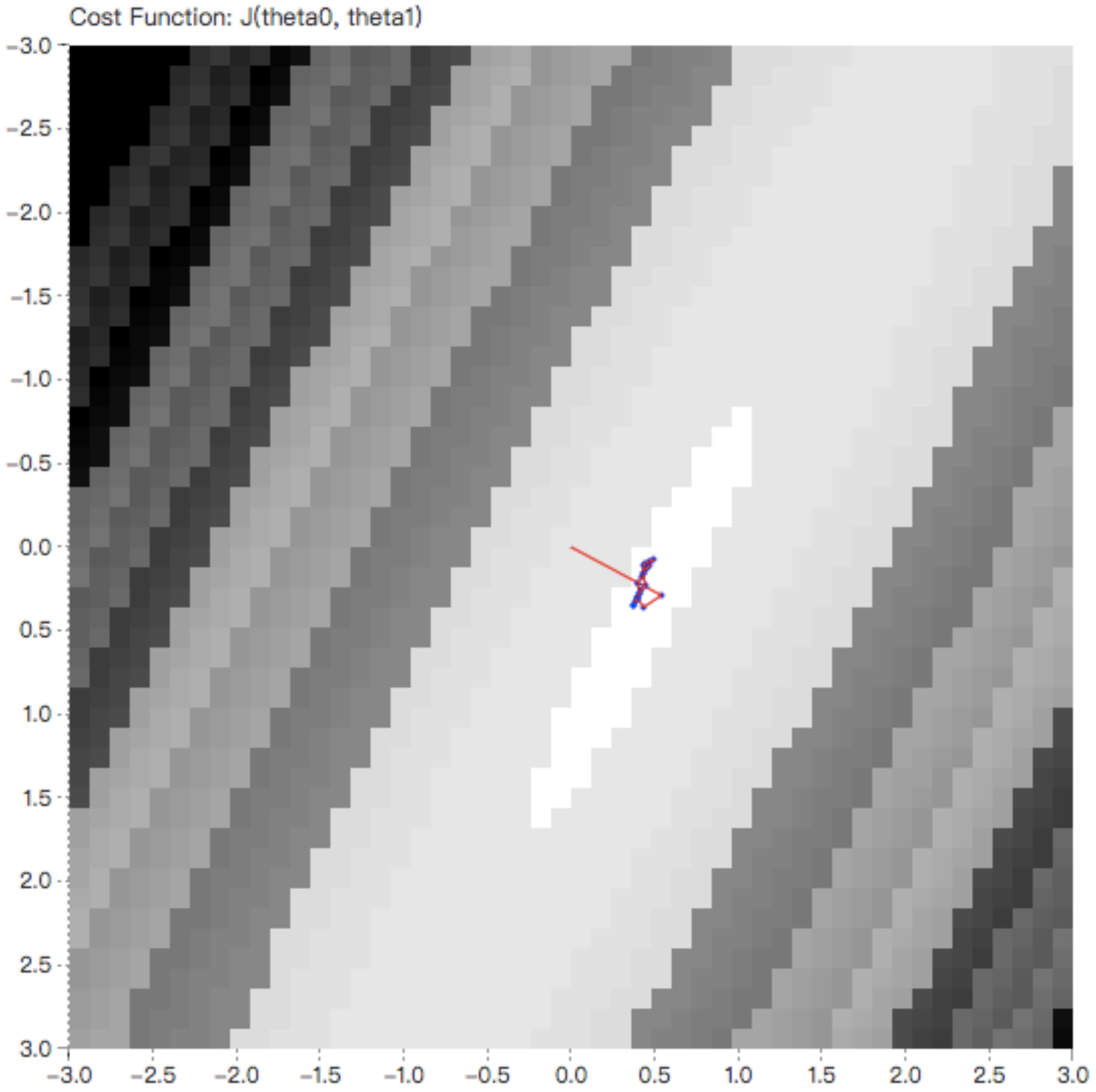


(Source: https://github.com/mattnedrich/GradientDescentExample)

Interactive demonstration of the Gradient Descent algorithm (補充)

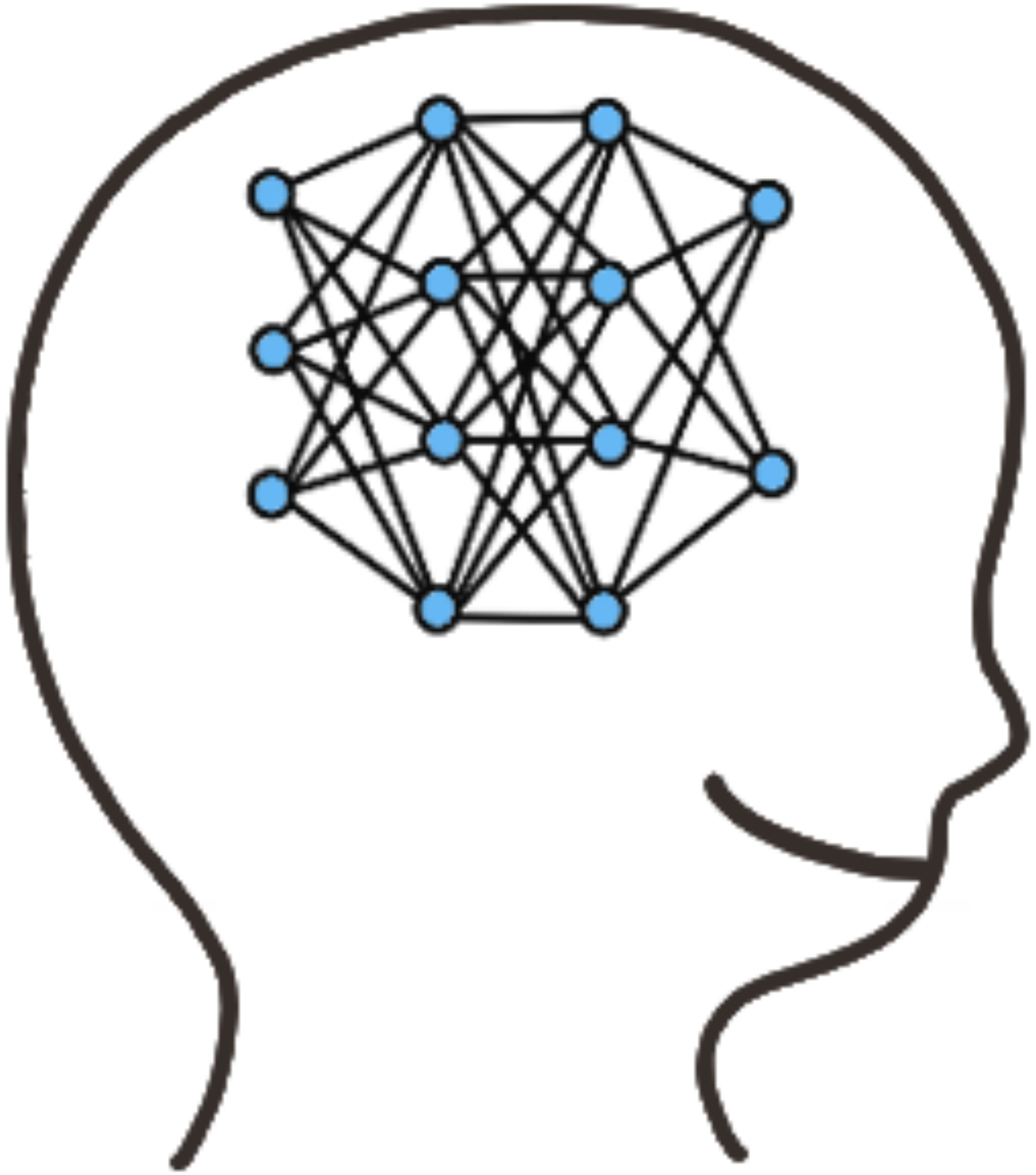
- https://lukaszkujawa.github.io/gradient-descent.html





梯度下降法種類

- **批次梯度下降**(Batch Gradient Descent, BGD)：每步使用全部的資料計算，難以用於大數據建模。
- **隨機梯度下降**(Stochastic Gradient Descent, SGD)：每步隨機挑選一個樣本計算(運算速度快，但不一定能往正確方向前進，適用於線上學習)。
- **小批梯度下降**(Mini-batch Gradient Descent, MBGD)：介於BGD和SGD之間，每次隨機選擇m筆資料計算。



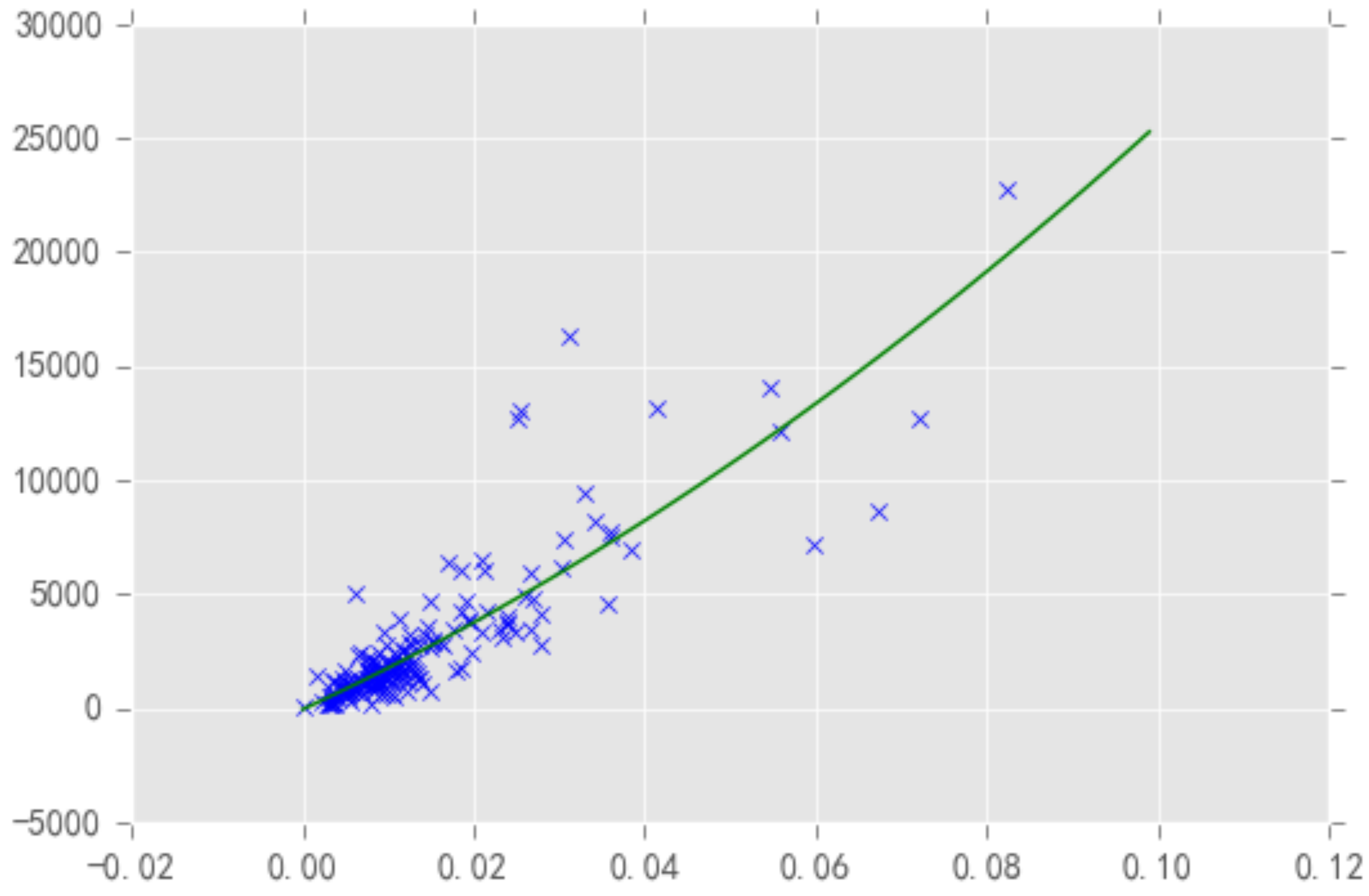
非線性迴歸方程式
Nonlinear Regression Equation

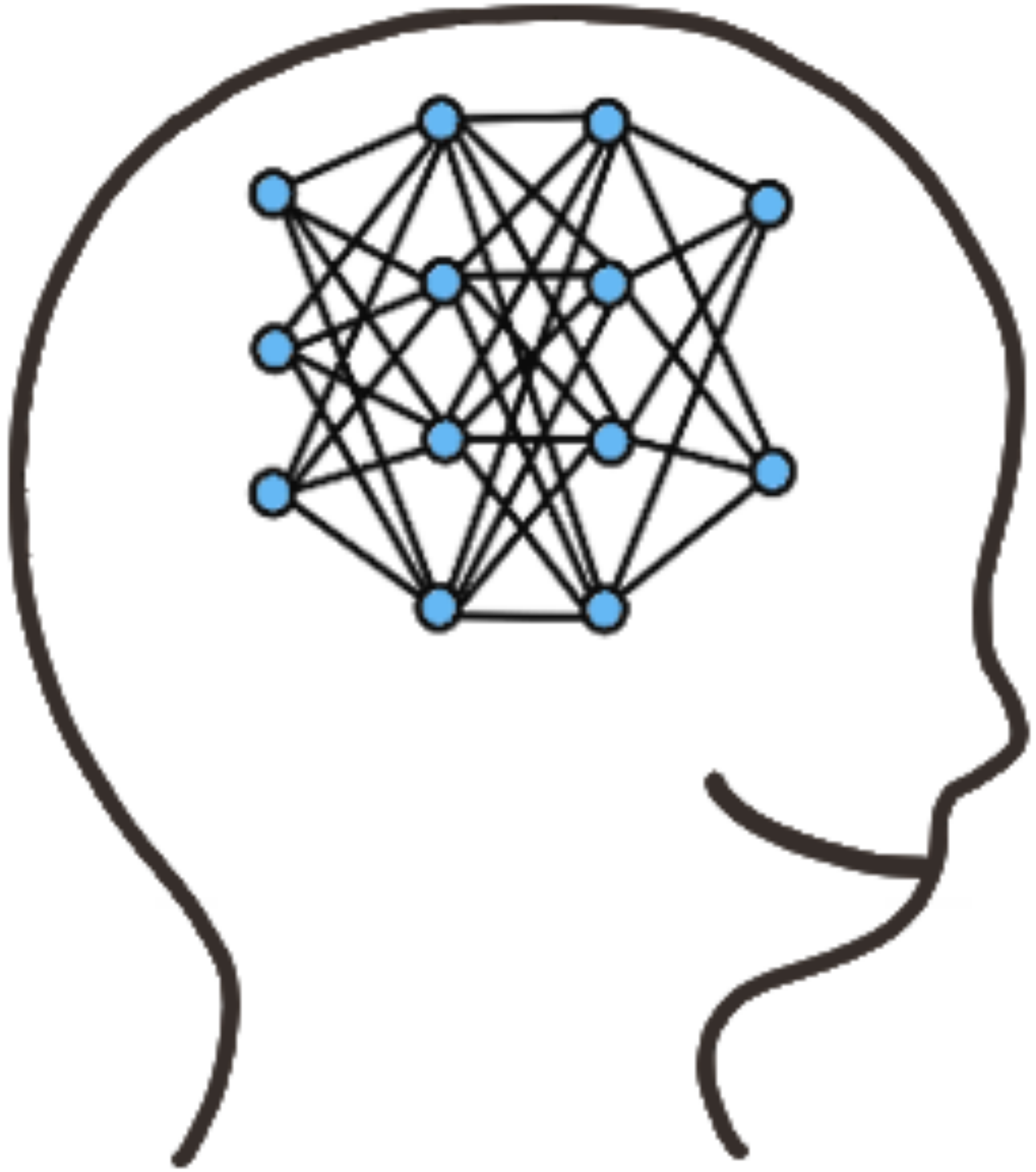
非線性迴歸 (Nonlinear Regression)

- 多項式迴歸(Polynomial Regression)
- $y = w^{(0)} + w^{(1)}x_1 + w^{(2)}x_2^2 + \ldots$ (e.g. $y = 3 + 2x_1 + 3x_2^2$)

Notes

- 一樣可用正規方程解





模型評估

Model Evaluation

評估模型準確度

- 均方誤差 (Mean Squared Error, MSE)

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{y}^{(i)}-y^{(i)}\right)^2$$

- R平方 (R Square)

$$SSE=\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{y}^{(i)}-y^{(i)}\right)^2$$

$$SST=\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}-\bar{y}\right)^2$$

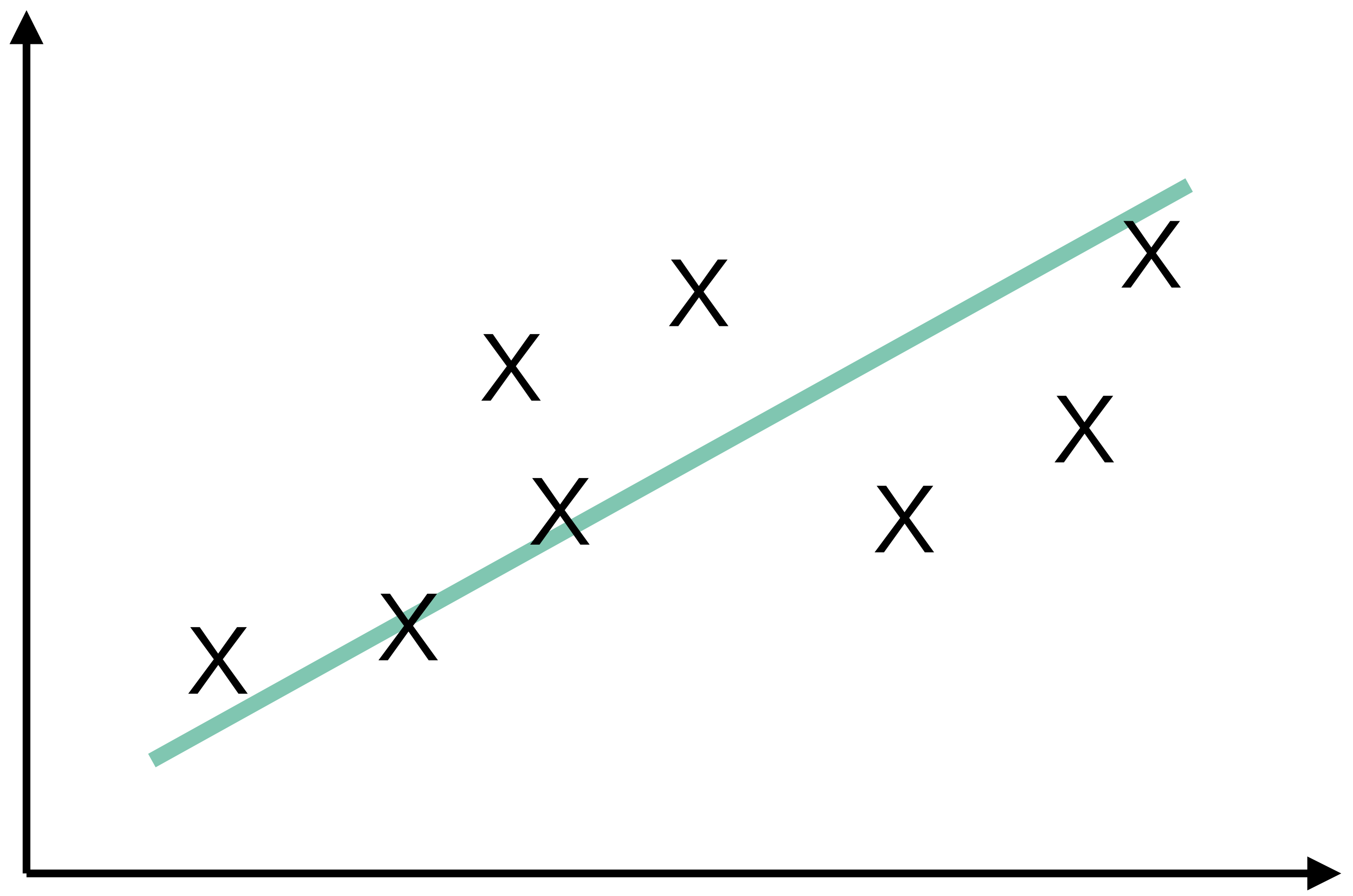
$$R^2=1-\frac{SSE}{SST}$$

Notes

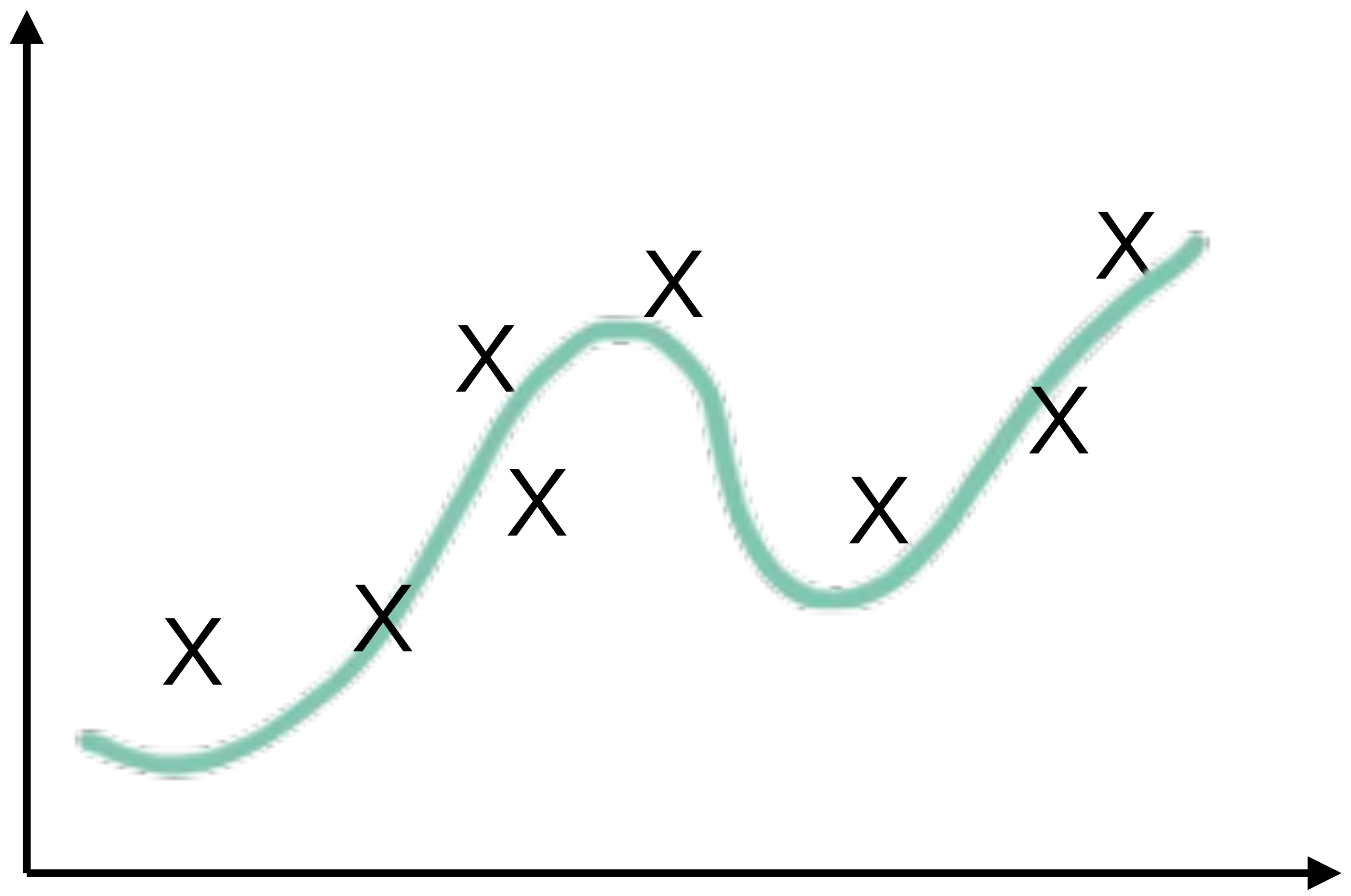
- SSE (Sum of Squared Error): 預測值和實際值的誤差平方和，即迴歸差異
- SST (Sum of Squared Total): 實際值與平均值的誤差平方和，即內部差異
- 後續課程會再教大家如何評估分類模型準確度

Underfitting/Overfitting

- 欠擬合(Underfitting)



- 過擬合(Overfitting)



交叉驗證 (Cross-Validation)

原始資料集	
訓練資料集 (Training Set)	測試資料集 (Test Set)

訓練資料集 (Training Set)	交叉驗證資料集(Cross Validation Set, CV)	測試資料集 (Test Set)

K折交叉驗證法 (K-fold Cross Validation)：計算平均效能

1/k

	Test

	Test	

⋮

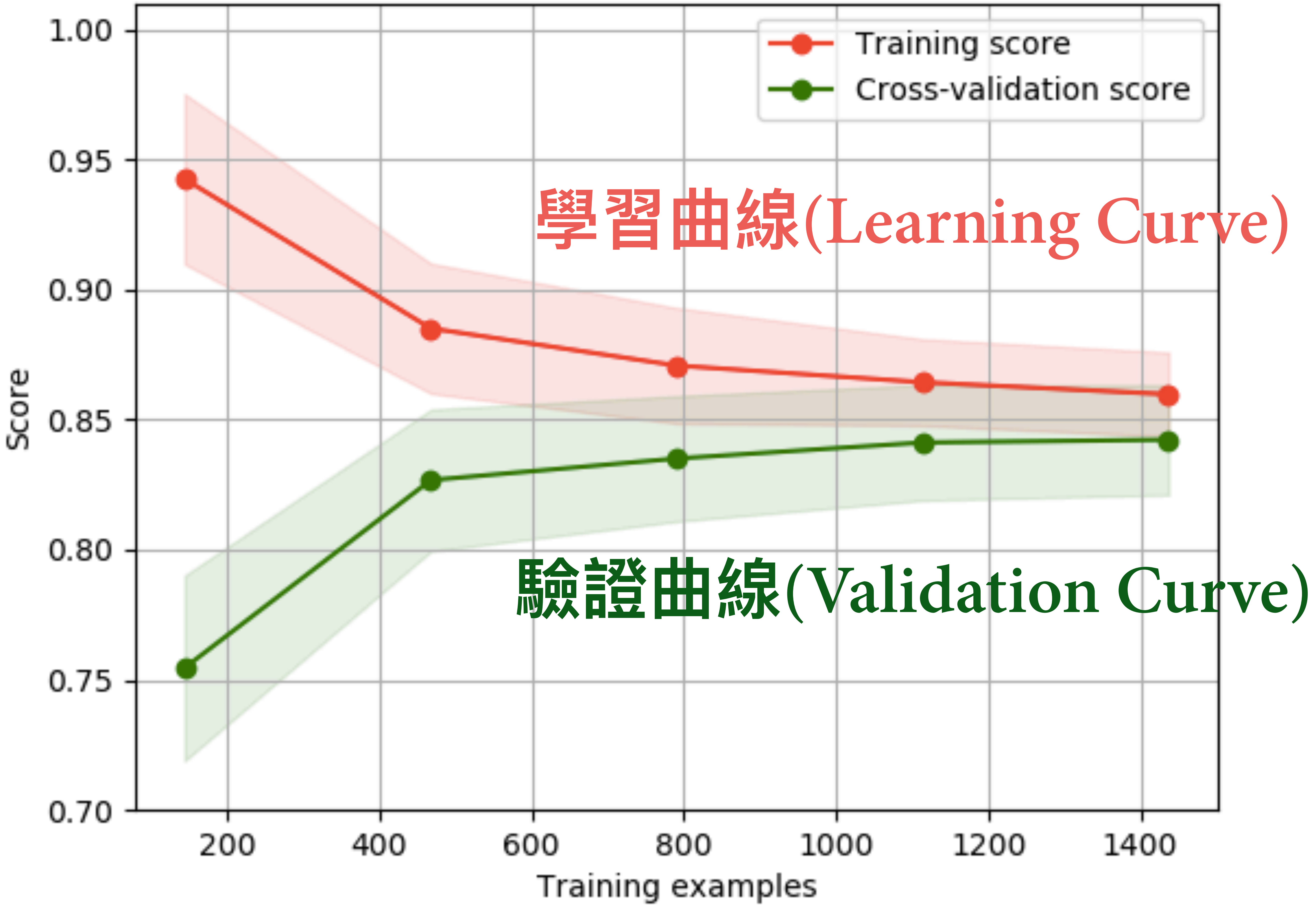
Test	

Notes

- 模型泛化(generation)能力：面對新的未知數據仍能保有訓練時的準確度
- 應該一律使用CV作為模型選擇和調整依據，測試資料僅作為最後驗證用

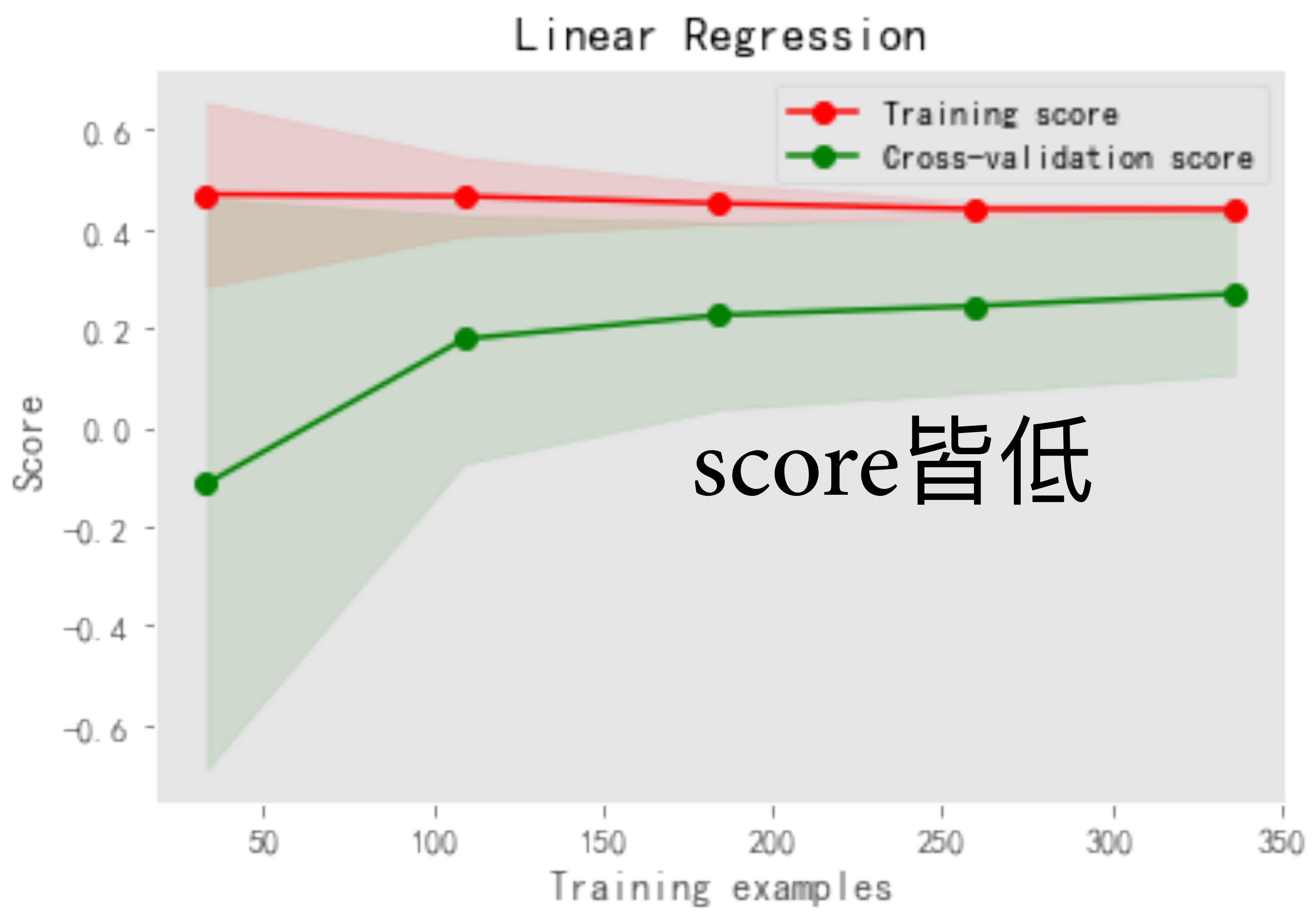
學習曲線與驗證曲線

理想狀態



偏誤 vs. 變異

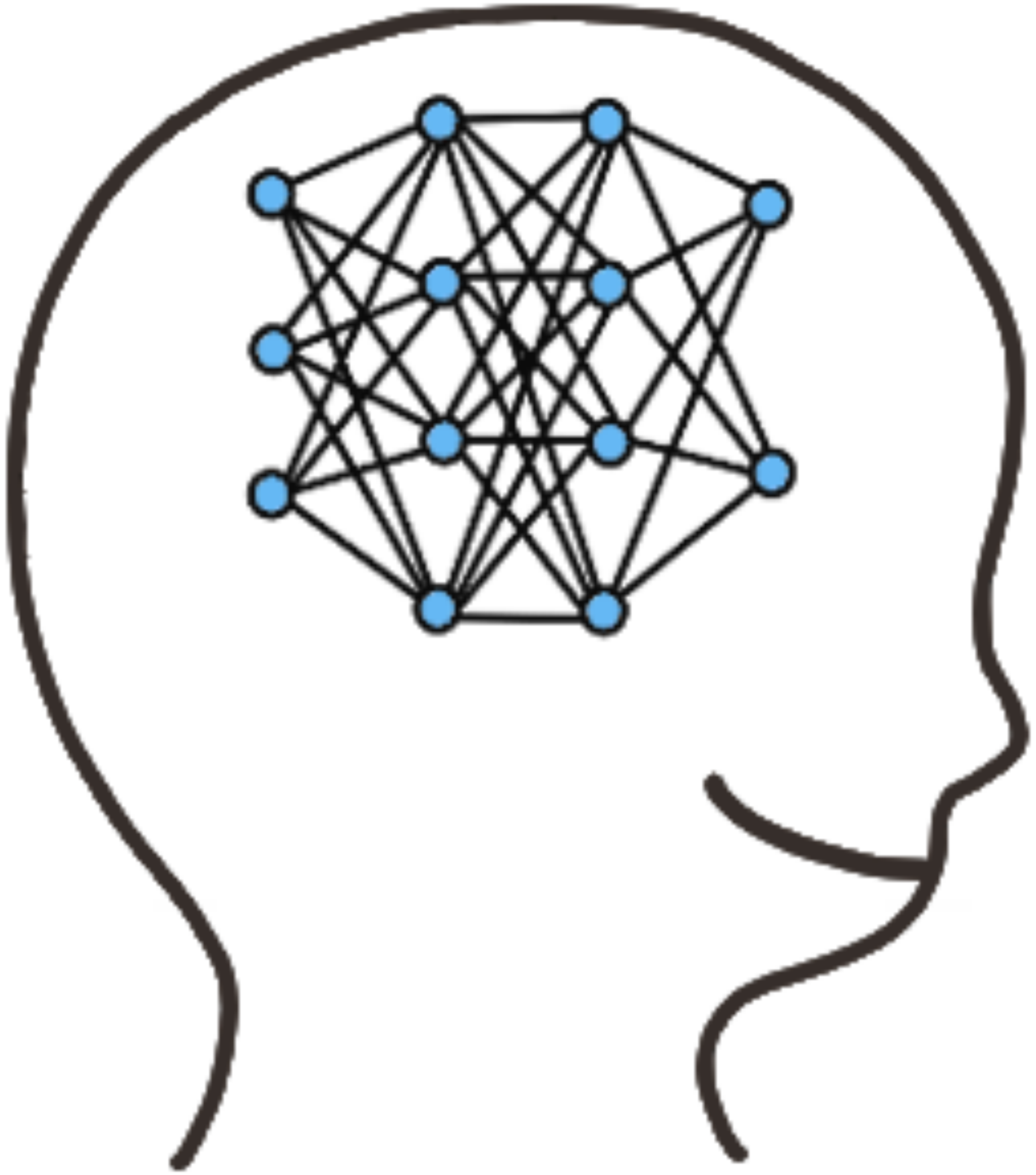
- 高偏誤(High Bias):
  - 欠擬合(Underfitting)



- 高變異(High Variance)
  - 過擬合/過適 (Overfitting)

Solutions to Underfitting/Overfitting

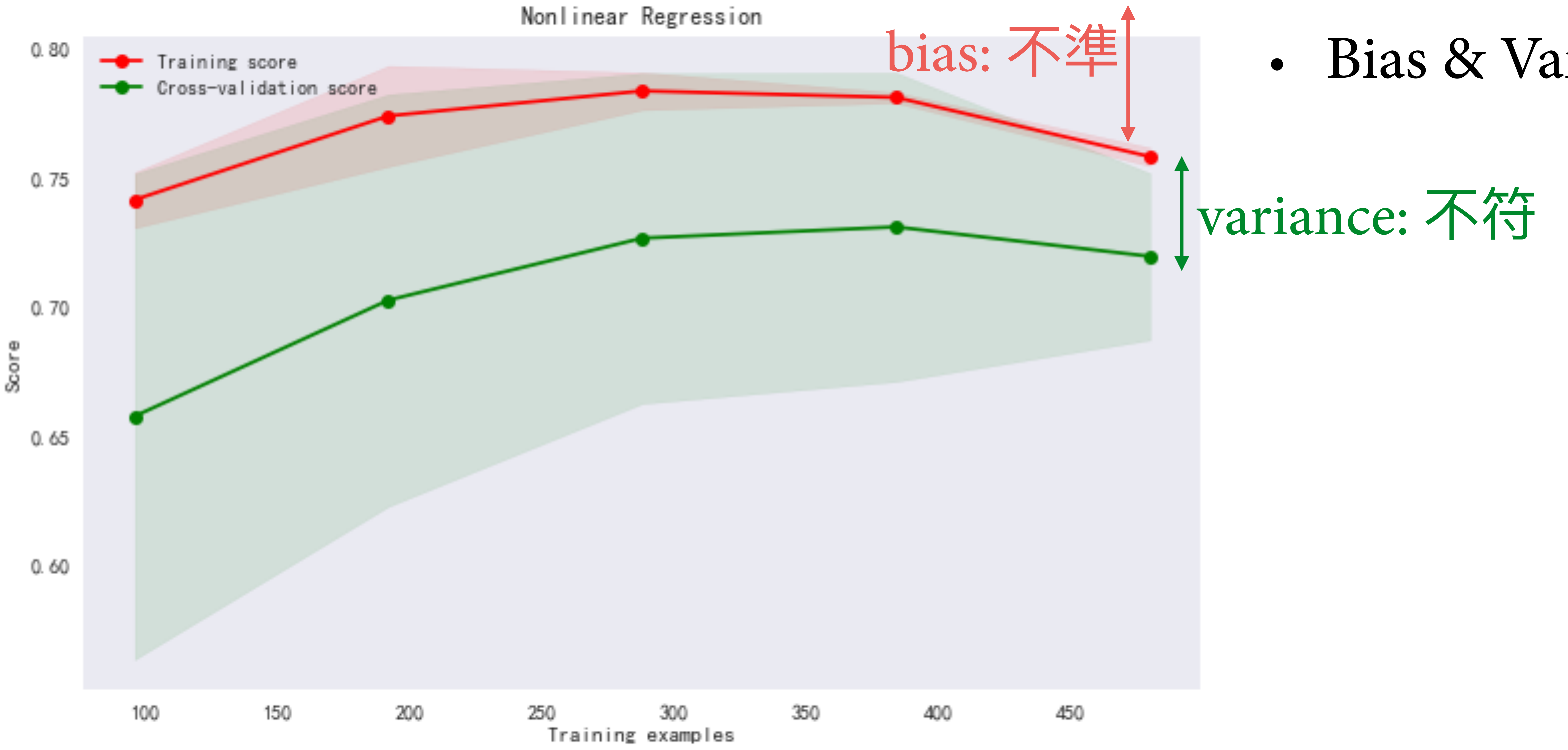
- **欠擬合(Underfitting)**
  - ✓ 增加特徵數量
  - ✓ 增加高次方變項
- **過擬合(Overfitting)**
  - ✓ 減少特徵數量
  - ✓ 增加資料筆數
  - ✓ 正規化(Regularization)



偏誤與變異權衡

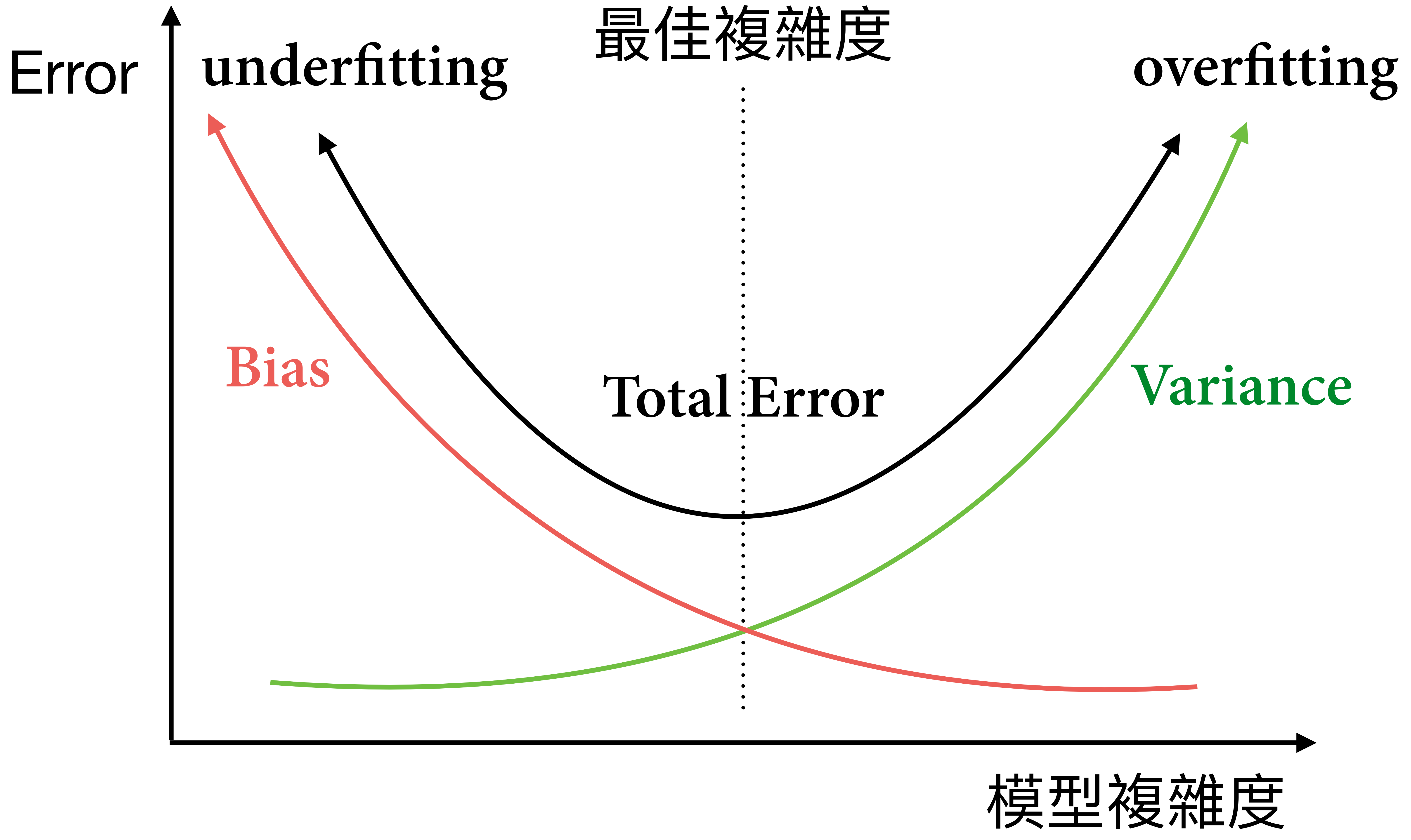
Bias-Variance Tradeoff

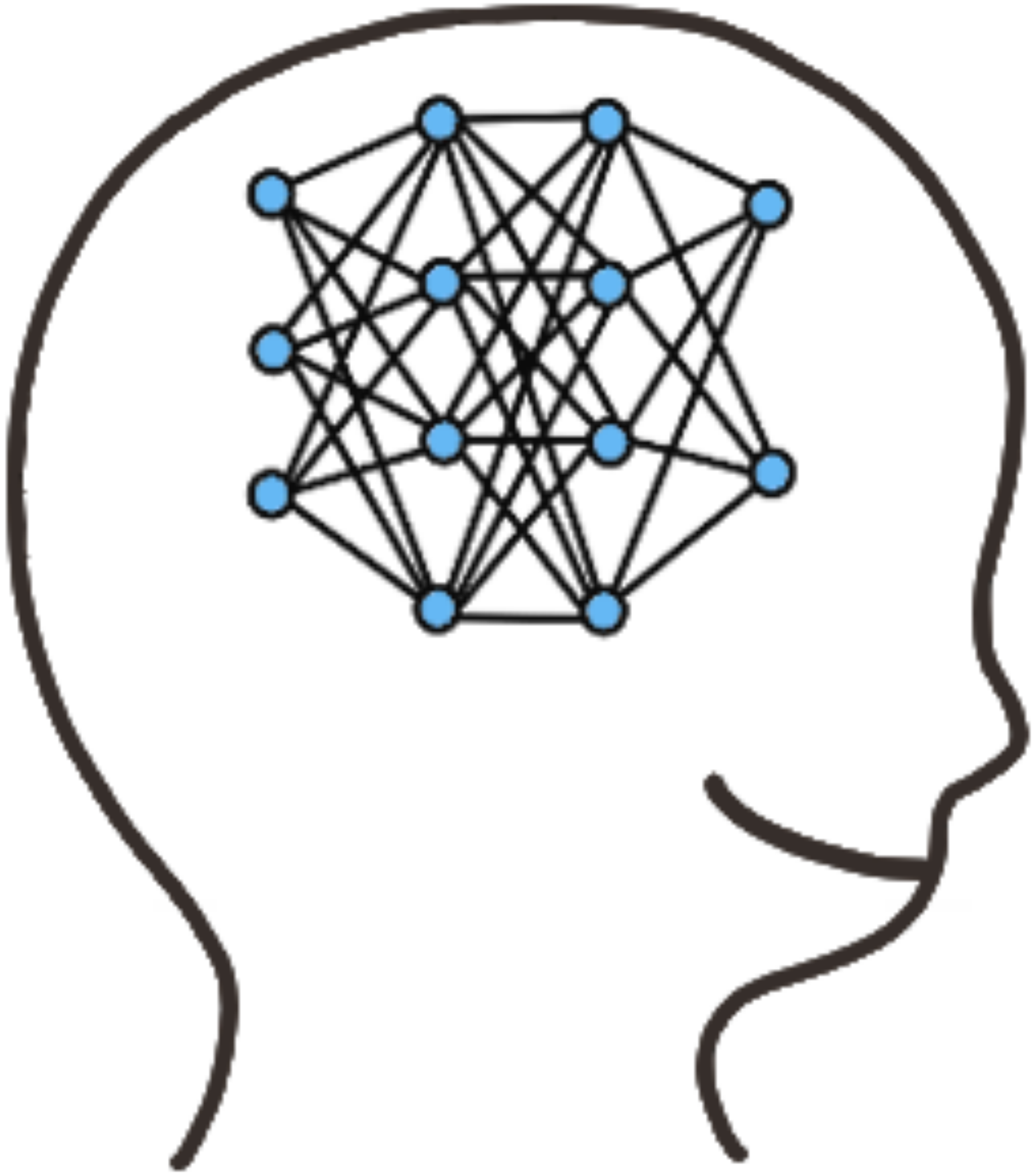
Bias-Variance Tradeoff



- Bias & Variance?

Bias-Variance Tradeoff





資料預處理(一)

Data Preprocessing - Part1

標準化

- 標準化(Standardization)
  - $x' = \dfrac{x - \overline{x}}{\sigma}$
- 標準化後：
  - 平均 = 0
  - 標準差 = 1

Notes

- $\overline{x}$: x 平均
- σ : x 標準差
- 標準差包含資料離散程度資訊，相較於直接把資料限縮於特定範圍內，標準化後對離群值較不敏感。

類別(categorical)資料編碼

- 有大小順序(順序量尺)
  - e.g. S -> 1, M -> 2, L -> 3
- 無大小順序(名義量尺)
  - One-hot Encoding

	顏色
0	紅色
1	藍色
2	綠色

→

	紅色	藍色	綠色
0	1	0	0
1	0	1	0
2	0	0	1