Machine Learning Note

H3Art

成绩分布

平时成绩：40%，其中项目展示20%，报告20%（意味着应该是没有考勤的）
闭卷考试：60%

项目要求

项目等级的判别标准以及对应分数：

- A：**自己创建数据集**，**提供源码**，**对比多种算法**且相对准确，有**实验结果**以及**图表分析**，有**案例讨论**以及**结论展望**，报告书写整体质量较好。对应90-100分。
- B：以上条件缺1或2，报告整体质量一般。对应80-89分。
- C：以上条件缺3或4，有明显的不足（比如算法简单），报告整体质量欠佳。对应70-79分。
- D：只有方法介绍，没有实验结果。对应60-69分。
- E：缺最终报告文档。对应0-60分。

考试题形

- 填空30分
- 判断10分
- 简答20分
- 开放40分

考试内容

1. Introduction 介绍

- **General Procedure** to ML机器学习的一般化过程：
  - Problem Definition问题定义 -> Data Collection数据收集 -> Feature Analysis特征分析 -> Model Training模型训练 -> Evaluation Metric评估指标
- **Supervised** vs. **Unsuervised** vs. **Semi-supervised**
  - **Supervised learning监督学习**: learn with **labeled有标签** training data
  - **Unsupervised learning无监督学习**: learn with **unlabeled无标签** training data
  - **Semi-supervised半监督学习**: a **small amount of labeled data** with a **large amount of unlabeled data**.
    - Train model with labeled data
    - Use the learned model to predict unlabeled data, then adjust parameter

2. Overview of Supervised Learning 监督学习概述

- **Least Square最小二乘法**
  - **Linear Model线性模型**：给定一个向量输入$\mathbf{X}^\top=(X_1,X_2,\dots,X_p)$，模型表示为$\hat{\mathbf{Y}}=\hat{\beta}_0+\sum_{j=1}^{p}X_j\hat{\beta}_j$，$\hat{\beta}_0$是偏置量(bias)，$\hat{\beta}_j$是向量中每个量的权重(weight)。
  - **Residual sum of squares平方残差和**：$\mathrm{RSS}(\beta)=\sum_{i=1}^{N}(y_i-x_i^\top\beta)^2=(\mathbf{y}-\mathbf{X}\beta)^\top(\mathbf{y}-\mathbf{X}\beta)$
- **k-nearest neighbors/K-NN k-最邻近算法**
  - $N_k(x)$是由k个最靠近点x的点x_i构成的邻居集合，记作$\hat{Y}(x)=\frac{1}{k}\sum_{x_i\in N_k(x)}y_i$
  - 一般的对距离进行度量的方式为欧几里得距离：$d(p,q)=\sqrt{(p_1-q_1)^2+(p_2-q_2)^2+\cdots+(p_i-q_i)^2+\cdots+(p_n-q_n)^2}$
- **Loss function vs. Expected prediction error损失函数与期望预测误差**
  - 损失函数：惩罚在预测中产生的误差：
    - 平方误差函数用于回归问题，即模型函数f是连续的
    - 0-1误差函数用于分类问题，即模型函数f是离散的
      - 贝叶斯分类器（Bayes Classifier）

- 期望预测误差：误差函数的期望值
- 最优预测（Optimal prediction）：最小化EPE（Expected Prediction Error）即最小化期望预测误差

- **Curse of dimensionality维度灾难**
  - 当维数增加时，**空间体积增加得很快**，导致**可用数据变得稀疏**
  - 支持结果所需的**数据量**往往随维数呈**指数级增长**
  - **采样困难**；本地方法效率低下
- **Bias-variance decomposition偏差-方差分解**
  - **Variance方差**：由于训练集的变化（即数据扰动的影响）而导致的学习性能的变化，公式表示为$\mathrm{E}_\tau[\hat{y}_0 - \mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0)]^2$，比喻为在一个标靶打中的点的分散程度
    - 方差大：在训练时拟合优秀，在测试时表现差
    - 减小方差的做法：添加正则化、增大训练集、降维、减少模型复杂度、Dropout
  - **Bias偏差**：学习算法的预期结果和实际结果之间的偏差，即学习算法的拟合能力，公式表示为$\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0) - f(x_0)$，比喻为在一个标靶中打中的点是否靠近中心（预测目标）
    - 偏差大：无法拟合原本的数据（在训练过程中）
    - 减少偏差的做法：添加更多的特征、构造更复杂的模型、减小正则化
  - **MSE/Mean Square Error均方误差 = variance方差 + squared bias平方偏差**，其由以上两式可得如下式：

$$
\begin{aligned}
\mathrm{MSE}(x_0) &= \mathrm{Var}_\tau(\hat{y}_0) + \mathrm{Bias}^2(\hat{y}_0) \\
&= \mathrm{E}_\tau[\hat{y}_0 - \mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0)]^2 + [\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0) - f(x_0)]^2 \\
&= \mathrm{E}_\tau[\hat{y}_0{}^2 - 2\hat{y}_0\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0) + (\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0))^2] + \mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0)^2 - 2\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0)f(x_0) + f(x_0)^2 \\
&= \mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0{}^2) - 2\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0)f(x_0) + f(x_0)^2 \\
&= \mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0{}^2) - 2\mathrm{E}_\tau(\hat{y}_0 f(x_0)) + \mathrm{E}_\tau(f(x_0)^2) \\
&= \mathrm{E}_\tau[(\hat{y}_0{}^2) - 2\hat{y}_0 f(x_0) + f(x_0)^2] \\
&= \mathrm{E}_\tau[f(x_0) - \hat{y}_0]^2
\end{aligned}
$$

3. Linear Model 线性模型

- **Linear regression线性回归**
  - 线性模型的优点：simple model; basic model; good interpretability（简单、基础、好的可解释性）
  - 单变量线性回归：$f(x_i) = wx_i + b$，因此$f(x_i) \approx y_i$，此时x_i是一个标量（scalar），最小化其均方误差可得权重w和偏置b的表达式
    - $w = \dfrac{\sum_{i=1}^m y_i(x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^m x_i^2 - \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^m x_i\right)^2}$
    - $b = \dfrac{1}{m}\sum_{i=1}^m (y_i - wx_i)$
  - 多变量线性回归：$f(\mathbf{x_i}) = \mathbf{w}^\top\mathbf{x_i} + \mathbf{b}$，因此$f(\mathbf{x_i}) \approx \mathbf{y_i}$，此时$\mathbf{x_i}$是一个向量（vector），同样的使用导数最小化均方误差后，可以得到权重$\mathbf{w}$的表达式
  - $\hat{\mathbf{w}}^* = (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\mathbf{y}$
  - 广义的线性模型：$y = g^{-1}(w^\top x + b)$，此时$g(\cdot)$是一个单调可微函数
- **Logits function 逻辑函数**
  - 目的：使用线性回归模型来处理分类问题
  - Logistic函数：任意阶可微凸函数（convex function）
    - Sigmoid函数：$y = \dfrac{1}{1+e^z}$，其中z是输入的线性组合，通常为$z = \mathbf{w}^\top\mathbf{x} + \mathbf{b}$，这样的函数是对单位阶跃函数（Unit-step function）的平滑近似，单位阶跃函数即当输入大于0时输出1，小于0时输出0
    - 逻辑回归可以用来估计给定x时y为1的条件概率$P(y=1|x)$，其通过上述所提到的Sigmoid函数有这样的转化：将$z = \mathbf{w}^\top\mathbf{x} + \mathbf{b}$带入Sigmoid函数，移项并取对数可得$\ln\dfrac{y}{1-y} = \mathbf{w}^\top\mathbf{x} + \mathbf{b} \to \ln\dfrac{P(y=1|x)}{P(y=0|x)}$，则：
      - $P(y=1|x) = \dfrac{e^{\mathbf{w}^\top\mathbf{x}+\mathbf{b}}}{1+e^{\mathbf{w}^\top\mathbf{x}+\mathbf{b}}}$
      - $P(y=0|x) = \dfrac{1}{1+e^{\mathbf{w}^\top\mathbf{x}+\mathbf{b}}}$
    - 似然函数$L(\mathbf{w},\mathbf{b})$表示了在给定参数$\mathbf{w}$和$\mathbf{b}$下，观察到当前数据集预测结果的概率，为了便于计算，通常对似然函数取对数，最大化对数似然等价于最小化损失函数：
    - $$
\begin{aligned}
L(\mathbf{w},\mathbf{b}) &= \sum_{i=1}^m \ln p(y_i|x_i; w, b) \\
&= \sum_{i=1}^m \frac{y_i e^{\beta^\top\hat{x}_i} + (1-y_i)}{1+e^{\beta^\top\hat{x}_i}}
\end{aligned}
$$
- **Linear discriminant analysis(LDA)线性判别分析**

- 目标：
  - 将样本投射到一条直线上
  - 将相似样本投影得尽可能近
  - 将不相似样本投影得尽可能远
  - 对于新样本，根据其投影点的相对位置确定类别
- Eng Ver:
  - Cast the samples onto a straight line
  - Project the similar samples as close as possible
  - Project the dissimilar samples as far as possible
  - For a new sample, determine the class according to the relative position of its projection point.
- 数学描述：
  - 最大化$J=\frac{||\mathbf{w}^\top\mu_\mathbf{0}-\mathbf{w}^\top\mu_\mathbf{1}||_2^2}{\mathbf{w}^\top\sum_\mathbf{0}\mathbf{w}+\mathbf{w}^\top\sum_\mathbf{1}\mathbf{w}}=\frac{\mathbf{w}^\top(\mu_\mathbf{0}-\mu_\mathbf{1})(\mu_\mathbf{0}-\mu_\mathbf{1})^\top\mathbf{w}}{\mathbf{w}^\top(\sum_\mathbf{0}+\sum_\mathbf{1})\mathbf{w}}$
  - 此时，类内散度可以表示为：$\mathbf{S_w}=\sum_0+\sum_1=\sum_{\mathbf{x}\in\mathbf{X_0}}(\mathbf{x}-\mu_\mathbf{0})(\mathbf{x}-\mu_\mathbf{1})^\top$
  - 类间散度可以表示为：$\mathbf{S_b}=(\mu_0-\mu_1)(\mu_0-\mu_1)^\top$
  - 因此根据以上三式，$J=\frac{\mathbf{w}^\top\mathbf{S_b}\mathbf{w}}{\mathbf{w}^\top\mathbf{S_w}\mathbf{w}}$
  - 为了解出最优的线性组合$\mathbf{w}$，可以设定目标为最小化$-\mathbf{w}^\top\mathbf{S_b}\mathbf{w}$且$\mathbf{w}^\top\mathbf{S_w}\mathbf{w}=1$，通过这种方式使得类间散布最大化而类内散布最小化，解的导出包括使用拉格朗日乘子法来求解带有约束的优化问题即$\mathbf{S_b}\mathbf{w}=\lambda\mathbf{S_w}\mathbf{w}$

4. Decision Tree 决策树

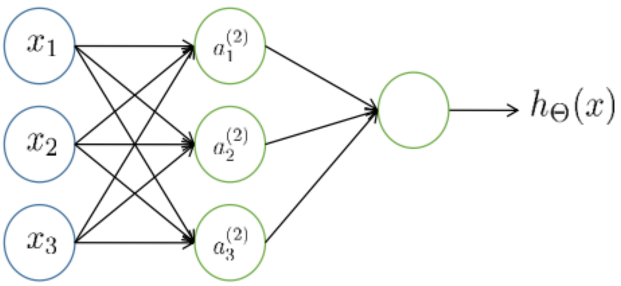
- **Basic algorithm基本算法**
  - 如果所有实例都来自于一个类别，那么决策树就只是包含该类名的应答节点/最终节点
  - 否则：
    - 定义a_best为具有某种机制的属性
    - 对于a_best的每个值$v_\text{best, i}$，从a_best生长出一个分支到所有具有a_best属性的值v_best的实例递归构建的决策树
- **Attribute Selection属性选择**
  - **Information entropy信息熵**
    - 用于衡量数据集的干净程度，信息熵越小，数据集越干净
    - 定义数据集D，共有$|Y|$个类，第k个类的占比为p_k，那么信息熵的计算公式定义为：$\text{Ent}(D)=-\sum_{k=1}^{|Y|}p_k\log_2 p_k$
  - **Information gain信息增益**（在ID3算法中使用）
    - 定义在一个离散的属性集合a内，它有v个可能的取值，$a=\{a^1,a_2,\dots,a^v\}$，再定义D^v按照这v个取值划分出v个子集，其信息增益的度可以表示为：$\text{Gain}(D,a)=\text{Ent}(D)-\sum_{v=1}^{V}\frac{|D^v|}{D}\text{Ent}(D^v)$
  - **Gain ratio信息增益率**（在C4.5算法中使用）
    - $\text{Gain ratio}(D,a)=\frac{\text{Gain}(D,a)}{\text{IV}(a)}$
    - $\text{IV}(a)=-\sum_{v=1}^{V}\frac{|D^v|}{|D|}\log_2\frac{|D^v|}{|D|}$
  - **Gini index基尼指数**（在CART算法中使用）
    - $\text{Gini}(D)=\sum_{k=1}^{|y|}\sum_{k'\neq k}p_k p_{k'}=1-\sum_{k=1}^{|y|}p_k^2$
    - $\text{Gini index}(D,a)=\sum_{v=1}^{V}\frac{|D^v|}{|D|}\text{Gini}(D^v)$
- **Bi-partition for continuous value连续值的二分**
  - 对连续属性 a 上的 n 个不同值进行排序，得到 { $a^1,a^2,...,a^n$ }
  - 根据分割点 t 将数据集 D 分为 D_t^+ 和 D_t^-
  - 候选分割点集合为 $T_a=\{\frac{a^i+a^{i+1}}{2}|1\leq i<n\}$
  - 选择最佳的 t ，使得 $\text{Gain}(D,a,t)$最大化，即$\text{Gain}(D,a)=\max_{t\in T_a}\text{Gain}(D,a,t)=\max_{t\in T_a}\text{Ent}(D)-\sum_{\lambda\in\{-,+\}}\frac{|D_t^\lambda|}{|D}\text{Ent}(D_t^\lambda)$
- **Reweight for missing value重新计算缺失值的权重**
  - 信息增益：

- $$\begin{aligned}\text{Gain}(D,a) &= \rho \times \text{Gain}(\tilde{D},a) \\ &= \rho \times \left(\text{Ent}(\tilde{D}) - \sum_{v=1}^{V} \tilde{r}_v \text{Ent}(\tilde{D}^v)\right) \\ &= \rho \times \left(-\sum_{k=1}^{|y|} \tilde{p_k} \log_2 \tilde{p_k} - \sum_{v=1}^{V} \tilde{r}_v \text{Ent}(\tilde{D}^v)\right)\end{aligned}$$
  - 如果需要，重新设置样本 x 的权重 w_x：
    - 如果 x 在属性 a 上有某个值，就保持 w_x 不变
    - 否则，首先将 x 加入到**每一个**与属性 a 对应的节点，然后将 x 的权重设置为 $\tilde{r}_v \cdot w_x$
- **Random forest随机森林**

1. 对于$b = 1$到B：
   (a) 从训练数据中抽取一个大小为 N 的bootstrap引导/自举？样本 $\mathbf{Z}^*$
   (b) 对bootstrap样本 Z^* 生长一个随机森林树 T_b，通过递归重复以下步骤直到每个终端节点的树，直到达到最小节点大小 $n_{\min}$ 为止
   i. 从 p 个变量中随机选择 m 个变量
   ii. 在这 m 个变量中选择最佳变量/分割点
   iii. 将节点分成两个子节点
2. 输出树的集合 $\{T_b\}_{b=1}^{B}$。
   为了在新点 x 上做出预测：
   回归：$\hat{f}_{\text{rf}}^{B}(x) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_b(x)$
   分类：设 $\hat{C}_b(x)$ 为第b个随机森林树的类别预测，然后 $\hat{C}_{\text{rf}}^{B}(x) = \text{majority vote}\{\hat{C}_b(x)\}_{b=1}^{B}$

5. Neural Networks 神经网络

- **Model representation模型表示**



在这里，第一层的输入为x_1, x_2, x_3，每一个神经元的权重记做Θ，上标表示层数，下标与输入神经元的下标相对应，在计算过程中，我们会添加偏置项x_0和a_0，增加模型的灵活度，以更好地拟合数据。
第一层的x到第二层的a的对应关系可以表示为：
  - $a_1(2) = g(\Theta_{10}^{(1)}x_0 + \Theta_{11}^{(1)}x_1 + \Theta_{12}^{(1)}x_2 + \Theta_{13}^{(1)}x_3)$
  - $a_2(2) = g(\Theta_{20}^{(1)}x_0 + \Theta_{21}^{(1)}x_1 + \Theta_{22}^{(1)}x_2 + \Theta_{23}^{(1)}x_3)$
  - $a_3(2) = g(\Theta_{30}^{(1)}x_0 + \Theta_{31}^{(1)}x_1 + \Theta_{32}^{(1)}x_2 + \Theta_{33}^{(1)}x_3)$

其中，$g(\cdot)$代表激活函数
第二层的a到第三层的输出$h_\Theta(x)$的对应关系可以表达为：
  - $h_\Theta(x) = g(\Theta_{10}^{(2)}a_0^{(2)} + \Theta_{11}^{(2)}a_1^{(2)} + \Theta_{12}^{(2)}a_2^{(2)} + \Theta_{13}^{(2)}a_3^{(2)})$

在向量化的实现中，$x = [x_0, x_1, x_2, x_3]^\top$，$z$代表每层输出的加权和，那么第二层的$z^{(2)} = [z_1^{(2)}, z_2^{(2)}, z_3^{(2)}]^\top$，总写起来为$z^{(2)} = \Theta^{(1)}x$，即第二层的$z$是第一层$x$根据相应的权重得到的加权和，但需要注意的是此时结果未激活，需要经过激活函数$g(\cdot)$处理才得到了第二层的a，同理可得$z^{(3)} = \Theta^{(2)}a^{(2)}$，最后第三层的输出$h_\Theta(x) = g(z^{(3)})$
- **Backpropagation algorithm反向传播**（写出算法，产生输出和产生错误的公式）

> **Backpropagation Algorithm**
> Training Set $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(m)}, y^{(m)})\}$
> Set $\Delta_{ij}^{(l)} = 0$ (for all l, i, j)
> For $i = 1$ to m
>   Set $a^{(1)} = x^{(i)}$
>   Perform forward propagation to compute $a^{(l)}$ for $l = 2, 3, \ldots, L$
>   Using $y^{(i)}$, compute $\delta^{(L-1)} = (a_i^{(l)} - y) \cdot g'(z_i^{(l)})$
>   Compute $\delta^{(L-1)}, \delta^{(L-2)}, \ldots, \delta^{(2)}$

  - $a_j^{l+1} = g\left(\sum_{i=1}^{S_l} \theta_{ji}^{l} \cdot a_i^{l}\right)$

- $\delta_i^{(l)} = \frac{\partial \mathrm{E}}{\partial z_i^{(l)}} = \sum_j^{N^{(l+1)}} (\delta_j^{l+1} \cdot \Theta_{ji}^{(l)}) \cdot g'(z_i^{(l)})$

  Reset weights: $\theta_{ji}^l = \theta_{ji}^l - \alpha \cdot \delta_j^{(l+1)} \cdot a_i^{(l)}$

- **Convolutional Neural Network/CNN 卷积神经网络**
  - 一个卷积神经网络主要由以下5层组成：
    - 数据输入层/ Input layer
    - 卷积计算层/ CONV layer：卷积运算是指以一定间隔滑动卷积核的窗口，将各个位置上卷积核的元素和输入的对应元素相乘，然后再求和（有时将这个计算称为乘积累加运算），将这个结果保存到输出的对应位置
    - ReLU激励层 / ReLU layer：CNN采用的激活函数一般为ReLU，当x<0，其值为0，当x>0，其值=x
    - 池化层 / Pooling layer：池化层夹在连续的卷积层中间， 用于压缩数据和参数的量，减小过拟合，池化层通常出现在卷积层之后，二者相互交替出现，并且每个卷积层都与一个池化层一一对应
    - 全连接层 / FC layer：两层之间所有神经元都有权重连接，通常全连接层在卷积神经网络尾部。也就是跟传统的神经网络神经元的连接方式是一样的