1 线性回归

最小二乘法

$$\hat{y} = \arg\min_i \sum_i (y_i - y)^2 = \bar{y}, \quad (1)$$

最大似然估计 似然函数：$p(x|\vartheta)$ 是 ϑ 的函数，因为 iid，整体的似然函数为 $\prod_i p(y_i|\mu,\sigma^2) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$. 找到最大的整体的似然：

$$\hat{\mu} = \arg\max_\mu \prod_i p(y_i|\mu,\sigma^2) = \bar{y},$$

这和最小二乘一样！

有偏/无偏估计 方差 σ^2 的有偏估计 $\hat{\sigma^2} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{\mu})^2$，无偏估计 $\hat{\sigma^2} = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{\mu})^2$

线性回归 二维情况：

$$\arg\min_{a,b} \sum_i (y_i - (ax_i + b))^2$$

也就是式1代入 $y = ax_i + b$，其实在最大似然估计式中代入 $\mu = ax_i + b$ 也可.

Variable remapping 可能很有效果

求解有约束优化问题 考虑一个优化问题：

$$\min f(x), \text{ subject to } g(x) = 0, h(x) \le 0,$$

用拉格朗日乘数法求解：

$$L(x,\lambda,\eta) = f(x) + \lambda g(x) + \eta h(x),$$

考虑对偶函数：

$$d(\lambda,\eta) = \min_x L(x,\lambda,\eta),$$

当 $\eta \ge 0$，对偶函数是原问题的下界.

$$\max_{\lambda,\eta} d(\lambda,\eta) = \max_{\lambda,\eta} \min_x L(x,\lambda,\eta),$$

subject to $\eta > 0$, 必定有 $d^* \le f^*$（弱对偶），但是只有是凸优化且满足 KKT 条件才有强对偶 $d^* = f^*$：

$$\text{KKT cond.} \begin{cases} \nabla f + \lambda\nabla g + \eta\nabla h = 0, \\ g(x) = 0, \\ h(x) \le 0, \\ \eta \ge 0, \\ \eta h(x) = 0, \end{cases}$$

凸优化 凸集 C 满足 $\forall x,y \in C, \forall\alpha \in [0,1]$:

$$\alpha x + (1-\alpha)y \in C,$$

凸函数 f 是定义在凸集 C 的函数，满足 $\forall x,y \in C, \forall\alpha \in [0,1]$:

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y),$$

仿射函数既是凸也是凹函数. 凸优化就是凸集上最小化一个凸函数.

在凸优化中，所有的局部最优解都是全局最优解. 如果一个函数是严格凸的（上式取 $<$ 时），那么只有一个全局最优解.

对偶问题也是凸优化问题.

正则化 不信任数据时使用，可以让参数变小，一个例子：

$$\arg\min_{a,b} \sum_i (y_i - (ax_i + b))^2 + \lambda a^2,$$

这个问题是有约束优化问题. 相同问题的无约束形式如下：

$$\arg\min_{a,b} \sum_i (y_i - (ax_i + b))^2, \text{ s.t. } a^2 \le c,$$

根据 KKT 条件，要么 $\hat{a}^2 = c$，要么 $\lambda = 0$

从贝叶斯学派观点，先验项就是正则化的手段. 先验就是额外的信息（很多统计学家质疑这个）最大后验估计等于最大似然估计加上一些指定的先验项.

$$p(a,b|\{x_i\},\{y_i\},\sigma^2) \propto p(a,b)\prod_i p(y_i,x_i,a,b,\sigma^2),$$

$$p(a,b) = p(a)p(b), p(a|\sigma_a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_a^2}}\exp(-\frac{a^2}{2\sigma_a^2}),$$

最终结果会规约为正则化系数 $\lambda = \sigma^2/\sigma_a^2$ 的最小二乘.

基函数 用基函数可以将变量使用非线性方法重新映射，常见的基函数有多项式，高斯，sigmoid. 应用基函数之后，可以把回归模型写成：

$$y = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}),$$

然后用最大似然估计或者最小二乘法可得：

$$\boldsymbol{w} = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T\boldsymbol{y},$$

其中，$\Phi = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}_1(x_1) & \cdots & \boldsymbol{\phi}_M(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\phi}_1(x_N) & \cdots & \boldsymbol{\phi}_M(x_N) \end{bmatrix}$ 是设计矩阵，$(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T$ 是 Φ 的伪逆，$\boldsymbol{y} = [y_1,\ldots,y_N]^T$.

用得比较多的基函数如下：

1.多项式：$\phi_i(x) = x^{i-1}$

2.高斯：$\phi_i(x) = \exp\{-\frac{(x-\mu_i)^2}{2\sigma^2}\}$

3.sigmoid：$\phi_j(x) = \text{sigmoid}(\frac{x-\mu_i}{a})$

核函数初步：等价核 求解岭回归得到：

$$w_{\text{ridge}} = (\Phi^T\Phi + \lambda I)^{-1}\Phi^T y,$$

那么输出：

$$\hat{y} = w_{\text{ridge}}^T\phi(x) = \phi^T(x)(\Phi^T\Phi + \lambda I)^{-1}\Phi^T y$$

$$= \sum_{i=1}^N \phi^T(x)(\Phi^T\Phi + \lambda I)^{-1}\phi(x_i)y_i$$

$$= \sum_{i=1}^N k(x,x_i)y_i,$$

等价核就是 $k(x,x_i)$，是按 $x = x_i$ 对称的函数，允许负数值.

偏差-方差分解 $\mathbb{E}(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{w}}^T\cdot\phi(\boldsymbol{x}))^2 = \int(\boldsymbol{w}^T\cdot\phi(\boldsymbol{x})) - \hat{\boldsymbol{w}}^T\cdot\phi(\boldsymbol{x}))^2 p(x)\mathrm{d}x + \int e^2 p(e)\mathrm{d}e$，第二项是噪声，我们只考虑对第一项进行分析. 假设我们已经在数据集 $\mathcal{D}$ 上进行了训练，那么有参数 $\hat{\boldsymbol{w}}(\mathcal{D})$. 那么 $\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[\boldsymbol{w}^T\cdot\phi(\boldsymbol{x}) - \hat{\boldsymbol{w}}^T\cdot\phi(\boldsymbol{x}))^2 = ((\boldsymbol{w} - \boldsymbol{w}^*)\cdot\phi(\boldsymbol{x}))^2 + \mathbb{E}_{\mathcal{D}}[((\hat{\boldsymbol{w}}(\mathcal{D}) - \boldsymbol{w}^*)\cdot\phi(\boldsymbol{x}))^2]$，其中，前一项是 (bias)^2，后一项是 variance，$\boldsymbol{w}^*$ 是 $\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[\hat{\boldsymbol{w}}(\mathcal{D})]$. 也就是说：expected "loss" = (bias)^2 + variance + noise. 过度正则化的模型有很大的偏差，欠缺正则化的模型则有很大的方差. 用交叉验证可以找到合适权衡位置.

不同的正则化形式 最小二乘法：

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N (y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}))^2,$$

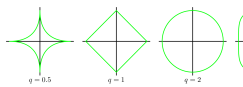
岭回归：

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N (y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}))^2 + \frac{\lambda}{2}\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w},$$

L_q-范数正则化回归：

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N (y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i))^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^M |\boldsymbol{w}_j|^q,$$

也就是，$\boldsymbol{w}$ 的可行域在 $\sum_{j=1}^M |\boldsymbol{w}_j|^q < c$ 中；$q = 2$ 时，是岭回归，$q = 1$ 时，是 LASSO 回归，有稀疏性，可以取代 $q < 1$；$q < 1$ 时，可行域不再是凸集，不再是凸优化，有稀疏性；$q = 0$ 时，是稀疏回归，是 NPH 问题.



解 LASSO 先考虑一个特殊的情况：$\Phi^T\Phi = I$，此时最小二乘的解是 $w_{\text{LS}} = \Phi^T y$

$$\min_w \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N (y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i))^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|_1$$

$$= \min_w \frac{1}{2}\sum_{i=1}^N (y_i - (w_{\text{LS}} - w_{\text{LS}} + \boldsymbol{w})^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i))^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|_1$$

$$\to \min_w \frac{1}{2}(\boldsymbol{w} - w_{\text{LS}})^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|_1$$

所以解为 $w_{\text{lasso}_i} = \text{sign}(w_{\text{LS}_i})\max(|w_{\text{LS}_i}| - \lambda, 0)$

Best subset: Hard thresholding, Ridge: Uniformly shrink, LASSO: Soft thresholding.

2 线性分类

分类算法的分类 二分类、多分类、多标签分类（多个二分类的聚合）

分类和回归 都想研究两个变量间的关系，离散情况就是分类了. 分类需要量化，保证离散的输出. 如果用普通的回归做分类，需要使用 sign 函数量化，但是这很难解.

逻辑回归 使用 sigmoid 函数 $\frac{1}{1+e^{-x}}$ 替代 sign()，易解了很多. 需要重新映射 $y_i = \frac{t_i+1}{2}$，并且使用交叉熵函数而不是平方误差之和：$\min_{\boldsymbol{w},b}\sum_i -y_i\log\hat{y_i} - (1-y_i)\log(1-y_i)$.

交叉熵 逻辑回归不是回归到特定的类别号，而是回归出一个属于某类的概率. 这个概率的似然函数 $P(t_i|x_i,\boldsymbol{w},b) = \hat{y}_i$，if $t_i = +1$ else if $t_i = -1, 1-\hat{y_i}$. 可以改写成 $\hat{y_i}^{y_i}\cdot(1-\hat{y_i})^{(1-y_i)}$，然后取对数似然即可获得交叉熵.

其他解释：有两个概率分布，一个是 ground-truth $P(t)$，一个是 predicted $Q(t)$，那么交叉熵 $C(P,Q) = \sum_t P(t)(-\log Q(t))$，熵 $H(P) = \sum_t P(t)(-\log P(t))$，K-L 散度（相对熵，两个分布的差异度，但是不对称 $D_{KL}(P||Q) \ne D_{KL}(Q||P), \ge 0$）$D_{KL}(P||Q) = C(P,Q) - H(P) = \sum_t P(t)\log\frac{P(t)}{Q(t)}$

解释逻辑回归 逻辑回归的预测值满足：

$$\begin{aligned} \hat{y_i} &= p(t_i = +1|\boldsymbol{x}_i) \\ &= \frac{p(x_i|t_i=+1)p(t_i=+1)}{p(x_i|t_i=+1)p(t_i=+1)+p(x_i,t_i=-1)} \\ &= \frac{1}{1+e^{-(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i+b)}} \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b = \ln\frac{p(\boldsymbol{x}_i|t_i=+1)p(t_i=+1)}{p(\boldsymbol{x}_i|t_i=-1)p(t_i=-1)} = \text{log odds},$$

几率，就是发生和不发生的比值，逻辑回归使用了对数几率（log odds）. 假设 $p(x|t_i=k)$ 是高斯分布，则有：

$$\text{log odds} = \Sigma^{-1}(\mu_{+1} - \mu_{-1})\boldsymbol{x}_i + b$$

指数族 指概率分布可以写成这样的分布：

$$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\vartheta}) = h(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{\vartheta})\exp(\boldsymbol{\vartheta}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})),$$

其中，$h(\boldsymbol{x})$ 是，$\boldsymbol{\vartheta}$ 是自然参数，$\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})$ 是充分统计量（为了估计分布所需要的统计量）.

分布	自然参数	充分统计
伯努利	$\ln(p/(1-p))$	x
泊松	$\ln\lambda$	x
指数	$-\lambda$	x
拉普拉斯	$-1/b$	$\lvert x-\mu\rvert$

累积函数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\vartheta}) = -\ln\boldsymbol{g}(\boldsymbol{\vartheta})$，有以下性质：

$$\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\vartheta_i} = \mathbb{E}[\boldsymbol{\phi}_i(\boldsymbol{x})]$$

$$\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial\vartheta_i\partial\vartheta_j} = \mathbb{E}[\boldsymbol{\phi}_i(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\phi}_j(\boldsymbol{x})] - \mathbb{E}[\boldsymbol{\phi}_i(\boldsymbol{x})]\mathbb{E}[\boldsymbol{\phi}_j(\boldsymbol{x})]$$

也就是说偏导数是均值、二阶偏导数是协方差，这样的分布具有最大熵的特性.

最大熵 具有最大微分熵性质的分布是高斯分布，具有最大熵性质的离散分布是均匀分布.

求解逻辑回归 其最小二乘的梯度为：

$$\nabla E(\boldsymbol{w}) = \sum_i (\hat{y_i} - y_i)\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i),$$

所以，没有解析解（封闭解）.

优化问题的数值解法

1.二阶：Newton-Raphson

2.一阶：Gradient Descent, Frank-Wolfe

牛顿法，由泰勒的二阶展开，并令一阶导数为零可得：

$$x' = x - H^{-1}\nabla f(x),$$

其中，H 是海森矩阵.

梯度下降，由泰勒一阶展开，令一阶导数为零可得：

$$x' = x - \eta\nabla f(x)$$

Frank-Wolfe，求解约束优化问题，也是一阶泰勒展开，考虑 $s_t = \min x f'(x_t)$，找到 s_t 之后，每步找到个系数 $\gamma \in (0,1)$：

$$x_{t+1} = \gamma s_t + (1-\gamma)x_t$$

费雪线性判别分析（LDA） 最大化类之间的间距、最小化类内的方差，这在几何上也行得通. 经分析其是高斯-逻辑回归的近似.

感知机 可以用梯度下降解

$$\min_{w,b} \sum_{i=1}^N (t_i - \text{sign}(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)).$$

多分类-用二分类模拟 数据集划分时总是有未分类的例子

1.one-versus-the-rest

2.one-versus-one

多分类-softmax 回归 和前面解释差不多，只不过：

$$\hat{y_{ik}} = p(t_i = k|x_i) = \frac{p(x_i|t_i=k)p(t_i=k)}{\sum_m p(x_i|t_i=m)p(t_i=m)},$$

定义 $\ln p(x_i|t_i=k)(t_i=k) = w_k^T x_i + b_k$，这就是 softmax 回归

多标签分类 就是多个二分类器连接在一块

3 SVM

硬边际 SVM 思想是最大化类之间的边际，这样对噪声不敏感且有最好的泛化能力. 找到离分类边界最近的点到边界的距离：

$$\gamma = \min_i \frac{y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b)}{\|\boldsymbol{w}\|}$$

，我们使最近的点的 $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) = 1$（通过缩放系数，这些点叫做支持向量），那么显然需要最大化 $1/\|\boldsymbol{w}\|$，也就是：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2, \text{s.t.} 1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \le 0,$$

其拉格朗日函数为：

$$L(\boldsymbol{w},\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_i \boldsymbol{\alpha}_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1),$$

套 KKT，结果如下：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{w} = \textstyle\sum_i \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \\ &\textstyle\sum_i \alpha_i y_i = 0, \\ &\alpha_i \ge 0, \\ &y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \ge 1, \\ &\alpha_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1) = 0, \end{aligned}$$

也就是，要么 $\alpha_i = 0$，要么 $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b = \pm 1$（此时 $\boldsymbol{x}_i$ 是支持向量）.

对偶问题

$$\max_\alpha \min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_i \boldsymbol{\alpha}_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1),$$

套 KKT，结果如下：

$$\begin{aligned} &\max_\alpha \textstyle\sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_i\sum_j \alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j, \\ &\text{s.t.} \forall\alpha_i \ge 0, \textstyle\sum_i \alpha_i y_i = 0 \\ &\boldsymbol{w} = \textstyle\sum_i \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i \\ &b = y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i \end{aligned}$$

软边际 SVM 如果非线性可分，我们应该使用软边际 SVM. 此时我们会对错误分类的点，还有过于靠近分类面的点进行容忍.

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2, \text{s.t. } \text{Ind}(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1) \le c_0,$$

其中，Ind 函数是指示函数，仅在小于 0 时得 1.也就是说 $y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \le 1$ 时有效. 那么可以写成另外一种形式：

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_i \xi_i, \text{s.t.} \xi_i \ge 0, y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \ge 1 - \xi_i,$$

其中，$\xi = \max(0, 1 - y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b))$，叫做松弛变量. 其拉格朗日函数如下：

$$L(\boldsymbol{w},\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \sum_i \boldsymbol{\alpha}_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1),$$

套 KKT，结果如下：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{w} = \textstyle\sum_i \alpha_i y_i \boldsymbol{x}_i, \\ &\textstyle\sum_i \alpha_i y_i = 0, \\ &\alpha_i + \beta_i = C \Rightarrow 0 \le \alpha_i \le C, \\ &\alpha_i \ge 0, \beta_i \ge 0, \xi_i \ge 0, \beta_i\xi_i = 0 \\ &y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) \ge 1 - \xi_i, \\ &\alpha_i(y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) - 1 + \xi_i) = 0, \end{aligned}$$

对偶问题如下：

$$\begin{aligned} &\max_\alpha \textstyle\sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_i\sum_j \alpha_i\alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j, \\ &\text{s.t. } 0 \le \alpha_i \le C, \textstyle\sum_i \alpha_i y_i = 0, \end{aligned}$$

也就是说，$C = +\infty$ 时，就是硬边际 SVM，样本分为三类，后两类是支持向量：

$$\begin{cases} \alpha_i = 0, & \xi_i = 0, y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) > 1 \\ 0 < \alpha_i < C, & \xi_i = 0, y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) = 1 \\ \alpha_i = C, & \xi_i > 0, y_i(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b) < 1 \end{cases}$$

核技巧 把上文中所有 $\boldsymbol{x}_i$ 换成 $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i)$，即可获得基函数版本的 SVM. 将上文中的 $\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j$ 换成 $k(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)$，可以得到核函数版本的 SVM. 其实核函数满足：

$$k(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_i)^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x}_j),$$

常见的核函数有线性 $\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j$，RBF$\exp(-\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2/2\sigma^2)$、多项式 $(1 + \boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j)^p$、sigmoid 核 $\tanh(\alpha\boldsymbol{x}_i^T\boldsymbol{x}_j + \beta)$.

使用核函数与使用基函数并无什么不同，相反核函数还较基函数容易表示一些. 满足 Mercer's condition 就是核函数，也就是说是必须是正定的：

$$\int_{\boldsymbol{x}}\int_{\boldsymbol{y}} f(\boldsymbol{x})K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})f(\boldsymbol{y})\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{y} > 0, \forall f$$

SMO 算法 序列最小优化算法，每次选择两个拉格朗日乘子作为变量，其他的乘子不变. 变量乘子都在"盒限制"中选取新值. 是坐标下降，比梯度下降简单.

4 监督学习

前面我们学习了回归、分类、密度估计，这些都是完全的监督学习. 监督学习的基本方法：收集数据（清洗）→ 决定模型形式（超参）→ 决定策略/优化目标 → 模型学习（获取参数）→ 评估模型

判别模型和概率模型 判别模型：$\hat{y} = f(x)$（分类，回归），概率模型 $q(y|x)$（分类、回归、密度估计）. 如果目标变量是离散的，就是分类问题；是连续的就是回归问题.

判别模型和生成模型 判别模型：$\hat{y} = f(x)$ 或者 $q(y|x)$，生成模型 $\hat{x} = f(y)$ 或者 $q(x|y)$. 在监督学习中，生成模型不是必要的. 如果两个模型都学习了，我们实际上完成了对 $p(x,y)$ 的估计. 密度估计在监督学习中是万能的，但是很难解决. 判别模型方法只需要处理判别模型，并且可以很容易运用基/核函数，在小数据集上表现更好. 生成模型方法需要处理判别模型和生成模型，可以使用隐变量，在处理大量数据时更加容易拟合.

损失函数 $\mathcal{L}(x_i,y_i,f)$，f 是泛函，下面是一些例子：

- 平方损失：$(y_i - f(x_i))^2$
- 绝对损失：$|y_i - f(x_i)|^2$
- 0-1 损失：if $y_i = f(x_i)$ then 0 else 1
- log 损失，通常见于概率函数（逻辑回归）：$-\log q(y_i|x_i)$
- 铰链损失，感知机：$\begin{cases} 0, \text{ if } y_i(w^T x_i + b) \ge 0, \\ -y_i(w^T x_i + b), \text{otherwise} \end{cases}$
- 铰链损失，SVM：$\begin{cases} 0, \text{ if } y_i(w^T x_i + b) \ge 1, \\ 1 - y_i(w^T x_i + b), \text{otherwise} \end{cases}$

风险函数 设定输入空间 $x \in \mathcal{X}$，输出空间 $y \in \mathcal{Y}$，假设空间 $f: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}, f(x) \in \mathcal{H}$，参数化 $f(x) \to f(x|\alpha)$，参数空间 $\alpha \in \Lambda$. 那么风险函数就是损失函数的函数 $R: \Lambda \to \mathbb{R}$：

$$R(\alpha) = \int_{x\in\mathcal{X}, y\in\mathcal{Y}} L(x,y,\alpha)p(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

风险最小化就是我们想要的，但是很难进行估计.

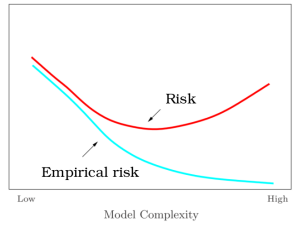
经验风险 基于训练数据，我们用经验风险估计风险：

$$R_{\text{emp}}(\alpha) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N L(x_i,y_i,\alpha),$$

其实最小二乘法、最大似然估计就是经验风险最小化 (ERM). 有很多关于 ERM 的问题：ERM 可能会导致不适定问题，因此我们使用正则化. ERM 不能包含先验信息，因此我们使用贝叶斯. ERM 不考虑数据集方差，因此我们使用偏差-方差权衡. ERM 没有考虑模型存储的成本，所以我们使用最小描述长度 (MDL). ERM 能保证风险最小化吗？

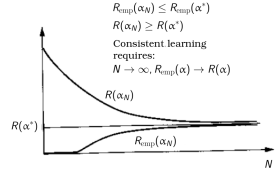
过拟合 原因如下：

- 训练数据不足
- 数据有噪声
- 模型复杂度太高



风险和经验风险 风险最小化 $\alpha^* = \arg\min_{\alpha\in\Lambda} R(\alpha)$，依靠损失函数、概率测量、参数空间. 经验风险最小化 $\alpha_N = \arg\min_{\alpha\in\Lambda} R_{\text{emp}}(\alpha)$，依靠损失函数、训练数据、参数空间.

一致学习 因为大数定理，所以风险和经验风险能够足够接近. 前面 $R_{\text{emp}}(\alpha_N) = 0$ 的最大样本数 N 点就是 VC 维的大小，代表 100% 的拟合，也就是最大能打散的样本数.



举个特殊例子，如果参数空间只有一个参数 α_0，那么根据 Hoeffding 不等式（且采用 0-1 loss）有：

$$P(R(\alpha_0) - R_{\text{emp}}(\alpha_0)) \le \exp(-2N\epsilon^2),$$

或者说，至少以 $1-\eta$ 的概率有：

$$R(\alpha_0) \le R_{\text{emp}}(\alpha_0) + \sqrt{\frac{-\log\eta}{2N}},$$

那么更加一般的情况下，假设有 M 个有限参数，我们至少以 $1-\eta$ 的概率有：

$$\sup_{\alpha\in\Lambda}(R(\alpha) - R_{\text{emp}}(\alpha)) \le \sqrt{\frac{1}{2N}(\log M - \log\eta)},$$

但是有些实用的学习模型有无限数量的参数！

函数集的熵 考虑二分类 $f(x|\alpha) \in \{-1,+1\}$，当我们给定一个数据集和一个参数空间时有多少种可能的结果？定义：$\mathcal{N}^\Lambda(x_1,x_2,\ldots,x_N) = \text{Count}\{(f(x_1|\alpha),\ldots,f(x_N|\alpha))|\alpha\in\Lambda\}$，注意，我们同样可以根据损失函数 (0-1 loss) 来定义这个数字，并且这个数字是相等的.

我们定义熵为 $H^\Lambda(N) = \mathbb{E}_{x\in\mathcal{X}}\log(\mathcal{N}^\Lambda)$，退火熵为 $H^\Lambda_{\text{ann}}(N) = \log(\mathbb{E}_{x\in\mathcal{X}}\mathcal{N}^\Lambda) > H^\Lambda(N)$，生长函数为 $G^\Lambda(N) = \log(\sup_{x\in\mathcal{X}}\mathcal{N}^\Lambda)$.

理论 1：一致学习

当且仅当 $\lim_{N\to\infty}\frac{\mathcal{N}^\Lambda}{N} = 0$ 而且 $\lim_{N\to\infty} P(|\sup_{\alpha\in\Lambda}(R(\alpha) - R_{\text{emp}}(\alpha))| > \epsilon) = 0, \forall\epsilon > 0$.

理论 2：快速收敛

如果 $\lim_{N\to\infty}\frac{H^\Lambda_{\text{ann}}(N)}{N} = 0$，那么 $P(R(\alpha_N) - R(\alpha^*) > \epsilon) < \exp(-c\epsilon^2 N), \forall\epsilon > 0, \forall N > N_0$

理论 3：当且仅当 $\lim_{N\to\infty}\frac{G^\Lambda(N)}{N} = 0$，那么学习是一致的而且收敛是快速的，不管 $p(x)$ 是什么.

VC 维度 我们可以进一步证明任何生长函数都要么满足 $G^\Lambda(N) = N\log 2$，或者 $G^\Lambda(N) \le h(\log(N/h) + 1)$，其中 h 是个整数且有 $G^\Lambda(h) = h\log 2, G^\Lambda(h+1) < (h+1)\log 2$，$h$ 就是 VC 维度. VC 维度的就是函数集可以打散的最多样本的数量 h.

在 D 维的线性分类器中，其 VC 维为 $D+1$. 此时 VC 维与其参数的数量一样.

拥有可以调节频率的 $\sin()$ 的模型，其 VC 维是无穷的！

SVM 需要考虑一个受限的线性分类器：

$$y = \begin{cases} +1, \text{if } w^T x + b \ge \Delta, \\ -1, \text{if } w^T x + b \le \Delta, \end{cases}$$

的 VC 维是 $h \le \min(D, [\frac{R^2}{\Delta^2}]) + 1$，$R$ 是能覆盖所有数据点的超球体的半径，小于线性分类器，其结合能力比较弱.

直观地说，VC 维度表征了一个函数集的强大程度. 无限 VC 维度意味着，对于特定数据集，函数集总是可以实现等于 0 的经验风险，即 ERM 不提供信息. 严格地，VC 维定义了风险的边界.

$$\epsilon = 4\times\frac{h(\log(2N/h)+1) - \log(\eta/4)}{N},$$

$$\sup_{\alpha\in\Lambda}(R(\alpha) - R_{\text{emp}}(\alpha)) \le \sqrt{\frac{\epsilon}{4}},$$

对于有限的参数空间，我们有 $\epsilon = 2\times\frac{\log M - \log\eta}{N}$

VC 维度描述了无限函数集的"有效体积". 但是许多重要分类器（决策树、神经网络）的 VC 维度尚不清楚，VC 维度分析不适用于非参数学习（例如 k-NN).

结构风险最小化 SRM 试图最小化 ERM 和置信区间的总和. SRM 是正则化的一个具体例子

$$\min_\alpha R_{\text{emp}}(\alpha) + \lambda C(\alpha)$$

其中，正则化项控制了模型的复杂度. 正则化首先被提出来处理病态问题. 有几种不同的方式来解释/执行正则化：贝叶斯、偏差-方差均衡、最小描述长度 (MDL).

贝叶斯作为正则化手段 考虑概率建模 $q(y|x)$，损失函数是对数损失 $-\log q(y_i|x_i)$. 最小化经验风险就是极大似然，最大化后验 $p(\alpha|\{x_i,y_i\}_{i=1,\ldots,N})$，需要先验 $p(\alpha)$. 因此，正则化项等价于 $-\log p(\alpha)$

贝叶斯与 SRM 对比

- 贝叶斯需要先验信息
- SRM 不要求真实模型位于假设空间内

偏差-方差均衡作为正则化手段 ERM 没有考虑数据集的方差，这是类似于正则项的地方. 但是偏差-方差均衡难以实现.

最小描述长度作为正则化手段 最小描述长度 (MDL) 原则：最佳模型是在给定数据集上能够达到最小描述长度的模型. MDL 考虑了模型存储的成本，相当于正则化项. MDL 需要适当的编码规则；但是理想的编码与概率有关.

精度、召回率、AUC 对于二元分类，我们通常希望区分不同类型的错误.

$$\text{Precision} = \frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FP}}$$

$$\text{Recall} = \frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FN}}$$

$$\text{F1-value} = \frac{2\times\text{Precision}\times\text{Recall}}{\text{Precision}+\text{Recall}}$$

最理想情况下，FN=FP=0.

还有一个 AUC，它是 ROC (receiver operating characteristic) curve 的曲线下面积. ROC 曲线的 X 轴是 $\frac{\text{FP}}{\text{FP}+\text{TN}}$，Y 轴是 $\frac{\text{TP}}{\text{TP}+\text{FN}}$（Recall）. 随机的二分类器 AUC 为 0.5，理想的为 1.

5 非参数学习

许多统计学习方法假设了个模型，其学习过程就是解出或者估计出模型的参数. 非参数学习没有明面上的模型，有时被称为基于实例/记忆的学习.

Parzen Window/核密度估计 求解（概率）密度估计问题，给出一组样本 $x_1,\ldots,x_N$，求 $p(x)$. PW 用核函数（需要满足非负、积分为 1，比如说，高斯核）求和来估计：

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N K(x|x_i),$$

其实 PW 和直方图很像，一个是经验概率密度函数，一个是用核函数的相加估计真正的 PDF. 那么我们也需要一个超参数 h 用于控制窗口大小：

$$K_h(x) = \frac{1}{h}K(\frac{x}{h})$$

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N K_h(x|x_i),$$

窗越小，越容易过拟合.

k-NN 看空间关系最近的 k 个样本，（简单/加权）投票决定样本归属哪一类. 设 $\mathcal{N}(x_i)$ 是 x_i 的邻居.

分类 $\hat{y} = \text{sign}(\sum_{x_i\in\mathcal{N}(x_i)} y_i)$

回归 $\hat{y} = \frac{1}{|\mathcal{N}(x_i)|}\sum_{x_i\in\mathcal{N}(x_i)} y_i$

1-NN 对噪声太过敏感. 用偏差-方差分解考察 k-NN 回归 $\mathbb{E}[(\hat{y}-y)^2]$, 发现同样有偏差-方差-噪声三项. $k\uparrow$, var $\downarrow$, bias $\uparrow$

稀疏编码 目的是要求解:

$$x=\sum_{i=1}^{N}\alpha_i x_i,\ \text{s.t. } \|\alpha\|_0\le k,$$

可以放宽以处理数据中的噪声或损坏.

6 无/半监督学习

有监督学习意图找出数据之中的关系以解决预测问题. 无监督学习意图发现数据中的模式, 以对数据进行描述: 比如关联分析 (啤酒尿布, 什么属性是互相关联的)、聚类 (分类的弱化版)、异常检测 (数据是否是正常的)、降维 (避免维度诅咒) 等等

维度诅咒

1.在高维空间, 距离无法区分

2.最近的邻居都在很远的地方

为什么? 因为高维空间非常大, 样本很稀疏.

K-means 是 Prototype-based clustering 的代表. 每个聚类都有个原型, 样本距离原型的距离决定了样本的类别.

算法 1 K-means 算法

Require: dataset $\{x_1,\dots,x_N\}$, number of clusters k
Ensure: clusters $q(x_i)\in\{1,\dots,k\}$
1: Initialize centroids $\{c_1,\dots,c_2\}$
2: **repeat**
3: **for** $i=1,\dots,N$ **do**
4: $q(x_i)\leftarrow\arg\min_j|x_i-c_i|$
5: **for** $i=1,\dots,k$ **do**
6: $c_j\leftarrow\text{mean}(x_i|q(x_i)=j)$
7: **until** centroids do not change

通常来说这个算法会收敛.

中心点 (也就是前面的 prototype) 也被称为码字, 组成码本. k-means 其实是解决

$$\min_{q,\{c_j\}}|x_i-c_{q(x_i)}|^2$$

k-means 算法启发式地交替更新 q 和 $\{c_j\}$. 这是贪心的, 不能保证得到全局最优解. 经常受到离群点、不同大小的簇、不同密度的簇、不规则形状的影响. 一个办法是过分割 (增大 k), 然后再后处理.

高斯混合模型 高斯混合模型是一种基于分布的聚类方法. 每一个簇代表一个单模态的分布. 计算后验概率以决定样本属于哪一个簇. 在高斯混合模型中, 每个分布是高斯分布.

1.一维情况: $p(x)=\sum_{j=1}^{k}w_j\mathcal{N}(x|\mu_j,\sigma_j^2)$, where $\sum_j w_j=1$,

2.多维情况: $p(x)=\sum_{j=1}^{k}w_j\mathcal{N}(x|\mu_j,\Sigma_j)$, where $\sum_j w_j=1$,

如果我们知道了 GMM 的参数, 那么我们可以这样计算后验概率 (也叫响应度):

$$p(q(x_i)=j)=\gamma_{ij}=\frac{w_j\mathcal{N}(x|\mu_j,\sigma_j^2)}{\sum_{j=1}^{k}w_j\mathcal{N}(x|\mu_j,\sigma_j^2)},$$

然后有 $q(x_i)=\arg\max_j\gamma_{ij}$, 所以说, 我们怎么样估计 GMM 的参数 $\theta=\{w_j,\mu_j,\Sigma_j|j=1,\dots k\}$ 呢?

问题就是要最大化 $\prod_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{k}w_j\mathcal{N}(x_i|\mu_j,\Sigma_j)$, 我们可以借鉴 K-means 的算法. 首先初始化参数, 然后计算相应的相应度, 第三步更新参数. 上面两个步骤交替进行, 直到模型收敛.

记 $\gamma_{ij}=p(q(x_i)=j)$:

$$w_j=\frac{\sum_i\gamma_{ij}}{N}$$

$$\mu_j=\frac{\sum_i\gamma_{ij}x_i}{\sum_i\gamma_{ij}}$$

$$\Sigma_j=\frac{\sum_i\gamma_{ij}(x_i-\mu_j)^T(x_i-\mu_j)}{\sum_i\gamma_{ij}}$$

EM 算法 引入隐变量 $z_i\in\{1,\dots,k\}$, 代表 x_i 对应的正确的簇, 那么要最大化 $\prod_i p(x_i,z_i|\theta)=\prod_i\prod_j(w_j\mathcal{N}(x_i|\mu_j,\Sigma_j))^{\mathcal{I}(z_i=j)}$, 或者 $\sum_i\sum_j\mathcal{I}(z_i=j)\log(w_j\mathcal{N}(x_i|\mu_j,\Sigma_j))$

EM 算法分为交替的两步: E-step: Given θ^t, calculate the expectation of object function with eliminating latent variables. Note that γ_{ij} is the expectation of $\mathcal{I}(z_i=j)$, so we have $\sum_i\sum_j\gamma_{ij}\log(w_j\mathcal{N}(x_i|\mu_j,\Sigma_j))$

M-step: Maximize the expectation of objective function to find a new estimate of parameters θ^t. Then we can derive the equations of GMM

算法 2 EM 算法

Require: $\hat{\theta}=\max_\theta p(X,Z|\theta)$, where Z is unobserved
1: $t\leftarrow0$, initialize θ^0
2: **repeat**
3: Given θ^t, calculate the expectation of $\log p(X,Z|\theta)$ with eliminating Z, i.e. $Q(\theta,\theta^t)=\mathbb{E}_{Z\sim p(Z|X,\theta^t)}\log p(X,Z|\theta)$
4: $\theta^{t+1}\leftarrow\arg\max_\theta Q(\theta,\theta^t)$
5: **until** convergence
6: $\hat{\theta}=\theta^{t+1}$

EM is a greedy algorithm, it will definitely converge but cannot ensure global optimum.

Set different initial values to escape from a local optimum. We may not maximize the expectation (i.e. the Q function); instead, increasing the Q function (e.g. by gradient ascent) is okay; this can be helpful if the Q function is not easy to maximize.

不同的聚类方法 基于密度的聚类: Mean-shift: 局部密度的均值来替代; DBSCAN: 对于每个点, 如果邻点的数目小于一个阈值, 那么这个点就是噪声. 否则, 属于一个簇/基于连通性的聚类/Agglomerative clustering/Divisive clustering

PCA 给出一个 $x\in\mathbb{R}^D$, 我们想要找到一个矩阵 $P\in\mathbb{R}^{K\times D}$, 其中 $K<D$, 然后我们可以用这个矩阵 P 降维 $x\colon y=Px, y\in\mathbb{R}^K$.

第一步是 $\bar{x}=\frac{\sum_i x_i}{N}$, 令 $X=\begin{pmatrix}(x_1-\bar{x})^T\\ \cdots\\ (x_N-\bar{x})^T\end{pmatrix}$, 第二步是 $C=X^TX=U\Lambda U^H$, 这是个协方差阵, 可以找出其特征值和特征向量, 第三步是选择最大的 K 项特征值, 并且选择对应的特征向量组成 P, $y_i=P(x_i-\bar{x})$

核 PCA 对于非线性, 使用核函数实现. $\Phi=\begin{pmatrix}\phi_i^T\\ \cdots\\ \phi_N^T\end{pmatrix}$, 其中 $\phi_i=\phi(x_j)$. 我们关心的是 $K=\Phi\Phi^T$.

流形学习 流形是一种拓扑空间, 它在每一点附近都与欧几里得空间相似. 一维流形包括线和圆, 但不包括"8". 二维流形也被称为曲面, 如球体. 流形的内在维度可以低于它的驻留空间. 流形学习是为了从高维数据中识别这种低维结构. 对于流形学习, 用测地线距离代替高维欧几里得距离.

PageRank 基于 Random Walk, 用来定义网页的相对重要度的.

算法 3 PageRank 算法

Require: A graph of webpages and hyperlinks
Ensure: Relative importance values of all webpages
1: $t\leftarrow0$, initialize r_i^0 uniformly
2: **repeat**
3: $\forall j, r_j t+1\leftarrow0$
4: $\forall i,j,\text{if } w_{ij}\neq0, r_j^{t+1}=r_j^{t+1}+\frac{w_{ij}}{\sum_k w_{ik}}r_i^t$
5: $\forall j, r_j^{t+1}\leftarrow\beta r_j^{t+1}+\frac{1-\beta}{N}$
6: **until** convergence

7 组合学习

建立多个个体/基础学习器, 然后将它们组合起来. 当这些基础学习器好而不同的时候, 组合学习很有效果. 但是实际中, 基础模型们很难做到独立. 我们希望每个基础模型尽可能不同, 但是多元化和性能是冲突的. 有两种形式的组合学习:

1.Boosting: 每个基础模型都顺序地训练, 整体模型更加关注模型之前处理得不太好的样本.

2.Bagging: 每个模型都是独自、并行地训练, 整体模型尝试使每个基础模型的训练数据多样化.

Boosting

$$f_m(x)=f_{m-1}(x)+\alpha_m G_m(x),$$

其中 $G_m(x)$ 是基础模型, 那么整体模型是

$$f(x)=\sum_m^{}\alpha_m G_m(x)$$

Boosting 回归树

$$f(x)=\sum_m^{}\alpha_m T(x,\theta_m),$$

其中, $T(x,\theta_m)=\begin{cases}c_{m1}, & \text{if } x\le t_m,\\ c_{m2}, & \text{if } x>t_m,\end{cases}$ 是决策树桩. 我们利用残差训练该模型, 算法如下:

算法 4 Step-wise learning algorithm

Require: $\{x_n,y_n\}$
Ensure: $\{\alpha_m,\theta_m\}$
1: **for** $m=1,\dots,M$ **do**
2: Calculate residue $r_n{}^{(m)}=y_n-f_{m-1}(x_n)$
3: Fit the residue with decision stump $T(x,\theta_m)$
4: Set $\alpha_m=1$
5: Update the model $f_m(x)=f_{m-1}(x)+\alpha_m T(x,\theta_m)$

Adaptive Boosting 分类模型, 目标是优化:

$$\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}(y_n,f(x_n))=\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n\times f(x_n)),$$

最小化 $\sum_{n=1}^{N}\mathcal{L}(y_n,f(x_n))=\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n\times f(x_n))$, 也就是:

$$\sum_{n=1}^{N}\exp(-y_n\times[f_{m_1}(x_n)+\alpha_m G_m(x_n)]),$$

算法 5 AdaBoost Algorithm

Require: $\{x_n,y_n\}$
Ensure: $f(x)=\sum_m\alpha_m G_m(x)$
1: **for** $m=1,\dots,M$ **do**
2: Calculate weights of samples: $w_{mn}=\exp(-y_n\times f_{m-1}(x_n))$ and then normalize $w_{mn}\leftarrow\frac{w_{mn}}{\sum_n w_{mn}}$
▪ $m=1$, then $w_{1n}=1/N$
▪ $w_{(m+1)n}\propto w_{mn}\exp(-y_n\alpha_m G_m(x_n))$
3: $G_m(x)$ is to minimize $e_m=\sum_{n=1}^{N}w_{mn}\mathbb{I}(y_n\neq G_m(x_n))$
4: $\alpha_m=\frac{1}{2}\log\frac{1-e_m}{e_m}$

如果一个样本被正确分类, 其权重就会减少 $exp(-alpha_m)$. 如果一个样本被错误地分类, 它的权重会增加 $exp(-alpha_m)$. 因此, 下一个基础分类器将专注于错误分类的样本.

Bagging = bootstrap aggregating 通过自举采样生成多个数据集. 生成 M 个数据集, 用每个数据集来训练一个模型. 然后对它们进行平均: $f(x)=\frac{1}{M}\sum_m G_m(x)$, 可以并行学习.

8 决策树

树模型由一组条件和一组基本模型组成, 以树的形式组织起来. 每个内部节点都是一个针对输入属性的条件——对输入空间的划分. 每个叶子节点就是一个基本模型, 回归时最简单为一个常数, 分类时最简单为一个类别.

构建决策树 是个 NPH 问题. 所以穷尽搜索不可行, 我们应该用启发式方法, 如下:

算法 6 Hunt's algorithm

Require: A set of training data $\mathcal{D}=\{x_n,y_n\}$
Ensure: A classification tree or regression tree T
1: **function** HuntAlgorithm($\mathcal{D}$)
2: **if** $\mathcal{D}$ need not or cannot be divided **then**
3: **return** a leaf node
4: **else**
5: Find an attribute of x, say x_d, and decide a condition $g(x_d)$
6: Divide $\mathcal{D}$ into $\mathcal{D}_1,\mathcal{D}_2,\dots$, according to the output of $g(x_d)$
7: $T_1=\text{HuntAlgorithm}(\mathcal{D}_1), T_2=\text{HuntAlgorithm}(\mathcal{D}_2),\dots$
8: Let $T_1,T_2,\dots$ be the children of T
9: **return** T

纯洁度/不纯度 描述一个集合容易/不容易分为一类的程度. 下面是几种不纯度 (越小越好) 测量方法, 用 p_i 表示类 i 的占比:

1.Entropy: $-p_0\log p_0-p_1\log p_1$

2.Gini index: $1-p_0^2-p_1^2$

3.Misclassification error: $\min(p_0,p_1)$

我们还要找到怎么样决定对一个属性进行划分. 当然是纯洁度增益越大越好. 这里给出了三个计算增益的方法, 其中 H 是上面的熵, G 是 Gini:

1.Information gain: $g=H(\mathcal{D})-\sum_i\frac{|\mathcal{D}_i|}{|\mathcal{D}|}H(\mathcal{D}_i)$

2.Information gain ratio to suppress too many subsets: $gr=\frac{g}{-\sum_i\frac{|\mathcal{D}_i|}{|\mathcal{D}|}\log\frac{|\mathcal{D}_i|}{|\mathcal{D}|}}$

3.Gini index gain: $gig=G(\mathcal{D})-\sum_i\frac{|\mathcal{D}_i|}{|\mathcal{D}|}G(\mathcal{D}_i)$

树的剪枝 采用算法6, 我们可以构建一个预测尽可能准确的树, 但是可能发生过拟合. 有两个方案控制树的复杂度:

1.早停止: 停止划分, 如果增益小于阈值, 或者树太深、集合太小

2.树剪枝: 从树中移除一些分支, 以降低总体的误差 $C_\alpha(T)=C(T)+\alpha|T|$, 其中 $C(T)$ 是经验风险 (比如预测错误率), $|T|$ 是树的复杂度 (比如说树的高度).

回归决策树 最简单的情况树每个叶子节点代表一个常数. 每次寻找一个属性并且选择一个划分条件, 最小化误差:

$$\min_{d,t,c_1,c_2}\left[\sum_{x_{id}\le t}(y_i-c_1)^2+\sum_{x_{id}>t}(y_i-c_2)^2\right]$$

最终这个回归树是个分段常函数.

回归决策树和 boosting 方法的等价 Hunt 算法: "分而治之", 条件 + 基础模型. Boosting: 基础模型的线性组合. 本质上是一样的, 得到的东西也一样.

树模型的实现

▪ ID3: 用 information gain

▪ C4.5: 用 information gain ratio

▪ CART: 用 Gini index (分类) 或者 quadratic cost(回归, 上面有说), 只用 2 路划分.

根据 $C_\alpha(T)=C(T)+\alpha|T|$, 逐渐增大 α 以获得不同的树, 然后用交叉验证寻找最佳的 α.

随机森林 - 决策树和集合学习的结合

- 根据装法, 首先生成多个数据集 (bootstrap samples), 每个数据集都会产生一个树模型

- 在构建树的过程中, 在分割时考虑一个随机的特征子集

9 概率图模型

生成模型和判别模型 生成模型是学习估计 $p(x,y)$, 也就是 x 和 y 的联合分布. 判别模型是学习、估计 $p(y|x)$, 或者更加简单的 $y=f(x)$. 我们只需要建模 x 与 y 之间的关系. 在分类问题中, 生成模型通常比判别模型更加难, 就像写作比阅读难一样. 概率图模型通过分解简化联合分布

朴素贝叶斯 分类模型. 朴素贝叶斯用数据直接估计 $p(y)$ 和 $p(x|y)$, 以求得 $p(y|x)$.

$$p(y|x)\propto p(y)p(x|y)=p(y)\prod_{i=1}^{D}p(x_i|y)$$

拉普拉斯平滑 为了让 $p(y)$ 和 $p(x_i|y)$ 不等于 0, 有必要进行平滑操作, 假设 $N()$ 是数据集中满足某种条件的数据的个数, $C()$ 是某一维数据的类别数目:

$$p'(x_i=a|y=b)=\frac{N(x_i=a,y=b)+\alpha}{N(y=b)+\alpha\times C(x_i)}$$

贝叶斯网络 是有向无环图. 若一节点 d 有来自点 (a,b,c) 的进入该节点的边, 那么: $p(a,b,c,d)=p(d|a,b,c)p(a,b,c)$

D-划分和条件独立 假设我们要考虑 $p(A,B|C)$ 其中 A, B, C 是不相交的随机变量集, 将 C 的节点标记为"已知", 对于每一对 $a\in A, a\in B$, 找出从 a 到 b 的所有可能路径, 并判断这条路径是否被阻塞. 无论箭头方向如何, 路径都由连续的边组成.

1.如果一个节点是公共父节点或链中节点, 并且该节点是**已知**的, 则路径被阻塞.

2.如果一个节点是公共子节点, 并且该节点及其所有后代都是**未知**的, 则路径被阻塞.

如果所有的路径都被阻塞了, 那么 $A\perp\!\!\!\perp B|C$, 否则 $A\not\perp\!\!\!\perp B|C$

马尔可夫盘 使用条件独立, 我们可以证明:

$$p(A|\bar{A})=p(A|\partial A),$$

其中, $\bar{A}$ 是 A 的补集; ∂A 是 A 的邻域, 包括: 父节点, 子节点, 子的其他父节点. 这样的邻域叫做马尔可夫盘.

马尔可夫随机场 无向图模型, 没有直接的条件分布. 条件独立的要点是若去掉 C 中节点, A 和 B 之间没有路径相通, 那么 $A\perp\!\!\!\perp B|C$. 其马尔可夫盘就是直接的邻居.

马尔可夫随机场定义了相关, 但不是分布. - 如果 x_i 和 x_j 不相连, 那么我们就不需要定义 $p(x_i,x_j|\{x_i,x_j\})$, 因为它们是条件独立的. 我们只需要考虑连接的节点. 团: 一个节点集合, 其中任何两个节点都是相连的. 最大团: 在图中具有最大可能大小的团. 联合分布只能在团上定义, 最终在最大团上有个分布. 实践中, 我们常常用指数族作为联合分布.

转换贝叶斯网络到马尔可夫随机场 有向边改为无向边, 有共同子节点的父节点间加上无向边. 转换后, 每个节点的马尔可夫盘保持不变, 有一些信息丢失. 一个马尔可夫随机场可对应多个贝叶斯网络, 也可能无对应.

因子图 因子用黑方块表示, 每个因子是个函数或者概率表达式, 其参数是黑方块所连接的节点. 每个节点也必定连接相关的因子.

信念传播: 和-积算法 有两种信息: 从变量到因子, 从因子到变量.

从变量到因子: $\mu_{x_m\to f_s}(x_m)=\prod_{l\in\text{ne}(x_m)\setminus f_s}\mu_{f_l\to x_m}(x_m)$, 也就是 f_l 是除 f_s 以外的所有因子.

从因子到变量: $\mu_{f_s\to x}(x)=\sum_{x_1}\cdots\sum_{x_M}f_s(x,x_1,\dots,x_M)\prod_{m\in\text{ne}(f_s)\setminus x}\mu_{x_m\to f_s}(x_m)$, 也就是 x_m 是除 x 以外的所有因子.

对于连续变量, 和-积算法仍然有效, 用 PDF 代替了概率分布. 如果因子图是一棵树 (即没有循环), 和-积算法是精确的. 如果因子图包含循环, 可以使用循环信念传播法. 需要决定一个消息传递时间表. 不一定能收敛. 在很多情况下, 我们退而求其次, 进行近似推理.

10 深度学习

M-P 神经元模型 最基本的神经网络单元, 连接具有权值, 有激活函数.

$$y=f(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}-\theta),$$

其中, 激活函数可以是 sign 或者 sigmoid. 感知机不能处理线性不可分的分类问题.

MLP 多层感知机, 中间层被称为隐藏层. 有非线性的激活函数.

Feedforward Network 每层都是全连接层, 没有同层连接 (RNN)、跳层连接 (ResNet). 输入层没有激活函数, 隐藏层和输出层一般有激活函数.

同层连接 RNN 带来了同层的连接, 使得每个 timeslot 可以使用之前的 timeslot 的输出/隐藏状态.

跳层连接 ResNet 引入了残差连接, DenseNet 引入了稠密连接.

BP 和梯度下降 和前面没有什么不同. 值得一提的是批处理——这是在随机梯度下降和传统梯度下降间的 tradeoff.

动量 动量就是上一次梯度下降的梯度信息, 有一阶和二阶 (就是一阶梯度信息的平方) 之分. 如果在梯度下降中加入动量, 通常能加快训练速度, 提升训练精度. 几乎所有的优化器都用了动量

避免过拟合 只要有一个隐藏层, 一个 FFN 就可以在任意精度上拟合任意的连续函数. 所以神经网络非常容易过拟合. 避免过拟合有以下方法:

1.使用验证集, 以早停止

2.使用正则化

3.Dropout 和 DropConnect

CNN 我不想瞎手了……

非监督学习

SOM 竞争学习: 在输出层, 只有一个神经元被激活, 其他神经元被抑制. (输出类似 One-Hot) 输出层是 2D. 可用于降维.

Hopfield network 神经元完全相互连接. 通常, 约束是与自身无连接且连接是对称的. 每个神经元的状态是二进制的 (-1 或 1). 它考虑了联想记忆.

Boltzmann machine 类似于 Hopfield 网络, 但区分可见和隐藏单元.

Restricted Boltzmann machine 基于能量的模型. 只允许可见和隐藏神经元之间的连接, 是一个二分图.

DBN 可以用于降维. DBN 也代表了"自动编码器"的策略, 它试图从无监督学习中受益.

PixelCNN 用概率来刻画图像

Variational auto-encoder 将自动编码器转换为概率框架.

GAN 拥有生成器和判别器.