

Table of Contents

序言	1.1
第一章 工具	1.2
第一节 Gitbook的安装与使用	1.2.1
第二节 编辑数学公式	1.2.2
库函数的使用与说明	1.2.3
库函数地址	1.2.4
代码自动测试Gtest	1.2.5
第二章 C++	1.3
基本语法	1.3.1
模板类与模板函数	1.3.2
COM	1.3.3
驱动	1.3.4
第五章 算法	1.4
第一节 插值	1.4.1
第二节 最长递增子序列	1.4.2
LU分解	1.4.3
SVD	1.4.4
霍夫曼编码	1.4.5
最小生成树Prim算法	1.4.6
最短路径Dijkstra算法	1.4.7
快速排序与二叉树	1.4.8
医学图像重建算法	1.4.9
第六章 最优化	1.5
最优化的优缺点及其改进方案	1.5.1
Levenberg-Marquardt算法	1.5.2
Quasi-Newton 拟牛顿法	1.5.3
信赖域方法	1.5.4
参数调节	1.5.5
ResINN	1.5.6
linear search	1.5.7
最速下降法, 牛顿法, LBFGS	1.5.8

线性与非线性方程组解的稳定性分析	1.5.9
第七章 机器学习	1.6
机器学习面试问题集	1.6.1
机器学习学习任务	1.6.2
机器学习原理	1.6.3
SVM, KKT条件与核函数方法	1.6.4
SVM	1.6.4.1
KKT条件与对偶	1.6.4.2
核函数方法	1.6.4.3
决策树与集成学习	1.6.5
决策树	1.6.5.1
集成学习	1.6.5.2
贝叶斯方法	1.6.6
逻辑回归与最大熵模型	1.6.7
高斯混合模型	1.6.8
隐马尔科夫模型	1.6.9
DNN-HMM混合系统	1.6.10
马尔科夫链蒙特卡洛方法	1.6.11
降维与无监督学习	1.6.12
分类问题与方法	1.6.13
回归问题与方法	1.6.14
K均值EM等聚类算法	1.6.15
正则化方法原理与实践	1.6.16
机器学习项目	1.6.17
多元回归分析	1.6.18
矩阵微分	1.6.19
正则化	1.6.20
训练神经网络的经验	1.6.21
Notes	1.6.22
特征工程	1.6.23
CRF	1.6.24
第八章 推荐系统	1.7
推荐系统概述	1.7.1
FM(Factorization Machines),FFM	1.7.2
Learning To Rank LTR	1.7.3

第九章 Kaggle	1.8
Titanic	1.8.1
第十章 问题	1.9
基本ML问题	1.9.1
模型评估问题	1.9.2
降维的方法与原理	1.9.3
非监督学习问题	1.9.4
集成学习问题	1.9.5
前向神经网络问题	1.9.6
循环神经网络问题	1.9.7
生成式对抗网络问题	1.9.8
强化学习问题	1.9.9
神经网络的种类适用场景与优缺点	1.9.10
基本C++问题	1.9.11
Windows C++	1.9.12
常规算法问题	1.9.13
常见问题	1.9.14
STL	1.9.15
结束	1.10

序

■日知录是为效法顾炎武的《日知录》而做，里面会记录自己在学习与工作中学到的东西，该书的目的是为了打造一本属于自己的百科全书，也是自己思想体系的体现。最终里面的每一章可能代表一个方向与学科，比如C++，C#最终会成为一章，经济，中国史会成为一章。如果经济学里面记录的内容不多，就编成一章，如果内容多了，则会编成多章，比如宏观经济学，微观经济学，计量经济学。这样，最终一门大的学科，比如，经济学，就编成了一卷。

■自然科学的基础是数学，数学是让一门学科严格化，并能称之为科学的基础。因此，本书的主线是以数学为基础，以编程为技术工具来高效的解决自然科学(如物理，半导体，光学，声学，分子化学)，商业与经济活动(推荐系统，计算广告，图像处理，信号处理，金融)中的问题。要践行毕达哥拉斯学派所谓的“世界的本质是数的理念”，换句话说，数学是所有学科唯一的通用语言。不同学科会分享相同的数学方法，这也就本书要总结的一个方面。不同学科的区别只是研究，处理问题的不同，而没有数学方法上的不同。就像随机偏微分方程可以用于量子力学，也可以用于金融；时间序列分析可以用于语音，数字信号处理，也可以用于金融。

■本书的是自己学习的总结，更是自己思想体系不断进化的体现。因此，这本书会一直去增补，完善，没有停止的说法。在可以预见的未来，本书会经历几个阶段。第一阶段是知识的学习与记录；第二阶段是知识的运用与不同知识原理的提炼；第三阶段就是知识的创造过程，也就是为解决一类问题而创造出一个新的方法。三阶段简单来说，就是把书读厚，把书读薄，再把书读厚的阶段。就时间尺度来说，第一阶段是30周岁以前，第二阶段是30岁以后的三年，第三阶段就是33岁以后的岁月。正如“日知其所亡，月无忘其所能”，自己要做到每一个总结，同时安排下一年的任务。

■李品品 2018年

第一章：工具

第一节 Gitbook的安装与使用

Gitbook是Github旗下的产品，它提供书籍的编写与管理的功能，一个核心特征就是，它管理书也像管理代码一样，可以对数据进行fork,建立新的branch,使得书也可以进行版本迭代。也可以与多人合作，来编辑，更新书籍，适合单人创作或者多人共同创作。怎么利用gitbook生成自己的书，可以参考如下链接 <https://www.jianshu.com/p/cf4989c20bd8>

<https://www.cnblogs.com/Lam7/p/6109872.html>

在安装好Node.js与gitbook之后，我们可以利用gitbook的GUI创建一本书，写入一些章节，然后保存，然后在cmd到该书summary.md所在的路径，然后再利用gitbook init进行初始化，然后再利用gitbook serve在浏览器上对书内容进行访问。当然，个gitbook serve这一步会出错，会出现fontsettings.js找不到的情况，我们需要修改

C:\Users\pili.gitbook\versions\3.2.3\lib\output\website\copyPluginAssets.js，设置confirm: false，再重启个gitbook serve就可以了。详见<https://github.com/GitbookIO/gitbook/issues/1309>然后就可以在<http://localhost:4000>访问书籍了

The screenshot shows a browser window with the URL localhost:4000/chapter1. A search bar at the top contains the query "fontsettings.js". Below the search bar, there is a message "No results". The main content area displays the first chapter of a book. The chapter title is "第一章" (Chapter 1). The content includes a link to a Jianshu article and a detailed description of the setup process for using gitbook.

Type to search

Find on page fontsettings.js No results

Introduction

第一章

第一节

第二节

第二章

第一节

第二节

结束

第一章

怎么利用gitbook生成自己的书，可以参考如下链接 <https://www.jianshu.com/p/cf4989c20bd8>

在安装好Node.js与gitbook之后，我们可以利用gitbook的GUI创建一本书，写入一些章节，然后保存，然后在cmd到该书summary.md所在的路径，然后再利用gitbook init进行初始化，然后再利用gitbook serve在浏览器上对书内容进行访问。当然，个gitbook serve这一步会出错，会出现fontsettings.js找不到的情况，我们需要修改C:\Users\pili.gitbook\versions\3.2.3\lib\output\website\copyPluginAssets.js，设置confirm: false，再重启个gitbook serve就可以了。详见<https://github.com/GitbookIO/gitbook/issues/1309>然后就可以在<http://localhost:4000>访问书籍了

Published with GitBook

如果想让章节有层次感的显示，则可以在summary.md中设置

The screenshot shows the GitBook Editor interface. The left sidebar lists files: assets, chapter1, chapter2, chapter3, chapter4, end, .gitignore, chapter1.md, README.md, and SUMMARY.md (which is selected). The main area shows the content of SUMMARY.md:

```
* [Introduction](README.md)
* [第一章 工具](chapter1/README.md)
  * [第一节 Gitbook的安装与使用](chapter1/section1.md)
  * [第二节](chapter1/section2.md)
* [第二章 代码](chapter2/README.md)
  * [第一节 C++](chapter2/section1.md)
  * [第二节 C#](chapter2/section2.md)
* [第三章 日志](chapter3/README.md)
  * [第一节 任务](chapter3/section1.md)
  * [第二节 问题](chapter3/section2.md)
  * [第三节 需要做的事情](chapter3/section3.md)
* [第四章 XXX](chapter4/README.md)
  * [第一节 比特币代码分析](chapter4/section1.md)
    * [第一段 VS2017下调试Bitcoincode](chapter4/section1/part1.md)
    * [第二节 密码学笔记](chapter4/section2.md)
    * [第三节 比特币下的区块链](chapter4/section3.md)
* [结束](end/README.md)
```

The right panel shows the generated 'Summary' page with the same hierarchical structure, displayed in a clean, organized format.

Error: Error with command "svgexport"

在cmd中安装:npm install svgexport -g

生成pdf

gitbook pdf ./ ./ML2.pdf

换行

一行之后加两个以上的空格。

同步

在gitbook 客户端book->Repository Setting...中添加Gitbook中书的地址即可：

<https://github.com/Li-Simon/Gitbook.git> 一般是在gitbook中先创建一本书，然后再copy到本地。

第二节 编辑数学公式

mathjax

可以参考https://598753468.gitbooks.io/tex/content/fei_xian_xing_fu_hao.html
数学公式的编辑类似于Latex.

需要安装mathjax

```
npm install mathjax  
安装特定版本的npm install mathjax@2.6.1
```

首先在书籍project的最顶成新建一个book.json,内容如下

```
{  
    "gitbook": "3.2.3",  
    "plugins": ["mathjax"],  
    "links": {  
        "sidebar": {  
            "Contact us / Support": "https://www.gitbook.com/contact"  
        }  
    },  
    "pluginsConfig": {  
        "mathjax":{  
            "forceSVG": true  
        }  
    }  
}
```

然后再用gitbook install命令安装mathjax

安装之后gitbook就出现编译错误了，也不能编译生成pdf文件。不论mathjax是哪个版本，从2.5开始都出错。下面选择用katex

gitbook pdf ./ mybook.pdf (./ mybook.pdf 之间有空格)

<http://ldehai.com/blog/2016/11/30/write-with-gitbook/>

no such file fontsettings.js,在上一节有讲怎么处理。

安装Katex

<https://github.com/GitbookIO/plugin-katex>

1. 在你的书籍文件夹里创建book.json
2. 里面写入如下内容

```
{  
  "plugins": ["katex"]  
}
```

4. 运行安装 gitbook install就安装好了(安装很慢, 一个小时), 可以换个地方安装, 只要把 book.json换个地方, 再在这个folder安装gitbook install, 然后把node_modules 拷到你书籍所在的folder就可以。Katex支持的公式<https://khan.github.io/KaTeX/docs/supported.html> <https://utensil-site.github.io/available-in-katex/>

中文在cmd中乱码的问题：

1. 打开cmd, 输入chcp 65001chcp 65001
2. 右击cmd上方, 选择属性-->字体-->SimSun-ExtB就可以显示了。

语法高亮

```
Supported languages  
This is the list of all 120 languages currently supported by Prism, with their corresponding  
alias, to use in place of xxxx in the language-xxxx class:
```

```
Markup - markup  
CSS - css  
C-like - clike  
JavaScript - javascript  
ABAP - abap  
ActionScript - actionscript  
Ada - ada  
Apache Configuration - apacheconf  
APL - apl  
AppleScript - applescript  
AsciiDoc - asciidoc  
ASP.NET (C#) - aspnet  
AutoIt - autoit  
AutoHotkey - autohotkey  
Bash - bash  
BASIC - basic  
Batch - batch  
Bison - bison
```

```
Brainfuck - brainfuck
Bro - bro
C - c
C# - csharp
C++ - cpp
CoffeeScript - coffeescript
Crystal - crystal
CSS Extras - css-extras
D - d
Dart - dart
Diff - diff
Docker - docker
Eiffel - eiffel
Elixir - elixir
Erlang - erlang
F# - fsharp
Fortran - fortran
Gherkin - gherkin
Git - git
GLSL - glsl
Go - go
GraphQL - graphql
Groovy - groovy
Haml - haml
Handlebars - handlebars
Haskell - haskell
Haxe - haxe
HTTP - http
Icon - icon
Inform 7 - inform7
Ini - ini
J - j
Jade - jade
Java - java
Jolie - jolie
JSON - json
Julia - julia
Keyman - keyman
Kotlin - kotlin
LaTeX - latex
Less - less
LiveScript - livescript
LOLCODE - lolcode
Lua - lua
Makefile - makefile
Markdown - markdown
MATLAB - matlab
MEL - mel
Mizar - mizar
Monkey - monkey
NASM - nasm
nginx - nginx
```

```
Nim - nim
Nix - nix
NSIS - nsis
Objective-C - objectivec
OCaml - ocaml
Oz - oz
PARI/GP - parigp
Parser - parser
Pascal - pascal
Perl - perl
PHP - php
PHP Extras - php-extras
PowerShell - powershell
Processing - processing
Prolog - prolog
.properties - properties
Protocol Buffers - protobuf
Puppet - puppet
Pure - pure
Python - python
Q - q
Qore - qore
R - r
React JSX - jsx
Reason - reason
reST (reStructuredText) - rest
Rip - rip
Roboconf - roboconf
Ruby - ruby
Rust - rust
SAS - sas
Sass (Sass) - sass
Sass (Scss) - scss
Scala - scala
Scheme - scheme
Smalltalk - smalltalk
Smarty - smarty
SQL - sql
Stylus - stylus
Swift - swift
Tcl - tcl
Textile - textile
Twig - twig
TypeScript - typescript
Verilog - verilog
VHDL - vhdl
vim - vim
Wiki markup - wiki
Xojo (REALbasic) - xojo
YAML - yaml
```

$$\hat{f} \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y^i - h_\theta(x^i)) x_j^i$$

http://www.aleacubase.com/cudalab/cudalab_usage-math_formatting_on_markdown.html

<https://www.zybuluo.com/codeep/note/163962#3%E5%A6%82%E4%BD%95%E8%BE%93%E5%85%A5%E6%8B%AC%E5%8F%B7%E5%92%8C%E5%88%86%E9%9A%94%E7%AC%A6>

库函数的使用与说明

开源库的使用说明：

如何选择开源许可证？



Github Fork:



机器学习算法工程师速查表大全 <https://github.com/kailashahirwar/cheatsheets-ai>

库函数地址

- [] C:\Data\Group\ShareFolder 是windows, linux的共享文件夹, 有关Linux开发的文件都在这个文件夹, 比如DeepLearning C:\Data\Group\ShareFolder\ToolsLibrary 存放的是Eigen, OpenCV库
- [] <https://github.com/tensorflow/models> 里面有很多models, 可以用来实际使用的。

Eigen

[API document](#) 整理一篇文章, 阐述Eigen有哪些功能, 能用来看做啥。OPT++

数据集

<https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.html>

Google Test

[Google C++ 单元测试框架](#) 核心是添加include与lib路径, 以及把运行时库设置成MTd 对工程名
右键->属性->配置属性->C/C++->代码生成->运行时库:与前面gtest配置一样, 选择MTd; 代码位
于:C:\Data\ShareFolder\Works\Miura\googletest-master

第六章 C++

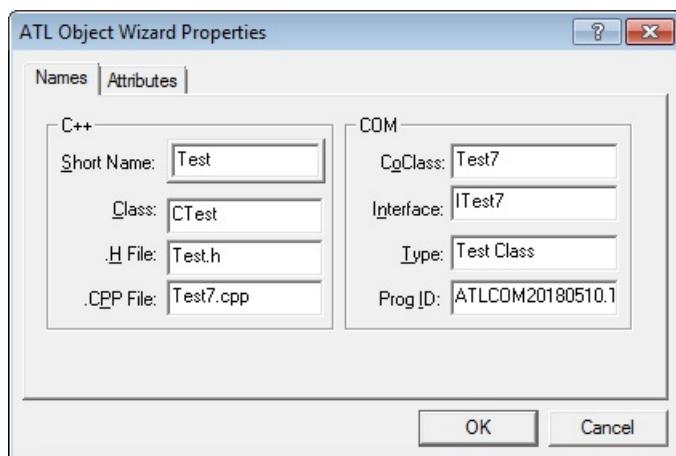
第一节 基本语法

接口：即抽象类，就是包含至少一个纯虚函数的类

```
一个类里面实现多种接口Iinterface, IinterfaceB, IinterfaceC
IE84TPTimeOutUIAck : public IUnknown
{
public:
    virtual HRESULT STDMETHODCALLTYPE ResponseTpTimeOutUIAck(
        /* [in] */ short nPortNo,
        /* [in] */ short nTpNo) = 0;

};
```

New ATL object 时，选择simple object，然后属性设置如下：则可以实现一个类中有多组接口函数。



C++通过ATL来实现接口的继承。

```
// Cr3halObj
class ATL_NO_VTABLE Cr3halObj :
    public CComObjectRootEx<CComSingleThreadModel>,
    public CComCoClass<Cr3halObj, &CLSID_r3halObj>,
    public IConnectionPointContainerImpl<Cr3halObj>,
    public Ir3halObj,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IHALEvents>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IE84Events>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IMMIEEvents>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IE90Events>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IE116Events>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IFFUEvents>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IWaferProtrusionEvent>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_ISignalTowerDevice>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IE84HOAVBLEEvents>,
    public IEmuConnectionPointImpl<Cr3halObj, &IID_IE84TPTimeOutUIAck>, //TP3 connection point
public IR3HALDiag
{  
    DECLARE_EMUCLASSFACTORY_SINGLETON(Cr3halObj)
```

COM组件接口继承的实现 <https://blog.csdn.net/dingbaosheng/article/details/624504>

TL学习笔记03

继承

C++:

C#:

<http://www.cnblogs.com/flyinthesky/archive/2008/06/18/1224774.html>

不能初始化的类被叫做抽象类，它们只提供部分实现，但是另一个类可以继承它并且能创建它们的实例。“一个包含一个或多个纯虚函数的类叫抽象类，抽象类不能被实例化，进一步一个抽象类只能通过接口和作为其它类的基类使用。

“抽象类能够被用于类，方法，属性，索引器和事件，使用abstract在一个类声明中表示该类倾向要作为其它类的基类

成员被标示成abstract，或被包含进一个抽象类，必须被其派生类实现。

一个抽象类可以包含抽象和非抽象方法，当一个类继承于抽象类，那么这个派生类必须实现所有的的基类抽象方法。

一个抽象方法是一个没有方法体的方法。

1. virtual修饰的方法必须有实现(哪怕是仅仅添加一对大括号)，而abstract修饰的方法一定不能实现。
2. virtual可以被子类重写，而abstract必须被子类重写。
3. 如果类成员被abstract修饰，则该类前必须添加abstract，因为只有抽象类才可以有抽象方法。
4. 无法创建abstract类的实例，只能被继承无法实例化。
5. C#中如果要在子类中重写方法，必须在父类方法前加virtual，在子类方法前添加override，这样就避免了程序员在子类中不小心重写了父类方法。
6. abstract方法必须重写，virtual方法必须有实现(即便它是在abstract类中定义的方法)。

mRet = TestHalfWafer(token, ref nSeq, true); //C# ref

模板类与模板函数

Why can templates only be implemented in the header file?

Clarification: header files are not the _only _portable solution. But they are the most convenient portable solution Error LNK2019 unresolved external symbol "public: int __thiscall Algo<int>::LongestIncreaseSubsequence(int * const,int)" (?LongestIncreaseSubsequence@? \$Algo@H@@QAEHQAH@Z) referenced in function _main Algo C:\Data\ShareFolder\Group\Tim\Code\Algo\Algo\Main.obj

当模板声明在头文件，实现在cpp中，一般会出现上面的问题，原因是
Algo<int> Algo实例化的时候，编译器会去创建一个int型的Algo的新类，以及
LongestIncreaseSubsequence(T arr[], int arrSize)方法，因此编译器会去找这个方法的实现，如果没有找到，自然会报错。因此有如下两个方法

1. 在头文件中实现
2. 在头文件中声明，再在cpp中显示实例化(explicit instantiations) template class Algo<int>;并实现模板函数

方式1: 实现在头文件里

```
#pragma once
#include <algorithm>
using namespace std;

template<class T>
class Algo
{
public:
    Algo() {};
    ~Algo() {};
public:
    int LongestIncreaseSubsequence(T arr[], int arrSize)
    {
        int *maxLen = new int[arrSize]();
        for (int i = 0; i < arrSize; i++)
        {
            maxLen[i] = 1;
        }
        for (int j = 1; j < arrSize; j++)
        {
            int maxLenJ = 1;
            for (int i = 0; i < j; i++)
            {
                if (arr[i] < arr[j])
                {

```

```

        maxLenJ = maxLen[i] + 1;
        maxLen[j] = std::max({ maxLen[j] ,maxLenJ });
    }
}
return maxLen[arrSize - 1];
}
};

```

```

//调用函数
#include "stdafx.h"
#include "Algo.h"
#include <iostream>
using namespace std;

int main()
{
    int param[6] = {5,3,4,8,6,7};
    int arrSize = sizeof(param) / sizeof(int);
    Algo<int> Alg;
    int maxLength = Alg.LongestIncreaseSubsequence(param, arrSize);
    cout << "Max length: " << maxLength << endl;
    return 0;
}

```

方式二:在头文件中声明, CPP中定义并对每种实例进行声明

```

Algo.h
#pragma once
#include <algorithm>
using namespace std;

template<class T>
class Algo
{
public:
    Algo() {};
    ~Algo() {};
public:
    int LongestIncreaseSubsequence(T arr[], int arrSize);
}

```

```

// Algo.cpp : Defines the entry point for the console application.

#include "stdafx.h"
#include "Algo.h"
#include <algorithm>
using namespace std;

```

```

template class Algo<int>; //必须先声明, 才可以用
template class Algo<double>;
template class Algo<char>;
template<class T>
int Algo<T>::LongestIncreaseSubsequence(T arr[], int arrSize)
{
    int *maxLen = new int[arrSize]();
    for (int i = 0; i < arrSize; i++)
    {
        maxLen[i] = 1;
    }
    for (int j = 1; j < arrSize; j++)
    {
        int maxLenJ = 1;
        for (int i = 0; i < j; i++)
        {
            if (arr[i] < arr[j])
            {
                maxLenJ = maxLen[i] + 1;
                maxLen[j] = std::max({ maxLen[j] ,maxLenJ });
            }
        }
    }
    return maxLen[arrSize - 1];
}

```

If all you want to know is how to fix this situation, read the next two FAQs.

But in order to understand why things are the way they are, first accept these facts:

A template is not a class or a function. A template is a “pattern” that the compiler uses to generate a family of classes or functions.

In order for the compiler to generate the code, it must see both the template definition (not just declaration) and the specific types/whatever used to “fill in” the template. For example, if you’re trying to use a `Foo<int>`, the compiler must see both the `Foo` template and the fact that you’re trying to make a specific `Foo<int>`.

Your compiler probably doesn’t remember the details of one .cpp file while it is compiling an other .cpp file. It could, but most do not and if you are reading this FAQ, it almost definitely does not. BTW this is called the “separate compilation model.”

Now based on those facts, here’s an example that shows why things are the way they are. Suppose you have a template `Foo` defined like this:

```

template<typename T>
class Foo {
public:
    Foo();
    void someMethod(T x);
private:
    T x;
};

Along with similar definitions for the member functions:

```

```

template<typename T>
Foo<T>::Foo()
{
    // ...
}

template<typename T>
void Foo<T>::someMethod(T x)
{
    // ...
}

Now suppose you have some code in file Bar.cpp that uses Foo<int>:

// Bar.cpp
void blah_blah_blah()
{
    // ...
    Foo<int> f;
    f.someMethod(5);
    // ...
}

```

Clearly somebody somewhere is going to have to use the “pattern” for the constructor definition and for the someMethod() definition and instantiate those when T is actually int.

But if you had put the definition of the constructor and someMethod() into file Foo.cpp, the compiler would see the template code when it compiled Foo.cpp and it would see Foo<int> when it compiled Bar.cpp,

but there would never be a time when it saw both the template code and Foo<int>. So by rule #2 above, it co

uld never generate the code for Foo<int>::someMethod().

A note to the experts: I have obviously made several simplifications above. This was intentional so please don't complain too loudly. If you know the difference between a .cpp file and a compilation unit, the difference between a class template and a template class, and the fact that templates really aren't just glorified macros, then don't complain: this particular question/answer wasn't aimed at you to begin with. I simplified things so newbies would “get it,” even if doing so offends some experts.

const对象只能访问**const**成员函数。因为**const**对象表示其不可改变，而非**const**成员函数可能在内部改变了对象，所以不能调用。

而非**const**对象既能访问**const**成员函数，也能访问非**const**成员函数，因为非**const**对象表示其可以改变。

```

#ifndef _MATRIX_H
#define _MATRIX_H
#include <iostream>
#include <algorithm>
using namespace std;

```

```

template<class T>
class CMatrix
{
public:
    CMatrix() {};
    CMatrix(int rows, int columns);
    CMatrix(const CMatrix&);
    ~CMatrix() {};
public:
    void Set(int row, int column, T val);
    T Get(int row, int column) const;
    CMatrix operator +(const CMatrix &mat2);
    CMatrix operator -(const CMatrix &mat2);
    CMatrix operator *(const CMatrix &mat2);
    CMatrix operator *(const T div);
    CMatrix operator /(const T div);
    CMatrix I(int n);
    int Rows() const{ return mRows; }
    int Columns() const{ return mColumns; }
    int Length() { return mRows*mColumns; }
    friend ostream &operator<<(ostream &os, const CMatrix &mat)
    {
        int row = mat.Rows();
        int col = mat.Columns();
        //mat是const, 因此只能访问const成员函数

        for (int i = 0; i < row; i++)
        {
            for (int j = 0; j < col; j++)
            {
                os << fixed << mat.Get(i, j) << '\t';
            }
            if (i < row)
            {
                os << "\n";
            }
        }
        os << "\n";
        return os;
    };

private:
    int mRows;
    int mColumns;
    T* startElement;

};

#endif

```


COM连接点

COM连接点 - 最简单的例子

```
AtAdvise(spCar, sinkptr, __uuidof(_IMyCarEvents), &cookies);
sinkptr指向了一个CComObject<CSink>
CComObject<CSink>* sinkptr = nullptr;
CComObject<CSink>::CreateInstance(&sinkptr);
```

换句话说，一旦将sink对象成功挂载到了COM对象，那么sink对象的生命周期就由对应的COM(spCar)对象来管理。

一旦挂载成功，sink对象就托管给对应的COM对象了，如果对应的COM对象析构了，那么所有它管理的sink对象也就释放了。

CLR是什么？

COM Interop(互操作)

引言

- 平台调用
- C++ Interop(互操作)
- COM Interop(互操作)

一、引言

这个系列是在C#基础知识中遗留下来的一个系列的，因为在C# 4.0中的一个新特性就是对COM互操作改进，然而COM互操作性却是.NET平台下其中一种互操作技术，为了帮助大家更好的了解.NET平台下的互操作技术，所以才有了这个系列。然而有些朋友们可能会有这样的疑问——“为什么我们需要掌握互操作技术的呢？”对于这个问题的解释就是——掌握了.NET平台下的互操作性技术可以帮助我们在.NET中调用非托管的dll和COM组件。.NET是建立在操作系统的之上的一个开发框架，其中.NET类库中的类也是对Windows API的抽象封装，然而.NET类库不可能对所有Windows API进行封装，当.NET中没有实现某个功能的类，然而该功能在Windows API被实现了，此时我们完全没必要去自己在.NET中自定义个类，这时候就可以调用Windows API中的函数来实现，此时就涉及到托管代码与非托管代码的交互，此时就需要使用到互操作性的技术来实现托管代码和非托管代码更好的交互。.NET平台下提供了3种互操作性的技术：

1. Platform Invoke(P/Invoke)，即平台调用，主要用于调用C库函数和Windows API
2. C++ Interop，主要用于Managed C++(托管C++)中调用C++类库

3. COM Interop, 主要用于在.NET中调用COM组件和在COM中使用.NET程序集。

下面就对这3种技术分别介绍下。

二、平台调用

使用平台调用的技术可以在托管代码中调用动态链接库(DLL)中实现的非托管函数, 如Win32 DLL和C/C++ 创建的dll。看到这里, 有些朋友们应该会有疑问——在怎样的场合我们可以使用平台调用技术来调用动态链接库中的非托管函数呢?

这个问题就如前面引言中说讲到的一样, 当在开发过程中, .NET类库中没有提供相关API然而Win32 API 中提供了相关的函数实现时, 此时就可以考虑使用平台调用的技术在.NET开发的应用程序中调用Win32 API中的函数;

然而还有一个使用场景就是——由于托管代码的效率不如非托管代码, 为了提高效率, 此时也可以考虑托管代码中调用C库函数。

2.1 在托管代码中通过平台调用来调用非托管代码的步骤

- (1). 获得非托管函数的信息, 即dll的名称, 需要调用的非托管函数名等信息
- (2). 在托管代码中对非托管函数进行声明, 并且附加平台调用所需要属性
- (3). 在托管代码中直接调用第二步中声明的托管函数

2.2 平台调用的调用过程

(1) 查找包含该函数的DLL, 当需要调用某个函数时, 当然第一步就需要知道包含该函数的DLL的位置, 所以平台调用的第一步也就是查找DLL, 其实在托管代码中调用非托管代码的调用过程可以想象成叫某个人做事情, 首先我们要找到那个人在哪里(即查找函数的**DLL**过程), 找到那个人之后需要把要做的事情告诉他(相当于加载**DLL**到内存中和传入参数), 最后让他去完成需要完成的事情(相当于让非托管函数去执行任务)。

(2) 将找到的DLL加载到内存中。

(3) 查找函数在内存中的地址并把其参数推入堆栈, 来封送所需的数据。CLR只会在第一次调用函数时, 才会去查找和加载DLL, 并查找函数在内存中的地址。当函数被调用过一次之后, CLR会将函数的地址缓存起来, CLR这种机制可以提高平台调用的效率。在应用程序域被卸载之前, 找到的DLL都一直存在于内存中。

(4) 执行非托管函数。

平台调用的过程可以通过下图更好地理解:



三、C++ Interop

第二部分主要向大家介绍了第一种互操作性技术，然后我们也可以使用C++ Interop技术来实现与非托管代码进行交互。然而C++ Interop 方式有一个与平台调用不一样的地方，就是C++ Interop 允许托管代码和非托管代码存在于一个程序集中，甚至同一个文件中。C++ Interop 是在源代码上直接链接和编译非托管代码来实现与非托管代码进行互操作的，而平台调用是加载编译后生成的非托管DLL并查找函数的入口地址来实现与非托管函数进行互操作的。C++ Interop 使用托管C++来包装非托管C++代码，然后编译生成程序集，然后再托管代码中引用该程序集，从而来实现与非托管代码的互操作。关于具体的使用和与平台调用的比较，这里就不多介绍，我将会在后面的专题中具体介绍。

COM(Component Object Model. 组件对象模型)是微软之前推荐的一种开发技术，由于微软过去十多年里开发了大量的COM组件，

然而不可能再使用.NET技术重写这些COM组件实现的功能，所以为了解决在.NET中的托管代码能够调用COM组件中间问题，.NET平台下提供了COM Interop, 即[COM互操作技术](#)，COM interop不仅支持在托管代码中使用COM组件，而且支持向COM组件中使用.NET程序集。

1. 在.NET中使用COM组件

在.NET中使用COM对象，主要有三种方法：

1. 使用TlbImpl工具为COM组件创建一个互操作程序集来绑定早期的COM对象，这样就可以在程序中添加互操作程序集来调用COM对象
2. 通过反射来后期绑定COM对象
3. 通过P/Invoke创建COM对象或使用C++ Interop为COM对象编写包装类

但是我们经常使用的都是方法一，下面介绍下使用方法一在.NET 中使用COM对象的步骤：

1. 找到要使用的COM 组件并注册它。使用 regsvr32.exe 注册或注销 COM DLL。
2. 在项目中添加对 COM 组件或类型库的引用。

添加引用时, **Visual Studio** 会用到 **Tlbimp.exe**(类型库导入程序), **Tlbimp.exe** 程序将生成一个 **.NET Framework** 互操作程序集。该程序集又称为运行时可调用包装 (RCW), 其中包含了包装 COM 组件中的类和接口。**Visual Studio** 将生成组件的引用添加至项目。

1. 创建 RCW 中类的实例, 这样就可以使用托管对象一样来使用 COM 对象。

下面通过一个图更好地说明在.NET 中使用 COM 组件的过程:



在 COM 中使用 .NET 程序集

.NET 公共语言运行时通过 COM 可调用包装 (COM Callable Wrapper, 即 CCW) 来完成与 COM 类型库的交互。CCW 可以使 COM 客户端认为是在与普通的 COM 类型交互, 同时使 .NET 组件认为它正在与托管应用程序交互。在这里 CCW 是非托管 COM 客户端与托管对象之间的一个代理。CCW 既可以维护托管对象的生命周期, 也负责数据类型在 COM 和 .NET 之间的相互转换。实现在 COM 使用 .NET 类型的基本步骤如:

1. 在 C# 项目中添加互操作特性

可以修改 C# 项目属性使程序集对 COM 可见。右键解决方案选择属性, 在“应用程序标签”中选择“程序集信息”按钮, 在弹出的对话框中选择“使程序集 COM 可见”选项, 如下图所示:



1. 生成 COM 类型库并对它进行注册以供 COM 客户端使用

在“生成”标签中，选中“为COM互操作注册”选项，如下图：



勾选“为COM互操作注册”选项后，Visual Studio会调用类型库导出工具(Tlbexp.exe)为.NET程序集生成COM类型库再使用程序集注册工具(Regasm.exe)来完成对.NET程序集和生成的COM类型库进行注册，这样COM客户端可以使用CCW服务来对.NET对象进行调用了。

总结

介绍到这里，本专题的内容就结束，本专题主要对.NET提供的互操作的技术做了一个总的概括，在后面的专题中将会有对具体的技术进行详细的介绍和给出一些简单的使用例子。

驱动

```
WINBASEAPI
BOOL
WINAPI
DeviceIoControl(
    HANDLE hDevice,
    DWORD dwIoControlCode,
    LPVOID lpInBuffer,
    DWORD nInBufferSize,
    LPVOID lpOutBuffer,
    DWORD nOutBufferSize,
    LPDWORD lpBytesReturned,
    LPOVERLAPPED lpOverlapped
);

```

是WinAPI, 负责与硬件打交道, 收发数据, 然后在我们的驱动程序DispatchControl函数中, 去解析DeviceIoControl传递的数据

```
// Control.cpp -- IOCTL handlers for usb42 driver
// Copyright (C) 1999 by Walter Oney
// All rights reserved

#include "stdcls.h"
#include "driver.h"
#include "ioctls.h"

///////////////////////////////
#pragma PAGEDCODE

NTSTATUS DispatchControl(PDEVICE_OBJECT fdo, PIRP Irp)
{
    // DispatchControl
    PAGED_CODE();
    PDEVICE_EXTENSION pdx = (PDEVICE_EXTENSION) fdo->DeviceExtension;

    NTSTATUS status = IoAcquireRemoveLock(&pdx->RemoveLock, Irp);
    if (!NT_SUCCESS(status))
        return CompleteRequest(Irp, status, 0);
    ULONG info = 0;

    PIO_STACK_LOCATION stack = IoGetCurrentIrpStackLocation(Irp);
    ULONG cbin = stack->Parameters.DeviceIoControl.InputBufferLength;
    ULONG cbout = stack->Parameters.DeviceIoControl.OutputBufferLength;
    ULONG code = stack->Parameters.DeviceIoControl.IoControlCode;

    switch (code)
    {
        // process request

```

```

case IOCTL_USB42_READ:
{
    // IOCTL_USB42_READ
    if (cbout != 64)
    {
        status = STATUS_INVALID_PARAMETER;
        break;
    }

    URB urb;
    UsbBuildInterruptOrBulkTransferRequest(&urb, sizeof(_URB_BULK_OR_INTERRUPT_TRANSFER),
                                          pdx->hpipe, Irp->AssociatedIrp.SystemBuffer, NULL, cbout, USBD_TRANSFER_DIRECTION_IN | USBD_SHORT_TRANSFER_OK, NULL);
    status = SendAwaitUrb(fdo, &urb);
    if (!NT_SUCCESS(status))
        KdPrint(("USB42 - Error %X (USBD status code %X) trying to read endpoint\n", status, urb.UrbHeader.Status));
    else
        info = cbout;
    break;
} // IOCTL_USB42_READ

default:
    status = STATUS_INVALID_DEVICE_REQUEST;
    break;

} // process request

IoReleaseRemoveLock(&pdx->RemoveLock, Irp);
return CompleteRequest(Irp, status, info);
} // DispatchControl

```

第五章：算法

第一节 Kriging插值

<https://xg1990.com/blog/archives/222>

空间插值问题，就是在已知空间上若干离散点 (x_i, y_i) 的某一属性(如气温, 海拔)的观测值

$z_i = z(x_i, y_i)$ 的条件下，估计空间上任意一点 (x, y) 的属性值的问题。

直观来讲，根据地理学第一定律，

大意就是，地理属性有空间相关性，相近的事物会更相似。由此人们发明了反距离插值，对于空间上任意一点 (x, y) 的属性 $z = z(x, y)$ ，

定义反距离插值公式估计量 $\hat{z} = \sum_{i=0}^n \frac{1}{d_i^\alpha} z_i$

其中 α 通常取 1 或者 2。

即，用空间上所有已知点的数据加权求和来估计未知点的值，权重取决于距离的倒数(或者倒数的平方)。

那么，距离近的点，权重就大；距离远的点，权重就小。反距离插值可以有效的基于地理学第一定律估计属性值空间分布，但仍然存在很多问题：

α 的值不确定 用倒数函数来描述空间关联程度不够准确

因此更加准确的克里金插值方法被提出来了

克里金插值公式 $\hat{z}_o = \sum_{i=0}^n \lambda_i z_i$

其中 \hat{z}_o 是点 (x_o, y_o) 处的估计值，即 $\hat{z}_o = z(x_o, y_o)$

假设条件：

1. 无偏约束条件 $E(\hat{z}_o - z_o) = 0$
2. 优化目标/代价函数 $J = Var((\hat{z}_o - z_o))$ 取极小值
3. 半方差函数 r_{ij} 与空间距离 d_{ij} 存在关联，并且这个关联可以通过这两组数据拟合出来，因此可以使用距离 d_{ij} 来求得 r_{ij}

半方差函数 $r_{ij} = \sigma^2 - C_{ij}$ ；等价于 $r_{ij} = \frac{1}{2} E[(z_i - z_j)^2]$

其中： $C_{ij} = Cov(z_i, z_j) = Cov(R_i, R_j)$

求得 r_{ij} 之后，我们就可以求得 λ_i

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} & 1 \\ r_{21} & r_{22} & \cdots & r_{2n} & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ r_{n1} & r_{n2} & \cdots & r_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \cdots \\ \lambda_n \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{1o} \\ r_{2o} \\ \cdots \\ r_{no} \\ 1 \end{bmatrix}$$

最长递增子序列

对于序列5, 3, 4, 8, 6, 7, 其最长的递增子序列是3, 4, 6, 7, 这里, 不需要保证元素是连在一起的, 只需要序号上升即可。问题变成求解n元系列 $a[1], a[2], a[3], \dots, a[n]$,

对于 $i < j < n$, 假设我们已经求得前 i 个元素的最长递增子序列长度为 $\text{MaxLen}[i]$ 满足 $i < j$, 那么我们可以遍历 i 从1到 $j-1$ 来求得 $\text{MaxLen}[j]$ 。基本的一些小算法写在一个CPP里面, 最后封装成一个类, 一般要设计成模板类。

```
int Algo::LongestIncreaseSubsequence(int arr[], int arrSize)
{
    int *maxLen = new int[arrSize]();
    for (int i = 0; i < arrSize; i++)
    {
        maxLen[i] = 1;
    }
    for (int j = 1; j < arrSize; j++)
    {
        int maxLenJ = 1;
        for (int i=0; i<j; i++)
        {
            if (arr[i] < arr[j])
            {
                maxLenJ = maxLen[i] + 1;
                maxLen[j] = std::max({ maxLen[j] ,maxLenJ });
            }
        }
    }
    return maxLen[arrSize-1];
}
```

LU分解

任何非奇异方阵都可以分解成上三角阵与下三角阵之积

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

对比两边矩阵的，可以求得：

但是编程时，行列都是从0开始时，要注意转换。

第1行： $a_{1j} = u_{1j}, j = 1, 2, \dots, n.$ => $u_{1j} = a_{1j}.$

第1列： $a_{j1} = l_{j1}u_{11}, j = 1, 2, \dots, n.$ => $l_{j1} = a_{j1}/u_{11}.$

...

第k行： $a_{kj} = \sum_{i=1}^{i=k} l_{ki}u_{ij}, => u_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{i=k-1} l_{ki}u_{ij}.$

第k列： $a_{jk} = \sum_{i=1}^{i=k} l_{ji}u_{ik}, => u_{jk} = [a_{jk} - \sum_{i=1}^{i=k-1} l_{ji}u_{ik}]/u_{kk}.$

因为前k-1行的 u_{ij} 都已知，前k-1列的 l_{ij} 都已知，因此可以求得第k行 u_{ij} ，第k列的 $l_{ij}.$

问题：得保证 a_{11} 非0，以及矩阵非奇异。

利用LU分解求线性方程组的解

求解线性方程组 $Ax=b$ 相当于求解 $LUX=b;$

设 $Y = UX$; 因此 $LY = b$; 首先求解 $LY = b,$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

求解上面的方程：

第1行： $y_1 = b_1.$

对于第k行： $b_k = \sum_{i=1}^{i=k} l_{ki}y_i => y_k = b_k - \sum_{i=1}^{i=k-1} l_{ki}y_i.$

求得Y之后，代入Y=UX求得X：

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

对于上三角矩阵，我们从第n行开始求解

对第n行： $y_n = u_{nn}x_n => x_n = y_n/u_{nn}.$

...。

对第k行: $y_k = \sum_{i=k}^{i=n} u_{ki}x_i \Rightarrow x_k = [y_n - \sum_{i=k+1}^{i=n} u_{ki}x_i]/u_{kk}$
这样通过LU分解矩阵就求得了线性方程组的解X.

矩阵求逆

我们可以利用LU分解来求非奇异方阵的逆矩阵。

AB=I

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

可以分解成求:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b_{1k} \\ b_{2k} \\ \cdots \\ b_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdots \\ 1 \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

右边的列, 就只是第k行值非0;

$A * b_k = e_k$, 对所有的 e_k 求出 b_k 就可以得到A的逆矩阵 $A^{-1} = B$

实际求解中把A换成LU来减少计算量。总的计算开销还是 n^3 。但是这样并不比直接的高斯消元法来的快。

算法实现如下。

```
//LU
template<class T>
void CMATRIX<T>::LU(CMATRIX &mat, int N, CMATRIX* L, CMATRIX* U)
{
    for (int k = 0; k < N; k++)
    {
        for (int j = k; j < N; j++)
        {
            T U_k_j = mat.Get(k, j);
            T L_j_k = mat.Get(j, k);
            for (int i = 0; i < k; i++)
            {
                U_k_j -= L->Get(k, i)*U->Get(i, j);
            }
            U->Set(k, j, U_k_j);

            for (int i = 0; i < k; i++)
            {
                L_j_k -= L->Get(j, i)*U->Get(i, k);
            }
        }
    }
}
```

```

        }
        L_j_k = L_j_k / U->Get(k, k);
        L->Set(j, k, L_j_k);

    }
}

//solve linear algebra equations
CVector Solve(CMatrix<double>& mat, CVector& vec)
{
    CVector X(vec.Size());
    CVector Y(vec.Size());
    if (mat.Columns() != mat.Rows() && mat.Rows() != vec.Size())
    {
        printf("Dimension not match!");
        return X;
    }
    CMatrix<double> L(vec.Size(), vec.Size());
    CMatrix<double> U(vec.Size(), vec.Size());
    mat.LU(mat, vec.Size(), &L, &U);
    Y = SolveLow(L, vec);
    cout << "Y\n" << Y;
    X = SolveUpper(U, Y);
    cout << "X\n" << X;
    return X;
}

CVector SolveLow(CMatrix<double>& mat, CVector& vec)
{
    CVector vecRes(vec.Size());
    if (mat.Columns() != mat.Rows() && mat.Rows() != vec.Size())
    {
        printf("Dimension not match!");
        return vecRes;
    }

    for (int k = 0; k < vec.Size(); k++)
    {
        double mRes = 0;
        mRes = vec.Get(k);
        for (int i = 0; i < k; i++)
        {
            mRes -= mat.Get(k, i)*vecRes.Get(i);
        }
        vecRes.Set(k, mRes);
    }
    return vecRes;
}

CVector SolveUpper(CMatrix<double>& mat, CVector& vec)
{

```

```

CVector vecRes(vec.Size());
if (mat.Columns() != mat.Rows() && mat.Rows() != vec.Size())
{
    printf("Dimension not match!");
    return vecRes;
}

for (int k = vec.Size() -1; k >=0 ; k--)
{
    double mRes = 0;
    mRes = vec.Get(k);
    for (int i = k+1; i <vec.Size(); i++)
    {
        mRes -= mat.Get(k, i)*vecRes.Get(i);
    }
    mRes = mRes / mat.Get(k, k);
    vecRes.Set(k, mRes);
}
return vecRes;
}

//inverse matrix
template<class T>
CMATRIX<T> CMATRIX<T>::Inv()
{
    CMATRIX result = *this;
    CMATRIX<double> L(mRows, mColumns);
    CMATRIX<double> U(mRows, mColumns);
    CMATRIX<double> InvMat(mRows, mColumns);
    LU(result,mRows, &L, &U);
    for (int col = 0; col < mColumns; col++)
    {
        CVector vec(mRows, col);
        CVector mSolution(mRows);
        mSolution = SolveLow(L, vec);
        mSolution = SolveUpper(U, mSolution);
        for (int row = 0; row<mRows; row++)
        {
            InvMat.Set(row, col, mSolution.Get(row));
        }
    }
    return InvMat;
}

```

SVD

利用LU分解，我们可以求满秩的线性方程组的解。对于 $m \times n$ ($m > n$) 阶矩阵，对于超定方程（方程数目大于未知数的个数），因为一般没有解满足 $Ax = b$ ，这就是最小二乘法发挥作用的地方。

这个问题的解就是使得： $\|Ax - b\|_2^2$ 值极小的解，通过求导（把 $x \rightarrow x + e$, 求梯度等于0的 x ），可以得到解为： $x = (X^T A)^{-1} A^T b$

QR分解

定理：设 A 是 $m \times n$ 阶矩阵， $m \geq n$ ，假设 A 为满秩的，则存在一个唯一的正交矩阵 Q ($Q^T Q = I$) 和唯一的具有正对角元 $r_{ij} > 0$ 的 $n \times n$ 阶上三角阵 R 使得 $A = QR$.

Gram-Schmidt 正交化

Gram-Schmidt 正交化的基本想法，是利用投影原理在已有基的基础上构造一个新的正交基。

$((\beta))_1$

<http://elsenaju.eu/Calculator/QR-decomposition.htm>

https://rosettacode.org/wiki/QR_decomposition

https://www.wikiwand.com/en/QR_decomposition#/Example_2

https://www.wikiwand.com/en/Householder_transformation

C# 有开源的免费的代数库 `mathnet.numerics`，功能也比较多，推荐通过 Nuget 来安装这个库

Nuget 安装dll

Tools-->Nuget Package Manager-->Manager Nuget packages for solution..-->Browse

<https://numerics.mathdotnet.com/api/MathNet.Numerics.LinearAlgebra/Matrix`1.htm#QR>

<https://numerics.mathdotnet.com/matrix.html>



研究这个



医学图像重建算法

平行光束算法

2.6.4 FBP (先滤波后反投影) 算法的推导

我们首先给出二维傅里叶变换在极坐标系下的表达式

$$f(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{polar}(\omega, \theta) e^{2\pi i \omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta.$$

因为 $F_{polar}(\omega, \theta) = F_{polar}(-\omega, \theta + \pi)$, 所以

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_{polar}(\omega, \theta) |\omega| e^{2\pi i \omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta.$$

根据中心切片定理, 我们可以用 P 来代替 F :

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega, \theta) |\omega| e^{2\pi i \omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta.$$

我们意识到 $|\omega|$ 是斜坡率滤波器的传递函数, 令 $Q(\omega, \theta) = |\omega|P(\omega, \theta)$, 则

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\omega, \theta) e^{2\pi i \omega(x \cos \theta + y \sin \theta)} d\omega d\theta.$$

利用一维傅里叶反变换并记 Q 的反变换为 q , 我们最后得到

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} q(x \cos \theta + y \sin \theta, \theta) d\theta,$$

或

$$f(x, y) = \int_0^{\pi} q(s, \theta) |s=x \cos \theta + y \sin \theta| d\theta.$$

这正是 $q(s, \theta)$ 的反投影 (见第1.5节)。

中心切片定理

Special example prove



1. 平行于y轴投影

$$p(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) dy \quad (1)$$

2. 投影函数一维傅里叶变换

$$P(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x,0) e^{-j2\pi ux} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) e^{-j2\pi ux} dx dy \quad (2)$$

3. 密度函数二维傅里叶变换

$$F(u,v) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) e^{-j2\pi(ux+vy)} dx dy \quad (3)$$

4. 在 $v=0$ 时, 傅里叶变换表示

$$F(u,v)|_{v=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) e^{-j2\pi ux} dx dy \quad (4)$$

5. 式 (2) 与 (4) 相等, 证明完毕

3. 对投影函数中的变量t进行傅里叶变换

$$P(\omega, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f'(t,s) ds e^{-j2\pi\omega t} dt \quad (3)$$

4. 对 (3) 式右面进行坐标变换x, y

$$ds dt = J dx dy = \begin{vmatrix} \partial t / \partial x & \partial s / \partial x \\ \partial t / \partial y & \partial s / \partial y \end{vmatrix} dx dy = dx dy$$

雅克比转换

$$P(\omega, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) e^{-j2\pi\omega(x\cos\theta+y\sin\theta)} dx dy \quad (4)$$

5. $f(x,y)$ 二维傅里叶变换

$$F(u,v) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) e^{-j2\pi(ux+vy)} dx dy \quad (5)$$

6. 比较公式 (4) 和 (5), 令 $u = \omega\cos\theta, v = \omega\sin\theta$

$$F(\omega\cos\theta, \omega\sin\theta) = P(\omega, \theta) \quad (6)$$

这表明,

一个物体 0° 投影的傅里叶变换与该物体二维傅里叶变换中 $v=0$ 的直线相同。



傅里叶切片定理:

物体 $f(x,y)$ 平行投影的傅里叶变换, 是物体二维傅里叶变换的一个切片 (直线), 切片是在与投影相同的角度获得的。

平行光束算法到扇形光束算法

其本质就是从直角坐标系变换到极坐标系

在完成了从平行光束数据 $p(s, \theta)$ 到扇形束数据 $g(\gamma, \beta)$ 的替换，旧变量 s 和 θ 到新变量 γ 和 β 的替换，及加入一个雅可比因子 $J(\gamma, \beta)$ ，一个崭新的扇形束图像重建算法就诞生了(图 3.5)!



图 3.5 从平行光束图像重建算法到扇形束图像重建算法的推导过程。

投影

1.5.1 投影

设 $f(x, y)$ 为 x - y 平面上定义的密度函数，其投影函数(即射线和，线积分，及拉东变换) $p(s, \theta)$ 有下面不同的等价表达式：

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \delta(x \cos \theta + y \sin \theta - s) dx dy ,$$

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \delta(\bar{x} \cdot \bar{\theta} - s) dx dy ,$$

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} f(s \cos \theta - t \sin \theta, s \sin \theta + t \cos \theta) dt ,$$

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} f(s \bar{\theta} + t \bar{\theta}^\perp) dt ,$$

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} f_\theta(s, t) dt ,$$

其中 $\bar{x} = (x, y)$ ， $\bar{\theta} = (\cos \theta, \sin \theta)$ ， $\bar{\theta}^\perp = (-\sin \theta, \cos \theta)$ ， δ 是狄拉克 δ 函数，图像 f 旋转角度 θ 后记为 f_θ 。我们假设探测器按逆时针方向绕物体旋转。这等价于探测器不动，而物体按顺时针做旋转。有关的坐标系如图1.12所示。

狄拉克函数

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(ax) f(x) dx = \frac{1}{|a|} f(0),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(n)}(x) f(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(0) \text{ [第 } n \text{ 阶导数]},$$

$$\delta(g(x))f(x) = \sum_n \frac{1}{|g'(\lambda_n)|} \delta(x - \lambda_n), \text{ 其中 } \lambda_n \text{ 为 } g(x) \text{ 的零点。}$$

狄拉克 δ 函数在二维和三维的情形的定义分别是， $\delta(\bar{x}) = \delta(x)\delta(y)$ 和 $\delta(\bar{x}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$ 。这时，在上面的最后一个性质中， $|g'|$ 要分别被

$$|grad(g)| = \sqrt{\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^2} \text{ 和 } |grad(g)| = \sqrt{\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial z}\right)^2} \text{ 取代。}$$

在二维成像中，我们通常用 δ 函数 $\delta(\bar{x} - \bar{x}_0)$ 来表示位于 $\bar{x} = \bar{x}_0$ 的点源。函数 $f(\bar{x}) = \delta(\bar{x} - \bar{x}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$ 的拉东变换就是

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\bar{x}) \delta(\bar{x} \cdot \bar{\theta} - s) d\bar{x},$$

$$p(s, \theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(x \cos \theta + y \sin \theta - s) dx dy,$$

解析法应用的就是中心切片定理，迭代法一般应用共轭梯度法或者拟牛顿法。

最优化方法

这章主要讨论常见的最优化方法，以及优化技巧与不同方法的优缺点。

最优化的优缺点及其改进方案

常见的损失函数

分类问题损失函数

y 是标签, f 是预测结果。

对于二分类问题 $Y = [-1, 1]$

0-1损失函数:

$$\blacksquare L_{0-1}(f, y) = 1_{fy \leq 0}$$

Hinge损失函数:

$$\blacksquare L_{hinge}(f, y) = \max(0, 1 - fy)$$

Logistic损失函数:

$$\blacksquare L_{logistic}(f, y) = \log_2(1 + \exp(-fy))$$

当预测值 $f \in [-1, 1]$ 时, 可以定义如下损失函数:

交叉熵(Cross Entropy):

$$\blacksquare L_{crossentropy} = -\log_2(\frac{1+fy}{2})$$

回归问题损失函数

对于回归问题, $Y=R$, 我们希望 $f(x_i, \theta) \approx y_i$, 最常用的损失函数是平方损失函数:

$$\blacksquare L_{square}(f, y) = (f - y)^2$$

平方损失函数对异常点惩罚很大, 因此对异常点比较敏感。为了解决这个问题, 引入了绝对损失函数:

$$\blacksquare L_{square}(f, y) = |f - y|$$

但是绝对损失函数在0点不可以求导。

一个方法是在0点进行函数光滑化也就是在0点附件用平方函数代替。 $\delta - > 0$

$$\blacksquare L_{square}(f, y) = \sqrt{(f - y)^2 + \delta^2}$$

或者用Huber损失函数:

Huber损失函数:

$$\blacksquare L_{square}(f, y) = (f - y)^2, |f - y| > \delta$$

$$\blacksquare L_{square}(f, y) = 2\delta|f - y| - \delta^2, |f - y| > \delta$$

还得补充与思考文本处理, 信号处理中的损失函数。

机器学习中哪些是凸优化问题，哪些是非凸优化问题

凸函数条件：Hessian矩阵为半正定。

逻辑回归，线性回归，SVM是凸优化问题。PCA，矩阵分解以及NN是非凸优化问题。

梯度下降

问题1：怎样验证自己代码中梯度公式的正确性？

$$\left| \frac{L(\theta + he_i) - L(\theta - he_i)}{2h} - \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_i} \right| \approx Mh^2$$

若 $M \leq 10^7$, 则：

$$\left| \frac{L(\theta + he_i) - L(\theta - he_i)}{2h} - \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_i} \right| \leq h$$

因此取 $h = 10^{-7}$ 看，看上式是否成立，不成立则 $M \geq 10^7$ ，则取 $h = 10^{-8}$ ，看上式得值是否变为原来的 10^{-2} 。如果是，则求导正确，不是则求导错误。

问题2：当数据量特别大的时候经典梯度下降法存在什么问题，需要怎么改进？

因为经典的梯度下降是对整个训练集进行的，如果训练集特别大，每次更新要针对整个数据集，因此需要很大的计算力，计算很费时间。

一般采用随机梯度下降法，每次训练一个数据。但是该方法很难收敛，会在极值点振荡，因此一般采用 mini-batch Gradient Descent 方法。一般 batch 的 size m 取 2 的整数次幂。

为了充分利用数据以及避免数据的特定顺序给算法收敛带来的印象，一般每次遍历数据前，对数据先随机排序，然后每次取 m 个数据，直到遍历所有数据。有必要再按新规则排序，重复以上步骤。

如何选择学习率 α ，为了加快学习速度与提高精度。一开始取大的学习速率，误差曲线进入平台期后，再减小学习速率做更精细的调整。

问题3：深度学习中常用的优化方法是随机梯度下降法，但是 SGD 偶尔也会失效，无法给出满意的训练结果，这是为什么？

当 SGD 遇到山谷的时候，由于沿山谷方向的梯度比较小，因此结果会在山谷方向来回移动，而不能像整体梯度下降一样能沿着山谷有一个确定方向的移动。其次是遇到平坦区域，有些方向的梯度接近于 0，因此需要很长世间才能走出这片区域。

问题4：为了改进 SGD，研究者都做了哪些改动？提出了哪些方法？他们各有哪些特点？

动量(Momentum)方法

为了解决SGD在山谷振荡，鞍点停滞的现象。我们引入了带动量的SGD。普通SGD是：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta g_t$$

带动量的SGD公式是：

$$v_t = \gamma v_{t-1} + \eta g_t$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - v_t$$

通过 $0 < \gamma < 1$, 能实现梯度的累积, 也就是速度的累积, 因此能更好的冲出山谷与平坦(平原)区域。

AdaGrad方法

惯性的获得是基于历史的, 除了从过去的步伐中获得一股子冲劲, 我们还想知道不同参数更新的步伐, 这样, 对于更新频率低的参数能加快更新步伐, 而更新频率高的参数减小步伐。因此就有了AdaGrad方法, 他采用"历史梯度平均和"来衡量不同参数的梯度的稀疏性。, 取值越小表明越稀疏。更新公式如下:

$$\theta_{t+1,i} = \theta_{t,i} - \frac{\eta}{\sqrt{\sum_{k=0}^t g_{k,i}^2 + \epsilon}} g_{t,i}$$

$\theta_{t+1,i}$ 表示t+1时刻, 参数向量的第i个参数, $g_{k,i}$ 表示k时刻, 参数向量的第i个方向。此外, 分母的求和新式实现了退火过程, 意味着随着时间推移, 学习速率越来越小, 保证算法最终收敛。

Adam方法

Adam方法将惯性保持与环境感知这两个有点集合在一起。

通过记录梯度的一阶矩来保持惯性, 通过记录二阶矩来实现环境感知能力。通过指数衰减平均技术来实现时间久远的梯度对当前平均值的贡献呈指数衰减。计算公式如下:

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2$$

Adam更新公式:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta \hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t + \epsilon}}$$

其中: $\hat{m}_t = \frac{m_t}{1-\beta_1^t}$, $\hat{v}_t = \frac{v_t}{1-\beta_2^t}$

问题5:L1正则化使得模型参数具有稀疏性的原理是什么?

角度1:通过做等高线图



由图可知, L1更容易在轴上与等高线相交, 而L2更容易在两轴之间相交。其实加L1,L2正则就是加一个约束, 也就是带约束的优化问题, 通过这个约束, 我们就知道了解空间的限定范围。

角度2: 贝叶斯先验

L1正则化相当于对模型参数引入了拉普拉斯先验, L2正则化相当于对模型参数引入了高斯先验。因为拉普拉斯先验分布中, 参数取值为0的概率更高, 因此更容易产生稀疏性。而高斯先验分布只会让所有参数趋近于0, 并且在趋近于0的不同位置是等概率的, 因此不会让参数等于0。

Levenberg-Marquardt算法

Levenberg-Marquardt

方法用于求解非线性最小二乘问题，结合了梯度下降法和高斯-牛顿法。

其主要改变是在Hessian阵中加入对角线项，加这一样可以保证Hessian阵是正定的。当然，这是一种L2正则化方式。

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{t+1} &= \mathbf{x}_t - (\mathbf{H} + \lambda \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{g}, \\ \mathbf{x}_{t+1} &= \mathbf{x}_t - (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \lambda \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{r} \end{aligned}$$

L-M算法的不足点。

当 λ 很大时， $\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \lambda \mathbf{I}_n$ 根本没用，Marquardt为了让梯度小的方向移动的快一些，来防止小梯度方向的收敛，把中间的单位矩阵换成了 $\text{diag}(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ ，因此迭代变成：

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \lambda \text{diag}(\mathbf{J}^T \mathbf{J}))^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{r}$$

阻尼项(damping parameter) λ 的选择，Marquardt 推荐一个初始值 λ_0 与因子 $v > 1$ ，开始时， $\lambda = \lambda_0$ ，然后计算 cost functions，第二次计算 $\lambda = \lambda_0/v$ ，如果两者 cost function 都比初始点高，然后我们就增大阻尼项，通过乘以 v ，直到我们发现当 $\lambda = \lambda_0 v^k$ 时，cost function 下降。

如果使用 $\lambda = \lambda_0/v$ 使得 cost function 下降，然后我们就把 λ_0/v 作为新的 λ

当 $\lambda = 0$ 时，就是高斯-牛顿法，当 λ 趋于无穷时，就是梯度下降法。如果使用 λ/v 没有使损失函数下降，使用 λ 导致损失函数下降，那么我们就继续使用 λ 做为阻尼项。

```
k := 0; x := x0; v := 2; A := J(x)^T J(x)g := J(x)^T f(x)
u := τ * max(aii)
found := (||g||∞ ≤ ε1)
while(not found) and (k < kmax)
    k := k + 1; solve -> (A + uI)hlm = -g
    if ||hlm|| ≤ ε(||x|| + ε2)
        found := true
    else :
        xnew := x + hlm
        ρ := (F(x) - F(x + hdl)) / (L(0) - L(hdl)))
        if ρ ≥ 0
            x := xnew; g := J(x)Tf(x)
            A := J(x)TJ(x)g := J(x)Tf(x)
            found := (||g||∞ ≤ ε1)
            u := u * max(1/3, 1 - (2ρ - 1)3); v := 2
        else
```

```
def LM_Solver(self):
    init_p = 0.5 * np.ones((2, 1))
```

```

init_p[0, 0] = 2.0
init_p[1, 0] = 1.0
epsilon_1 = 1e-15
epsilon_2 = 1e-15
epsilon_3 = 1e-15
alpha = 1
cost_history = np.zeros((self.training_steps, 3))
Jaco = self.Jacobian(init_p)
Hessian = np.dot(Jaco.transpose(), Jaco)
resi = self.residual(init_p)
m_g = np.dot(Jaco.transpose(), resi)
cost_old = np.dot(resi.transpose(), resi)
epoch = -1
train_stop = -1
miu = Hessian.max()
lamda_v = 2

matrix_I = np.identity(Hessian.shape[0])
while epoch < self.training_steps - 1 and train_stop < 0:
    epoch += 1
    print "Epoch: ", epoch
    go_next_epoch = -1

    while go_next_epoch < 0:
        sigma_p = np.dot(np.linalg.inv(Hessian + miu*matrix_I), m_g)
        square_g = np.linalg.norm(sigma_p)
        if square_g <= epsilon_2*np.linalg.norm(init_p):
            train_stop = 1
            break
        else:
            new_p = init_p + sigma_p
            resi_new = self.residual(new_p)
            cost_new = np.dot(resi_new.transpose(), resi_new)
            frac = np.dot(sigma_p.transpose(), miu* sigma_p + m_g)
            rou = (cost_old - cost_new) / frac
            if rou > 0:
                go_next_epoch = 1
                init_p = new_p
                Jaco = self.Jacobian(init_p)
                Hessian = np.dot(Jaco.transpose(), Jaco)
                resi = self.residual(init_p)
                m_g = np.dot(Jaco.transpose(), resi)
                if (np.abs(m_g)).max < epsilon_1:
                    train_stop = 1
                    break
                miu *= max(1.0 / 3.0, 1 - pow(2 * rou - 1, 3))
                lamda_v = 2
                print init_p.transpose(), miu, cost_new
                cost_history[epoch, 0] = cost_new
                cost_history[epoch, 1] = miu
                cost_history[epoch, 2] = np.linalg.norm(m_g)
                cost_old = cost_new
            go_next_epoch = 0
    epoch += 1

```

```
        else:  
            miu *= lamda_v  
            # lamda_miu *= 0  
            lamda_v *= 2  
    return cost_history, init_p
```

线性搜索与Armijo准则

符号约定：

■ $g_k : \nabla f(x_k)$, 即目标函数关于k次迭代值 x_k 的导数

■ $G_k : G(x_k) = \nabla^2 f(x_k)$, 即Hessian矩阵

■ d_k : 第k次迭代的步长因子, 在最速下降算法中, 有 $d_k = -g_k$

■ α_k : 第k次迭代的步长因子, 有 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

在精确线性搜索中, 步长因子 α_k 由下面的因子确定：

■ $\alpha_k = \operatorname{argmin}_\alpha f(x_k + \alpha d_k)$

而对于非精确线性搜索, 选取的 α_k 只要使得目标函数f得到可接受的下降量, 即:

■ $\Delta f(x_k) = f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k)$

Armijo 准则用于非精确线性搜索中步长因子 α 的确定, 内容如下:

Armijo 准则:

已知当前位置 x_k 和优化方向 d_k , 参数 $\beta \in (0, 1), \delta \in (0, 0.5)$. 令步长因子

■ $\alpha_k = \beta^{m_k}$, 其中

m_k 为满足下列不等式的最小非负整数m:

■ $f(x_k + \beta^m d_k) \leq f(x_k) + \delta \beta^m g_k^T d_k$

由此确定下一个位置 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

对于梯度上升, 上面的方程变成:

■ $f(x_k - \beta^m d_k) \geq f(x_k) - \delta \beta^m g_k^T d_k$

由此确定下一个位置 $x_{k+1} = x_k - \alpha_k d_k$

Quasi-Newton methods

BFGS

我们知道, 在牛顿法中, 我们需要求解二阶导数矩阵--Hessian阵, 当变量很多时, 求解Hessian阵势比较费时间的, Quasi-Newton法主要是在构造Hessian阵上下功夫, 它是通过构造一个近似的Hessian阵, 或者Hessian阵的逆, 而不是解析求解或者利用差分法来求解这个Hessian阵。构造的Hessian阵通过迭代而改变。

比较出名的Quasi-Netwon方法有BFGS(以Charles George Broyden, Roger Fletcher, Donald Goldfarb and David Shanno命名)

在牛顿法中, k步搜寻步长与方向是 p_k , 满足下面方程

$$\blacksquare B_k p_k = -\nabla f(x_k)$$

$\blacksquare B_k$ 就是近似的Hessian阵。下面我们讨论 B_k 如何变化,

我们要求 B_k 的更新满足quasi-Netwon条件

$$\blacksquare B_{k+1}(x_{k+1} - x_k) = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$$

这个条件就是简单的求 $f(x)$ 的二阶导数。

令:

$$\blacksquare y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k), \quad s_k = x_{k+1} - x_k, \text{ 因此} \quad \blacksquare B_{k+1} \text{满足 } B_{k+1}s_k = y_k$$

这就是割线方程(the secant equation), The curvature condition $s_k^T y_k > 0$ 需要满足。

k步的Hessian阵以如下方式更新,

$$\blacksquare B_{k+1} = B_k + U_k + V_k$$

为了保持 B_{k+1} 的正定性以及对称性。 B_{k+1} 可以取如下形式:

$$\blacksquare B_{k+1} = B_k + \alpha u u^T + \beta v v^T$$

选择 $u = y_k, v = B_k s_k$, 为了满足割线方程(the secant condition), 我们得到:

$$\blacksquare \alpha = \frac{1}{y_k^T s_k}$$

$$\blacksquare \beta = \frac{1}{s_k^T B_k s_k}$$

最终我们得到Hessian阵的更新方程:

$$\blacksquare B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k^T}{s_k^T B_k s_k}$$

利用 Sherman–Morrison formula,

$$\blacksquare (A + uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^TA^{-1}}{1+v^TA^{-1}u}$$

其中A是可逆方阵, $1 + v^T A^{-1}u \neq 0$

可以方便的得到 B_{k+1} 的逆。

$$\blacksquare B_{k+1}^{-1} = (I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k}) B_k^{-1} (1 - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k}) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$$

$$\blacksquare B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1} + \frac{(s_k^T y_k + y_k^T B_k^{-1} y_k)(s_k s_k^T)}{(s_k^T y_k)^2} - \frac{B_k^{-1} y_k s_k^T + s_k y_k^T B_k^{-1}}{s_k^T y_k}$$

DFP

参考 DFP的矫正公式如下：

$$H_{k+1} = H_k + \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k}$$

当采用精确线搜索时，矩阵序列 H_k 的正定新条件 $s_k^T y_k > 0$ 可以被满足。但对于 Armijo 搜索准则来说，不能满足这一条件，需要做如下修正：

$$H_{k+1} = H_k \quad s_k^T y_k \leq 0$$

$$H_{k+1} = H_k + \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} \quad s_k^T y_k > 0$$

Broyden族算法

之前BFGS和DFP校正都是由 y_k 和 $B_k s_k$ (或者 s_k 和 $H_k y_k$) 组成的秩2矩阵。而Droyden族算法采用了 BFGS 和 DFP 校正公式的凸组合，如下：

$$H_{k+1}^\phi = \phi_k H_{k+1}^{BFGS} + (1 - \phi_k) H_{k+1}^{DFP} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} + \phi_k v_k v_k^T \text{ 其中}$$

$$\phi_k \in [0, 1], v_k \text{ 由下式定义: } v_k = \sqrt{\frac{s_k}{y_k^T H_k y_k}} \left(\frac{s_k}{y_k^T s_k} - \frac{H_k y_k}{y_k^T H_k y_k} \right)$$

Gauss-Netwon方法

对于函数 $f(x)$ 的小邻域展开

$$\blacksquare f(x+h) \simeq l(h) \equiv f(x) + J(x)h$$

$$\blacksquare F(x+h) \simeq L(h) \equiv \frac{1}{2}l(h)^T l(h) = \frac{1}{2}f^T f + h^T J^T f + \frac{1}{2}h^T J^T J h$$

我们需要选择步长 h_{gn} 来最小化 $L(h)$

$$\blacksquare h_{gn} = \operatorname{argmin}_h L(h)$$

$$\blacksquare (J^T J)h_{gn} = -J^T f$$

信赖域方法

Powell's Dog Leg Method是一种信赖域方法

在Gauss-Netwon迭代中

$$\blacksquare J(x)h \simeq -f(x)$$

最陡的方向由下面公式给出：

$$\blacksquare h_{sd} = -g = -J(x)^T f(x)$$

但是这只是给出了方向，而没有给出步长。

考虑线性模型

$$\blacksquare f(x + \alpha h_{sd}) \simeq f(x) + \alpha J(x)h_{sd}$$

$$\blacksquare F(x + \alpha h_{sd}) \simeq \frac{1}{2}||f(x) + \alpha J(x)h_{sd}||^2 = F(x) + \alpha h_{sd}^T J(x)^T f(x) + \frac{1}{2}\alpha^2 ||J(x)h_{sd}||^2$$

当 α 取如下值得时候，以上函数取最小值

$$\blacksquare \alpha = -\frac{h_{sd}^T J(x)^T f(x)}{||J(x)h_{sd}||^2} = \frac{||g||^2}{||J(x)h_{sd}||^2}$$

现在有两个步长的选择 $a = \alpha h_{sd}$ 以及 $b = h_{gn}$, Powell建议在信赖域半价是 Δ 的时候，步长可以如下选择

If $||h_{gn}|| \leq \Delta$, $h_{dl} = h_{gn}$

$$\blacksquare \text{Elseif: } ||\alpha h_{sd}|| \geq \Delta, h_{dl} = (\Delta / ||h_{sd}||)h_{sd}$$

else:

$$\blacksquare h_{dl} = \alpha h_{sd} + \beta(h_{gn} - \alpha h_{sd})$$

选择 β 使得 $||h_{dl}|| = \Delta$

在L-M算法中我们定义了增益因子，

$$\blacksquare \rho = (F(x) - F(x + h_{dl}) / (L(0) - L(h_{dl})))$$

其中L是线性模型

$$L(h) = \frac{1}{2} \|f(x) + J(x)h\|^2$$

在L-M我们通过 ρ 来控制阻尼因子, 在dog-leg算法中, 我们通过它来控制步长

Dog Leg Method

```
k := 0; x := x_0; Δ := Δ_0; g := J(x)^T f(x)
found := (||f(x)||_∞ ≤ ε_3) or (||g||_∞ ≤ ε_1)
while(not found) and (k < k_max)
    k := k + 1; computer α by (2.4)
    h_sd := -α g; solve J(x)h_gn ≈ -f(x)
    computer h_dl by (4.5)
    if ||h_dl|| ≤ ε(||x|| + ε_2)
        found := true
    else :
        x_new := x + h_dl
        ρ := (F(x) - F(x + h_dl)) / (L(0) - L(h_dl))
        if ρ ≥ 0
            x := x_new; g := J(x)^T f(x)
            found := (||f(x)||_∞ ≤ ε_3) or (||g||_∞ ≤ ε_1)
        if ρ ≥ 0.75
            Δ := max(Δ, 3 * ||h_dl||)
        elseif ρ < 0.25
            Δ := Δ/2; found := (Δ ≤ ε_2(||x|| + ε)
```

```
def Dogleg_Solver(self):
    init_para = np.ones((2, 1))
    epsilon_1 = 1e-15
    epsilon_2 = 1e-15
    epsilon_3 = 1e-15
    alpha = 1
    cost_history = np.zeros((self.training_steps, 3))
    Jaco = self.Jacobian(init_para) //get Jacobian
    Hessian = np.dot(Jaco.transpose(), Jaco)
    resi = self.residual(init_para)
    m_g = np.dot(Jaco.transpose(), resi)
    cost_old = np.dot(resi.transpose(), resi)

    epoch = -1
    train_stop = -1
    delta = 0.01
    while epoch < self.training_steps - 1 and train_stop < 0:
        epoch += 1
        print "Epoch: ", epoch
        go_next_epoch = -1

        while go_next_epoch < 0:
            square_g = np.linalg.norm(m_g)
            square_Jg = np.linalg.norm(np.dot(Jaco, m_g))
            alpha = pow(square_g, 2) / pow(square_Jg, 2)
```

```

    h_sd = -alpha * m_g
    h_gn = np.dot(np.linalg.inv(Hessian), -m_g)
    norm_para = np.linalg.norm(init_para)

    ##calculate h_dl
    if np.linalg.norm(h_gn) <= delta:
        h_dl = h_gn
        hdl_type = 0
    elif np.linalg.norm(h_sd) >= delta:
        h_dl = (delta / np.linalg.norm(h_sd)) * h_sd
        hdl_type = 1
    else:
        beta = self._get_h_dl(h_sd, h_gn, delta)
        h_dl = h_sd + beta * (h_gn - h_sd)
        hdl_type = 2

    # #epsilon_2*norm_para:
    if np.linalg.norm(h_dl) < epsilon_2 * (norm_para + epsilon_2):
        train_stop = 1
        break
    else:
        para_0 = init_para + h_dl
        #cost_old = pow(np.linalg.norm(resi), 2)
        resi_new = self.residual(para_0)
        cost_new = np.dot(resi_new.transpose(), resi_new)
        #pow(np.linalg.norm(resi_new), 2)
        #h_sub = h_sd - 0.5 * np.dot(Hessian, h_dl)
        #frac = np.dot(h_dl.transpose(), h_sub)
        if hdl_type == 0:
            frac = cost_new
        elif hdl_type == 1:
            frac = delta/(2*alpha)*(2*np.linalg.norm(alpha*m_g) - delta)
        else:
            frac = 0.5*alpha*pow(beta, 2)*pow(np.linalg.norm(alpha*m_g), 2)
            frac += beta*(2 - beta)*cost_new
        rou = (cost_old - cost_new) /frac
        if rou > 0:
            go_next_epoch = 1
            init_para = para_0
            Jaco = self.Jacobian(init_para)
            Hessian = np.dot(Jaco.transpose(), Jaco)
            resi = self.residual(init_para)
            m_g = np.dot(Jaco.transpose(), resi)

            cost_history[epoch, 0] = cost_new
            cost_history[epoch, 1] = delta
            cost_history[epoch, 2] = np.linalg.norm(m_g)
            print para_0.transpose(), cost_new, delta

            if (np.abs(m_g)).max() < epsilon_1 or (np.abs(resi_new)).max() < epsilon_1:
                train_stop = 1

```

```
        break
    if rou > 0.75:
        delta = max(delta, 3 * np.linalg.norm(h_dl))
    elif rou < 0.25:
        delta /= 2.0
    if delta < epsilon_2:
        break
    cost_old = cost_new
return cost_history, init_para
```

优化收敛位置

参考知乎上面

对于N个参数的系统(神经网络), 对应的Hessian阵是N阶的, 我们假定其本征值的正负概率都是0.5. 因此, 要保证是局部最小值, 则Hessian正定, 意味着所有的本征值都为正。其概率是 $\frac{1}{2^N}$ 。同样, 是局部最大值, 则Hessian阵负定, 概率也为 $\frac{1}{2^N}$ 。因此, 最有可能的是本征值有正有负, 也就是鞍点的情形。但是即使是普通的鞍点, 函数不会震荡, 而是马上逃离。

实际的情形是, 函数收敛到了一个大的平坦区域, 其表现就是一阶导数很小, 以至于在训练结束的时候还没有逃离出这个平坦区域。那么, 我们得从数学上讨论这种平坦区域(平坦马鞍面)具有什么样的性质。可以看下面一个方程:

$$f(x, y) = \frac{\alpha}{2}x^2 - \frac{\beta}{2}y^2$$

$$f_x = \alpha x; f_y = -\beta y.$$
 假设 $\alpha > 0, \beta > 0$

(0, 0)点是唯一的鞍点。在x方向, 该点是局部最小值, 但在y方向, 是局部极大值, 如果 β 很小, 很小是它与学习率r相乘结果与1来说的。假设学习率是r一开始 $y = \Delta_0$, 则一次迭代后

$$\Delta_1 = \Delta_0 + r * \beta * \Delta_0 = (1 + r\beta)\Delta_0$$

$$\Delta_2 = \Delta_1 + r * \beta * \Delta_1 = (1 + r\beta)\Delta_1$$

n次迭代后:

如果训练总的次数为N, $r\beta \leq \frac{1}{N}$, 那N次迭代之后

$(1 + r\beta)^N \Delta_0 \leq (1 + \frac{1}{N})^N \approx e \Delta_0 = 2.71828 \Delta_0$, 这定量的给出了在训练结束的时候, 函数能多大程度的逃离(0, 0)点。

这个模型可以推广到N维情形。假设Hessian阵有N-K个本征值非负, K个小于零。

考虑通过平移后, 鞍点处于(0, 0...0)点附近的二阶展开:

$$L(X) = L(0) + \sum_{i=K+1}^{i=N} \frac{\alpha_i}{2} x_i^2 - \sum_{i=1}^{i=K} \frac{\alpha_i}{2} x_i^2$$

如果满足所有的 $\alpha_i \ll 1, i \in [1, K]$, 这时候, 函数会在很长时间内, 局域在鞍点附件。

可以考虑的时, 怎么通过设计Cost Function来避免产生这些超级马鞍面。

这些超级马鞍面的产生要考虑激活函数吗, 时候Relu比Sigmoid不容易产生这些马鞍面?

激活函数的作用

增加非线性, 增强学习能力

为啥使用收敛慢的(随机)梯度下降法

因为只需要计算一阶导数，而不需要计算二阶，因为几十万以上的参数，计算二阶导数太费时间，内存也是个问题(除非用L-BFGS)

SVD PCA

SVD 将矩阵分解成累加求和的形式，其中每一项的系数即是原矩阵的奇异值。这些奇异值，按之前的几何解释，实际上就是空间超椭球各短轴的长度。现在想象二维平面中一个非常扁的椭圆（离心率非常高），它的长轴远远长于短轴，以至于整个椭圆看起来和一条线段没有什么区别。这时候，如果将椭圆的短轴强行置为零，从直观上看，椭圆退化为线段的过程并不突兀。回到 SVD 分解当中，较大的奇异值反映了矩阵本身的主要特征和信息；较小的奇异值则如例中椭圆非常短的短轴，几乎没有体现矩阵的特征和携带的信息。因此，若我们将 SVD 分解中较小的奇异值强行置为零，则相当于丢弃了矩阵中不重要的一部分信息。

因此，SVD 分解至少有两方面作用：

- 分析了解原矩阵的主要特征和携带的信息(取若干最大的奇异值)，这引出了主成分分析(PCA)；
- 丢弃忽略原矩阵的次要特征和携带的次要信息(丢弃若干较小的奇异值)，这引出了信息有损压缩、矩阵低秩近似等话题。

项目背景

随着半导体工艺中，芯片中的尺寸越来越小，光学衍射效应越来越明显，单纯的几何光学(初中物理老师告诉你，光是直线传播的，这其实说的是，光是粒子，但光通过狭窄的缝隙会发生衍射效应，这时，光不是直线传播的了)以及不适用，要考虑光的衍射效应。光通过Musk就相当于一次傅里叶变化，从时域变到了频率域。再通过棱镜，又相当于一次傅里叶变换，从频率域变到时域。但棱镜的尺寸有限，因此只接收了低频波，因此，用图像处理的话来说，棱镜的作用就是一个低通滤波器。去掉了高频部分，因此投影到wafer(晶圆)上的图案不再菱角分明，而是在边界处会比较圆滑。

如果没有一些傅里叶光学的背景，你们听起来会比较费劲，但是如果你们有图像处理的背景的话，就记住把Musk上的图案刻蚀到晶圆上就是经历了两次傅里叶变换再加一个低通滤波器。

光通过单缝后，其频谱是连续的，但是经过周期性(结构)缝，其频谱就是离散的，如果为了节约棱镜的开支，就只能取很低的频谱。

光学建模是个逆问题(逆问题的例子，就是CT，通过收集到的信号来反推身体的内部结构)。(怎么把逆问题与深度学习，机器学习联系起来？)，再通俗点，它实际上和机器学习，深度学习要处理的问题是一样的，就是求解一个模型，就是train一个model。正向过程就是你已经训练好了一个模型(取啥例子？)，然后输入一张图，看它的分类是啥，这很容易，难得是，我有一堆分类好的图片，让你训练一个model。逆问题就是一个优化问题，因此就设计到一些优化算法，这时候考点就来了？有哪些优化算法，总结下，有两种，线性搜索方法(linear search)以及 trust region。但是对于这个求逆问题而言，是很复杂的，直接离散的话，参数基本在10的15次方以上，总之，这个求逆问题是很难的，即使求出来，也不会很准。因此，我们有两个研究的方向。直接通过光学图像(也就是将要刻蚀在wafer上的电路板)来反求印刷这张图像的模板(Musk)，其实这个光刻就像拍照片，拍的物体(比如风景)就是Musk，wafer就相当于胶卷，wafer上的图像就相当于风景在胶卷上的投缘。

第一个方向是，直接通过光学图像(也就是将要刻蚀在wafer上的电路板)来反求印刷这张图像的模板(Musk)，我们的模型就是卷积网络，因为多层网络可以用来近似任何一个函数(通用近似定理 (Universal approximation theorem, 一译万能逼近定理)」指的是：如果一个前馈神经网络具有线性输出层和至少一层隐藏层，只要给予网络足够数量的神经元，便可以实现以足够高精度来逼近任意一个在 R^n 的紧子集 (Compact subset) 上的连续函数。只要神经元足够多，再加一个激活函数)，当然可以用来近似这个求逆过程。但是这条路风险很大，因此，我们有了第二条研究的路径，就是修正原有的物理模型，使得它更powerful，也就是说，我们仍然需要建立物理model，来进行求逆过程，得到一个物理的model，只是，这个model不是足够强大，会有一些缺陷，因此，我们想通过一个CNN来修正这个model，来让我们的模型更有效。这就是大致的背景。背景讲清楚了，我们就该讲我们是怎么做的了。

搭建GPU环境，装显卡驱动(显卡驱动，蓝屏)，cuda, cudnn，但是发现不能使用apt-get install东西，重装了很多次系统，装了不同的ubuntu系统，从12.04到16.04的五个不同版本，折腾了一周。(因此因为公司的IP保护，无线网卡解决问题) 我们一开始做了些尝试，用了CNN, VGG, 遇到的问题(图像预处理，亚像素的偏移)，数据集不够，因为真实数据都是机密(IP)，不可以轻易拿到。自己去切割图像，通过有经验的人工来做分类。再通过翻转这些操作来增加数据集。此外，数据集也是很讲究的，你得保证同一数据集中的物理参数，焦距，偏振方向都是一致的，焦距不同，得到的图像模糊程度不同。很长一段时间，我们都在用记忆卷积，反卷积的深度神经网络，都没发现很好的效果。后来使用了pre-trained model, 因为我们的数据量少(30000张图)，但是经过CNN处理过的图像，并不比没有处理的图像好，这就尴尬了，因此，我们一直加深网络。

Linear Search Methods

the steepest descent algorithm proceeds as follows: at each step, starting from the point $x^{(k)}$, we conduct a line search in the direction $-\nabla f(x^{(k)})$, until a minimizer, $x^{(k+1)}$, is found.

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x^{(k)} - \alpha \nabla f(x^{(k)}))$$

Proposition 8.1: if $x^{(k)}$ is the steepest descent sequence for $f: R^n \rightarrow R$, then for each k the vector $x^{(k+1)} - x^{(k)}$ is orthogonal to the vector $x^{(k+2)} - x^{(k+1)}$

Proposition 8.2: if $x^{(k)}$ is the steepest descent sequence for $f: R^n \rightarrow R$ and if $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, then

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$$

Stopping criterion:

$$\frac{|f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})|}{\|f(x^{(k)})\|} < \epsilon$$

Example: Quadratic function of the form:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Q x - b^T x$$

Gradient: $g^{(k)} = \nabla f(x^{(k)}) = Qx - b$

$$\text{so } x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k g^{(k)}$$

where:

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x^{(k)} - \alpha g^{(k)}) = \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} \left(\frac{1}{2}(x^{(k)} - \alpha g^{(k)})^T Q (x^{(k)} - \alpha g^{(k)}) - (x^{(k)} - \alpha g^{(k)})^T b \right)$$

Hence:

$$\alpha_k = \frac{g^{(k)T} g^{(k)}}{g^{(k)T} Q g^{(k)}}$$

Covergence properties:

Define:

$$V(x) = f(x) + \frac{1}{2}x^{*T} Q x^* = \frac{1}{2}(x - x^*)^T Q (x - x^*)$$

With: $x^* = Q^{-1}b$

Lemma 8.1 The iterative algorithm

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k g^{(k)}$$

with $g^{(k)} = Qx^{(k)} - b$ satisfies

$$V(x^{(k+1)}) = (1 - \gamma_k)V(x^{(k)}),$$

where, if $g^{(k)} = 0$ then $\gamma_k = 1$, and if $g^{(k)} \neq 0$ then:

$$\blacksquare \gamma_k = \alpha_k \frac{g^{(k)T} Q g^{(k)}}{g^{(k)T} Q^{-1} g^{(k)}} (2 \frac{g^{(k)T} g^{(k)}}{g^{(k)T} Q g^{(k)}} - \alpha_k)$$

Submit α_k into γ_k , then

$$\blacksquare \gamma_k = \frac{(g^{(k)T} g^{(k)})^2}{(g^{(k)T} Q g^{(k)})(g^{(k)T} Q^{-1} g^{(k)})}$$

Theorem 8.1 Let $x^{(k)}$ be the sequence resulting from a gradient algorithm

$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k g^{(k)}$. Let γ_k be as defined in Lemma 8.1, and suppose that $\gamma_k > 0$ for all k , then $x^{(k)}$ converges to x^* for any initial condition $x^{(0)}$ if and only if:

$$\blacksquare \sum_{x=0}^{\infty} \gamma_k = \infty$$

Theorem 8.2 In the steepest descent algorithm, we have

$$\blacksquare x^{(k)} \rightarrow x^* \text{ for any } x^{(0)}$$

Theorem 8.3 For the fixed step size gradient algorithm, $x^{(k)} \rightarrow x^*$ for any $x^{(0)}$

if and only if $0 < \alpha < \frac{2}{\lambda_{\max}(Q)}$

Convergence Rate:

Theorem 8.4 In the method of steepest descent applied to the quadratic function, at every step k , we have :

$$\blacksquare V(x^{(k+1)}) \leq \left(\frac{\lambda_{\max}(Q) - \lambda_{\min}(Q)}{\lambda_{\max}(Q)}\right) V(x^{(k)}).$$

Let:

$$\blacksquare r = \frac{\lambda_{\max}(Q)}{\lambda_{\min}(Q)} = \|Q\| \|Q^{-1}\| \text{ the so-called condition number of } Q.$$

Then, it follows from Theorem 8.4 that $V(x^{(k+1)}) \leq (1 - \frac{1}{r})V(x^{(k)})$. We refer to $1 - \frac{1}{r}$ as the convergence ratio. If $r = 1$, then $\lambda_{\max}(Q) = \lambda_{\min}(Q)$, corresponding to circular contours of f . You can use the convergence ratio r to judge the speed of convergence.

Definition 8.1 Given a sequence $x^{(k)}$ that converges to x^* , that is, $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$, we say that the order of convergence is o , where $p \in R$, if $0 < \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^{(k+1)} - x^*}{\|x^{(k)} - x^*\|^p} < \infty$, if for all $p > 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^{(k+1)} - x^*}{\|x^{(k)} - x^*\|^p} = 0$,

then we say that the order of convergence is ∞ .

Lemma 8.3. In the steepest descent algorithm, if $g^{(k)} \neq 0$ for all k , then $\gamma_k = 1$ if and only if $g^{(k)}$ is an eigenvector of Q .

Theorem 8.6 Let $x^{(k)}$ be the sequence resulting from a gradient algorithm applied to a function f . Then, the order of convergence of $x^{(k)}$ is 1 in the worst case, that is, there exist a function f and an initial $x^{(0)}$ such that the order of convergence of $x^{(k)}$ is equal 1.

Newton's Method

$$\blacksquare f(x) = f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})^T g^{(k)} + \frac{1}{2}(x - x^{(k)})^T F(x^{(k)})(x - x^{(k)})$$

Theorem 9.1 Suppose that $f \in C^3$, and $x^* \in R^n$ is a point such that $\nabla f(x^*) = 0$ and $F(x^*)$ is invertible. Then, for all $x^{(0)}$ sufficiently close to x^* , Newton's method is well defined for all k , and converges to x^* with order of convergence at least 2.

As stated in the above theorem, Newton's methods has superlinear convergence properties if the starting point is near the solution. However, the method is not guaranteed to converge to the solution if we start away from it (in fact, it may not even be well defined because the Hessian may be singular). In particular, the method may not be a descent method; that is, it is possible that $f(x^{(k+1)}) > f(x^{(k)})$. Fortunately, it is possible to modify the algorithm such that descent property holds. To see this, we need the following result.

Theorem 9.2 Let $x^{(k)}$ be the sequence generated by Newton's method for minimizing a given objective function $f(x)$. If the Hessian $F(x^{(k)}) > 0$ and $g^{(k)} = \nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, then the direction $d^{(k)} = -F(x^{(k)})^{-1}g^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ from $x^{(k)}$ to $x^{(k+1)}$ is a descent direction for f in the sense that there exists an $\alpha > 0$ such that for all $a \in (0, \alpha)$,

$$f(x^{(k)} + ad^{(k)}) < f(x^{(k)}).$$

The above theorem motivates the following modification of Newton's method:

$$\blacksquare x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k F(x^{(k)})^{-1} g^{(k)} \text{ where}$$

$$\blacksquare \alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha > 0} f(x^{(k)} - \alpha_k F(x^{(k)})^{-1} g^{(k)})$$

A drawback of Newton's method is that evaluation of $F(x^{(k)})$ for large n can be computationally expensive. Furthermore, we have to solve the set of n linear equations $F(x^{(k)})d^{(k)} = -g^{(k)}$. In the Chapters 10 and 11, we discuss methods that alleviate this difficulty.

Levenberg-Marquardt Modification:

If the Hessian matrix $F(x^{(k)})$ is not positive definite, then the search direction

$d^{(k)} = -F(x^{(k)})^{-1}g^{(k)}$ may not point in a descent direction. A simple technique to ensure that the search direction is a descent direction is to introduce the so-called Levenberg-Marquardt Modification to Newton's algorithm:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha_k F(x^{(k)} + u_k I)^{-1} g^{(k)}$$

where $u_k \geq 0$

Newton's methods for nonlinear least-squares

Consider the following problem:

$$\text{minimize } \sum_{i=1}^m (r_i(x))^2$$

where $r_i : R^n \rightarrow R, i = 1, \dots, m$, are given functions. This particular problem is called a nonlinear least-squares problem

$$\boxed{F_{jk} = 2 \sum_i \left(\frac{\partial r_i}{\partial x_j} \frac{\partial r_i}{\partial x_k} + r_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)},$$

$$\text{Let } s(x) = r_i(x) \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_k}(x)$$

So the Hessian matrix as

$$\boxed{F(x) = 2(J(x)^T J(x) + S(x))}.$$

Therefore, Newton's method applied to the nonlinear least-squares problems is given by

$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J(x)^T J(x) + S(x))^{-1} J(x)^T r(x)}$. In some case, $s(x)$ can be ignored because its components are negligibly small. In this case, the above Newton's algorithm reduces to what is commonly called the Gauss-Newton method:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J(x)^T J(x))^{-1} J(x)^T r(x).$$

A potential problem with the Gauss-Newton method is that the matrix $J(x)^T J(x)$ may not be positive definite. As described before, this problem can be overcome using a Levenberg-Marquardt modification:

$$\boxed{x^{(k+1)} = x^{(k)} - (J(x)^T J(x) + u_k I)^{-1} J(x)^T r(x)}.$$

Conjugate Direction Methods

The conjugate direction methods typically perform better than the method of steepest descent, but not as well as Newton's method. As we saw from the method of steepest descent and Newton's method, the crucial factor in the efficiency of an iterative search method is the direction of the search at each iteration.

Definition 10.1 Let Q be a real symmetric $n \times n$ matrix. The directions $d^{(0)}, d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(m)}$ are Q -conjugate if, for all $i \neq j$, we have $d(i)^T Q d(j) = 0$.

Lemma 10.1 Let Q be a symmetric positive definite $n \times n$ matrix. If the directions

$d^{(0)}, d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(m)} \in R^n, k \leq n - 1$, are nonzero and Q -conjugate, then they are linearly independent.

Basic conjugate Direction Algorithm. Given a start $x^{(0)}$, and Q -conjugate direction

$$\blacksquare d^{(0)}, d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(m)}, \text{ for } k \geq 0,$$

$$\blacksquare g^{(k)} = \nabla f(x^{(k)}) = Qx^{(k)} - b,$$

$$\blacksquare \alpha_k = -\frac{g^{(k)T} d^{(k)}}{d^{(k)T} Q d^{(k)}}$$

$$\blacksquare x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$$

Theorem 10.1 For any starting point $x^{(0)}$, the basic conjugate direction algorithm converges to the unique x^* (that solves $Qx = b$) in n steps; that is, $x^{(n)} = x^*$

□

Lemma 10.2 In the conjugate direction algorithm,

$$\blacksquare g^{(k+1)T} d^{(i)} = 0 \text{ for all } k,$$

$0 \leq k \leq n - 1$, and $0 \leq i \leq k$

The conjugate gradient algorithm is summarized below.

1. Set $k := 0$; select the initial point $x^{(0)}$

2. $\blacksquare g^{(0)} = \nabla f(x^{(0)})$. If $g^{(0)} = 0$, stop, else set $d^{(0)} = -g^{(0)}$. 3.

$$\blacksquare \alpha_k = -\frac{g^{(k)T} d^{(k)}}{d^{(k)T} Q d^{(k)}}$$

3. $\blacksquare x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$

4. $\blacksquare g^{(k+1)} = \nabla f(x^{k+1})$. If $g^{(k+1)} = 0$, stop.

5. $\blacksquare \beta_k = -\frac{g^{(k+1)T} Q d^{(k)}}{d^{(k)T} Q d^{(k)}}$ 7. $\blacksquare d^{(k+1)} = -g^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$

6. Set $k := k+1$; go to step 3.

Proposition 10.1 In the conjugate gradient algorithm, the directions $d^{(0)}, d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(n-1)}$ are Q-conjugate.

最优化方法

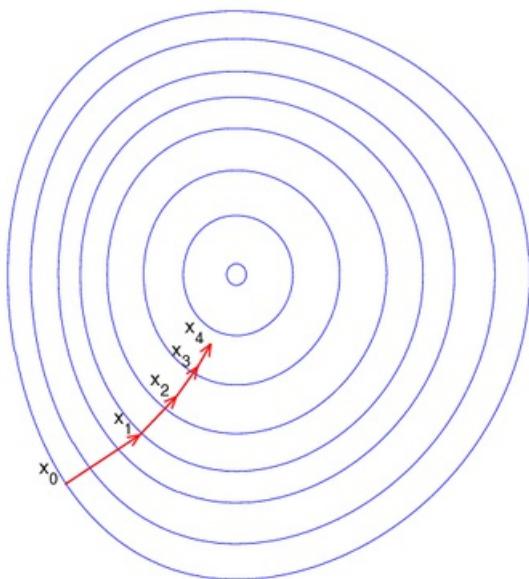
最速下降法, 牛顿法, LBFGS

1. 梯度下降法(Gradient Descent)

梯度下降法是最早最简单, 也是最为常用的最优化方法。梯度下降法实现简单, 当目标函数是凸函数时, 梯度下降法的解是全局解。一般情况下, 其解不保证是全局最优解, 梯度下降法的速度也未必是最快的。

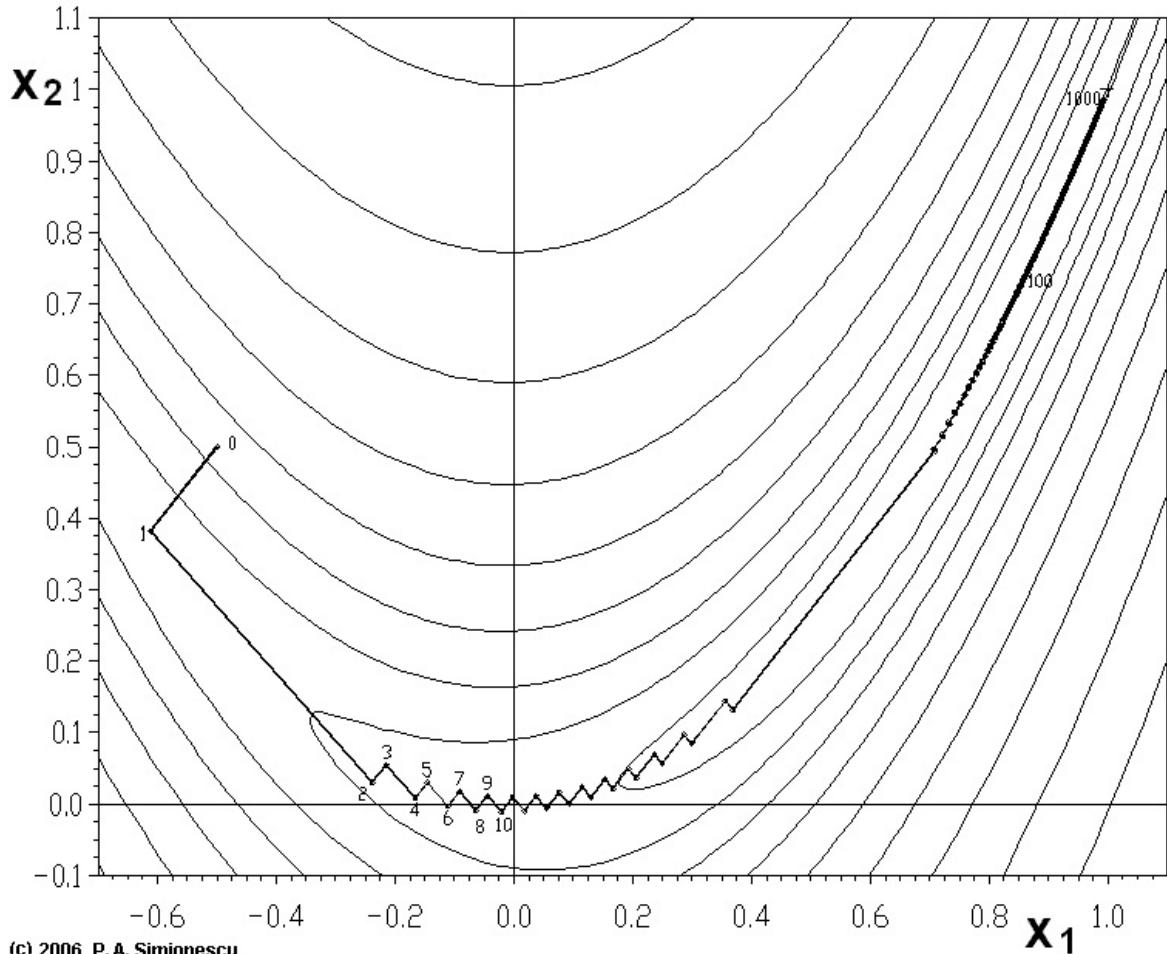
梯度下降法的优化思想是用当前位置负梯度方向作为搜索方向, 因为该方向为当前位置的最快下降方向, 所以也被称为是“最速下降法”。最速下降法越接近目标值, 梯度趋于0, 所以步长越小, 前进越慢。

梯度下降法的搜索迭代示意图如下图所示:



梯度下降法的缺点:

(1) 越靠近极小值的地方收敛速度越慢, 如下图所示



(c) 2006 P. A. Simionescu

从上图可以看出，梯度下降法在接近最优解的区域收敛速度明显变慢，利用梯度下降法求解需要很多次的迭代。

在机器学习中，基于基本的梯度下降法发展了两种梯度下降方法，分别为随机梯度下降法和批量梯度下降法。

比如对一个线性回归(Linear Logistics)模型，假设下面的 $h(x)$ 是要拟合的函数， $J(\theta)$ 为损失函数， θ 是参数，要迭代求解的值， θ 求解出来了那最终要拟合的函数 $h(\theta)$ 就出来了。其中 m 是训练集的样本个数， n 是特征的个数。

$$h(\theta) = \sum_{j=0}^n \theta_j x_j \quad J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (y^i - h_\theta(x^i))^2$$

//n是特征的个数，m的训练样本的数目

1) 批量梯度下降法 (Batch Gradient Descent, BDG)

(1) 将 $J(\theta)$ 对 θ 求偏导，得到每个 θ 对应的梯度：

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y^i - h_\theta(x^i)) x_j^i$$

(2) 由于要最小化风险函数，所以按照每个参数 θ 的负梯度方向来更新 θ

$$\theta'_j = \theta_j - \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = \theta_j + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y^i - h_\theta(x^i)) x_j^i$$

(3) 从上面公式可以注意到，它得到的是一个全局最优解，但是每迭代一步，都要用到训练集所有的数据，如果 m 很大，那么可想而知这种方法的迭代速度会相当的慢。所以，这就引入了另外一种方法——随机梯度下降。

一个实验结果，说明随机梯度下降法能收敛到最终结果：

对于批量梯度下降法，样本个数 m , x 为 n 维向量，一次迭代需要把 m 个样本全部带入计算，迭代一次计算量为 $m * n^2$ 。

2) 随机梯度下降 (Stochastic Gradient Descent, SGD)

(1) 上面的风险函数可以写成如下这种形式，损失函数对应的是训练集中每个样本的粒度，而上面批量梯度下降对应的是所有的训练样本

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (y^i - h_\theta(x^i))^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m cost(\theta, (x^i, y^i))$$

$$cost(\theta, (x^i, y^i)) = \frac{1}{2} (y^i - h_\theta(x^i))^2$$

(2) 每个样本的损失函数，对 θ 求偏导得到对应的梯度，来更新 θ

$$\theta'_j = \theta_j + (y^i - h_\theta(x^i)) x_j^i$$

(3) 随机梯度下降是通过每个样本来迭代更新一次，如果样本量很大的情况（例如几十万），那么可能只用其中几万条或者几千条的样本，就已经将 θ 迭代到最优解了，对比上面的批量梯度下降，迭代一次需要用到十几万训练样本，一次迭代不可能最优，如果迭代 10 次的话就需要遍历训练样本 10 次。但是，SGD 伴随的一个问题是噪音较 BGD 要多，使得 SGD 并不是每次迭代都向着整体最优化方向。

随机梯度下降每次迭代只使用一个样本，迭代一次计算量为 n^2 ，当样本个数 m 很大的时候，随机梯度下降迭代一次的速度要远高于批量梯度下降方法。两者的关系可以这样理解：随机梯度下降方法以损失很小的一部分精确度和增加一定数量的迭代次数为代价，换取了总体的优化效率的提升。增加的迭代次数远远小于样本的数量。

比较批量梯度下降法与随机梯度下降法：

用 $y = 2 * x1 + x2 - 1 + rand(0, 1)$ 产生1000组数, 用这一组数据来反求产生函数中的系数

$$(2, 1, -1)^T.$$

迭代停止条件就是, 训练得到的相邻两次参数的差的范数小于0.000001(严格来说, 停止条件是损失函数一介导数等于0, 也就是 $L'(\theta) = -\frac{1}{m}X^T(X\theta - Y) = 0$).

1)批量梯度下降法: 1000个样本, 设置的learn rate = 0.0001, 一次迭代所有1000个样本, 最终经过38000次迭代收敛到可以接受的标准。如果设置learn rate 是较大的值, 比如为1, 则发现结果马上发散了, 因此批量梯度下降法对learn rate比较敏感, 而下面的随机梯度下降法就不会出现这个问题, 因为每次只对一个样本进行处理, 即使这个样本对参数的梯度很大, 但是下一个样本又可以马上把参数拉回来。

```
C:\Windows\system32\cmd.exe
Grad:4.34235e-05 1.78119e-05 -0.00100021
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993389 para diff norm: 1.00131e-06 iter num: 37888
Grad: 4.3417e-05 1.78092e-05 -0.00100005
Paras: 1.99971 0.999882 -0.99339 para diff norm: 1.00115e-06 iter num: 37889
Grad: 4.34104e-05 1.78065e-05 -0.000999903
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993391 para diff norm: 1.001e-06 iter num: 37890
Grad: 4.34038e-05 1.78038e-05 -0.000999751
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993392 para diff norm: 1.00085e-06 iter num: 37891
Grad:4.33973e-05 1.78011e-05 -0.0009996
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993393 para diff norm: 1.0007e-06 iter num: 37892
Grad: 4.33907e-05 1.77984e-05 -0.000999449
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993394 para diff norm: 1.00055e-06 iter num: 37893
Grad: 4.33841e-05 1.77957e-05 -0.000999298
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993395 para diff norm: 1.0004e-06 iter num: 37894
Grad: 4.33776e-05 1.7793e-05 -0.000999147
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993396 para diff norm: 1.00025e-06 iter num: 37895
Grad: 4.3371e-05 1.77903e-05 -0.000998996
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993397 para diff norm: 1.00009e-06 iter num: 37896
Grad: 4.33644e-05 1.77876e-05 -0.000998844
Paras: 1.99971 0.999882 -0.993398 para diff norm: 9.99944e-07 iter num: 37897
pass
solution:
 1.99971
 0.999882
 -0.993398
Golden Solution:
 2
 1
 -1
Press any key to continue . . .
```

2)随机梯度下降法:

1000个样本, 设置的learn rate = 1, 一次迭代处理一个样本, 最终经过25000次迭代收敛到可以接受的标准。

```
cmd C:\Windows\system32\cmd.exe
Paras: 1.99795 0.9998981 -0.951616 para diff norm: 0.000446962 iter num: 24714
Paras: 1.99818 0.999232 -0.951604 para diff norm: 0.000338804 iter num: 24715
Paras: 1.99816 0.99922 -0.951605 para diff norm: 1.82845e-05 iter num: 24716
Paras: 1.99805 0.998911 -0.951617 para diff norm: 0.000328846 iter num: 24717
Paras: 1.99804 0.998721 -0.951623 para diff norm: 0.000190122 iter num: 24718
Paras: 1.9981 0.999161 -0.951611 para diff norm: 0.000444339 iter num: 24719
Paras: 1.99816 0.999501 -0.951604 para diff norm: 0.000344163 iter num: 24720
Paras: 1.99813 0.998416 -0.951627 para diff norm: 0.00108582 iter num: 24721
Paras: 1.99815 0.998517 -0.951624 para diff norm: 0.000102945 iter num: 24722
Paras: 1.99834 0.999645 -0.951597 para diff norm: 0.00114423 iter num: 24723
Paras: 1.99829 0.999464 -0.951642 para diff norm: 0.000192287 iter num: 24724
Paras: 1.99833 0.99955 -0.95164 para diff norm: 9.18398e-05 iter num: 24725
Paras: 1.99831 0.99951 -0.951641 para diff norm: 4.20315e-05 iter num: 24726
Paras: 1.99805 0.999223 -0.951665 para diff norm: 0.000389985 iter num: 24727
Paras: 1.99804 0.999007 -0.951669 para diff norm: 0.000216928 iter num: 24728
Paras: 1.99784 0.998829 -0.951689 para diff norm: 0.000266407 iter num: 24729
Paras: 1.99765 0.998724 -0.951707 para diff norm: 0.000220029 iter num: 24730
Paras: 1.99779 0.998928 -0.951696 para diff norm: 0.000248953 iter num: 24731
Paras: 1.99774 0.998884 -0.9517 para diff norm: 6.50401e-05 iter num: 24732
Paras: 1.99774 0.998884 -0.9517 para diff norm: 5.54896e-07 iter num: 24733
pass
solution:
1.99774
0.998884
-0.9517
Golden Solution:
2
1
-1
Press any key to continue . . .
```

3)牛顿法

```
cmd C:\Windows\system32\cmd.exe
Paras: 1.99954 1 -0.99909 para diff norm: 1.0188e-06 iter num: 7691
Paras: 1.99955 1 -0.999091 para diff norm: 1.01778e-06 iter num: 7692
Paras: 1.99955 1 -0.999091 para diff norm: 1.01676e-06 iter num: 7693
Paras: 1.99955 1 -0.999092 para diff norm: 1.01575e-06 iter num: 7694
Paras: 1.99955 1 -0.999093 para diff norm: 1.01473e-06 iter num: 7695
Paras: 1.99955 1 -0.999094 para diff norm: 1.01372e-06 iter num: 7696
Paras: 1.99955 1 -0.999095 para diff norm: 1.0127e-06 iter num: 7697
Paras: 1.99955 1 -0.999096 para diff norm: 1.01169e-06 iter num: 7698
Paras: 1.99955 1 -0.999097 para diff norm: 1.01068e-06 iter num: 7699
Paras: 1.99955 1 -0.999098 para diff norm: 1.00967e-06 iter num: 7700
Paras: 1.99955 1 -0.999099 para diff norm: 1.00866e-06 iter num: 7701
Paras: 1.99955 1 -0.9991 para diff norm: 1.00765e-06 iter num: 7702
Paras: 1.99955 1 -0.999101 para diff norm: 1.00664e-06 iter num: 7703
Paras: 1.99955 1 -0.999101 para diff norm: 1.00564e-06 iter num: 7704
Paras: 1.99955 1 -0.999102 para diff norm: 1.00463e-06 iter num: 7705
Paras: 1.99955 1 -0.999103 para diff norm: 1.00363e-06 iter num: 7706
Paras: 1.99955 1 -0.999104 para diff norm: 1.00262e-06 iter num: 7707
Paras: 1.99955 1 -0.999105 para diff norm: 1.00162e-06 iter num: 7708
Paras: 1.99955 1 -0.999106 para diff norm: 1.00062e-06 iter num: 7709
Paras: 1.99955 1 -0.999107 para diff norm: 9.99617e-07 iter num: 7710
pass
solution:
1.99955
1
-0.999107
Golden Solution:
2
1
-1
Press any key to continue . . .
```

对批量梯度下降法和随机梯度下降法的总结：

批量梯度下降---最小化所有训练样本的损失函数，使得最终求解的是全局的最优解，即求解的参数是使得风险函数最小，但是对于大规模样本问题效率低下。

随机梯度下降---最小化每条样本的损失函数，虽然不是每次迭代得到的损失函数都向着全局最优方向，但是大的整体的方向是向全局最优解的，最终的结果往往是在全局最优解附近，适用于大规模训练样本情况。

从实验数据来看，批量梯度下降法收敛到的是全局最优值，而随机梯度下降法收敛到最优值附件的地方。随机梯度下降法的好处是收敛远快于批量梯度下降法。

问题可以转化成寻找一组 λ 使得: $L(\lambda) = (X * \lambda - Y)^T (X * \lambda - Y)$ 极小

利用 $L(\lambda)$ 对向量 λ 求导可以得到¹:

$$\frac{\partial L(\lambda)}{\partial \lambda} = 2X^T(X\lambda - Y) = 0$$

我们也可以得到:

$$\frac{\partial^2 L(\lambda)}{\partial \lambda^2} = 2X^T X$$

$$X(n+1) = X(n) - f'(X(n))/f''(X(n))$$

```
MatrixXd Iteration::BathGradDescent(MatrixXd paras, int iterator_num)
{
    int rows = m_input_data.rows();
    int cols = m_input_data.cols();
    MatrixXd init_paras = paras;
    if (m_input_data.cols() == paras.rows())
    {
        MatrixXd grad = (1.0 / rows)*m_input_data.transpose()*(m_output_data - m_input_data*init_paras);
        paras += m_learn_rate*grad;
    }
    else
    {
        //error
    }
    return paras;
}

MatrixXd Iteration::StocGradDescent(MatrixXd paras, int index)
{
    int rows = m_input_data.rows();
    int cols = m_input_data.cols();
    MatrixXd input_data_i(1,cols);
    MatrixXd output_data_i(1, 1);
    output_data_i(0, 0) = m_output_data(index,0);

    for (int i = 0; i < cols; i++)
    {
        input_data_i(0, i) = m_input_data(index, i);
    }

    if (m_input_data.cols() == paras.rows())
    {
        MatrixXd grad = (1.0 / rows) *input_data_i.transpose()*(input_data_i*paras - output_data_i);
        paras = paras - grad;
    }
    else
    {
```

```

    //error
}
return paras;
}

```

由于牛顿法是基于当前位置的切线来确定下一次的位置，所以牛顿法又被很形象地称为是"切线法"。牛顿法的搜索路径(二维情况)如下图所示：

牛顿法搜索动态示例图：

牛顿法和拟牛顿法 (Newton's method &Quasi-Newton methods)

1)牛顿法 (Newton's method)

牛顿法是一种在实数域和复数域上近似求解方程的方法。方法使用函数 $f(x)$ 的泰勒级数的前面几项来寻找方程 $f(x) = 0$ 的根。¹牛顿法最大的特点就在于它的收敛速度很快。

步骤：

首先，选择一个接近函数 $f(x)$ 零点的 x_0 ，计算相应的计算相应的 $f(x_0)$ 和切线斜率 $f'(x_0)$ 。然后计算穿过点 $(x_0, f(x_0))$ 并且斜率为 $f'(x_0)$ 的直线和x轴的交点的x轴坐标，也就是如下方程：

$$x * f'(x_0) + f(x_0) - x_0 * f'(x_0) = 0$$

我们将新求得的点的 x 坐标命名为 x_1 ，通常 x_1 会比 x_0 更接近方程 $f(x) = 0$ 的解。因此我们现在可以利用 x_1 开始下一轮迭代。迭代公式可化简为如下所示：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \frac{1}{1}$$

如果X是向量，则可以写成向量形式：

已经证明，如果 $f'(x)$ 是连续的，并且待求的零点 x 是孤立的，那么在零点 x 周围存在一个区域，只要初始值 x_0 位于这个邻近区域内，那么牛顿法必定收敛。并且，如果 $f'(x)$ 不为0，那么牛顿法将具有平方收敛的性能。粗略的说，这意味着每迭代一次，牛顿法结果的有效数字将增加一倍。下图为一个牛顿法执行过程的例子。



关于牛顿法和梯度下降法的效率对比：

从本质上去看，牛顿法是二阶收敛，梯度下降是一阶收敛，所以牛顿法就更快。如果更通俗地说的话，比如你想找一条最短的路径走到一个盆地的最底部，梯度下降法每次只从你当前所处位置选一个坡度最大的方向走一步，牛顿法在选择方向时，不仅会考虑坡度是否够大，还会考虑你走了一步之后，坡度是否会变得更大。所以，可以说牛顿法比梯度下降法看得更远一点，能更快地走到最底部。（牛顿法目光更加长远，所以少走弯路；相对而言，梯度下降法只考虑了局部的最优，没有全局思想。）

根据wiki上的解释，从几何上说，牛顿法就是用一个二次曲面去拟合你当前所处位置的局部曲面，而梯度下降法是用一个平面去拟合当前的局部曲面，通常情况下，二次曲面的拟合会比平面更好，所以牛顿法选择的下降路径会更符合真实的最优下降路径。



注：红色的牛顿法的迭代路径，绿色的是梯度下降法的迭代路径。

牛顿法的优缺点总结：

优点：二阶收敛，收敛速度快；

缺点：牛顿法是一种迭代算法，每一步都要求解目标函数的Hessian矩阵的逆矩阵，计算比较复杂。

2) 拟牛顿法 (Quasi-Newton Methods)

拟牛顿法是求解非线性优化问题最有效的方法之一，于20世纪50年代由美国Argonne国家实验室的物理学家W.C.Davidon所提出来。Davidon设计的这种算法在当时看来是非线性优化领域最具创造性的发明之一。不久R. Fletcher和M. J. D. Powell证实了这种新的算法远比其他方法快速和可靠，使得非线性优化这门学科在一夜之间突飞猛进。

拟牛顿法的本质思想是改善牛顿法每次都要求解复杂的Hessian矩阵的逆矩阵的缺陷，它使用正定矩阵来近似Hessian矩阵的逆，从而简化了运算的复杂度。拟牛顿法和最速下降法一样只要求每一步迭代时知道目标函数的梯度。通过测量梯度的变化，构造一个目标函数的模型使之足以产生超线性收敛性。这类方法大大优于最速下降法，尤其对于困难的问题。另外，因为拟牛顿法不需要二阶导数的信息，所以有时比牛顿法更为有效。如今，优化软件中包含了大量的拟牛顿算法用来解决无约束、约束和大规模的优化问题。

具体步骤：

拟牛顿法的基本思想如下。首先构造目标函数在当前迭代 x_k 的二次模型：

$$m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{p^T B_k p}{2}$$

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f(x_k)$$

这里 B_k 是一个对称正定矩阵，于是我们取这个二次模型的最优解作为搜索方向，并且得到新的迭代点：

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

其中我们要求步长 α_k 满足Wolfe条件。这样的迭代与牛顿法类似，区别就在于用近似的Hesse矩阵 B_k 代替真实的Hesse矩阵。所以拟牛顿法最关键的地方就是每一步迭代中矩阵 B_k 的更新。现在假设得到一个新的迭代 x_{k+1} ，并得到一个新的二次模型：

这个公式被称为割线方程。常用的拟牛顿法有DFP算法和BFGS算法。

最优化方法：牛顿迭代法和拟牛顿迭代法

共轭梯度法

共轭梯度法 (Conjugate Gradient) 是介于最速下降法与牛顿法之间的一个方法，它仅需要一阶导数信息，但克服了最速下降法收敛慢的缺点，同时又避免了牛顿法需要储存和计算Hesse矩阵并求逆的缺点，共轭梯度法不仅是解决大型线性方程组最有用的方法之一，也是解大型非线性最优

化问题最有效的算法之一。向量共轭的定义：若 \mathbf{A} 是正定对称阵，若非0矢量 \mathbf{u}, \mathbf{v} 满足，

$\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{v} = 0$, 则称矢量 \mathbf{u}, \mathbf{v} 是共轭的。假设：
 $\mathbf{P} = [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n]$ 是一组基于 \mathbf{A} 的共轭矢量，

则 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的解 \mathbf{x}^* 可以表示为：
 $\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{p}_i$,

因此基于基矢量展开，我们有：

$$\mathbf{Ax}_* = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{Ap}_i \text{ 左乘 } \mathbf{P}_k^T : \quad \mathbf{P}_k^T \mathbf{Ax}_* = \sum_{i=1}^n \alpha_i P_k^T \mathbf{Ap}_i \text{ 代入} :$$

$$\mathbf{P}_k^T \mathbf{Ax}_* = \mathbf{b}, \mathbf{u}^T \mathbf{Av} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_A,$$

利用 $i! = k$, 有 $\langle \mathbf{p}_k, \mathbf{p}_i \rangle_A = 0$ 就得到：

如果我们的小心的选择 \mathbf{p}_k , 为了获得解 \mathbf{x}_* 的一个好的近似，我们并不需要所有的基向量。因此，我们把共轭梯度算法当成一种迭代算法，它也允许我们近似 n 很大，以至于直接求解需要花费太多时间的系统。我们给 \mathbf{x}_* 一个初始猜测值 \mathbf{x}_0 , 假设 $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$, 在求解的过程中，我们需要一种标准来告诉我们是否我们的解更靠近真实的解 \mathbf{x}_* , 实际上，求解 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 等价于求解如下二次函数的极小

值：
 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T \mathbf{b}$, 他存在唯一的最小值，因为他的二阶导是正定的：

$$\mathbf{D}^2 \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}, \text{ 解就是一阶导数等于0的地方} \quad \mathbf{D}\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}, \text{ 假设第一个基矢 } \mathbf{p}_0 \text{ 就是 } f(x) \text{ 在 } \mathbf{x} = \mathbf{x}_0 \text{ 处的负梯度，我们可以假设}$$

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}. \text{ 因此:} \quad \mathbf{p}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_0. \text{ 令 } \mathbf{r}_0 \text{ 表示第k步的残差:}$$

$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k, \mathbf{r}_k$ 是 $f(x)$ 在 $x = x_k$ 处的负梯度。为了让 \mathbf{p}_k 与前面的所有 \mathbf{p}_i 相互共轭，
 \mathbf{p}_k 可以如下构造：
 $\mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k - \sum_{i < k} \frac{\mathbf{p}_i^T \mathbf{Ar}_k}{\mathbf{p}_i^T \mathbf{Ap}_i} \mathbf{p}_i$ 沿着这个方向，因此下一步的优化方向就是：

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \text{ 满足:} \quad g'(\alpha_k = 0) \text{ 因此:}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) =: g(\alpha_k), \quad \alpha_k = \frac{\mathbf{p}_k^T \mathbf{b}}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{Ap}_k} = \frac{\mathbf{p}_k^T (\mathbf{r}_k + \mathbf{Ax}_k)}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{Ap}_k} = \frac{\mathbf{p}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{Ap}_k}$$

算法：

$$\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_0$$

$$\mathbf{p}_0 := \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{k} := 0$$

repeat:

$$\alpha_k := r_0$$

$$\alpha_k := \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{Ap}_k}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} := \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$$

$$\mathbf{r}_{k+1} := \mathbf{r}_k + \alpha_k \mathbf{Ap}_k$$

if r_{k+1} is sufficiently small, then exit loop.

$$\beta_k := \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$$

■ $\mathbf{p}_{k+1} := \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$

■ $k := k + 1$

protected Vector FillDataAbsolute(Vector f, Matrix J, Variable variable)

线性与非线性方程组解的稳定性分析

线性方程组解的稳定性分析

系统解的稳定性定义成系统小的扰动对系统解的影响。

Example 1:

$$\begin{bmatrix} 400 & -201 \\ -800 & 401 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 200 \\ -200 \end{bmatrix}$$

Solution:

$$x_1 = -100, x_2 = -200$$

If we give small change to matrix A, change A_{11} from 400 to 401 then:

$$\begin{bmatrix} 401 & -201 \\ -800 & 401 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 200 \\ -200 \end{bmatrix}$$

This time the solution is:

$$x_1 = 40000, x_2 = 79800$$

Ill-conditioned:

When the solution is highly sensitive to the values of the coefficient matrix A or the righthand side constant vector b, the equations are called to be ill-conditioned.

Condition Number

Let's linear equations:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b},$$

Let us investigate first, how a small change in the \mathbf{b} vector changes the solution vector. \mathbf{x} is the solution of the original system and let $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ is the solution when \mathbf{b} changes from \mathbf{b} to $\mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$.

Then we can write:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$$

$$\text{or } \mathbf{Ax} + \mathbf{A}\Delta\mathbf{x} = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$$

But because $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, it follows that

$$\mathbf{A}\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{b}$$

$$\text{So: } \mathbf{\delta x} = \mathbf{A}^{-1}\Delta\mathbf{b}$$

Using the matrix norm properties:

$$\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\|$$

We can get:

$$\blacksquare \|\mathbf{A}^{-1} \Delta \mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\Delta \mathbf{b}\|,$$

Also, we can get:

$$\blacksquare \|\mathbf{b}\| = \|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\|$$

Using equations 2.5 and 2.6 we can get:

$$\blacksquare \frac{\|\Delta \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|} \leq \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

Let's define condition number as: $\mathbf{K}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|$

we can rewrite equation 2.7 as:

$$\blacksquare \frac{\|\Delta \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \mathbf{K}(\mathbf{A}) \cdot \frac{\|\Delta \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

Now, let us investigate what happens if a small change is made in the coefficient matrix

\blacksquare A. Consider \mathbf{A} is changed to $\mathbf{A} + \Delta \mathbf{A}$ and the solution changes from \mathbf{x} to $\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}$

$\blacksquare (\mathbf{A} + \Delta \mathbf{A})(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}) = \mathbf{b}$, we can obtain:

$$\blacksquare \frac{\|\Delta \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}\|} \leq \mathbf{K}(\mathbf{A}) \cdot \frac{\|\Delta \mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}$$

$\mathbf{K}(\mathbf{A})$ is a measure of the relative sensitivity of the solution to changes in the right-hand side vector \mathbf{b} . When the condition number $\mathbf{K}(\mathbf{A})$ becomes large, the system is regarded as being illconditioned.

Matrices with condition numbers near 1 are said to be well-conditioned.

非线性方程组解的稳定性分析

For non-linear system,

最小二乘法求解线性, 非线性方程组

所有的线性方程组或者非线性方程组可以转化成一个最小二乘法问题, 使得拟合的方程与观察值之间的平方和最小。

$$\hat{\beta} = \operatorname{argmin}_{\beta} S(\beta) = \operatorname{argmin}_{\beta} \sum_{i=1}^m [y_i - f(x_i, \beta)]^2$$

y_i 是观测值, x_i 是已知变量, 一共m组观测值。

当 $f(x, \beta)$ 是线性方程组时

即 $\mathbf{f}(\mathbf{X}, \beta) = \mathbf{A}\beta$

cost function 可以表示如下：

$$\blacksquare L(\beta) = ||\mathbf{Y} - \mathbf{A}\beta||^2$$

其中 $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \dots \mathbf{y}_m]^T$

cost function 对 β

$$\blacksquare L(\beta) = \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T \mathbf{A}\beta + \beta^T \mathbf{A}^T \mathbf{A}\beta$$

求导,

$$\blacksquare -2\mathbf{A}^T \mathbf{Y} + 2(\mathbf{A}^T \mathbf{A})\beta = 0$$

再让导数等于0, 就可以求得解为: β

$$\blacksquare \beta = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{Y}$$

我们接下来主要讨论非线性的情况:

也就是残差 $\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i, \beta)$ 不能表示成线性形式。

当然我们有很多方法来求解方程(4.1), 比如 梯度下降法, 牛顿法, 高斯-牛顿法, 以及 Levenberg-Marquardt 梯度下降法

把损失函数展开到一阶。

$$\blacksquare f(x + \alpha \mathbf{d}) = f(x_0) + \alpha f'(x_0) \mathbf{d} + O(\alpha^2)$$

$$\blacksquare x_{t+1} = x_t - \alpha f'(x_t),$$

牛顿法

把cost function进行展开到二阶:

$$\blacksquare f(x_{t+1}) = f(x_t) + g(x_{t+1} - x_t) + \frac{1}{2}(x_{t+1} - x_t)^T H(x_{t+1} - x_t)$$

求导, $\frac{\partial f}{\partial x_t} = g + H(x_{t+1} - x_t)$, 让导数为0就有

$$\blacksquare x_{t+1} = x_t - H^{-1}g$$

要是 H 是正定的, 上面的就是凸函数, 也就一定有了最小值。可惜 H 不一定是正定的, 这就引导出了下面的方法

高斯-牛顿法

cost function 可以表示成残差的形式:

$$\blacksquare L(x) = \sum_{i=1}^m r_i(x)^2$$

根据牛顿法:

$$v x_{t+1} = x_t - H^{-1}g,$$

梯度表示为:

$$g_j = 2 \sum_i r_i \frac{\partial r_i}{\partial x_j}$$

对方程(4.9)求二阶导, 我们可以得到Hessian矩阵:

$$H_{jk} = 2 \sum_i \left(\frac{\partial r_i}{\partial x_j} \frac{\partial r_i}{\partial x_k} + r_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial x_j \partial x_k} \right),$$

当残差 r_i 很小的时候, 我们就可以去掉最后一项, 因此

$$H_{jk} \approx 2 \sum_i J_{ij} J_{ik} \quad \text{With} \quad J_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial x_j}$$

这样Hessian就是半正定了。

因此参数迭代公式(4.10)可以写成:

$$x_{t+1} = x_t - (J^T J)^{-1} J^T r,$$

Levenberg-Marquardt

方法用于求解非线性最小二乘问题, 结合了梯度下降法和高斯-牛顿法。

其主要改变是在Hessian阵中加入对角线项。当然, 这是一种L2正则化方式。

$$x_{t+1} = x_t - (H + \lambda I_n)^{-1} g,$$

$$x_{t+1} = x_t - (J^T J + \lambda I_n)^{-1} J^T r$$

L-M算法的不足点。

当 λ 很大时, $J^T J + \lambda I_n$ 根本没用, Marquardt为了让梯度小的方向移动的快一些, 来防止小梯度

方向的收敛, 把中间的单位矩阵换成了 $\text{diag}(J^T J)$, 因此迭代变成:

$$x_{t+1} = x_t - (J^T J + \lambda \text{diag}(J^T J))^{-1} J^T r$$

阻尼项(damping parameter) λ 的选择, Marquardt 推荐一个初始值 λ_0 与因子 $v > 1$, 开始时,

$\lambda = \lambda_0$, 然后计算cost functions, 第二次计算 $\lambda = \lambda_0/v$, 如果两者cost function都比初始点高, 然后

我们就增大阻尼项, 通过乘以 v , 直到我们发现当 $\lambda = \lambda_0 v^k$ 时, cost function下降。

如果使用 $\lambda = \lambda_0/v$ 使得cost function下降, 然后我们就把 λ_0/v 作为新的 λ

当 $\lambda = 0$ 时, 就是高斯-牛顿法, 当 λ 趋于无穷时, 就是梯度下降法。如果使用 λ/v 没有使损失函数下降, 使用 λ 导致损失函数下降, 那么我们就继续使用 λ 做为阻尼项。

归一化的残差

■ $J_S = \Sigma J, \Sigma_{ij} = \frac{1}{y_i} \delta_{ij}$

L2正则化与Levenberg-Marquardt算法

我们在cost function加上L2正则项

■ $L(\beta) = \sum_{i=1}^m [y_i - f(x_i, \beta)]^2 + \lambda \|\beta\|^2$

可以表示成：

■ $L(\beta) = L(\beta_0) + (\beta - \beta_0)^T \nabla_{\beta} L(\beta_0) + \frac{1}{2} (\beta - \beta_0)^T H(\beta - \beta_0) + \lambda \|\beta\|^2 + O(\beta^3)$

求一阶导数：

■ $L(\beta) = L(\beta_0) + (\beta - \beta_0)^T g + \frac{1}{2} (\beta - \beta_0)^T H(\beta - \beta_0) + \frac{1}{2} \lambda \|\beta\|^2 + O(\beta^3)$

令其为0：

■ $\frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta} = g + H(\beta - \beta_0) + \lambda \beta = 0$

就得到：

■ $\beta = (H + \lambda I_n)^{-1} H \beta_0 - (H + \lambda I_n)^{-1} g,$

第八章 机器学习

这章主要讨论传统的机器学习方法，涉及到分类，回归，聚类，降维，决策树与集成学习

机器学习

1. 过拟合与欠拟合, 交差验证的目的, 超参数搜索方法, EarlyStopping
2. L1正则和L2正则的做法, 正则化背后的思想, BatchNorm, Covariance Shift, L1正则产生稀疏解的原理
3. 逻辑回归为何是线性模型, LR如何解决低维不可分, 从图模型角度看LR,
4. 和朴素贝叶斯和无监督
5. 几种参数估计方法MLE, MAP, 贝叶斯的联系与区别
6. 简单说下SVM的支持向量, KKT, 何为对偶, 核的通俗理解
7. GBDT, 随机森林能否并行, 问下bagging, boosting
8. 生成模型, 判别模型举个例子
9. 聚类方法的掌握, 问下kmeans的EM推导思路, 谱聚类和Graph-cut的理解
10. 梯度下降类方法和牛顿类方法的区别, 随便问问Adam, L-BFGS的思路
11. 半监督的思想, 问一些特定半监督算法是如何利用无标签数据的, 从MAP角度看半监督
12. 常见的分类模型的评价指标(顺便问问交叉熵, ROC如何绘制, AUC的物理含义, 类别不均匀样本)

神经网络

1. CNN中卷积操作和卷积核作用, maxpooling作用
2. 卷积层与全连接层的联系
3. 梯度爆炸与消失的概念(顺便问问神经网络权重初始化的方法, 为何能减缓梯度爆炸与消失, CNN中有哪些解决方法, LSTM如何解决的, 如何梯度裁剪, dropout如何用在RNN系列网络中, dropout如何防止过拟合)
4. 为何卷积可以用在图像, 语音, 语句上, 顺便问问channel在不同类型数据源中的含义

自然语言处理, 推荐系统

1. CRF跟逻辑回归, 最大熵模型的关系
2. CRF的优化方法, CRF和MRF的联系, HMM与CRF的关系(顺便问问朴素贝叶斯和HMM的联系, LSTM+CRF用于序列标注的原理, CRF的点函数和边函数, CRF的经验分布)
3. wordEmbedding的几种常用方法和原理(language model, perplexity评价指标, word2vec跟Glove的异同)
4. Topic model说一说, 为何CNN能用在文本分类, syntactic 和semantic问题举例,
5. 常见的sentence embedding方法, 注意力机制(注意力机制的几种不同情形, 为何引入, seq2seq原理)
6. 序列标注的评价指标, 语义消歧的做法, 常见的跟word有关的特征
7. factorization machine, 常见矩阵分解模型
8. 如何把分类模型用于商品推荐(包括数据集划分, 模型验证等)
9. 序列学习, wide & deep model(顺便问问为何wide和deep)

第一步(一个月), 公式推导必须会, 核心思想会, 并且要融会贯通。

1. SVM
2. LR, LTR
3. 决策树, RF, GBDT, xgboost
4. 贝叶斯
5. 降维:PCA, SVD
6. BP的公式推导, 以及写一个简单的神经网络, 并跑个小的数据。用python,numpy。
7. LeetCode上面刷Easy与Medium的题
8. 看面经, 找面试常遇到的问题

第二步是最优化总结(半个月), 总结常用的优化算法, 比如梯度下降, 牛顿, 拟牛顿, trust region, 二次规划。

机器学习score函数设置:

1. 回归, 分类, 决策树, 深度神经网络, 图模型, 概率统计, 最优化方法
2. 分类, 聚类, 特征选择, 降维等数据挖掘技术
3. 机器学习, 概率统计, 最优化
4. GBDT, LR, LTR, 特征提取
5. 推荐系统基本算法: LR, GBDT, SVD/SVD++, FM/FFM具体实用场景与变形
6. 对分类, 回归, 聚类, 标注等统计机器学习问题有深入研究, 熟悉常用模型:LR, KNN, Naive bayes, rf, GBDT, SVM, PCA, SVD, kmeans, kmodes等
7. 精通主流机器学习算法, 对贝叶斯, 随机森林, SVM, 神经网络, 聚类, PCA等有深入研究
8. 熟悉数据分析思路, 熟悉经典的数据挖掘, 机器学习算法, 如:LR, 决策树, BP神经网络, SVM等浅层学习, 熟悉集成算法, 诸如bagging, boosting, 了解深度学习CNN, RNN, 熟悉使用python, 了解pandas, sklearn, xgboost
9. 熟悉常用的最优化算法设计与实现, 对于非凸优化问题有深入的理解(并行模拟退火, 蒙特卡洛等优化方法)
10. 机器学习算法: 贝叶斯, 聚类, 逻辑回归, SVM, GBDT, RF

总结:

1. 分类:
 - i. SVM,
 - ii. LR
2. 回归:
3. 集成学习:
 - i. bagging
 - ii. Boosting
4. 工具
 - i. sklearn, xgboost, tensorflow

分类总结：

1. Regression:
 2.
 - i. Ordinary Least Squares Regression(OLSR)
 - ii. Linear Regression
 - iii. Logistic Regression
 - iv. Stepwise Regression
 - v. Multivariate Adaptive Regression Splines
 - vi. Locally Estimated Scatterplot Smoothing
 3. Regularization Algorithms
 4.
 - i. Ridge Regression
 - ii. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator(LASSO)
 - iii. Least-Angle Regression(LARS)
 5. Ensemble Algorithms
 6.
 - i. Boosting
 - ii. Booststrapped Aggregation(Bagging)
 - iii. Adaboost
 - iv. Stacked Generalization(Blending)
 - v. Gradient Boosting Machines(GBM)
 - vi. Gradient Boosted Regression Trees(GBRT)
 - vii. Random Forest
 7. Decision Tree Algorithms
 8.
 - i. Classification and Regression Tree(CART)
 - ii. Iterative Dichotomiser3(ID3)
 - iii. C4.5 and C5.0
 - iv. Chi-Squared Automatic Interaction Detection(CHAID)
 - v. Decision Stump
 - vi. M5
 - vii. Conditional Decision Trees
 9. Dimensionality Reduction Algorithms
 10.
 - i. Principle Component Analysis(PCA)
 - ii. Principle Component Regression(PCR)
 - iii. Sammon Mapping
 - iv. Multidimensional Scaling(MDS)
 - v. Projection Pursuit
 - vi. Linear Discriminant Analysis(LDA)
 - vii. Mixture Discriminant Analysis(MDA)

- viii. Quadratic Discriminant Analysis(QDA)
- ix. Flexible Discriminant Analysis(FDA)
- 11. Bayesian Algorithms
- 12.
 - i. Naive Bayes
 - ii. Gaussian Naive Bayes
 - iii. Multinomial Naive Bayes
 - iv. Averaged One-Dependence Estimators(AODE)
 - v. Bayesian Belief Network(BBN)
 - vi. Bayesian Network(BN)
- 13. Clustering Algorithms
- 14.
 - i. K-Means
 - ii. K-Medians
 - iii. Expectation Maximisation(EM)
 - iv. Hierarchical
- 15. Instance-Based Algorithms
- 16.
 - i. K-Nearest Neighbor(KNN)
 - ii. Learning Vector Quantization(LVQ)
 - iii. Self-Organizing Map(SOM)
 - iv. Locally Weighted Learning(LWL)
- 17. Graphical Models
- 18.
 - i. Bayesian Network
 - ii. Markov random field
 - iii. Chain Graphs
 - iv. Ancestral Graph
- 19. Association Rule Learning Algorithms
- 20.
 - i. Apriori Algorithm
 - ii. Eclat Algorithm
 - iii. FP-growth
- 1. Deep Learning
- 2.
 - i. Deep Boltzmann Machine(DBM)
 - ii. Deep Belief Networks(DBN)
 - iii. Convolutional Neural Network(CNN)
 - iv. Stacked Auto-Encoders
- 3. Artificial Neural Network

4.

- i. Perception
- ii. Back-Propagation
- iii. Radial Basis Function Network(RBFN)

机器学习原理

偏差, 方差, 噪声

偏差-方差分解可以用来对学习算法的期望泛化错误率进行拆分。同时, 偏差-方差分解为我们设计模型与分析提供了一个比较清晰的方向。

假设测试样本是 \mathbf{x} , 令 y_D 为 \mathbf{x} 在数据集上的标记(可能存在标记错误的情况), y 为 \mathbf{x} 的真实标记, $f(\mathbf{x}; D)$ 为训练集 D 上学得模型 f 在 \mathbf{x} 上的预测输出, 以回归模型为例, 学习算法的期望预测为:

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = E_D[f(\mathbf{x}, D)]$$

方差是:

$$var(\mathbf{x}) = E_D[f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x})]^2$$

噪声是:

$$\epsilon^2 = E_D[y_D - y]^2$$

输出期望与真实标记之间的差别成为偏差(Bias), 即:

$$bias^2(\mathbf{x}) = E_D[\hat{f}(\mathbf{x}) - y]^2$$

为方便讨论, 假设噪声的期望为0; 即: $E_D[y_D - y] = 0$. 下面来对模型的期望泛化误差进行分解:

$$\begin{aligned} E(f; D) &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - y_D)^2] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}) + \hat{f}(\mathbf{x}) - y_D)^2] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2] + E_D[(\hat{f}(\mathbf{x}) - y_D)^2] + E_D[2(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))(\hat{f}(\mathbf{x}) - y_D)] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2] + E_D[(\hat{f}(\mathbf{x}) - y_D)^2] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2] + E_D[(\hat{f}(\mathbf{x}) - y + y - y_D)^2] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2] + E_D[(\hat{f}(\mathbf{x}) - y)^2] + E_D[(y - y_D)^2] + E_D[2(\hat{f}(\mathbf{x}) - y)(y - y_D)] \\ &= E_D[(f(\mathbf{x}, D) - \hat{f}(\mathbf{x}))^2] + E_D[(\hat{f}(\mathbf{x}) - y)^2] + E_D[(y - y_D)^2] \end{aligned}$$

因此就得到:

$E(f; D) = bias^2(\mathbf{x}) + var(\mathbf{x}) + \epsilon^2$ 也就是泛化误差分成偏差, 方差与噪声之和。我们设计模型分析时, 可以从这三方面去考虑。

噪声

为了消除噪声的影响, 我们需要对数据进行清洗, 进行预处理。在很大程度上就是为了得到更干净的数据。

Bias

偏差小，说明的是模型很准，可能有过拟合的倾向，增加模型的复杂度可以使得bias减小。但是泛化能力变差，也就是variance会大，模型对数据很敏感。如果模型bias大，通过对简单的模型进行boost，来提升模型的准确性，也就是Boost系列算法做的事情，如：AdaBoost, GBDT, XGBoost。

方差

方差小，说明模型很稳定，也就是说模型的泛化能力好，可能测试集上的数据相对于训练集来说有一些变化，但是也不影响模型的输出结果，此时，可能模型欠拟合，因此泛化能力好。如果模型variance大，可以通过训练多个模型，并让各个模型之间的关联性很小，通过求平均来减小Variance，这就是集成模型中bagging系列算法做的事情，如Bagging, Random Forest.

最大似然函数

输入： $X \in R^n$

输出： $Y \in (1, 2, \dots, K)$

条件概率： $P(X = x|Y = C_k) = P(X^{(1)} = x^{(1)}, X^{(2)} = x^{(2)}, \dots, X^{(n)} = x^{(n)}|Y = C_k)$, k=1,2,...,K

假设有N个样本点 $(X_i, Y_i), i = 1, 2, \dots, N$

条件概率： $P(Y = y|X = x, \theta)$, 其中 θ 是模型的参数。

似然函数定义为：每个样本点发生概率的乘积： $L(\theta) = \prod_{n=1}^N P(Y = Y_n|X = X_n, \theta)$

我们需要求得一个模型，使得在所有样本点在该模型发生的几率极大，几率是联合几率，是每个样本发生几率的乘积。也就是极大化似然函数。

分类与回归问题似乎都可以转化成求解似然函数。

用极大似然函数求解回归问题

输入： $\mathbf{X} \in R^n$

输出： $Y \in R$

我们的模型是 $f(\mathbf{X}, \Theta)$ ，其中 Θ 是模型参数， \mathbf{X} 是输入变量。假设我们的损失函数是平方误差，因此我们的cost function可以表示如下：

$$L(\mathbf{X}, \Theta) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (f(X_n, \Theta) - Y_n)^2$$

等价于：

$$e^{L(\mathbf{X}, \Theta)} = e^{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (f(X_n, \Theta) - Y_n)^2} = \prod_{n=1}^N e^{\frac{1}{2} (f(X_n, \Theta) - Y_n)^2}$$

实际上，最小化 $L(\mathbf{X}, \Theta)$ 等价于最小化 $e^{L(\mathbf{X}, \Theta)}$ ，等价于最大化 $e^{-L(\mathbf{X}, \Theta)}$ ，也就是等价于最大化

$$\Gamma(\Theta) = \prod_{n=1}^N e^{-\frac{1}{2}(f(X_n, \Theta) - Y_n)^2} = \prod_{n=1}^N P(X_n, \Theta)$$

其中 $P(X_n, \Theta) = e^{-\frac{1}{2}(f(X_n, \Theta) - Y_n)^2}$

定义成回归模型中样本 (X_n, Y_n) 发生的几率，这样我们就把回归问题与几率联系起来了。我们把求解损失函数最小，转化成极大似然函数的求解。

对于不同的损失函数，我们都可以转化成对应的概率。

对于分类问题，怎么用一个统一的框架来解析？可以是基于概率的。

用极大似然函数求解多类分类问题

在这里我们以多项逻辑斯蒂回归为例，讨论怎么用最大化似然函数来求解这一类问题。

假设离散性随机变量Y的取值是 $(1, 2, \dots, K)$ ，输入变量 $\mathbf{X} \in R^n$

则，模型如下：

$$P(Y = k|x) = \frac{\exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} \exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}, k = 1, 2, \dots, K - 1$$

$$P(Y = K|x) = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} \exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}$$

这里 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n+1}$ ； $\mathbf{w}_k \in \mathbf{R}^{n+1}$ 。

因此，总的似然函数可以表示为：

$$L(\mathbf{W}) = \prod_{n=1}^N P(Y = Y_n | X = X_n) \text{ 这样，我们需要求的参数是 } W = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_{n+1}).$$

用极大似然与SVM来做多类分类问题

核心，定义出到超平面的距离，每一个类，一个超平面，然后定义距离，然后转化成概率，最终转化成极大似然函数求解。

极大似然与最大熵原理的等价性

最大熵原理

奥卡姆剃刀

SVM, KKT条件与核函数方法

SVM

线性可分二分类问题

一组数据 $(x_i, y_i), i = 1, 2 \dots N, y_i \in +1, -1, x_i \in R^m$

SVM算法是为了求得一个分割超平面 $\mathbf{w}\mathbf{x} + b = 0$ 使得所有的样本点到超平面的几何距离都不小于 γ , 且这个 γ 是最大的。

首先我们定义几何距离和函数距离:

几何距离: $\gamma_i = y_i(\frac{\mathbf{w}\mathbf{x}_i}{\|\mathbf{w}\|} + \frac{b}{\|\mathbf{w}\|})$

除以 $\|\mathbf{w}\|$ 是因为 \mathbf{x}, b 同时乘以一个因子, 超平面不变。

函数间距: $\gamma_i = y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i + b)$

我们要使: $\gamma_i \geq \gamma$. 对任何的样本点 i 都成立, 并求得 γ 的最大值。故上面的问题可以用如下数学来刻画:

$$\max_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} \gamma$$

$$s.t. \quad y_i(\frac{\mathbf{w}\mathbf{x}_i}{\|\mathbf{w}\|} + \frac{b}{\|\mathbf{w}\|}) \geq \gamma$$

转化为函数间隔:

$$\max_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} \frac{\gamma}{\|\mathbf{w}\|}$$

$$s.t. \quad y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i + b) \geq \|\mathbf{w}\|\gamma = \hat{\gamma}$$

为了简化计算, 我们取 $\hat{\gamma} = 1$

因此问题转化为:

$$\max_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} \frac{1}{\|\mathbf{w}\|}$$

$$s.t. \quad y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, N$$

转化为求极小问题:

$$\max_{\mathbf{w}, \mathbf{b}} \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad s.t. \quad y_i(\mathbf{w}\mathbf{x}_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, N$$

问题转化成带约束的优化问题(在这里是凸优化问题)。带等式的约束问题可以通过引入拉格朗日乘子求解, 带不等式约束的问题可以引入KKT乘子求解。下面我们先来讨论下带约束的凸优化问题。

Karush-Kuhn-Tucker(KKT)条件

1. 先讨论一般带约束优化问题的数据描述
2. 然后引入其作用约束与不起作用约束的定义
3. 再引入正则点的定义
4. 接下来引入KKT条件 5. 针对局部极小问题，我们考虑优化函数的二阶导数问题。

一般形式的优化问题：

$$\begin{aligned} & \text{minimize } f(\mathbf{x}) \\ & \text{s.t. } \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ & \text{s.t. } \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \end{aligned}$$

其中： $f : R^n \rightarrow R$, $\mathbf{h} : R^n \rightarrow R^m$, $m \leq n$; $\mathbf{g} : R^n \rightarrow R^p$;

针对这一问题，引入如下定义：

定义21.1. 对于一个不等式约束 $g_i(x) \leq 0$, 如果在 x^* 处, $g_i(x^*) = 0$, 那么称该不等式约束是 x^* 处的起作用约束。如果 $g_i(x^*) < 0$, 那么称该不等式约束是 x^* 处的不起作用约束。

定义21.2. 设 \mathbf{x}^* 满足 $\mathbf{h}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \leq \mathbf{0}$, 设 $J(\mathbf{x}^*)$ 为起作用不等式约束下标集,

$$J(\mathbf{x}^*) = \{j : g_j(\mathbf{x}^*) = 0\}$$

如果： $\nabla h_i(\mathbf{x}^*), \nabla g_j(\mathbf{x}^*), i \leq j \leq m, j \in J(\mathbf{x}^*)$

是线性无关的，则称 \mathbf{x}^* 是一个正则点。

KKT条件：某个点是局部极小点所满足的一阶必要条件。

定理：KKT条件，设 $f, \mathbf{g}, \mathbf{h} \in C^1$, 设 \mathbf{x}^* 是问题 $\mathbf{h} = \mathbf{0}, \mathbf{g} \leq \mathbf{0}$ 的一个正则点和局部极小点，那么必然存在 $\lambda^* \in R^m$ 和 $u^* \in R^p$ 使得以下条件成立：

$$\mathbf{u}^* \geq \mathbf{0}$$

$$Df(\mathbf{x}^*) + \lambda^* Dh(\mathbf{x}^*) + \mathbf{u}^* Dg(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}^T$$

$$\mathbf{u}^{*T} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0$$

λ^* 为拉格朗日乘子向量, \mathbf{u}^* 是KKT乘子向量, 其元素分别成为拉格朗日乘子, KKT乘子。

充分条件

上面讲了局部极小的必要条件, 这里我们讨论局部极小的充分条件。然后我们就利用KKT条件去求不等式约束问题。

二阶充分必要条件；

定义如下矩阵：

$$L(\mathbf{x}, \lambda, \mathbf{u}) = F(\mathbf{x}) + \lambda \mathbf{H}(\mathbf{x}) + \mathbf{u} \mathbf{G}(\mathbf{x})$$

$F(\mathbf{x})$ 是在 \mathbf{x} 处的 Hessian 矩阵；

$$\lambda \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \lambda_1 H_1(\mathbf{x}) + \dots + \lambda_m H_m(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{u} \mathbf{G}(\mathbf{x}) = u_1 G_1(\mathbf{x}) + \dots + u_p G_p(\mathbf{x})$$

其中 $G_k(\mathbf{x})$ 是 g_k 处的 Hessian 矩阵。

起作用约束所定义曲面的切线空间： $T(\mathbf{x}^*) = \{y \in R^n : Dh(x^*)y = 0, Dg_j(x^*)y = 0, j \in J(x^*)\}$.

定理：二阶必要条件：如果 \mathbf{x}^* 是上面讨论的优化问题的极小点，那么存在 $\lambda^* \in R^m, \mathbf{u}^* \in R^p$ 使得：

1. $\mathbf{u}^* \geq 0,$
2. $Df(\mathbf{x}^*) + \lambda^* Dh(\mathbf{x}^*) + \mathbf{u}^* Dg(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}^T$
3. $\mathbf{u}^{*T} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0$

4. 对所有 $\mathbf{y} \in T(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*), \mathbf{y} \neq 0$, 都有 $\mathbf{y}^T L(\mathbf{x}, \lambda, \mathbf{u}) \mathbf{y} > 0$

定理：二阶充分条件：

假设 $f, \mathbf{g}, \mathbf{h} \in C^2, \mathbf{x}^* \in R^n$ 是一个可行点，存在向量 $\lambda^* \in R^m, \mathbf{u}^* \in R^p$ 使得：

4. $\mathbf{u}^* \geq 0,$
5. $Df(\mathbf{x}^*) + \lambda^* Dh(\mathbf{x}^*) + \mathbf{u}^* Dg(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}^T$
6. $\mathbf{u}^{*T} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0$

4. 对所有 $\mathbf{y} \in T(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*), \mathbf{y} \neq 0$, 都有 $\mathbf{y}^T L(\mathbf{x}, \lambda, \mathbf{u}) \mathbf{y} > 0$

那么 \mathbf{x}^* 是优化问题

$$s.t. \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

$$s.t. \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$$

的严格局部极小点。

$$T(\mathbf{x}^*) = \{y \in R^n : Dh(x^*)y = 0, Dg_j(x^*)y = 0, j \in J(x^*)\}$$

其中： $J(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*) = \{j : g_j(\mathbf{x}^*) = 0\}, \mathbf{u}^* > 0$

核函数方法

决策树与集成学习

决策树与集成学习

决策树是一种基本的回归与分类的方法。决策树由节点与边构成，节点分类内部节点与叶子节点；内部节点表示属性或者特征，叶子节点表示一个类。

决策树学习

训练集 $D = ((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_N, y_N))$ 其中 $x_i = (x_i^{(1)}, x_i^{(2)} \dots x_i^{(n)})$ 是 n 维变量， n 表示特征的数目， $y_i \in (1, 2 \dots K)$ 类标签。训练的本质是基于一定标准得到一组分类规则。我们需要得到一组与训练数据矛盾较小并且泛化能力也好的分类规则，其中泛化能力说的是在测试集上其错误率也小，错误率有不同的定义方式，可以是均方误差，也可以是似然函数，一般回归问题选择均方误差，分类问题选择似然函数，想想这是为什么？。

分类规则就是特征选择的过程，特征选择是基于一些可以量化的函数，一般基于信息熵增益最大或者信息熵增益率最大或者 Gini 系数下降最大的规则。因此，接下来我们要定义如下概念。

1. 信息熵
2. 条件熵
3. 信息增益
4. 信息增益率
5. Gini 系数

1. 信息熵

熵的概念来自于统计物理，描述微观系统的混乱程度，由 Rudolf Clausius 提出，

$$S = k_B \ln \Omega = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

其中 k_B 是 Boltzmann constant, Ω 表示系统的可能状态数。

它表示的就是 $\ln(p_i)$ 的期望值。香农把这个概念引入信息学，定义了信息熵。

考虑一个只能取有限 n 个值的系统，值对应的就是状态，比如投硬币，只能取两个值，就是说只能有 2 个状态，因此 $n=2$ ，在统计物理中，状态对应的是系统的能级，也就是一个能级对应一个状态，系统处于不同能级的概率就是 p_i

$$P(X = x_i) = p_i, i = 1, 2..n$$

熵的定义如下： $H(x) = -\sum_i^{i=n} p_i \ln p_i$

若系统是确定的，则有一个 $p_i = 1$ ，其他的 $p_i = 0$ 等于 0，因此代入熵的公式可知，熵为 0。可以证明，对于 n 个状态的系统，系统的熵满足如下不等式：

熵的概念来自于统计物理，描述微观系统的混乱程度，由Rudolf Clausius提出。

$$S = k_B \ln \Omega = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

其中 k_B 是Boltzmann constant, Ω 表示系统的可能状态数。

它表示的就是 $\ln(p_i)$ 的期望值。香农把这个概念引入信息学，定义了信息熵。

考虑一个只能取有限n个值的系统，值对应的就是状态，比如投硬币，只能取两个值，就是说只能有2个状态，因此n=2，在统计物理中，状态对应的是系统的能级，也就是一个能级对应一个状态，系统处于不同能级的概率就是 p_i

$$P(X = x_i) = p_i, i = 1, 2..n$$

熵的定义如下： $H(x) = - \sum_i^{i=n} p_i \ln p_i$

若系统是确定的，则有一个 $p_i = 1$ ，其他的 $p_i = 0$ 等于0，因此代入熵的公式可知，熵为0.可以证明，对于n个状态的系统，系统的熵满足如下不等式：

$$0 \leq H(x) = - \sum_i^{i=n} p_i \ln p_i \leq \ln n.$$

2. 条件熵

联合概率说的是两个及两个系统随机变量共同发生的几率问题，条件熵 $H(Y|X)$ 说的是随机变量X给定的情况下，随机变量Y的条件熵。

计算如下：

$$H(Y|X) = \sum_i^{i=n} p_i H(Y|X = x_i)$$

这里， $p_i = P(X = x_i), i = 1, 2..n$ 。

$H(Y|X = x_i)$ 计算与上面的信息熵一样，只是对于 $H(Y|X = x_i)$ ，我们只计算 $X = x_i$ 的那些样本的熵，因为我们会对所有X取不同值得样本进行求和，因此会遍历整个样本。

3. 信息增益

信息增益是基于以上两个概念的，是针对于特征而言的，特征A对训练数据集D的信息增益 $g(D, A)$ 定义成经验熵 $H(D)$ 与特征A给定的条件下，D的经验条件熵 $H(D|A)$ 之差。即：

$$g(D, A) = H(D) - H(D|A).$$

如果我们知道数据集D的信息熵计算，以及条件熵的计算，则信息增益的计算不难。

4. 信息增益率

假设样本D中有K个类, C_k 是第k类的集合, $|C_k|$ 是集合 C_k 的大小, 因此样本集合的基尼系数定义成:

$$Gini(p) = 1 - \sum_{i=1}^{i=K} \left(\frac{|C_i|}{|D|} \right)^2$$

基于不同的指标, 比如信息增益, 信息增益率, 基尼系数, 我们会得到不同的决策树生成算法, 依次是ID3, C4.5, CART。

关于Gini系数的讨论(一家之言)

- 考察Gini系数的图像、熵、分类误差率三者之间的关系
- 将 $f(x)=-\ln x$ 在 $x=1$ 处一阶展开, 忽略高阶无穷小, 得到 $f(x) \approx 1-x$

$$\begin{aligned} H(X) &= -\sum_{k=1}^K p_k \ln p_k \\ &\approx \sum_{k=1}^K p_k (1-p_k) \end{aligned}$$



信息熵与基尼系数的函数大致一致, 实际上在iris数据集中, 生成决策树时, 两者没有差别。

ID3算法

ID3算法基于信息增益最大, 代码实现如下, 它的缺点在于, 它倾向于选择取值很多的特征, 因为当特征能取很多值得时候, 此时系统的不确定度降低, 极端情况是, 特征能取N个不同的值, N个训练集的数量, 此时特征A条件熵为0.为了避免这种情况, 而引入了C4.5算法。

假设特征A是信息增益最大的特征, 当特征A取离散值时, 假设特征A可以取K个不同值, 我们选择A作为特征之后会生出K个节点, 对于每个节点, 我们要重复上面的步骤, 继续寻找信息增益最大的特征, 只是, 这时候特征数目减小了1, 减小的这个特征就是A特征本身。当一个节点, 它的熵小于一定阈值的时候, 我们就不再分割这个节点而是把他当成一个叶子节点。我们可以使用递归来

关于Gini系数的讨论(一家之言)

□ 考察Gini系数的图像、熵、分类误差率三者之间的关系

■ 将 $f(x) = -\ln x$ 在 $x=1$ 处一阶展开，忽略高阶无穷小，得到 $f(x) \approx 1-x$

$$\begin{aligned} H(X) &= -\sum_{k=1}^K p_k \ln p_k \\ &\approx \sum_{k=1}^K p_k (1-p_k) \end{aligned}$$



信息熵与基尼系数的函数大致一致，实际上在iris数据集中，生成决策树时，两者没有差别。

ID3算法

ID3算法基于信息增益最大，代码实现如下，它的缺点在于，它倾向于选择取值很多的特征，因为当特征能取很多值得时候，此时系统的不确定度降低，极端情况是，特征能取N个不同的值，N个训练集的数量，此时特征A条件熵为0。为了避免这种情况，而引入了C4.5算法。

假设特征A是信息增益最大的特征，当特征A取离散值时，假设特征A可以取K个不同值，我们选择A作为特征之后会生出K个节点，对于每个节点，我们要重复上面的步骤，继续寻找信息增益最大的特征，只是，这时候特征数目减小了1，减小的这个特征就是A特征本身。当一个节点，它的熵小于一定阈值的时候，我们就不再分割这个节点而是把他当成一个叶子节点。我们可以使用递归来实现ID3算法。

对于特征值取连续的情况，我们通过计算特征值大于阈值与小于阈值的两部分熵之和来计算熵。算法实现的时候要注意的一点就是，计算熵时，不能让概率等于0，否则会出错。

```
import scipy
import numpy as np
from sklearn import tree
from sklearn.datasets import load_iris
import matplotlib.pyplot as plt

class DecisionTree(object):
```

```

        for n in range(1, sorted_data.shape[0]):
            threshold = (sorted_data[n-1, feature_index] + sorted_data[n, feature_index])/
2
            featue_result_data = np.zeros((sorted_data.shape[0], 2))
            featue_result_data[:, 0] = sorted_data[:, feature_index]
            featue_result_data[:, -1] = sorted_data[:, -1]
            condition_entropy = self.distribution(featue_result_data, n)
            if condition_entropy < best_entropy:
                best_threshold = threshold
                best_entropy = condition_entropy
                best_feature = feature_index
            print best_entropy, best_feature, best_threshold
        return best_entropy, best_feature, best_threshold

if __name__ == '__main__':
    DT = DecisionTree()
    iris = load_iris()
    clf = tree.DecisionTreeClassifier()
    clf = clf.fit(iris.data, iris.target)
    data = iris.data
    target = iris.target
    iris_data = np.zeros((data.shape[0], data.shape[1] + 1))
    iris_data[:, 0:data.shape[1]] = data
    iris_data[:, -1] = target
    best_entropy, best_feature, best_threshold = DT.best_feature_threshold(iris_data)

```



C4.5

C4.5算法弥补了ID3算法的不足，通过使用信息增益率来作为特征的选择标准。

$$g_R(D, A) = \frac{g(D, A)}{H(A)}$$

其中 $H(A) = \sum_{i=1}^K p_i \ln p_i$, K是特征A能取不同值得数目, p_i 是取不同值得概率。

模型的剪枝

为什么需要剪枝：提高泛化能力，

我们可以一步步的细分节点而使得系统的分类误差很小，但是这只是训练数据集上的结果，当我们把模型运用到测试集时，误差率会很高，这是因为模型过拟合你，我们可以通过对决策树进行剪枝来提高模型的泛化能力。

为了进行剪枝，我们得定义剪枝的标准，也就是定义损失函数，损失函数至少要包括两项，一个是在训练集上的误差，一个是模型的复杂程度。模型的复杂程度可以定义成与叶子节点正相关。模型在训练集上的误差率可以如下定义。

$$C(T) = \sum_{t=1}^{t=|T|} N_t H_t$$

```

        return best_entropy, best_feature, best_threshold

if __name__ == '__main__':
    DT = DecisionTree()
    iris = load_iris()
    clf = tree.DecisionTreeClassifier()
    clf = clf.fit(iris.data, iris.target)
    data = iris.data
    target = iris.target
    iris_data = np.zeros((data.shape[0], data.shape[1] + 1))
    iris_data[:, 0:data.shape[1]] = data
    iris_data[:, -1] = target
    best_entropy, best_feature, best_threshold = DT.best_feature_threshold(iris_data)

```

< >

C4.5

C4.5算法弥补了ID3算法的不足，通过使用信息增益率来作为特征的选择标准。

$$g_R(D, A) = \frac{g(D, A)}{H(A)}$$

其中 $H(A) = \sum_{i=1}^{i=K} p_i \ln p_i$, K是特征A能取不同值得数目, p_i 是取不同值得概率。

模型的剪枝

为什么需要剪枝:提高泛化能力,

我们可以一步步的细分节点而使得系统的分类误差很小,但是这只是训练数据集上的结果,当我们把模型运用到测试集时,误差率会很高,这是因为模型过拟合你,我们可以通过对决策树进行剪枝来提高模型的泛化能力。

为了进行剪枝,我们得定义剪枝的标准,也就是定义损失函数,损失函数至少要包括两项,一个是指模型在训练集上的误差,一个是模型的复杂程度。模型的复杂程度可以定义成与叶子节点正相关。模型在训练集上的误差率可以如下定义。

$$C(T) = \sum_{t=1}^{t=|T|} N_t H_t$$

其中 N_t 是叶子节点t上的样本点数目, H_t 是叶子节点t的熵。

叶子节点的熵定义为:

$$H_t = - \sum_{k=1}^{k=K} \frac{N_{tk}}{N_t} \ln \frac{N_{tk}}{N_t},$$

其中 $k \in (1, 2 \dots K)$ 是样本结果可以取不同值的数目,也就是标签有K类 N_t 是叶子节点t的样本数

目, N_{tk} 是叶子节点t中标签属于k类的数目。总体而言, $C(T)$ 刻画的是模型在训练集上的误差。结合这两部分,我们可以定义剪枝的损失函数:

$$C_\alpha(T) = C(T) + \alpha |T|$$

假设X和Y分别为输入与输出变量，并且Y是连续变量，给定训练数据集

$$D = ((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_N, y_N)).$$

假设已将输入空间划分为M个单元 R_1, R_2, \dots, R_M ，并且每个单元 R_m 上有一个固定的输出值 c_m ，于是回归树模型可以表示为：

$$f(x) = \sum_{m=1}^{m=M} c_m I(x \in R_m)$$

当输入空间的划分确定时，可以用平方误差

$$\sum_{x_i \in R_m} (y_i - f(x_i))^2$$

来表示回归树对于训练数据的预测误差，用平方误差最小的准则来求解每个单元上的最优输出值。

可以求得

$$\hat{c}_m = \text{ave}(y_i | x_i \in R_m).$$

问题是，怎么对输入的空间进行划分？

回归树可以处理离散特征与连续特征，对于连续特征，若这里按第j个特征的取值s进行划分，切分后的两个区域分别为：

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j \leq s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j > s)$$

若为离散特征，则找到第j个特征下的取值s：

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j = s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j \neq s)$$

分别计算 R_1, R_2 的类别估计 c_1, c_2 ，然后计算按照(j,s)切分后的损失：

$$\min_{j, s} [\sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2],$$
找到的是损失最小的(j,s)对

即可，也就是说找到最优特征 j^* ，并找到最优特征的分割值 s^* 。递归执行(j,s)的选择过程，知道满足停止条件为止。递归的意思是，对分割出的两个区域 R_1, R_2 分别进行如上的步骤，再分割下去。

总结：

回归树算法：

输入：训练集 $D = ((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_N, y_N)).$

输出：回归树T

1. 求解选择的切分特征j与切分特征取值s，j将训练集D划分成两部分， R_1, R_2 ，

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j \leq s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j > s)$$

其中：

$$\hat{c}_m = \text{ave}(y_i | x_i \in R_m).$$

问题是，怎么对输入的空间进行划分？

回归树可以处理离散特征与连续特征，对于连续特征，若这里按第j个特征的取值s进行划分，切分后的两个区域分别为：

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j \leq s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j > s)$$

若为离散特征，则找到第j个特征下的取值s：

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j = s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j \neq s)$$

分别计算 R_1, R_2 的类别估计 c_1, c_2 ，然后计算按照(j,s)切分后的损失：

$$\min_{j,s} [\sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2], \text{ 找到是的损失最小的(j,s)对}$$

即可，也就是说找到最优特征 j^* ，并找到最优特征的分割值 s^* 。递归执行(j,s)的选择过程，知道满足停止条件为止。递归的意思是，对分割出的两个区域 R_1, R_2 分别进行如上的步骤，再分割下去。

总结：

回归树算法：

输入：训练集 $D = ((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_N, y_N))$.

输出：回归树T

1.求解选择的切分特征j与切分特征取值s，j将训练集D划分成两部分， R_1, R_2 ，

$$R_1(j, s) = (x_i | x_i^j \leq s)$$

$$R_2(j, s) = (x_i | x_i^j > s)$$

其中：

$$c_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{x_i \in R_1} y_i$$

$$c_2 = \frac{1}{N_2} \sum_{x_i \in R_2} y_i$$

2.遍历所有的可能解(j,s)，找到最优的 (j^*, s^*) ，最优解使得如下损失函数最小，

$$\min_{j,s} [\sum_{x_i \in R_1} (y_i - c_1)^2 + \sum_{x_i \in R_2} (y_i - c_2)^2]$$

按照最优特征 (j^*, s^*) 来切分即可

3.递归调用1., 2.步骤，直到满足停止条件

4.将输入空间划分为M个区域 R_1, R_2, \dots, R_M ，返回决策树T

$$f(x) = \sum_{m=1}^{m=M} \hat{c}_m I(x \in R_m)$$

对于固定的 α , 存在唯一的最有子树 $C_\alpha(T)$.

Breiman等人证明, 可以用递归的方法对树进行剪枝, 将 α 从0开始增大, $0 \leq \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_n$, 得到一系列最优子树系列 (T_0, T_1, T_n) , 序列中的子树是嵌套的(?)。

具体的, 从整棵树 T_0 开始剪枝, 对 T_0 的任意内部节点 t , 以为单节点书的损失函数是(也就是把 t 下面的所有节点减掉之后的损失函数):

$$\blacksquare C_\alpha(t) = C(t) + \alpha$$

以为根结点的字数 T_t 的损失函数是(不进行剪枝时的损失函数):

$$\blacksquare C_\alpha(T_t) = C(T_t) + \alpha|T_t|$$

当\alpha 小于某个值时, 不剪枝会使得整体的损失函数较小, 也就是:

$$\blacksquare C_\alpha(T_t) < C_\alpha(t)$$

当\alpha 增大时, 在某一\alpha有:

$$\blacksquare C_\alpha(T_t) = C_\alpha(t)$$

当\alpha再增大时, 不等式反向, 只要 $\alpha = \frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}$, T_t 与t有相同的损失函数。

为此, 对 T_0 中每一个内部节点t, 计算:

$$\blacksquare g(t) = \frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}$$

它表示剪枝之后整体损失函数减小的程度, 在 T_0 中减去 $g(t)$ 最小的 T_t , 将得到的子树作为 T_1 , 同时将最小的 $g(t)$ 设为 α_1 , T_1 为区间 $[\alpha_1, \alpha_2]$ 的最优子树。

如此剪枝下去, 在这一过程中, 不断的增加\alpha的取值, 产生新的区间, 最终会的到一组决策树 (T_0, T_1, T_n) , 对应于椅子确定的权衡参数 (a_0, a_1, a_n) , 通过验证集合中每颗树的总体误差, 也就得到了最终的最优决策树 T^* .

T是整颗决策树吗?

输入:CART 生成树 T_0

输出:剪枝后的最优树 T^*

1) 设 $k=0$, $T = T_0$, $a = +\infty$

3) 自下而上的对内部节点 t 计算 :

当\alpha 小于某个值时, 不剪枝会使得整体的损失函数较小, 也就是:

$$\blacksquare C_\alpha(T_t) < C_\alpha(t)$$

当\alpha增大时, 在某一\alpha有:

$$\blacksquare C_\alpha(T_t) = C_\alpha(t)$$

当\alpha再增大时, 不等式反向, 只要\alpha = \frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}, T_t与t有相同的损失函数。

为此, 对T_0中每一个内部节点t,计算:

$$\blacksquare g(t) = \frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}$$

它表示剪枝之后整体损失函数减小的程度, 在T_0中减去g(t)最小的T_t,将得到的子树作为T_1,同时

将最小的g(t)设为\alpha_1, T_1为区间[\alpha_1, \alpha_2)的最优子树。

如此剪枝下去, 在这一过程中, 不断的增加\alpha的取值, 产生新的区间, 最终会的到一组决策树

(T_0, T_1, T_n), 对应于椅子确定的权衡参数(a_0, a_1, a_n), 通过验证集合中每棵树的总体误差, 也就得到了最终的最优决策树T*.

T是整颗决策树吗?

输入:CART 生成树 T_0

输出:剪枝后的最优树 T*

1) 设 k=0 , T = T_0 , a = +\infty

3) 自下而上的对内部节点 t 计算 :

$$\blacksquare g(t) = \frac{C(t)-C(T_t)}{|T_t|-1}$$

a=\min(a, g(t))

4) 自上而下的访问内部节点 t , 对最小的 g(t)=a 进行剪枝, 并对叶节点 tt 以多数表决形式决定其类别, 得到树 TT

5) k=k+1, a_k = a, T_k = T

6) 如果 T 为非单节点树, 回到 4).

7) 对于产生的子树序列 (T_0, T_1, T_n) 分别计算损失, 得到最优子树T*并返回.

使得这两部分的误差和最小，这就是该特征的最佳切分点，再在该数据集中的所有特征中这个误差，找到最佳的切分特征，最后得到最佳特征以及最佳特征的切分点。基于这两个值，把数据集分成两部分，再对这两部分分别进行如上的操作（求最佳特征与该特征下的最佳切分点）

1. 决策树之 CART . ↵

集成学习

集成学习就是组合一系列的弱分类器生成强分类器。组合的弱分类器之间的关系有两种：

一种是彼此间相互依赖,一系列学习器之间需要串行生成,代表算法是Boosting系列算法,代表算法是AdaBoost与GBDT.

一种是学习器彼此间无关联,一些列算法可以并行的生成,代表算法是Bagging(Bootstrap Aggregating)和随机森林(Random Forest)系列。随机森林是时Bagging的进行版,随机表现在两个方面,一方面是取样本点是随机的,另一方面,选择特征也是随机的(比如总共有N个特征,随机选取小于N的K个特征)

还有一种是两者的结合物:stacking

PAC, 弱可学习, 强可学习

PAC(Probably approximately correct)

强可学习:如果存在一个多项式的学习算法学习呀,学习的正确率很高

弱可学习:如果存在一个多项式的学习算法学习呀,学习的正确率仅比随机猜测略好
在PAC学习框架下,一个概念是强可学习的充分必要条件是这个概念是弱可学习的。

集成学习的理论基础

我们考虑多个不相干分类器叠加处理二分类的问题, $y \in (-1, +1)$ 和真实的函数 f ,假设基分类器的错误率都是 ϵ , 即对每个分类器都有

$$\bullet P(h_i(x) \neq f(x)) = \epsilon$$

假设集成通过简单的投票发结合T个基分类器,若半数的基分类器正确,则集成分类正确。

$$\{ \% \text{math} \% \} \text{kern}\{10 \text{em}\} H(x) = \text{sign}(\sum_{i=1}^T h_i(x)) \{ \% \text{endmath} \% \}$$

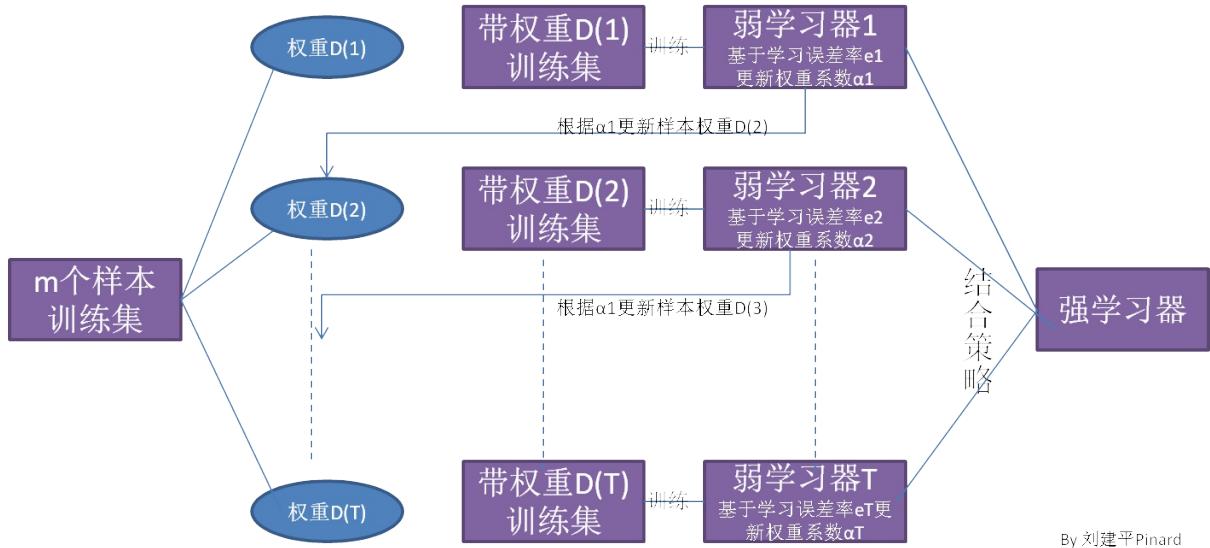
价格基分类器之间的错误率是相互独立的,则由Hoeffding不等式可知,集成的错误率为:

$$\bullet P(H(x) \neq f(x)) = \sum_{i=0}^{[T/2]} \binom{T}{k} (1 - \epsilon)^k \epsilon^{T-k} \leq \exp\left(-\frac{1}{2} T (1 - 2\epsilon)^2\right)$$

上式表明,随着集成中个体分类器数目T的增大,集成的错误率将指数下降,最终趋向于0.

Boosting:

Boosting系列方法的原理图如下:



By 刘建平 Pinard

AdaBoost

Boosting系列算法的代表就是AdaBoost。

算法如下：

输入：训练数据集 $T = ((x_1, y_1), (x_2, y_2) \dots (x_N, y_N))$, 其中 $x_i \in X \subseteq R^n, y \in (-1, +1)$

输出：最终的分类器 $G(x)$

(1) 初始化训练数据集的权重分布

$$D_1 = (w_{11}, \dots, w_{1i}, \dots, w_{1N}),$$

$$w_{1i} = \frac{1}{N}, i = 1, 2, \dots, N$$

(2) 对 $m=1, 2, \dots, M$

使用具有权值分布 D_m 的训练数据集进行训练，得到基分类器

$$G_m(x) : \chi \in (-1, +1)$$

(b) 计算 $G_m(x)$ 在训练集上的分类误差率：

$$e_m = P(G_m(x_i) \neq y_i) = \sum_{i=1}^N w_{mi} I(G_m(x_i) \neq y_i)$$

(c) 计算 $G_m(x)$ 的系数

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \log \frac{1-e_m}{e_m}$$

这里用的是自然对数。

(d) 更新训练数据集的权值分布：

$$D_1 = (w_{m+1,1}, \dots, w_{m+1,i}, \dots, w_{m+1,N}),$$

$$w_{m+1,i} = \frac{w_{mi}}{Z_m} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i)), i = 1, 2, \dots, N$$

这里， Z_m 是归一化因子：

$$\bullet Z_m = \sum_{i=1}^N w_{mi} \exp(-\alpha_m y_i G_m(x_i))$$

它使 D_{m+1} 成为一个概率分布。

(3) 构建基本分类器的线性组合：

$$\bullet f(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_m G_m(x)$$

得到最终分类器

$$\bullet G(x) = \text{sign}(f(x)) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^N \alpha_m G_m(x)\right)$$

由 α_m 的定义可以知道，第 m 个分类器的误差率越小，则 α_m 的值越大，因此第 m 个分类器在总的分类器中占的比重越大。因此，AdaBoost 会加大那些准确率很高的分类器的权重。

同时，在第 $m+1$ 个分类器求解时，对于上一轮被分错的样本的权值会变大。

不改变所给的训练数据，而不断的改变训练数据权值的分布，使得训练数据在基本分类器的学习中起不同的作用，这是 AdaBoost 的一个特点。

可以参考《统计机器学习》8.1 节的例子来加深理解。

AdaBoost 算法的训练误差分析

定理：(AdaBoost 的训练误差界)

AdaBoost 算法最终分类器的训练误差界为：

$$\bullet \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N I(G_m(x_i) \neq y_i) \leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp(-y_i f(x_i)) = \prod_m Z_m$$

定理(二分类问题 AdaBoost 的训练误差界)

$$\bullet \prod_m Z_m = \prod_{m=1}^M [2 \sqrt{e_m(1-e_m)}] = \prod_{m=1}^M \sqrt{1 - 4\gamma_m^2} \leq \exp(-2 \sum_{m=1}^M \gamma_m^2)$$

其中： $\gamma_m = \frac{1}{2} - e_m$

梯度提升

提升树是以分类树或者回归树为基本分类器的提升方法，提升树被认为是统计学习中性能最好的方法之一。

提升树实际采用加法模型(即基函数的线性组合)与前向分步算法。以决策树为基函数的提升方法称为提升树。对分类问题决策树是二叉分类树，对回归问题决策树是二叉回归树。

决策树桩(decision stump)：可以看成是一个根节点直接连接两个叶节点的简单决策树。提升树模型可以表示为决策树的加法模型。

$$\bullet f_M(x) = \sum_{m=1}^M T(x; \Theta_m)$$

其中： $T(x; \Theta_m)$ 表示决策树； Θ_m 为决策树的参数； M 为树的个数。

梯度提升算法：

提升树算法采用前向分步算法。首先缺点初始提升树 $f_0(x) = 0$, 第m步的模型是：

$$\blacksquare f_m(x) = f_{m-1}(x) + T(x; \Theta_m)$$

其中, $f_{m-1}(x)$ 为当前模型, 通过经验风险极小化来确定下一刻决策树的参数 Θ_m

$$\blacksquare \hat{\Theta}_m = \operatorname{argmin}_{\Theta_m} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(x_i) + T(x_i; \Theta_m)).$$

对于一个训练数据集 $T = ((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N))$, $x_i \in \chi \in R^N$, χ 为输入控件, $y_i \in R$, 为输出空间。如果将输入控件 χ 划分为J个互不相交的区域 R_1, R_2, \dots, R_J , 并且在每个区域上确定输出的常量 c_j , 那么树可以表示为：

$$\blacksquare T(x; \theta) = \sum_{j=1}^J c_j I(x \in R_j).$$

其中, 参数 $\Theta = ((R_1, c_1), (R_2, c_2), \dots, (R_J, c_J))$ 表示树的区域划分和各区域上的常数。J是回归树的发杂都, 即叶节点个数。

回归为题提升树使用以下前向分步算法：

$$\blacksquare f_0(x) = 0$$

$$\blacksquare f_m(x) = f_{m-1}(x) + T(x; \Theta_m), m = 1, 2, \dots, M$$

$$\blacksquare f_m(x) = \sum_{m=1}^M T(x; \Theta_m)$$

在前向分步算法的第m步, 给定当前模型 $f_{m-1}(x)$, 需求解：

$$\blacksquare \hat{\Theta}_m = \operatorname{argmin}_{\Theta_m} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(x_i) + T(x_i; \Theta_m)).$$

得到 $\hat{\Theta}_m$, 即第m颗树的参数。

采用平方误差损失函数时：

$$\blacksquare L(y, f(x)) = (y - f(x))^2$$

其损失变成：

$$\blacksquare L(y, f_{m-1}(x) + T(x; \Theta_m)) = (y - f_{m-1}(x) - T(x; \Theta_m))^2 = [r - T(x; \Theta_m)]^2$$

这里,

$$\blacksquare r = y - f_{m-1}(x)$$

是当前模型拟合数据的残差。所以, 对回归问题的提升树算法来说, 只需要简单地你和当前模型的残差。

GBDT

当损失函数是平方损失和指数损失函数时，每一步优化是很简单的，但是对于一般损失函数而言，往往每一步优化并不容易。针对这一问题，Freidman提出了梯度提升(gradient boosting)算法，这是利用最速下降法的近似方法，其关键是利用损失函数的负梯度在当前模型的值。

$$\blacksquare - \left[\frac{\partial L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)} \right]_{f(x)=f_{m-1}(x)}$$

作为回归问题提升算法中的残差的近似值，拟合一个回归树。

梯度提升树算法

输入：训练数据集 $T = ((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N))$, $x_i \in \chi \in R^N$, χ 为输入, $y_i \in R$, 损失函数为 $L(y, f(x))$:

输出：回归树 $\hat{f}(x)$.

(1) 初始化

$$\blacksquare f_0(x) = \operatorname{argmin}_c \sum_{i=1}^N L(y_i, c).$$

(2) 对 $m=1, 2, \dots, M$

(a) 对 $i=1, 2, \dots, N$, 计算

$$\blacksquare r_{mi} = - \left[\frac{\partial L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)} \right]_{f(x)=f_{m-1}(x)}$$

(b) 对 r_{mi} 拟合一个回归树，得到第 m 课树叶节点区域 $R_{mj}, j = 1, 2, \dots, J$

(c) 对 $j=1, 2, \dots, J$, 计算

$$\blacksquare c_{mj} = \operatorname{argmin}_c \sum_{x_i \in R_{mj}} L(y_i, f_{m-1}(x_i) + c).$$

$$\blacksquare \text{(d) 更新 } f_m(x) = f_{m-1}(x) + \sum_{j=1}^J c_{mj} I(x \in R_{mj}), m = 1, 2, \dots, M$$

(3) 得到回归树

$$\blacksquare \hat{f}(x) = f_M(x) = \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^J c_{mj} I(x \in R_{mj})$$

函数空间的数值优化：

XGBoost¹

模型复杂度惩罚是XGBoost相对于MART的提升。

$$\blacksquare = \sum_{m=1}^M [\gamma T_m + \frac{1}{2} \lambda ||w_m||_2^2 + \alpha ||w_m||_1]$$

MART includes row subsampling, while XGBoost includes both row and column subsampling

Newton boosting

Input: Data set D, A loss function L, A base learner L_Φ , the number of iterations M. The learning rate η

1. Initialize $\hat{f}^{(0)}(x) = \hat{f}_{(0)}(x) = \hat{\theta}_0 = \operatorname{argmin}_{\theta} \sum_{i=1}^n L(y_i, \theta)$;
2. for m = 1,2,...,M do
3. $\hat{g}_m(x_i) = [\frac{\partial L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)}]_{f(x)=f^{(m-1)}(x)}$
4. $\hat{h}_m(x_i) = [\frac{\partial^2 L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)^2}]_{f(x)=f^{(m-1)}(x)}$
5. $\hat{\phi}_m = \operatorname{argmin}_{\phi \in \Phi} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \hat{h}_m(x_i) [(-\frac{\hat{g}_m(x_i)}{\hat{h}_m(x_i)}) - \phi(x_i)]^2$
6. $\hat{f}_m(x) = \eta \hat{\phi}_m(x);$
7. $\hat{f}^m(x) = \hat{f}^{(m-1)}(x) + \hat{f}_m(x);$
8. end

Output: $\hat{f}(x) = \hat{g}^{(M)}(x) = \sum_{m=1}^M \hat{f}_m(x)$

对于没有惩罚项的Netwon tree boosting(NTB),每一次迭代都最小化如下损失函数:

$$\blacksquare J_m(\phi_m) = \sum_{i=1}^n L(y_i, \hat{f}^{(m-1)}(x_i) + \phi_m(x_i))$$

对于梯度提升算法, 基函数是如下的树:

$$\blacksquare \phi_m(x) = \sum_{j=1}^T w_{jm} I(x \in R_{jm})$$

这里的T是第m颗树叶子节点的个数, w_{jm} 是第m颗树中第j个叶子节点的权重。

对上式进行二阶泰勒展开,并忽略掉常数项可以得到:

$$\blacksquare J_m(\phi_m) = \sum_{i=1}^n [\hat{g}_m(x_i) \phi_m(x_i) + \frac{1}{2} \hat{h}_m(x_i) \phi_m(x_i)^2]$$

代入:

$$\begin{aligned} \blacksquare \phi_m(x) &= \sum_{j=1}^T w_{jm} I(x \in R_{jm}) \\ \blacksquare J_m(\phi_m) &= \sum_{i=1}^n [\hat{g}_m(x_i) \sum_{j=1}^T w_{jm} I(x \in R_{jm}) + \frac{1}{2} \hat{h}_m(x_i) (\sum_{j=1}^T w_{jm} I(x \in R_{jm}))^2] \end{aligned}$$

由于每个样本点只能属于一个叶子节点, 因此:

$$\blacksquare I(x \in R_{jm}) I(x \in R_{im}) = \delta_{ij}$$

因此上面可以简化成:

$$\begin{aligned} \blacksquare J_m(\phi_m) &= \sum_{i=1}^n [\hat{g}_m(x_i) \sum_{j=1}^T w_{jm} I(x \in R_{jm}) + \frac{1}{2} \hat{h}_m(x_i) \sum_{j=1}^T w_{jm}^2 I(x \in R_{jm})] \\ \blacksquare &= \sum_{j=1}^T \sum_{i \in I_{jm}} [\hat{g}_m(x_i) w_{jm} + \frac{1}{2} \hat{h}_m(x_i) w_{jm}^2] \end{aligned}$$

定义:

$$\blacksquare G_{jm} = \sum_{i \in I_{jm}} \hat{g}_m(x_i)$$

$$\blacksquare H_{jm} = \sum_{i \in I_{jm}} \hat{h}_m(x_i)$$

因此, 可以把cost function写成:

$$J_m(\phi_m) = \sum_{j=1}^T [G_{jm}w_{jm} + \frac{1}{2}H_{jm}w_{jm}^2]$$

$$\blacksquare \geq -\sum_{j=1}^T \frac{1}{2} \frac{G_{jm}^2}{H_{jm}}$$

成立条件是:

$$w_{jm} = -\frac{G_{jm}}{H_{jm}}, j = 1, 2, \dots, T$$

为了寻找最佳分裂点j, 也就是最大化如下的Gain:

$$\blacksquare Gain = \frac{1}{2} \left[\frac{G_L^2}{H_L} + \frac{G_R^2}{H_R} - \frac{G_{jm}^2}{H_{jm}} \right]$$

总结起来:Newton tree boosting算法如下:

Input: Data set D, A loss function L, A base learner L_Φ , the number of iterations M. The learning rate η

1. Initialize $\hat{f}^{(0)}(x) = \hat{f}_{(0)}(x) = \hat{\theta}_0 = \operatorname{argmin}_\theta \sum_{i=1}^n L(y_i, \theta);$
2. for m = 1,2,...,M do
3. $\hat{g}_m(x_i) = [\frac{\partial L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)}]_{f(x)=f^{(m-1)}(x)}$
4. $\hat{h}_m(x_i) = [\frac{\partial^2 L(y, f(x_i))}{\partial f(x_i)^2}]_{f(x)=f^{(m-1)}(x)}$
5. Determin the structure $\hat{R}_{jm}, j = 1, \dots, T$ by selecting splits which maximize

$$\blacksquare Gain = \frac{1}{2} \left[\frac{G_L^2}{H_L} + \frac{G_R^2}{H_R} - \frac{G_{jm}^2}{H_{jm}} \right]$$

6. Determine the leaf weights $w_{jm}, j = 1, \dots, T$ for the learnt structure by

$$\hat{w}_{jm} = -\frac{G_{jm}}{H_{jm}}, j = 1, 2, \dots, T$$

$$7. \hat{f}_m(x) = \eta \sum_{j=1}^T \hat{w}_{jm} I(x \in \hat{R}_{jm});$$

$$8. \hat{f}^m(x) = \hat{f}^{(m-1)}(x) + \hat{f}_m(x);$$

9. end

$$\text{Output: } \hat{f}(x) = \hat{g}^{(M)}(x) = \sum_{m=1}^M \hat{f}_m(x)$$

Bagging

Bagging系列方法的原理图如下：



Bagging的本质思想是平均一个个多noisy(variance大)但是近似无偏的模型,因此可以减少variance。树是bagging理想的候选者,因为他们能抓住数据中复杂的相互作用结构。在大多数问题中,boosting相对于bagging有压倒性优势,成为更好的选择。

Boosting通过弱学习者的时间演化,成员投一个带权重的票。

$$\text{Regression: } \hat{f}_{rf}^B(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B T_b(x)$$

因为从bagging中生成的树是id(identically distributed),B颗树的期望与单棵树的期望一样,如果输之间是IID(independent identically distributed),每棵树的variance是 σ^2 ,则B颗树的variance是 $\frac{\sigma^2}{B}$,假设树之间的关联系数是c,则B颗树的variance是:

$$c\sigma^2 + \frac{1-c}{B}\sigma^2$$

如果c=1,就回到iid情况,如果c ≠ 0,则上面的第一项不会随着B增大而减小,只有第二项会随着B增大而减小,因此我们要尽量使得树之间的关联系数c趋于0.这可以通过随机化来实现,对样本和对特征这两方面随机化。

问题:怎么构造具有负关联系数的系统?

$$\hat{f}_{bag}(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{f}^*(x)$$

当B趋于无穷时,上述表达式就是bagging估计的一个Monte Carlo估计。

Random Forest

参数推荐:

对于分类问题,默认m是 \sqrt{p} ,最小的节点数是1.

对于回归问题,默认的m是 $p/3$,最小的节点尺寸是5.

OOB:out of box, bagging中有 $(1 - \frac{1}{N})^N = 1/e$ 的样本没有被选中,可以用来做验证,因此不需要交叉验证。当OOB误差稳定后,训练也就可以结束了。

贝叶斯方法

朴素贝叶斯

朴素贝叶斯是基于特征条件独立假设。输入变量中所有特征之间是独立的因此，联合条件概率是各个条件概率的乘积。

输入： $X \in R^n$

输出： $Y \in (1, 2, \dots, K)$

条件概率： $P(X = x|Y = C_k) = P(X^{(1)} = x^{(1)}, X^{(2)} = x^{(2)}, \dots, X^{(n)} = x^{(n)}|Y = C_k), k=1,2,\dots,K$

条件独立假设：

$$P(X = x|Y = y) = P(X = x|Y = C_k) = P(X^{(1)} = x^{(1)}, X^{(2)} = x^{(2)}, \dots, X^{(n)} = x^{(n)}|Y = C_k) \\ = \prod_{j=1}^n P(X^{(j)} = x^{(j)}|Y = C_k)$$

在上面的公式中，先验概率计算如下：

$$P(Y = C_k) = \frac{\sum_{i=1}^N I(y_i=c_k)}{N}, k = 1, 2, \dots, K$$

条件概率计算

假设第 j 个特征 $x^{(j)}$ 的可能取值集合是 $(a_{j1}, a_{j2}, \dots, a_{js_j})$ ，条件概率计算如下：

$$P(X^{(j)} = a_{jl}|Y = C_k) = \frac{\sum_{i=1}^N I(x_i^{(j)} = a_{jl}, y_i = c_k)}{\sum_{i=1}^N I(y_i = c_k)}$$

$j = 1, 2, \dots, n; l = 1, 2, \dots, S_j; k = 1, 2, \dots, K$

后验概率计算

基于贝叶斯定理计算后验概率：

$$P(Y = C_k | X = x) = \frac{P(X=x|Y=C_k)P(Y=C_k)}{\sum_k P(X=x|Y=C_k)P(Y=C_k)}$$

$$\text{把条件独立假设代入可以得到: } P(Y = C_k | X = x) = \frac{P(Y=C_k) \prod_{j=1}^n P(X^{(j)}=x^{(j)}|Y=C_k)}{\sum_k P(Y=C_k) \prod_{j=1}^n P(X^{(j)}=x^{(j)}|Y=C_k)}$$

因为分母对不同的类别k都是一样的，因此只需要求分子就可以了。计算不同的类别k对应的值，分类结果对应概率最大的。

因此朴素贝叶斯可以表示为：

$$y = f(x) = \operatorname{argmax}_{c_k} P(Y = C_k) \prod_{j=1}^n P(X^{(j)}=x^{(j)}|Y=C_k)$$

Laplace Smoothing

在实际计算条件概率的时候，或出现0的情况，这会影响后面的后验概率的计算。一般通过 Laplace Smoothing 来处理。

$$P(X^{(j)} = a_{jl} | Y = C_k) = \frac{\sum_{i=1}^N I(x_i^{(j)}=a_{jl}, y_i=c_k) + \lambda}{\sum_{i=1}^N I(y_i=c_k) + s_j \lambda}$$

$$\lambda > 0, j = 1, 2, \dots, n; l = 1, 2, \dots, S_j; k = 1, 2, \dots, K$$

基本上到此，朴素贝叶斯的介绍也就完结了，朴素贝叶斯不需要计算任何参数，计算简单，缺点是分类性能不一定高。

极大似然估计

极大似然估计是试图在所有的模型参数可能取值中，找到一个能使得数据出现的可能性最大的值。

贝叶斯网络

逻辑回归

在这里我们以多项逻辑斯蒂回归为例，讨论怎么用最大化似然函数来求解这一类问题。

假设离散性随机变量Y的取值是(1,2,...,K),输入变量 $\mathbf{X} \in R^n$

则，模型如下：

$$\begin{aligned}\blacksquare P(Y = k|x) &= \frac{\exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}{\sum_{k=1}^{K-1} \exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}, k = 1, 2, \dots, K - 1 \\ \blacksquare P(Y = K|x) &= \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{K-1} \exp(\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{x})}\end{aligned}$$

这里 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n+1}$; $\mathbf{w}_k \in \mathbf{R}^{n+1}$.

因此，总的似然函数可以表示为：

$$\blacksquare L(\mathbf{W}) = \prod_{n=1}^N P(Y = Y_n | X = X_n)$$
 这样，我们需要求的参数是 $W = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_{n+1})$.

最简单的就是二项逻辑斯蒂回归，在这里 $K=2$: 似然函数可以写成如下简单的形式：

$$\blacksquare L(\mathbf{W}) = \prod_{n=1}^N [\pi(x_i)^{y_i}][1 - \pi(x_i)]^{1-y_i}$$

其中： $\blacksquare P(Y = 1|x) = \pi(x) = \frac{\exp(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x})}{1 + \exp(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x})}$
 $\blacksquare P(Y = 0|x) = 1 - \pi(x)$

当 $y_i = 0$ 时：

$$\blacksquare [\pi(x_i)^{y_i}][1 - \pi(x_i)]^{1-y_i} = 1 - \pi(x_i)$$
 当 $y_i = 1$ 时：

$$\blacksquare [\pi(x_i)^{y_i}][1 - \pi(x_i)]^{1-y_i} = \pi(x_i)$$

实际上分别是 $y_i = 0, y_i = 1$ 发生的概率。

一般连乘形式的似然函数容易发生值溢出，故而一般求对数似然函数：

$$\begin{aligned}\blacksquare L(\mathbf{W}) &= \sum_{n=1}^N [y_i \log \pi(x_i) + (1 - y_i) \log[1 - \pi(x_i)]] \\ &= \sum_{n=1}^N [y_i(w \cdot x_i) + \log(1 + \exp(w \cdot x_i))]\end{aligned}$$

求 $L(\mathbf{W})$ 的极大值，得到 \mathbf{w} 的估计值。

问题转化为以对数似然函数为目标函数的最优化问题，一般采用梯度下降法或者拟牛顿法求解。
(为啥不使用牛顿法？因为求Hessian矩阵比较麻烦，而拟牛顿法只需要构造Hessian阵就可以了，用迭代法求)

最大熵模型

最大熵原理

最大熵原理是概率模型学习的一个准则，最大熵原理认为，学习概率模型时，在所有可能的概率模型（分布）中，熵最大的模型是最好的模型。通常用约束条件来确定概率模型的集合。所以，最大熵原理也可以表述为在满足约束条件的模型集合中，选取熵最大的模型。

怎么建立起最大熵原理与最大似然原理之间的联系？

最大熵模型如下：

对于给定的训练数据集： $T = ((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N))$

以及特征函数 $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $i = 1, 2, \dots, n$, 最大熵模型的学习等价于约束最优化问题：

$$\begin{aligned} & \max_{P \in C} H(P) = \sum_{x,y} \hat{P}(x) P(y|x) \log P(y|x) \\ & \text{s.t. } E_P(f_i) = E_{\hat{P}}(f_i), i = 1, 2, \dots, n \quad \sum_y P(y|x) = 1 \end{aligned}$$

可以转化为求极小问题：

$$\begin{aligned} & \min_{P \in C} H(P) = - \sum_{x,y} \hat{P}(x) P(y|x) \log P(y|x) \\ & \text{s.t. } E_P(f_i) - E_{\hat{P}}(f_i) = 0, i = 1, 2, \dots, n \quad \sum_y P(y|x) = 1 \end{aligned}$$

一般，带约束的优化问题可以通过引入拉格朗日乘子与KKT乘子来求解，也就是把原始问题转化为对偶问题来求解。在满足KKT条件时，对偶问题与原始问题等价：

首先引入拉格朗日乘子： w_0, w_1, \dots, w_n , 定义拉格朗日函数 $L(P, \mathbf{w})$ ；

$$\begin{aligned} L(P, \mathbf{w}) &= -H(P) + w_0(1 - \sum_y P(y|x)) + \sum_{i=1}^n w_i(E_P(f_i) - E_{\hat{P}}(f_i)) \\ &= - \sum_{x,y} \hat{P}(x) P(y|x) \log P(y|x) + w_0(1 - \sum_y P(y|x)) \\ &\quad + \sum_{i=1}^n w_i (\sum_{x,y} \hat{P}(x, y) f_i(x, y) - \sum_{x,y} \hat{P}(x) P(y|x) f_i(x, y)) \end{aligned}$$

最优化的原始问题是：

$$\min_{P \in C} \max_{\mathbf{w}} L(P, \mathbf{w})$$

最优化的对偶问题是：

$$\max_{\mathbf{w}} \min_{P \in C} L(P, \mathbf{w})$$

由于拉格朗日函数 $L(P, \mathbf{w})$ 是 P 的凸函数，因此原始问题与对偶问题的解释等价的。（为什么？，用KKT条件能解析吗？）

令： $\Psi(\mathbf{w}) = \min_{P \in C} L(P, \mathbf{w})$

$\Psi(\mathbf{w})$ 称为对偶函数。同时，将其解记为：

$$\blacksquare P_{\mathbf{w}} = \arg \min_{P \in C} L(P, \mathbf{w}).$$

具体计算就是 $L(P, \mathbf{w})$ 对 P 求导，并让其等于0.

$$\begin{aligned} \blacksquare \frac{\partial L(P, \mathbf{w})}{\partial P(y|x)} &= \sum_{x,y} \hat{P}(x) (\log P(y|x) + 1) - \sum_y w_0 - \sum_{x,y} (\hat{P}(x) \sum_{i=1}^n w_i f_i(x, y)) \\ &= \sum_{x,y} \hat{P}(x) (\log P(y|x) + 1 - w_0 - \sum_{i=1}^n w_i f_i(x, y)) \end{aligned}$$

令其偏导数等于0, 在 $\hat{P}(x) > 0$ 的情况下, 解得：

$$\blacksquare P(y|x) = \exp \left(\sum_{i=1}^n w_i f_i(x, y) \right) + w_0 - 1$$

由于： $\sum_y P(y|x) = 1$, 得：

$$\blacksquare P_w(y|x) = \frac{1}{Z_w(x)} \exp \left(\sum_{i=1}^n w_i f_i(x, y) \right)$$

其中：

$$\blacksquare Z_w(x) = \sum_{i=1}^n \exp \left(\sum_y w_i f_i(x, y) \right)$$

其中： $Z_w(x)$ 称为规范化因子, $f_i(x, y)$ 称为特征函数, w_i 是特征函的权重。

之后再求解对偶问题外部的极大化问题：

$$\blacksquare \max_w \Psi(\mathbf{w})$$

将其解记作 w^* , 即：

$$\blacksquare w^* = \arg \max_w \Psi(\mathbf{w})$$

高斯混合模型

三硬币模型

三枚硬币A, B, C正面出现的概率是 π, p, q .进行如下实验: 先掷硬币A, 正面选硬币B, 反面选硬币C; 然后掷选出的硬币, 掷硬币的结果出现正面记作1, 反面记作0. 独立地重复n次实验, 得到一个观察序列如下:

1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 1

三硬币模型可以写作:

$$\begin{aligned} P(y|\theta) &= \sum_z P(y, z|\theta) = \sum_z P(z|\theta)P(y|z, \theta) \\ &= \pi p^y (1-p)^{1-y} + (1-\pi)q^y (1-q)^{1-y} \end{aligned}$$

$\Theta = (\pi, p, q)$ 是模型参数, 随机变量y的数据可以观察, 随机变量z的数据不可以观察。

最大似然函数

寻找一组模型参数, 使得在该参数下, 观测序列出现的概率极大。

将可观察数据表示为 $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_n)^T$, 为观测数据表示为 $Z = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n)^T$. 则观察数据的似然函数是:

$$\begin{aligned} P(Y|\theta) &= \sum_Z P(Z|\theta)P(Y|Z, \theta) \\ &= \prod_{j=1}^n [\pi p^y (1-p)^{1-y} + (1-\pi)q^y (1-q)^{1-y}] \end{aligned}$$

考虑求模型参数 $\Theta = (\pi, p, q)$ 的极大似然估计, 即:

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta} \log(P(Y|\theta))$$

只能通过迭代来求解模型参数。EM算法就是该问题的一种方法。

EM算法

E步: 计算模型参数 $\pi^{(i)}, p^{(i)}, q^{(i)}$ 下观测数据 y_j 来自掷硬币B的概率是(无论是正面还是反面, 都可以用下面公式进行计算):

$$u^{(i+1)} = \frac{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j}}{\pi^{(i)}(p^{(i)})^{y_j}(1-p^{(i)})^{1-y_j} + (1-\pi^{(i)})(q^{(i)})^{y_j}(1-q^{(i)})^{1-y_j}}$$

M步: 计算模型参数的新估计值:

之所以抛硬币B是因为抛硬币A出现了正面, 因此 π (抛A出现正面的几率如下计算)

$$\pi^{(i+1)} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n u^{(i+1)}$$

在抛硬币B的前提下, 根据抛B得到正面的频率得到P(B正面出现的概率)

$$p^{(i+1)} = \frac{\sum_{j=1}^n u^{(i+1)} y_j}{\sum_{j=1}^n u^{(i+1)}}$$

在抛硬币C的前提下(1-来自抛B的概率), 根据抛C得到正面的频率得到P(C正面出现的概率)

$$p^{(i+1)} = \frac{\sum_{j=1}^n (1-u^{(i+1)}) y_j}{\sum_{j=1}^n (1-u^{(i+1)})}$$

(EM算法)

输入: 观察变量数据Y, 隐变量数据Z, 联合分布 $P(Y, Z|\theta)$, 条件分布 $P(Z|Y, \theta)$;

输出: 模型参数 θ .

(1)选择参数的初始值 $\theta^{(0)}$, 开始迭代;

(2)E步: 记 $\theta^{(i)}$ 为第*i*次迭代参数 θ 的估计值, 在第*i*+1次迭代的E步, 计算:

$$Q(\theta, \theta^{(i)}) = E_z[\log P(Y, Z|\theta)|Y, \theta^{(i)}] = \sum_z P(Z|Y, \theta^{(i)}) \log P(Y, Z|\theta)$$

这里, $P(Y, Z|\theta^{(i)})$ 是在给定

观测数据Y和当前的参数估计 $\theta^{(i)}$ 下隐变量数据Z的条件概率分布:

(3)M步(求导令其等于0得极大): 求使 $Q(\theta, \theta^{(i)})$ 极大的 θ , 确定第*i*+1次迭代的参数的估计值

$\theta^{(i+1)}$:

$$\theta^{(i+1)} = \arg \max_{\theta} Q(\theta, \theta^{(i)})$$

(4)重复第(2)(3)步, 直到收敛。

Q函数

完全数据的对数似然函数 $\log P(Y, Z|\theta)$ 关于给定观测数据Y和当前参数 θ 下对未观察数据Z的条件

概率分布 $\log P(Z|Y, \theta^{(i)})$ 的期望成为Q函数, 即:

$$Q(\theta, \theta^{(i)}) = E_z[\log P(Y, Z|\theta)|Y, \theta^{(i)}]$$

高斯混合模型

高斯混合模型是指的具有如下形式的概率分布模型：

$$\blacksquare P(y|\theta) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \phi(y|\theta_k)$$

其中 α_k 是系数 $\alpha_k \geq 0$, $\sum_{k=1}^K \alpha_k = 1$; $\phi(y|\theta_k)$ 是高斯分布函数, $\theta_k = (u_k, \sigma_k^2)$,

$$\blacksquare P(y|\theta_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} \exp\left(-\frac{(y-u_k)^2}{2\sigma_k^2}\right)$$

称为第 k 个分模型。

高斯混合模型参数估计得EM算法

可以用 EM 算法来求解 GMM 的参数 α_k, u_k, σ_k .

$\gamma_{jk} = 1$ 表示第 j 个观测来自第 k 个分模型, $\gamma_{jk} = 0$ 表示第 j 个观测不是来自第 k 个分模型。

有了观察数据 y_j 以及未观测数据 γ_{jk} , 则完全数据是：

$$\blacksquare (y_j, \gamma_{j1}, \gamma_{j2}, \dots, \gamma_{jK}), j = 1, 2, \dots, K$$

似然函数为：

$$\begin{aligned} \blacksquare P(y, \gamma|\theta) &= \prod_{j=1}^N P(y_j, \gamma_{j1}, \gamma_{j2}, \dots, \gamma_{jK} | \theta) \\ &= \prod_{k=1}^K \prod_{j=1}^N [\alpha_k \phi(y_j | \theta_k)]^{\gamma_{jk}} \\ &= \prod_{k=1}^K \alpha_k^{n_k} \prod_{j=1}^N [\phi(y_j | \theta_k)]^{\gamma_{jk}} \\ &= \prod_{k=1}^K \alpha_k^{n_k} \prod_{j=1}^N \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} \exp\left(-\frac{(y_j - u_k)^2}{2\sigma_k^2}\right) \right]^{\gamma_{jk}} \end{aligned}$$

式中 $\sum_{j=1}^N \gamma_{jk} = n_k$, $\sum_{k=1}^K n_k = N$ 。

转化为完全数据的对数似然函数。

隐马尔科夫模型

定义

HMM类似于量子力学中的路径积分。马尔科夫模型是关于时序的概率模型，描述由一个隐藏的马尔科夫链生成不可观测的状态随机序列，再由各个状态生成一个观测而产生观测随机序列的过程。隐藏的马尔科夫链随机生成的状态的序列成为状态序列(state sequence);每个状态生成一个观测，而由次产生的观测的随机序列成为观测序列(observation sequence).序列的每一个位置又可以看成一个时刻。

马尔科夫模型由初始概率分布，状态转移概率分布以及观测概率分布确定。

设Q是所有可能的状态集合，V是所有可能的观测的集合。

$$Q = (q_1, q_2, \dots, q_N), V = (v_1, v_2, \dots, v_M)$$

其中N是可能的状态数，M是可能的观测数。

I是长度为T的状态序列，O是对应的观测序列。

$$I = (i_1, i_2, \dots, i_T), O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$$

A是状态转移矩阵：

$$A = [a_{ij}]_{N \times N}$$

其中：

$$a_{ij} = P(i_{t+1} = q_j | i_t = q_i), i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, \dots, N$$

是在t时刻处于 q_i 的条件下在时刻t+1转移到 q_j 的概率。

B是观察概率矩阵：

$$B = [b_j(k)]_{N \times M}$$

其中：

$$b_j(k) = P(o_t = v_k | i_t = q_j), k = 1, 2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N$$

是在时刻t处于状态 q_j 的条件下生成观测 v_k 的概率。

π 是初始状态概率向量：

$$\pi = (\pi_i)$$

其中：

$$\pi_i = P(i_1 = q_i), i = 1, 2, \dots, N$$

是在时刻t=1处于状态 q_i 的概率。

马尔科夫模型 λ 可以用三元符号来表示：

$$\lambda = (A, B, \pi)$$

A,B, π 称为马尔科夫模型的三要素。

马尔科夫模型的两个假设：

(1)齐次马尔科夫假设。任一时刻只与前一时刻有关系

$$\blacksquare P(i_t | i_{t-1}, o_{t-1}, \dots, i_1, o_1) = P(i_t | i_{t-1}), t = 1, 2, \dots, T$$

(2)观测独立性假设：任一时刻的观测只依赖于该时刻的马尔科夫链的状态，而与其他观测以及状态没有关系。

$$\blacksquare P(o_t | i_T, o_T, \dots, i_{t+1}, o_{t+1}, i_t, i_{t-1}, o_{t-1}, i_1, o_1) = P(o_t | i_t)$$

HMM的三个问题

1. 概率计算问题：给定模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ ，和观测序列 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ ，计算在模型 λ 下观测序列 O 出现的概率 $P(O|\lambda)$ 。
2. 学习问题：已知观测序列 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ ，估计模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ ，使得 $P(O|\lambda)$ 最大。即用极大似然法的方法估计参数。
3. 预测问题（也称为解码（decoding）问题）：已知观测序列 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ 和模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ ，求给定观测序列条件概率 $P(I|O)$ 最大的序列 $I = (i_1, i_2, \dots, i_T)$ ，即给定观测序列，求最有可能的对应的状态序列。

概率计算问题

直接计算方法：

问题：给定模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ ，和观测序列 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ ，计算在模型 λ 下观测序列 O 出现的概率 $P(O|\lambda)$ 。

对于状态序列 $I = (i_1, i_2, \dots, i_T)$ 的概率是： $P(I|\lambda) = \pi_{i_1} a_{i_1 i_2} a_{i_2 i_3} \dots a_{i_{T-1} i_T}$ ，

对于上面这种状态序列，产生观测序列 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ 的概率是：

$$P(O|I, \lambda) = b_{i_1}(o_1) b_{i_2}(o_2) \dots b_{i_T}(o_T),$$

因此 I 和 O 的联合概率是：

$$P(O, I|\lambda) = P(O|I, \lambda) P(I|\lambda) = b_{i_1}(o_1) b_{i_2}(o_2) \dots b_{i_T}(o_T) \pi_{i_1} a_{i_1 i_2} a_{i_2 i_3} \dots a_{i_{T-1} i_T}$$

对所有可能的 I 求和，得到：

$$\blacksquare P(O|\lambda) = \sum_I P(O, I|\lambda)$$

直接计算，时间复杂度是 $O(TN^T)$ 。为了降低计算的时间复杂度，引入了前向算法。

前向算法

给定模型 λ , 定义到时刻t部分观测序列为 $O = o_1, o_2, \dots, o_T$ 且状态为 q_i 的概率为前向概率。记作:

$$\alpha_t(i) = P(o_1, o_2, \dots, o_t, i_t = q_i | \lambda)$$

有了前向概率就可以通过递归的方法来计算任何一个观测序列的概率。就如下图所示:

前向算法使用前向概率的概念, 记录每个时间下的前向概率, 使得在递推计算下一个前向概率时, 只需要上一个时间点的所有前向概率即可。原理上也是用空间换时间。这样的时间复杂度是 $O(N^2T)$ 。



上面就是状态数目为5, 时间 $T=4$ 的图。一个问题是, 前向算法是否可以转化为矩阵求解问题?

$$\alpha_t = (\alpha_t(1), \alpha_t(2), \dots, \alpha_t(N))^T$$

初始状态是 π , 转移矩阵是 A , 因此时刻t的概率分布是一个 $N \times M$ 的矩阵, 也就是N个状态, 每个状态有M个分立值, 计算如下: 问题是怎么样降低运算复杂度? N^T 的复杂度是 $O(N^{2.373} \log T)$

$N \begin{bmatrix} A \\ \vdots \end{bmatrix}$
 $N \begin{bmatrix} B \\ \vdots \end{bmatrix}$
 $N \begin{bmatrix} \pi \\ \vdots \end{bmatrix}$

定义 矩阵乘积 $a \times b = (a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_N b_N)^T$.

则 $\alpha_1 = \pi \times b[0,1]$
 $\alpha_2 = A \cdot \alpha_1 \times b[0,2]$
 $\alpha_3 = A \cdot \alpha_2 \times b[0,3]$

$\therefore \alpha_3 = A(A\alpha_1 \times b[0,2]) \times b[0,3]$
 $= A^2 \cdot \pi \times b[0,1] \times b[0,2] \times b[0,3]$
 $\therefore \alpha_T = A^T \cdot \pi \prod_{i=1}^T b[i, i+1]$

后向概率

■ $\beta_t(i) = P(o_{t+1}, o_{t+2}, \dots, o_T | i_t = q_i, \lambda)$

定义 ■ $\beta_T(i) = 1, i = 1, 2, \dots, N$

对 $t = T-1, T-2, \dots, 1$ 有：

■ $\beta_t(i) = \sum_{j=1}^N a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j), i = 1, 2, \dots, N$

■ $\beta_t = A^{T-t} \prod_{j=t+1}^T xB[o_j], t = T-1, T-2, \dots, 1$

■ $\beta_t = (\beta_t(1), \beta_t(2), \dots, \beta_t(N))^T$

一些概率与期望值

(1) 给定模型 λ 以及观测 O , 在时刻 t 处于状态 q_i 的概率为：

■ $\gamma_t(i) = P(i_t = q_i | O, \lambda) = \frac{P(i_t = q_i, O | \lambda)}{P(O | \lambda)}$

因为 ■ $\alpha_t(i) \beta_t(i) = P(i_t = q_i, O | \lambda)$

所以： ■ $\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i) \beta_t(i)}{\sum_{i=1}^N \alpha_t(i) \beta_t(i)}$

(2) 给定模型 λ 以及观测 O , 在时刻 t 处于状态 q_i 且在 $t+1$ 时刻处以 q_j 的概率为：

■ $\xi_t(i, j) = P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j | O, \lambda)$

$$\xi_t(i, j) = \frac{P(i_t=q_i, i_{t+1}=g_j, O|\lambda)}{P(O|\lambda)} = \frac{P(i_t=q_i, i_{t+1}=g_j, O|\lambda)}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N P(i_t=q_i, i_{t+1}=g_j, O|\lambda)}$$

而：

$$P(i_t = q_i, i_{t+1} = g_j, O|\lambda) = \alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)$$

所以：

$$\xi_t(i, j) = \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}$$

(3) 将 $\gamma_t(i), \xi_t(i, j)$ 对不同时刻求和，可以得到一些有用的期望：

(a) 在观测 O 下状态 i 出现的期望值：

$$\sum_{i=1}^T \gamma_t(i)$$

(b) 在观测 O 下由状态 i 转移的期望值：

$$\sum_{i=1}^{T-1} \gamma_t(i)$$

(c) 在观测 O 下由状态 i 转移到状态 j 的期望值：

$$\sum_{i=1}^{T-1} \xi_t(i, j)$$

学习算法

监督学习方法

我们有观测序列和对应的状态序列 $[(O_1, I_1), (O_2, I_2), \dots, (O_S, I_S)]$

怎么可以通过统计方法来得到转移矩阵 A ，观测概率 B ，以及初始状态概率 π

$$\hat{a}_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_{j=1}^N A_{ij}}, i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, N$$

$$\hat{b}_j(k) = \frac{B_{jk}}{\sum_{k=1}^M B_{jk}}, j = 1, 2, \dots, N; k = 1, 2, \dots, M$$

初始状态概率 π_i 的估计值 $\hat{\pi}_i$ 为 S 个样本中初始状态为 q_i 的频率。

人工标注的成本很高，因此就会利用非监督学习的方法。

Baum-Welch 算法思想

假设给定训练数据只包含 S 个长度为 T 的观察序列 (O_1, O_2, \dots, O_s) 而没有对应的状态序列，目

标是学习HMM模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 的参数。我们将观测序列数据堪称观察数据O,状态序列数据看作不可观测的隐数据I,那么隐马尔科夫模型事实上是一个含有隐变量的概率模型：

$$\blacksquare P(O|\lambda) = \sum_I P(O|I, \lambda)P(I|\lambda)$$

他的参数学习可以由EM算法来实现。

4. 确定完全数据的对数似然函数

所有观测数据写成 $O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$,所有隐数据写成 $I = (i_1, i_2, \dots, i_T)$,完成数据是

$(O, I) = (o_1, o_2, \dots, o_T, i_1, i_2, \dots, i_T)$.完全数据的对数似然函数是 $\log P(O, I|\lambda)$

5. EM算法的E步, 求Q函数 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$

$$\blacksquare Q(\lambda, \hat{\lambda}) = E_I[\log P(O, I|\lambda)|O, \hat{\lambda}]$$

$$\blacksquare Q(\lambda, \hat{\lambda}) = \sum_I \log P(O, I|\lambda)P(O, I|\hat{\lambda})$$

其中, $\hat{\lambda}$ 是隐马尔科夫模型参数的当前估计值, λ 是要极大化的马尔科夫模型参数。

$$\blacksquare P(O, I|\lambda) = \pi_{i_1} b_{i_1}(o_1) b_{i_2}(o_2) \dots b_{i_T}(o_T) \pi_{i_1} a_{i_1 i_2} a_{i_2 i_3} \dots a_{i_{T-1} i_T}$$

于是函数 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 可以写成:

$$\blacksquare Q(\lambda, \hat{\lambda}) = \sum_I \log \pi_{i_1} P(O, I|\hat{\lambda}) + \sum_I \left(\sum_{t=1}^{T-1} \log a_{i_t i_{t+1}} \right) P(O, I|\hat{\lambda}) + \sum_I \left(\sum_{t=1}^{T-1} \log b_{i_t}(o_t) \right) I$$

式中求和都是对所有训练数据的序列总长度T进行的。

6. EM算法的M步: 极大化Q函数 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 求模型参数 A, B, λ 。极大化, 满足梯度为0, 也就对 A, B, λ 中的元素分别求导令其为0。

在 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 中的三项中, 分别只包含了 $\pi, a_{ij}, b_j(k)$,因此求解起来比较方便。此外, 我们还可以利用概率和为1的限定条件, 也就是利用拉格朗日乘子来进行计算。

对 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 的第一项, 我们求 λ :

$$\blacksquare \sum_I \log \pi_{i_1} P(O, I|\hat{\lambda}) = \sum_{i=1}^N \log \pi_i P(O, i_1 = i|\hat{\lambda})$$

因为 π_i 满足约束条件 $\sum_{i=1}^N \pi_i = 1$,利用拉格朗日乘子, 写出拉格朗日函数:

$$\blacksquare \sum_{i=1}^N \log \pi_i P(O, i_1 = i|\hat{\lambda}) + \gamma \left(\sum_{i=1}^N \pi_i - 1 \right)$$

对其求偏导并令其为0:

$$\blacksquare \frac{\partial}{\partial \pi_i} \left[\sum_{i=1}^N \log \pi_i P(O, i_1 = i|\hat{\lambda}) + \gamma \left(\sum_{i=1}^N \pi_i - 1 \right) \right] = 0$$

得到:

$$\blacksquare P(O, i_1 = i|\hat{\lambda}) + \gamma \pi_i = 0$$

对 i 求和得到 γ :

$$\gamma = -P(O|\hat{\lambda})$$

代入上式, 得到:

$$\pi_i = \frac{P(O, i_1=i|\hat{\lambda})}{P(O|\hat{\lambda})}$$

对 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 的第二项, 我们求 a_{ij} :

$$\sum_I \left(\sum_{t=1}^{T-1} \log a_{i_t i_{t+1}} \right) P(O, I|\hat{\lambda}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{T-N} \sum_{t=1}^{T-1} \log a_{ij} P(O, i_t = i, i_{t+1} = j|\hat{\lambda})$$

利用约束条件 $\sum_{i=1}^N a_{ij} = 1$, 利用拉格朗日乘子可以得到:

$$a_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{T-1} P(O, i_t = i, i_{t+1} = j|\hat{\lambda})}{\sum_{t=1}^{T-1} P(O, i_t = i|\hat{\lambda})}$$

对 $Q(\lambda, \hat{\lambda})$ 的第三项, 我们求 $b_j(k)$:

$$\sum_I \left(\sum_{t=1}^{T-1} \log b_{i_t}(o_t) \right) P(O, I|\hat{\lambda}) = \sum_{j=1}^M \sum_{t=1}^T \log b_j(o_t) P(O, i_t = j|\hat{\lambda})$$

利用 $\sum_{k=1}^M b_j(k) = 1$. 注意只有在 $o_t = v_k$ 时, $b_j(o_t)$ 对 $b_j(k)$ 的偏导数才不为0, 以 $I(o_t = v_k)$ 表示, 求得:

$$b_j(k) = \frac{\sum_{t=1}^T P(O, i_t = j|\hat{\lambda}) I(o_t = v_k)}{\sum_{t=1}^T P(O, i_t = j|\hat{\lambda})}$$

$\hat{\lambda}$ 是当前 (A, B, π) 的估计值, 因此可以通过迭代, 得到 (A, B, π) 的收敛解。

Baum-Welch 算法

输入: 观测数据 $O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$;

输出: 隐马尔科夫模型的参数

(1) 初始化

对 $n=0$, 选取 $a_{ij}^{(0)}, b_j(k)^{(0)}, \pi_i^{(0)}$ 得到模型 $\lambda^{(0)} = (A^{(0)}, B^{(0)}, \pi^{(0)})$

(2). 递推对 $n=1, 2, \dots$,

$$a_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{T-1} \xi_t(i, j)}{\sum_{t=1}^T \xi_t(i)}$$

$$b_j(k) = \frac{\sum_{t=1, o_t=v_k}^T \gamma_t(j)}{\sum_{t=1}^T \gamma_t(j)}$$

$$\pi_i = \gamma_1(i)$$

右端的值按照观测 $O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$ 和模型 $\lambda^{(n)} = (A^{(n)}, B^{(n)}, \pi^{(n)})$, 以及式中 $\xi_t(i, j)$ 按照中“一些概率与期望值”中定义进行计算。

(3) 终止, 得到模型参数 $\lambda^{(n+1)} = (A^{(n+1)}, B^{(n+1)}, \pi^{(n+1)})$

预测算法

前面已经讨论了给定观测序列 $O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$ 的概率计算问题以及通过观测序列学习模型参数问题, 还余下HMM三个问题中的给定观测下隐变量的预测问题。

前面, 我们在“一些概率与期望值”中通过前向概率和后向概率, 得到了当前模型参数以及观察序列下, 某一时刻隐变量的取值概率 $\xi_t(i)$ 。

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{i=1}^N \alpha_t(i)\beta_t(i)}$$

计算每一时刻t最可能出现的状态i, 然后得到最有可能出现的序列。这就是近似算法.

近似算法

$$i_t^* = \arg \max_{1 \leq i \leq N} [\gamma_t(i)], t = 1, 2, \dots, T$$

从而得到状态序列 $I^* = (i_1^*, i_2^*, \dots, i_T^*)$ 。近似算法简单, 但是会预测出一些实际上不发生的状态, 比如转移矩阵等于0的两个相邻状态。尽管如此, 近似算法还是有用的。

维特比算法思想

维特比算法是用动态规划解马尔科夫模型预测问题, 即用动态规划求概率最大路径(最优路径), 这时, 一条路径对应一个状态序列。

根据动态规划原理, 最优路径具有这样的特性: 如果最优路径在时刻t通过节点 i_t^* , 那么这一路径从结点 i_t^* 到终点 i_T^* 的部分路径, 对于从 i_t^* 到 i_T^* 的所有可能部分路径来说, 必须是最优的。

因为假如不是这样, 那么从 i_t^* 到 i_T^* 就有另外一条更好的部分路径存在, 如果他和从 i_t^* 到 i_T^* 的部分路径连接起来, 就会形成一条比原来的路径更优的路径, 这是矛盾的。

根据这一原理, 我们

首先定义两个变量 δ, ψ , 定义在时刻t状态为i的所有单个路径 (i_1, i_2, \dots, i_t) 中概率最大值为:

$$\delta_t(i) = \max_{i_1, i_2, \dots, i_{t-1}} P(i_t = i, i_{t-1}, i_{t-2}, \dots, i_1, o_t, \dots, o_1 | \lambda), i = 1, 2, \dots, N$$

由定义可以得到变量 δ 的递推公式:

$$\begin{aligned} \blacksquare \delta_{t+1}(i) &= \max_{i_1, i_2, \dots, i_t} P(i_{t+1} = i, i_{t-1}, i_{t-2}, \dots, i_1, o_{t+1}, \dots, o_1 | \lambda) \\ \blacksquare &= \max_{1 \leq j \leq N} [\delta_t(j) a_{ji}] b_i(o_{t+1}), i = 1, 2, \dots, N; t = 1, 2, \dots, T-1 \end{aligned}$$

定义在时刻t状态i的所有单个路径 $(i_1, i_2, \dots, i_{t-1}, i)$ 中概率最大的路径的第t-1个节点为：

$$\blacksquare \psi_t(i) = \arg \max_{1 \leq j \leq N} [\delta_{t-1}(j) a_{ji}], i = 1, 2, \dots, N$$

维特比算法步骤

输入：模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 和观测数据 $O = (o_1, o_2, \dots, o_T)$ ；

输出：最优化路径 $I^* = (i_1^*, i_2^*, \dots, i_T^*)$ 。

(1). 初始化

$$\blacksquare \delta_1(i) = \pi_i b_i(o_1), i = 1, 2, \dots, N$$

$$\blacksquare \psi_1(i) = 0, i = 1, 2, \dots, N$$

(2). 递推，对 $t=2, 3, \dots, T$

$$\blacksquare \delta_{t+1}(i) = \max_{1 \leq j \leq N} [\delta_t(j) a_{ji}] b_i(o_{t+1}), i = 1, 2, \dots, N$$

$$\blacksquare \psi_t(i) = \arg \max_{1 \leq j \leq N} [\delta_{t-1}(j) a_{ji}], i = 1, 2, \dots, N$$

(3). 终止

$$\blacksquare P^* = \max_{1 \leq j \leq N} \delta_T(i)$$

$$\blacksquare i_T^* = \arg \max_{1 \leq j \leq N} \delta_T(i)$$

(4) 最优路径回溯。对 $t=T-1, T-2, \dots, 1$

$$\blacksquare i_t^* = \psi_{t+1}(i_{t+1}^*)$$

求得最优路径 $I^* = (i_1^*, i_2^*, \dots, i_T^*)$.

DNN-HMM混合系统

DNN-HMM混合系统利用DNN强大的表示学习能力以及HMM的序列化建模能力，他在大词汇连续语音识别任务重的表现远优于传统的(GMM-)HMM.

马尔科夫链蒙特卡洛方法

[参考这篇文章](#)

基本思想

对于一个给定的概率分布 $P(X)$, 若要得到其样本, 通过上述的马尔科夫链的概念, 我们可以构造一个转移矩阵 P 的马尔科夫链, 使得该MC的平稳分布是 $P(X)$, 这样, 无论初始状态是何值, 比如是 x_0 , 那么随着马尔科夫过程的转移, 得到了一系列的状态值, 如 $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots$, 如果这个马尔科夫过程在第 n 步已经收敛, 那么分布 $P(X)$ 的样本就是 x_n, x_{n+1}, \dots 。

细致平衡条件

假设一个各态便利的马尔科夫过程, 其转移矩阵是 P , 分布是 $\pi(x)$, 若满足:

$$\pi(i)P_{i,j} = \pi(j)P_{j,i}$$

则 $\pi(x)$ 是马尔科夫链的平稳分布, 上式称为细致平衡条件。

Metropolis采样算法

Metropolis采样算法的基本原理

假设需要从目标概率密度 $p(\theta)$ 中进行采样, 同时, θ 满足 $-\infty < \theta < \infty$. Metropolis采样算法根据马尔科夫链去生成一个序列:

$$\theta^{(1)} \rightarrow \theta^{(2)} \rightarrow \dots \theta^{(t)} \rightarrow$$

其中, $\theta^{(t)}$ 表示的是马尔科夫链在第 t 时刻的状态。

在Metropolis采样算法过程中, 首先初始化状态值 $\theta^{(1)}$, 然后利用一个已知的分布 $q(\theta|\theta^{(t-1)})$ 生成一个新的候选状态 $\theta^{(*)}$, 随后根据一定的概率选择接受这个新值还是拒绝这个新值, 在Metropolis采样中, 概率为:

$$\alpha = \min\left(1, \frac{p(\theta^{(*)})}{p(\theta^{(t-1)})}\right)$$

这样的过程一直持续到采样过程的收敛, 当收敛以后, 样本 $\theta^{(t)}$ 即为目标分布 $P(\theta)$ 中的样本。

Metropolis采样算法的流程

基于以上的分析，可以总结出如下的Metropolis采样算法的流程

初始化时间t=1

设置u的值，并初始化初始状态 $\theta^{(t)} = u$

重复以下的过程：

- 令t=t+1 ■从已知分布 $q(\theta|\theta^{(t-1)})$ 中生成一个候选状态 $\theta^{(*)}$
 - 计算接受的概率： $\alpha = \min(1, \frac{p(\theta^{(*)})}{p(\theta^{(t-1)})})$
 - 从均匀分布Uniform(0,1)生成一个随机值a. ■如果 $a < \alpha$, 则接受新生成的值: $\theta^{(t)} = \theta^{(*)}$;
- 否则 $\theta^{(t)} = \theta^{(t-1)}$ 直到t=T.

Metropolis采样算法的解释

要证明Metropolis采样算法的正确性，最重要的是要证明构造的马尔科夫过程满足细致平衡条件，即：

$$\pi(i)P_{i,j} = \pi(j)P_{j,i}$$

对于上面的过程，分布为 $p(\theta)$ ，从状态i转移到状态j的转移概率为：

$$P_{i,j} = \alpha_{i,j}Q_{i,j}$$

其中， $Q_{i,j}$ 为上述已知分分布，且是对称的分布 $Q_{i,j} = Q_{j,i}$ 。即：

■ $q(\theta = \theta^{(t)} | \theta^{(t-1)}) = q(\theta = \theta^{(t-1)} | \theta^{(t)})$ 接下来，我们需要证明Metropolis采样算法中构造的马尔科夫链满足细致平衡条件：

$$\begin{aligned} p(\theta^{(i)} P_{i,j}) &= p(\theta^{(i)} \alpha_{i,j} Q_{i,j}) \\ &= p(\theta^{(i)} \min(1, \frac{p(\theta^{(j)})}{p(\theta^{(i)})}) Q_{i,j}) \\ &= \min(p(\theta^{(i)} Q_{i,j}), p(\theta^{(j)} Q_{i,j})) \\ &= p(\theta^{(j)} \min(\frac{p(\theta^{(i)})}{p(\theta^{(j)})}, 1) Q_{j,i}) \\ &= p(\theta^{(i)} \alpha_{i,j} Q_{i,j}) \\ &= p(\theta^{(j)} P_{j,i}) \end{aligned}$$

因此，通过上面方法构造出来的马尔科夫链满足细致平衡条件。

MCMC的使用场景

MCMC——Metropolis-Hastings算法 MCMC——Gibbs Sampling算法

降维与无监督学习

隐语义模型

LFM(Latent factor model):通过隐含特征(Latent Factor)联系用户兴趣和物品.

LFM通过如下公式计算用户u对物品i的兴趣:

$$Preference(u, i) = r_{ui} = p_u^T q_i = \sum_{k=1}^K p_{u,k} q_{i,k}$$

公式中 $p_{u,k}$ 和 $q_{i,k}$ 是模型的参数, 其中 $p_{u,k}$ 度量了用户u的兴趣和第k个隐类的关系。而 $q_{i,k}$ 都凉了第k个隐类和物品i之间的关系。

$p_{u,k}, q_{i,k}$ 通过如下方式求解:

$$C = \sum_{(u,i) \in K} (r_{ui} - \hat{r}_{ui})^2 = \sum_{(u,i) \in K} (r_{ui} - \sum_{k=1}^K p_{u,k} q_{i,k})^2 + \lambda ||p_u||^2 + \lambda ||q_i||^2$$

SVD++

指标

1. 准确率
2. 召回率
3. 覆盖率
4. 多样性

麦克斯韦妖与信息熵

不存在一个监测系统, 能区分粒子的速度而对粒子做出区分, 使得原本温度相同的系统, 自发的形成高温与低温子系统。因为在区分例子速度时, 就是一个信息处理的过程, 使得系统的信息熵减小。那么, 怎么根据熵增原理, 确定系统的熵减数量与检测系统需要付出的信息熵的数量, 或者能量。

非负矩阵分解

$N * p$ 数据矩阵X近似表示为:

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{WH}$$

其中: $\mathbf{W} \in R^{N \times r}$, $\mathbf{H} \in R^{r \times p}$, $r \leq \max(N, p)$, 我们假定 $x_{ij}, w_{ik}, h_{kj} \geq 0$.

矩阵W, H通过最大化下面似然函数确定:

$$L(\mathbf{W}, \mathbf{H}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^p [x_{ij} \log(\mathbf{WH})_{ij} - (\mathbf{WH})_{ij}]$$

这个从一个 x_{ij} 满足均值为 $(\mathbf{WH})_{ij}$ 的泊松分布的模型的似然函数。

通过梯度下降法可以求解。

分类问题与方法

回归问题与方法

K均值EM等聚类算法

k-means对初始值的设置很敏感，所以有了k-means++、intelligent k-means、genetic k-means。k-means对噪声和离群值非常敏感，所以有了k-medoids和k-medians。k-means只用于numerical类型数据，不适用于categorical类型数据，所以k-modes。k-means不能解决非凸(non-convex)数据，所以有了kernel k-means

正则化方法原理

Ridge回归, Shrink与SVD

$$\hat{\beta}^{ridge} = \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2$$

等价于:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}^{ridge} &= \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p x_{ij}\beta_j)^2 \\ &\text{subject to : } \sum_{j=1}^p \beta_j^2 \leq t. \end{aligned}$$

上面的问题也等价于假定, y_i, β_i 服从如下分布:

$$y_i \in N(\beta_0 + x_i^T \beta, \sigma^2)$$

$$\beta_i \in N(0, \tau^2)$$

其中: $\lambda = \sigma^2 / \tau^2$

因此RRS(Root sum square)可以写成如下形式:

$$RRS(\lambda) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + \lambda \beta^T \beta$$

通过对 β 求导并令其为0, 可以得到:

$$\hat{\beta}^{ridge} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda I)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

为了建立起L2与SVD之间的联系, 我们对 \mathbf{X} 进行SVD分解:

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^T$$

我们重写没有正则化的最小二乘拟合:

$$\mathbf{X}\beta^{ls} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T \mathbf{y}$$

对于L2正则化的最小二乘法:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}\beta^{ls} &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda I)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{U} \mathbf{D} (\mathbf{D}^2 + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{D} \mathbf{U}^T \mathbf{y} \\ &= \sum_{j=1}^p \mathbf{u}_j \frac{d_j^2}{d_j^2 + \lambda} \mathbf{u}_j^T \mathbf{y} \end{aligned}$$

从上面的分式 $\frac{d_j^2}{d_j^2 + \lambda}$ 可以知道, 对于 $d_j \ll \lambda$, 则相应的方向会收缩到0。可以认为L2就是对数据进行了SVD分解后, 只保留了 $d_j > \lambda$ 的分量。

Lasso(L1)回归

$$\hat{\beta}^{ridge} = \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|$$

等价于：

$$\hat{\beta}^{ridge} = \arg \min_{\beta} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^p x_{ij}\beta_j)^2$$

$$subject to : \sum_{j=1}^p |\beta_j| \leq t.$$

L1更容易产生稀疏性,因为椭圆与菱形更易在菱形顶点相交,而与圆形不容易在坐标轴上相切。



L1稀疏性的数学解析

一个数学上更严格 的解析。。上面的问题也等价于假定, y_i, β_i 服从如下分布:

$$y_i \in N(\beta_0 + x_i^T \beta, \sigma^2)$$

$$\beta_i \in (1/2\tau) \exp(-|\beta|/\tau)$$

其中: $\tau = 1/\lambda$

因此 β_i 更容易分布在0的附件, 也就是能级排斥(量子混沌里面的概念, L1是可积系统, L2是 GOE)

最小二乘一般通过Cholesky分解($p^3 + Np^2/2$)或者QR分解(NP^2)来实现, 前者一般更快, 但是没有后者稳定。

机器学习项目

目录

1. **AlphaZero-Gomoku**
2. **OpenPose**
3. **Face Recognition**
4. **Magenta**
5. **YOLOv2**
6. **MUSE**
7. **Arnold**
8. **FoolNLTK**
9. **Gym**
10. **style2paints v2.0**

winequality 可以作为线性回归的练习

从回归到分类，到推进系统，数据集在下面 <http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.html> 对于回归，可以先用方程产生带噪声的数据，再对这些带噪声的数据进行回归分析。一元高次方程回归。

$$y(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d + \text{random tensorflownews}$$

多元回归分析可以通过求伪逆来求解。

自己需要做的是写一个regression与classification的类，来实现不同的回归与分类算法，先设计成一个类，如果有必要再设计成一个工厂类。

多元回归分析

多元回归方程

$$\hat{y} = \lambda_0 + \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \dots + \lambda_m x_m$$

其中 b_j 是 x_j 的偏回归系数, \hat{y} 是样本的估计值。

根据最小值原理, 可以求得偏回归系数。

$$L(b) = \sum_{i=0}^{n-1} [y_i - (\lambda_0 + \lambda_1 x_{1i} + \lambda_2 x_{2i} + \dots + \lambda_m x_{mi})]^2$$

变量数为m, 样本数为n. 最小二乘法的目的就是找到一组偏回归系数使得损失函数L极小, 极端情况就是L=0, 则所有样本估计值就是样本的观测值。这在满秩的情况下存在。一般只是求得L的极小值点。对损失函数求偏导, 可以得到:

实际问题可以转化成矩阵分析

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \lambda_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{1o} \\ y_{2o} \\ \vdots \\ y_{no} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}$$

即:

$$X * \lambda = Y + \epsilon$$

寻找一组 λ 使得 $L(\lambda) = (X * \lambda - Y)^T (X * \lambda - Y)$ 极小

利用 $L(\lambda)$ 对向量 λ 求导可以得到¹:

$$\frac{\partial L(\lambda)}{\partial \lambda} = 2X^T(X\lambda - Y) = 0$$

我们也可以得到: $\frac{\partial^2 L(\lambda)}{\partial \lambda^2} = 2X^T X$

求得: $\lambda = (X^T X)^{-1} X^T Y$

$(X^T X)^{-1} X^T$ 也称为X的伪逆。

多项式拟合

函数的多项式表示方式: $y = \sum_{k=0}^m \lambda_k x^k$ 对于n组数据 (x_i, y_i) 若我们想用多项式去拟合这组数据, 就是寻找使下列函数值极小的一组系数 λ

$$L(\lambda) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \sum_{k=0}^m \lambda_k x_i^k)^2 \text{ 令: } \lambda = [\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_m]^T$$

$$X_i = [x_i^0, x_i^1, \dots, x_i^m] \quad Y = [Y_0, Y_1, \dots, Y_{n-1}]^T$$

则上面损失函数可以表示为: $L(\lambda) = (X * \lambda - Y)^T (X * \lambda - Y)$

对其求一阶导，结果为0； $\frac{\partial L(\lambda)}{\partial \lambda} = 0$ 最终方程可以化简成如下形式：

$$\boxed{\begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{n-1} x_j^0 & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^1 & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^m \\ \sum_{j=0}^{n-1} x_j^1 & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^2 & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{m+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=0}^{n-1} x_j^m & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{m+1} & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \cdots \\ \lambda_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^0 \\ \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^1 \\ \cdots \\ \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^m \end{bmatrix}} \text{ 即: } X * \lambda = Y$$

得到 $\lambda = X^{-1}Y$ 若在方程上加上一个正则项，

$L(\lambda) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{n-1} (y_i - \sum_{k=0}^m \lambda_k x_i^k)^2 + \sum_{k=0}^m \lambda_k^2$ 得到如下的矩阵：

$$\boxed{\begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{n-1} x_j^0 - 2n & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^1 & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^m \\ \sum_{j=0}^{n-1} x_j^1 & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^2 - 2n & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{m+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=0}^{n-1} x_j^m & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{m+1} & \cdots & \sum_{j=0}^{n-1} x_j^{2m} - 2n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \cdots \\ \lambda_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^0 \\ \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^1 \\ \cdots \\ \sum_{j=0}^{n-1} y_j * x_j^m \end{bmatrix}}$$

类似于Ridge回归：但是对于加噪声参数的多项式数据，发现不加正则项能给出正确的结果，加正则项反倒不能。

迭代法求解

求解上面的方程也可以使用迭代法求解：

1. 矩阵求导术(上), <https://zhuanlan.zhihu.com/p/24709748> ↵

矩阵微分

参考闲话矩阵求导

向量 \mathbf{y} 对标量 x 求导

我们假定所有的向量都是列向量

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \left[\frac{\partial y_1}{\partial x} \quad \frac{\partial y_2}{\partial x} \quad \cdots \quad \frac{\partial y_m}{\partial x} \right]$$

标量 y 对向量 \mathbf{x} 求导：

$$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_m} \end{bmatrix}$$

向量对向量求导

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \frac{\partial y_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

标量对矩阵求导，

$$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_{11}} & \frac{\partial y}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{1q}} \\ \frac{\partial y}{\partial x_{21}} & \frac{\partial y}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{2q}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_{p1}} & \frac{\partial y}{\partial x_{p2}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{pq}} \end{bmatrix}$$

矩阵对标量求导，

注意有个类似于转置的操作，因为 \mathbf{Y} 是 $m \times n$ 矩阵

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_{11}}{\partial x} & \frac{\partial y_{12}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{1n}}{\partial x} \\ \frac{\partial y_{21}}{\partial x} & \frac{\partial y_{22}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{2n}}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_{m1}}{\partial x} & \frac{\partial y_{m2}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{mn}}{\partial x} \end{bmatrix}$$

用维度分析来解决求导的形式问题

$$\text{向量对向量的微分 } \frac{\partial(\mathbf{Ax})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(\mathbf{Ax})_1}{\partial x_1} & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_m}{\partial x_1} \\ \frac{\partial(\mathbf{Ax})_1}{\partial x_2} & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_m}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial(\mathbf{Ax})_1}{\partial x_n} & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_2}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial(\mathbf{Ax})_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \mathbf{A}^T$$

考虑 $\frac{\partial \mathbf{Au}}{\partial \mathbf{x}}$, \mathbf{A} 与 \mathbf{x} 无关, 所以 \mathbf{A} 肯定可以提出来, 只是其形式不知。假如

$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{p \times 1}$ 我们知道最终结果肯定和 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ 有关, 注意到 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, 于是 \mathbf{A} 只能

转置以后添在后面, 因此: $\frac{\partial \mathbf{Au}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}^T$

$$dL = \frac{\partial L^T}{\partial \mathbf{w}} d\mathbf{w}$$

再考虑如下问题:

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{Ay}}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1} \text{ 其中 } \mathbf{A} \text{ 与 } \mathbf{x} \text{ 无关, 我们知道 } \frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{Ay}}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{m \times 1} \text{ 因此}$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{Ay}}{\partial \mathbf{x}} = f(A, y) + g\left(\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}^T A\right) \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1}, \mathbf{x}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{1 \times n}, \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{m \times n} \text{ 因}$$

此, 为了满足 $\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{Ay}}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 我们可以知道函数 f, g 的形式。最终有:

$$\frac{\partial(\mathbf{x}^T \mathbf{A})\mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}^T \mathbf{x} + \mathbf{A}\mathbf{y} \text{ 当 } \mathbf{x} = \mathbf{y} \text{ 时,} \quad \frac{\partial(\mathbf{x}^T \mathbf{A})\mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{A}^T + \mathbf{A})\mathbf{x}$$

最后一个例子(还没解出来): $\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{x} \mathbf{x}^T \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ 知道 $\frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{x} \mathbf{x}^T \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ 还需要对迹形式进行求解.

正则化

L0 is OMP-k

Ensemble learning(团体学习)

利用多个学习方法来获得更好的预测能力，机器学习中的系综学习的样本是有限的，但是统计力学中的系综方法其样本是无限的。机器学习中的系综方法包括Bagging,boosting

Bagging算法(Bootstrap aggregating)

参考 是一种团体学习方法,可以看成事一种圆桌会议,或者投票选举的形式,其思想是“群众的眼光是雪亮的”,可以训练多个模型,之后将这些模型进行加权组合,一般这类方法的效果,都会好于单个模型的效果。在实践中,在特征一定的情况下,大家总是使用Bagging的思想去提升效果。算法步骤 给定一个大小为n的训练集D, Bagging算法从中均匀、有放回地(即使用自助抽样法)选出m个大小为 n' 的子集 D_i , 作为新的训练集。在这m个训练集上使用分类、回归等算法,则可得到m个模型,同一个训练集中的成员可以有重重复,再通过取平均值、取多数票等方法,即可得到Bagging的结果。

Boosting

在Bagging方法中, 我们假设每个训练样本的权重都是一致的; 而Boosting算法则更加关注错分的样本, 越是容易错分的样本, 约要花更多精力去关注。对应到数据中, 就是该数据对模型的权重越大, 后续的模型就越要拼命将这些经常分错的样本分正确。最后训练出来的模型也有不同权重, 所以boosting更像是会整, 级别高, 权威的医师的话语权就重些。训练:先初始化每个训练样本的权重相等为 $1/d$, d为样本数量; 之后每次使用一部分训练样本去训练弱分类器, 且只保留错误率小于0.5的弱分类器, 对于分对的训练样本, 将其权重调整为 $\text{error}(M_i)/(1-\text{error}(M_i))$, 其中 $\text{error}(M_i)$ 为第*i*个弱分类器的错误率(降低正确分类的样本的权重, 相当于增加分错样本的权重);

测试:每个弱分类器均给出自己的预测结果, 且弱分类器的权重为 $\log(1-\text{error}(M_i))/\text{error}(M_i)$ 权重最高的类别, 即为最终预测结果。

在adaboost中, 弱分类器的个数的设计可以有多种方式, 例如最简单的就是使用一维特征的树作为弱分类器。

adaboost在一定弱分类器数量控制下, 速度较快, 且效果还不错。

我们在实际应用中使用adaboost对输入关键词和推荐候选关键词进行相关性判断。随着新的模型方法的出现，adaboost效果已经稍显逊色，我们在同一数据集下，实验了GBDT和adaboost，在保证召回基本不变的情况下，简单调参后的Random Forest准确率居然比adaboost高5个点以上，效果令人吃惊。。。

Bagging和Boosting都可以视为比较传统的集成学习思路。现在常用的Random Forest, GBDT, GBRank其实都是更加精细化，效果更好的方法。后续会有更加详细的内容专门介绍。

训练神经网络的经验

第一步(一个月), 公式推导必须会, 核心思想会, 并且要融会贯通。

1. SVM
2. LR, LTR
3. 决策树, RF, GBDT, xgboost
4. 贝叶斯
5. 降维:PCA, SVD
6. BP的公式推导, 以及写一个简单的神经网络, 并跑个小的数据。用python, numpy。
7. LeetCode上面刷Easy与Medium的题
8. 看面经, 找面试常遇到的问题

第二步是最优化总结(半个月), 总结常用的优化算法, 比如梯度下降, 牛顿, 拟牛顿, trust region, 二次规划。

特征工程

特征工程是什么

有这么一句话在业界广泛流传：数据和特征决定了机器学习的上限，而模型和算法只是逼近这个上限而已。那特征工程到底是什么呢？顾名思义，其本质是一项工程活动，目的是最大限度地从原始数据中提取特征以供算法和模型使用。通过总结和归纳，人们认为特征工程包括以下方面：

特征选择方式

参考知乎上[这篇文章](#)

特征选择与特征提取是特征工程中的两大核心问题。特征选择是指选择获得相应模型和算法最好性能的特征集，工程上常用的方法如下：

1. 计算每一个特征与相应变量的相关性。一般是算皮尔逊系数和互信息系数。皮尔逊系数只能衡量线性相关性，互信息系数能够很好地度量各种相关性，但是计算相对复杂，很多toolkit里面包含了这个工具（如sklearn的MI），得到相关性之后就可以排序选择特征了。
2. 构建单个特征的模型，通过模型的准确性为特征排序，借此来选择特征。
3. 通过L1正则项来选择特征，L1正则方法具有稀疏解的特性，因此天然具备特征选择的特性。
4. 训练能够对特征打分的预选模型：RF和LR等都对模型的特征打分，通过打分获得相关性后再训练最终模型。
5. 通过特征组合后回来选择特征：如对用户ID和用户特征的组合来获得较大的特征集再来选择特征，这种做法在推荐系统和广告系统中比较常见，这也是所谓亿级甚至十亿级特征的主要来源，原因是用户数据比较稀疏，特征组合能同时兼顾全局模型和个性化模型。
6. 通过深度学习来进行特征选择/目前这种手段

总体而言，有两种方法：

基于方差的方法（PCA），基于相关性方法。

1. 相关性：一般用皮尔逊相关系数来定义。
2. 方差法：去掉值变化不大的特征，因为可以把这些特征看成常数值，他们对分类或者回归结果影响不大。

特征选择

1. Filter方法：自变量与目标变量之间的关联
 - i. Pearson相关系数
 - ii. 卡方检测
 - iii. 信息增益，互信息(MIC)

2. Wrapper方法:通过目标函数来决定是否加入一个变量

i. 迭代:产生特征子集, 评价

ii. 完全搜索

iii. 启发式搜索

iv. 随机搜索(GA, SA)

3. Embedded方法:学习器自身自动选择特征

i. 正则化L1, L2

ii. 决策树(熵-信息增益, 基尼系数)

iii. 深度学习

Filter

Pearson相关系数

Pearson相关系数(取值在[-1,1]之间, 大于0是正相关, 小于0是负相关, 等于0就没有相关性。只对具有线性相关性的变量有效, 不能处理具有非线性关系的两组变量)

互信息(MIC)

$$MIC : I(X, Y) = \sum_{y \in Y} \sum_{x \in X} p(x, y) \log\left(\frac{p(x, y)}{p(x)p(y)}\right)$$

对于线性与非线性关系的数据都实用。

距离相关系数(Distance Correlation)

为了克服Pearson相关系数只对具有线性关系的变量起作用而引入。

样本: $(X_k, Y_k), k = 1, 2, \dots, n$

定义距离矩阵:

$$a_{j,k} = \|\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_k\|, \quad j, k = 1, 2, \dots, n$$

$b_{j,k} = \|\mathbf{Y}_j - \mathbf{Y}_k\|, \quad j, k = 1, 2, \dots, n$ || * || 是欧氏距离。取所有的双中心距离。

$$\mathbf{A}_{j,k} := a_{j,k} - \hat{a}_{j.} - \hat{a}_{.k} + \hat{a}_{..}$$

$$\mathbf{B}_{j,k} := b_{j,k} - \hat{b}_{j.} - \hat{b}_{.k} + \hat{b}_{..}$$

$\hat{a}_{j.}$ 是j-th row的平均, $\hat{a}_{.k}$ 是k-th column的平均, $\hat{a}_{..}$ 是全局平均。

定义The squared sample distance covariance:

$$dCov_n^2(X, Y) := \frac{1}{n^2} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n A_{jk} B_{jk}$$

虽然MIC与距离相关系数能处理具有线性与非线性关系的变量之间的相关性, 但是Pearson还是不可替代的, 第一, Pearson系数计算速度快;第二, 相对于其它两种取值在[0,1], Pearson取值[-1,1], 正负表关系的正负, 绝对值表示强度。前提就是两个变量是线性相关的。

特征工程小结

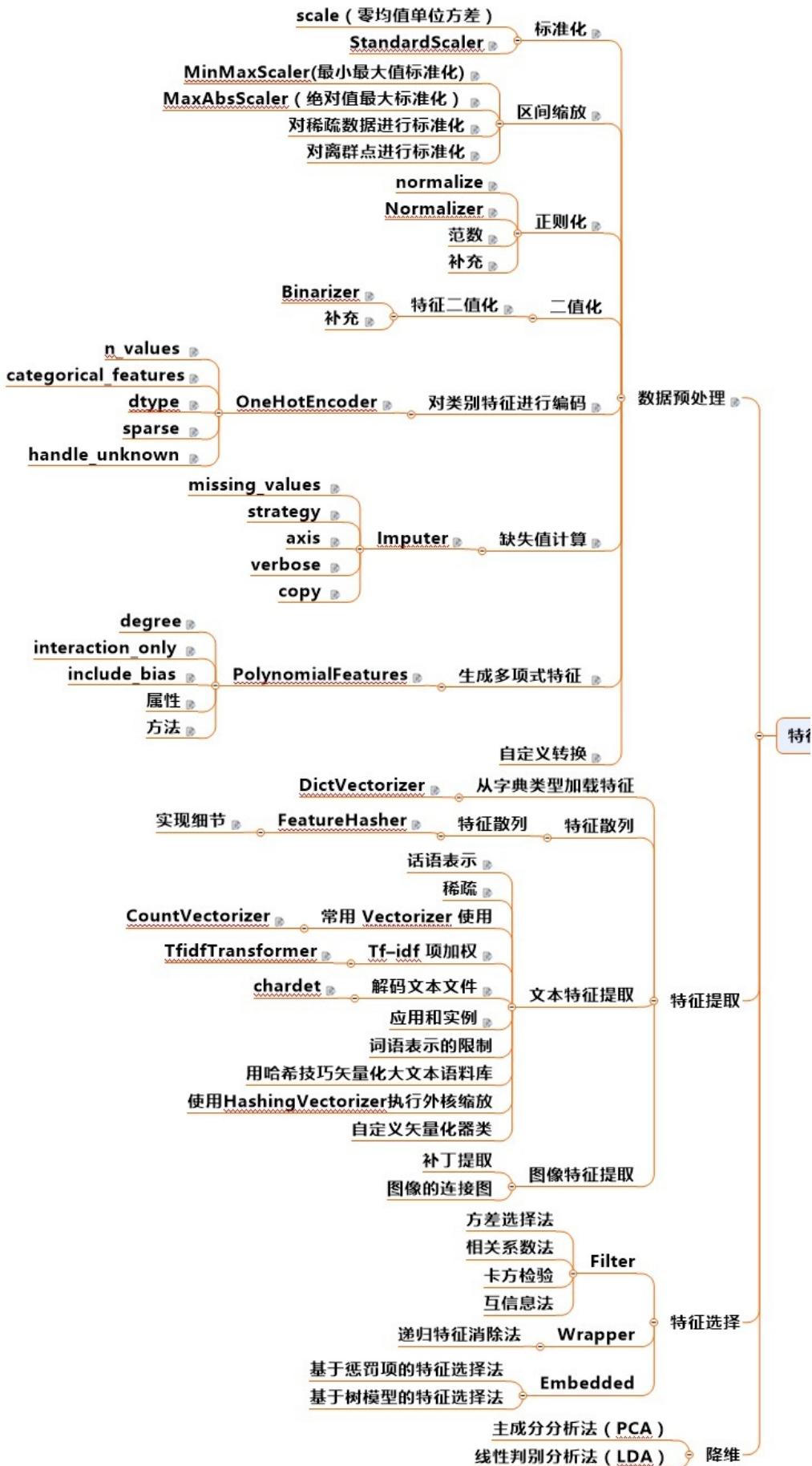
- 特征工程: 利用数据领域的相关知识来创建能够使机器学习算法达到最佳性能的特征的过程。
 - 特征构建: 是原始数据中人工的构建新的特征。
 - 特征提取: 自动地构建新的特征, 将原始特征转换为一组具有明显物理意义或者统计意义或核的特征。
 - 特征选择: 从特征集合中挑选一组最具统计意义的特征子集, 从而达到降维的效果。
- 重要性排名: 特征构建>特征提取>特征选择

ML框架¹

参考



特征工程



模型的超参数调节

Model	Parameters to optimize	Good range of values
Linear Regression	<ul style="list-style-type: none">• fit_intercept• normalize	<ul style="list-style-type: none">• True / False• True / False
Ridge	<ul style="list-style-type: none">• alpha• Fit_intercept• Normalize	<ul style="list-style-type: none">• 0.01, 0.1, 1.0, 10, 100• True/False• True/False
k-neighbors	<ul style="list-style-type: none">• N_neighbors• p	<ul style="list-style-type: none">• 2, 4, 8, 16• 2, 3
SVM	<ul style="list-style-type: none">• C• Gamma• class_weight	<ul style="list-style-type: none">• 0.001, 0.01.....10...100...1000• 'Auto', RS*• 'Balanced' , None
Logistic Regression	<ul style="list-style-type: none">• Penalty• C	<ul style="list-style-type: none">• L1 or L2• 0.001, 0.01.....10...100
Naive Bayes (all variations)	NONE	NONE
Lasso	<ul style="list-style-type: none">• Alpha• Normalize	<ul style="list-style-type: none">• 0.1, 1.0, 10• True/False
Random Forest	<ul style="list-style-type: none">• N_estimators• Max_depth• Min_samples_split• Min_samples_leaf• Max features	<ul style="list-style-type: none">• 120, 300, 500, 800, 1200• 5, 8, 15, 25, 30, None• 1, 2, 5, 10, 15, 100• 1, 2, 5, 10• Log2, sqrt, None
Xgboost	<ul style="list-style-type: none">• Eta• Gamma• Max_depth• Min_child_weight• Subsample• Colsample_bytree• Lambda• alpha	<ul style="list-style-type: none">• 0.01,0.015, 0.025, 0.05, 0.1• 0.05-0.1,0.3,0.5,0.7,0.9,1.0• 3, 5, 7, 9, 12, 15, 17, 25• 1, 3, 5, 7• 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0• 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0• 0.01-0.1, 1.0 , RS*• 0, 0.1, 0.5, 1.0 RS*

NLP 特征工程

Data Pre-processing

- Text Cleaning
- Spell Checking
- Stemming
- Lemmatization

Feature Engineering

- Categorical Features
- Counting Features

More Features

- Co-occurrence Features
- Semantic Features
- Statistical Features

Models

- XGBoost
- Ridge Regression
- GBM
- Extra Trees
- Random Forest

特征工程可以参考[这篇文章](#)

<http://blog.kaggle.com/2016/07/21/approaching-almost-any-machine-learning-problem-abhishek-thakur/>

第八章 推荐系统

推荐系统概述

FM(Factorization Machines), FFM

FM

- 一般的线性模型为:
$$y = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i$$
一般模型中，各个特征是独立考虑的，没

有考虑特征之间的相互关系。如果考虑特征 x_i, x_j 之间的相互关系，模型修改如下：

$$y = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n w_{ij} x_i x_j$$

■如果系统的特征比较多的话，计算复杂度会大大提升。为了降低时间复杂度，我们引入了辅助向量latent vector

$$\mathbf{V}_i = [v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{ik}]^T$$

,辅助变量是描述变量之间的相关性。模型修改如下：

$$y = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (V_i, V_j) x_i x_j$$

以上就是FM模型。k是超参数，一般娶30或者40。时间复杂度是 $O(kn^2)$ ，可通过如下方式化简。

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (V_i, V_j) x_i x_j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (V_i, V_j) x_i x_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (V_i, V_i) x_i x_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_{f=1}^n \left(\sum_{i=1}^n v_{if} x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n v_{if}^2 x_i^2 \end{aligned}$$

通过对每个特征引入latent vector \mathbf{V}_i ，并对公式进行化简，可以把时间复杂度降为 $O(kn)$.

LTR

LTR or machine-learned ranking(MLR)是运用机器学习,典型的监督,半监督或者强化学习来为信息检索系统构建排序模型

排序学习可以在信息检索(IR),NLP, DM等领域被广泛应用,典型的应用有文献检索,专家检索系统,定义查询系统,协同过滤,问答系统,关键词提取,文档摘要还有机器翻译等。

互联网搜索方面的一个新趋势是使用机器学习方法去自动的建立评价模型 $f(q, d)$ 。

对于标注训练集,选定LTR方法,确定损失函数,以最小化损失函数为目标进行优化即可得到排序模型的相关参数,这就是学习过程。预测过程就是将待预测结果输入到学习到的排序模型中,即可以得到结果的相关得,利用该得分进行排序即可得到待预测结果的最终顺序。

第九章 Kaggle

这章主要通过Kaggle实战来提升自己的运用的能力，最主要的还是特征提取的能力。

Titanic

Variable Description

Survived: Survived (1) or died (0)
Pclass: Passenger's class
Name: Passenger's name
Sex: Passenger's sex
Age: Passenger's age
SibSp: Number of siblings/spouses aboard
Parch: Number of parents/children aboard
Ticket: Ticket number
Fare: Fare
Cabin: Cabin
Embarked: Port of embarkation

常用的数据清洗技巧

导入数据

```
train = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\train.csv")
test = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\test.csv")
test_Y = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\gender_submission.csv")
```

导入库函数

```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
# Handle table-like data and matrices
import numpy as np
import pandas as pd

# Modelling Algorithms
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
from sklearn.svm import SVC, LinearSVC
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier , GradientBoostingClassifier

# Modelling Helpers
```

```

from sklearn.preprocessing import Imputer , Normalizer , scale
from sklearn.cross_validation import train_test_split , StratifiedKFold
from sklearn.feature_selection import RFECV

# Visualisation
import matplotlib as mpl
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.pylab as pylab
import seaborn as sns

# Configure visualisations
%matplotlib inline
mpl.style.use( 'ggplot' )
sns.set_style( 'white' )
pylab.rcParams[ 'figure.figsize' ] = 8 , 6

```

数据的统计属性

```

train.shape ##数据的维度
train.head ##显示所有数据

```

相关系数与统计属性

In [6]: `train.describe()`

Out[6]:

	PassengerId	Survived	Pclass	Age	SibSp	Parch	Fare
count	891.000000	891.000000	891.000000	714.000000	891.000000	891.000000	891.000000
mean	446.000000	0.383838	2.308642	29.699118	0.523008	0.381594	32.204208
std	257.353842	0.486592	0.836071	14.526497	1.102743	0.806057	49.693429
min	1.000000	0.000000	1.000000	0.420000	0.000000	0.000000	0.000000
25%	223.500000	0.000000	2.000000	20.125000	0.000000	0.000000	7.910400
50%	446.000000	0.000000	3.000000	28.000000	0.000000	0.000000	14.454200
75%	668.500000	1.000000	3.000000	38.000000	1.000000	0.000000	31.000000
max	891.000000	1.000000	3.000000	80.000000	8.000000	6.000000	512.329200

In [7]: `train.corr()`

Out[7]:

	PassengerId	Survived	Pclass	Age	SibSp	Parch	Fare
PassengerId	1.000000	-0.005007	-0.035144	0.036847	-0.057527	-0.001652	0.012658
Survived	-0.005007	1.000000	-0.338481	-0.077221	-0.035322	0.081629	0.257307
Pclass	-0.035144	-0.338481	1.000000	-0.369226	0.083081	0.018443	-0.549500
Age	0.036847	-0.077221	-0.369226	1.000000	-0.308247	-0.189119	0.096067
SibSp	-0.057527	-0.035322	0.083081	-0.308247	1.000000	0.414838	0.159651
Parch	-0.001652	0.081629	0.018443	-0.189119	0.414838	1.000000	0.216225
Fare	0.012658	0.257307	-0.549500	0.096067	0.159651	0.216225	1.000000

相关系数, 分布, 类别图

```

def plot_correlation_map( df ):
    corr = train.corr()
    _ , ax = plt.subplots( figsize =( 12 , 10 ) )
    cmap = sns.diverging_palette( 220 , 10 , as_cmap = True )
    _ = sns.heatmap(
        corr,
        cmap = cmap,
        square=True,
        cbar_kws={ 'shrink' : .9 },
        ax=ax,
        annot = True,
        annot_kws = { 'fontsize' : 12 }
    )

def plot_distribution( df , var , target , **kwargs ):
    row = kwargs.get( 'row' , None )
    col = kwargs.get( 'col' , None )
    facet = sns.FacetGrid( df , hue=target , aspect=4 , row = row , col = col )
    facet.map( sns.kdeplot , var , shade= True )
    facet.set( xlim=( 0 , df[ var ].max() ) )
    facet.add_legend()

def plot_categories(fd, cat, target, **kwargs):
    row = kwargs.get('row', None)
    col = kwargs.get('col', None)
    facet = sns.FacetGrid(fd, row = row, col = col)
    facet.map(sns.barplot, cat, target)
    facet.add_legend()

plot_correlation_map(train)
plot_distribution( train , var = 'Age' , target = 'Survived' , row = 'Sex' )
plot_categories(train, cat = 'Embarked', target = 'Survived')

```

plot_correlation_map(train)



类标签数字化

```
sex = pd.Series( np.where( train.Sex == 'male' , 1 , 0 ) , name = 'Sex' )
```

通过pandas产生一个新的数组，它是把原来sex中的male转化成1，其它的sex类别转化成0.

对类标签添加前缀

```
embarked = pd.get_dummies( train.Embarked , prefix='Embarked' )
```

原来Embarked的类标签是C, Q, S。现在添加了前缀Embarked_，并且把原来的一个类分成了三个类。

```
In [47]: embarked.head()
```

```
Out[47]:
```

	Embarked_C	Embarked_Q	Embarked_S
0	0	0	1
1	1	0	0
2	0	0	1
3	0	0	1
4	0	0	1

缺失值填充

通过均值来填充

```
imputed = pd.DataFrame()
imputed[ 'Age' ] = train.Age.fillna( train.Age.mean() )
imputed[ 'Fare' ] = train.Fare.fillna( train.Fare.mean() )
imputed[ 'Pclass' ] = train.Pclass.fillna( train.Pclass.mean() )
```

数据拼接

```
DataSet = pd.concat([imputed, embarked, sex, train.Pclass, train.SibSp, train.Parch],axis = 1)
```

DataSet.shape就是(891,10)

构造训练数据

```
train_X = DataSet[0:891]
train_Y = train.Survived
```

模型选择与训练

```
model = RandomForestClassifier(max_depth=3, max_features='auto',n_estimators=100)
model.fit(train_X, train_Y)
print model.score(train_X, train_Y),model.score(test_X, test_Y)

0.8305274971941639 0.8851674641148325
```

当你选定一个模型后，就根据这个模型，进行相应的参数输入，最基本的包括输入(X,Y)，其它的就是模型参数的设定，这个你可以根据sklearn的API进行设置。当然有目的性的调参考验的就是你的理论功底了。

总的效果

```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
# Handle table-like data and matrices
import numpy as np
import pandas as pd

from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.naive_bayes import GaussianNB
from sklearn.svm import SVC, LinearSVC
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier , GradientBoostingClassifier

# Modelling Helpers
from sklearn.preprocessing import Imputer , Normalizer , scale
from sklearn.cross_validation import train_test_split , StratifiedKFold
from sklearn.feature_selection import RFECV
import xgboost as xgb

train = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\train.csv")
test = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\test.csv")
test_Y = pd.read_csv("C:\Data\Group\ShareFolder\Kaggle\Titanic\\gender_submission.csv")

imputed_train = pd.DataFrame()
imputed_train[ 'Age' ] = train.Age.fillna( train.Age.mean() )
imputed_train[ 'Fare' ] = train.Fare.fillna( train.Fare.mean() )
imputed_train[ 'Pclass' ] = train.Pclass.fillna( train.Pclass.mean() )
embarked_train = pd.get_dummies(train.Embarked, prefix = 'Embarked')
sex_train= pd.Series( np.where( train.Sex == 'male' , 1 , 0 ) , name = 'Sex' )
DataSet_train = pd.concat([imputed_train, embarked_train, sex_train, train.Pclass, train.SibSp, train.Parch],axis = 1)

imputed_test = pd.DataFrame()
imputed_test[ 'Age' ] = test.Age.fillna( train.Age.mean() )
imputed_test[ 'Fare' ] = test.Fare.fillna( train.Fare.mean() )
imputed_test[ 'Pclass' ] = test.Pclass.fillna( train.Pclass.mean() )
embarked_test = pd.get_dummies(test.Embarked, prefix = 'Embarked')
sex_test = pd.Series( np.where( test.Sex == 'male' , 1 , 0 ) , name = 'Sex' )
DataSet_test = pd.concat([imputed_test, embarked_test, sex_test, test.Pclass, test.SibSp, test.Parch],axis = 1

test_X = DataSet_test[0:418]
train_X = DataSet_train[0:891]
train_Y = train.Survived
train_X.shape,train_Y.shape,test_X.shape,test_Y.shape
```

最终结果

使用SVM在Titanic数据上，训练集效果依次是线性SVM, GBDT,LR,RF,DT,KNN。最诡异的是，有事测试集上准确率比训练集上高。

对于随机森林RF，会发现，一开始随着树的深度增加，RF整体的准确率会上升，也就是说，RF需要准确性高的(或者说bias小的)分类器做基函数，对于GBDT，发现随深度增加，准确率下降，也就是GBDT需要深度浅，variance很小的树作为分类器，这符合他们的原理。即RF基于bias小的基分类器，通过增加树的数目来降低variance, boosting基于variance小的基分类器，通过boost来降低bias。

但是有个问题是，RF在100棵树时效果最好，选择1000, 10000都没有100的效果好。

```
In [78]: model = GaussianNB()
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.7710437710437711
test score =  0.7870813397129187

In [79]: model = DecisionTreeClassifier()
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.9820426487093153
test score =  0.8110047846889952

In [81]: model = RandomForestClassifier(max_depth=6, min_samples_leaf = 1, max_features='auto', n_estimators=100)
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.8664421997755332
test score =  0.8947368421052632

In [77]: model = LogisticRegression()
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.8024691358024691
test score =  0.9497607655502392

In [80]: model = GradientBoostingClassifier(max_depth=1, min_samples_leaf=3)
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.8148148148148148
test score =  0.9784688995215312

In [82]: model = SVC(kernel = 'linear')
model.fit(train_X, train_Y)
print "train score = ", model.score(train_X, train_Y)
print "test score = ", model.score(test_X, test_Y)

train score =  0.7867564534231201
test score =  1.0
```

模型融合

对多个模型的结果取平均(投票)，作为最终的结果。比如拿SVM, LR, RF, GBDT的平均结果作为最终结果。

用几个模型筛选出较为重要的特征

```
def get_top_n_features(titanic_train_data_X, titanic_train_data_Y, top_n_features):
    # 随机森林
    rf_est = RandomForestClassifier(random_state=42)
    rf_param_grid = {'n_estimators': [500], 'min_samples_split': [2, 3], 'max_depth': [20]}
    ]}
```

```

rf_grid = model_selection.GridSearchCV(rf_est, rf_param_grid, n_jobs=25, cv=10, verbose=1)
rf_grid.fit(titanic_train_data_X, titanic_train_data_Y)
#将feature按Importance排序
feature_imp_sorted_rf = pd.DataFrame({'feature': list(titanic_train_data_X), 'importance': rf_grid.best_estimator_.feature_importances_}).sort_values('importance', ascending=False)
features_top_n_rf = feature_imp_sorted_rf.head(top_n_features)['feature']
print('Sample 25 Features from RF Classifier')
print(str(features_top_n_rf[:25]))


# AdaBoost
ada_est = ensemble.AdaBoostClassifier(random_state=42)
ada_param_grid = {'n_estimators': [500], 'learning_rate': [0.5, 0.6]}
ada_grid = model_selection.GridSearchCV(ada_est, ada_param_grid, n_jobs=25, cv=10, verbose=1)
ada_grid.fit(titanic_train_data_X, titanic_train_data_Y)
#排序
feature_imp_sorted_ada = pd.DataFrame({'feature': list(titanic_train_data_X), 'importance': ada_grid.best_estimator_.feature_importances_}).sort_values('importance', ascending=False)
features_top_n_ada = feature_imp_sorted_ada.head(top_n_features)['feature']


# ExtraTree
et_est = ensemble.ExtraTreesClassifier(random_state=42)
et_param_grid = {'n_estimators': [500], 'min_samples_split': [3, 4], 'max_depth': [15]}
et_grid = model_selection.GridSearchCV(et_est, et_param_grid, n_jobs=25, cv=10, verbose=1)
et_grid.fit(titanic_train_data_X, titanic_train_data_Y)
#排序
feature_imp_sorted_et = pd.DataFrame({'feature': list(titanic_train_data_X), 'importance': et_grid.best_estimator_.feature_importances_}).sort_values('importance', ascending=False)
features_top_n_et = feature_imp_sorted_et.head(top_n_features)['feature']
print('Sample 25 Features from ET Classifier:')
print(str(features_top_n_et[:25]))


# 将三个模型挑选出来的前features_top_n_et合并
features_top_n = pd.concat([features_top_n_rf, features_top_n_ada, features_top_n_et], ignore_index=True).drop_duplicates()

return features_top_n

```

第十章 面试

这章涉及到C++,传统算法, ML, DL方面的常见问题。

机器学习类面试问题集

算法理论方面

2.1 LR, SVM, KNN, GBDT, XGB推导, 算法细节(LR为何是sigmod, 理论推导出sigmod,KNN距离度量方式, XGBoost为什么要用二阶信息不用一阶, LR和SVM对比, GBDT和XGB和LightGBM对比)。2.2 CNN DNN RNN 细节以及相关问题(poll层, 激活函数, 梯度消失弥散问题, LSTM结构图, 深度网络优势及缺点)。2.3 常见排序算法的复杂度和一些细节以及改进优化。2.4 树模型建模过程。2.5 特征选择方法。2.6 模型训练停止方法。2.7 正则化作用。2.8 模型效果评价指标。2.9 AUC理解和计算方法。2.10 Hadoop, Hive, Spark相关理论。2.11 L_BFGS, DFP推导。2.12 弱分类器组合成强分类器的理论证明。2.13 FM, FMM, Rank_SVM算法细节。2.14 map_reduce基本概念以及常见处理代码。2.15 过拟合的解决方法。2.16 各个损失函数之间区别。2.17 L1,L2正则化相关问题。

模型评估问题

降维的方法与原理

非监督学习问题

集成学习问题

前向神经网络问题

循环神经网络问题

生成式对抗网络问题

强化学习问题

神经网络的种类适用场景与优缺点

基本C++问题

sizeof

定义一个空的类型，里面没有任何成员变量和成员函数，但是对该类型求sizeof，得到的结果是多少？

答案：1；

不是0的原因是，当我们声明该类型的实例时，它必须在内存中有一定的空间，否则无法使用这些实例，至少占多少内存，由编译器决定，在VS中，每个空类型的实例占1字节的空间。

面试官：如果在该类型里面添加一个构造函数和析构函数，再对该类型求sizeof，得到的结果又是多少？

应聘者：1。因为调用构造函数与析构函数只需要知道函数的地址即可，而这些函数的地址只与类型相关，与类型的实例无关，编译器也不会因为这两个函数而在实例中添加额外的信息。

面试官：那如果把析构函数标记为虚函数呢？

应聘者：编译器一旦发现一个类型中有虚函数，就会为该类型生成虚函数表，并在该类型的每一个实例中添加一个指向该虚函数表的指针，在32位的机器上，一个指针占4字节，因此求sizeof是4，不是4+1，因为只是指向虚函数表的指针的大小，在64位机器上，一个指针占8字节，因此求sizeof是8。

数组与指针的sizeof

sizeof对数组，得到整个数组所占空间的大小。

sizeof对指针，得到指针本身所占空间的大小。

数组的名字就是一个指针，该指针指向数组的第一个元素，我们可以用一个指针来访问数组。也就是数组名加元素下标来访问数组元素或者获取数组元素的值。

```
int data1[] = {1,4,7,9,6};
cout<<sizeof(data1)<<endl;
cout<<"1st of data1:"<<*(data1)<<endl;
cout<<"2st of data1:"<<*(data1 + 1)<<endl;
cout<<"1st of data1:"<<*(data1+3)<<endl;

20
1st of data1:1
2st of data1:4
1st of data1:9
```

class与struct区别

C++中Class成员变量或者成员函数默认private，而struct成员变量默认为public。

C#中，class与struct的成员变量与成员函数都默认是private。

```
#include <iostream>
#include <array>
int main ()
{
    std::array<int,5> myints;
    std::cout << "size of myints:" << myints.size() << std::endl;
    std::cout << "sizeof(myints):" << sizeof(myints) << std::endl;
    return 0;
}
size of myints: 5
sizeof(myints): 20
```

String 类

[string](#)的构造、拷贝构造、析构、赋值、输出、比较、字符串加、长度、子串

数据结构

数据结构一直是技术面试的重点，大多数面试题都是围绕数组，字符串，链表，树，栈以及队列这几种常用的数据结构展开的，因此每一个面试者都必须熟练掌握着集中数据结构。

数组和字符串是两种最基本的数据结构，他们用连续内存分别储存数据和字符。链表和树是面试中出现频率最高的数据结构，由于操作链表和树需要大量的指针，应聘者在解决相关问题的时候一定要留意代码的鲁棒性，否则容易出现程序崩溃的问题。栈是一个与递归密切相关的数据结构，同样队列也与广度优先遍历算法密切相关，深入理解这两种数据结构能帮助我们解决很多算法问题。

数组

它占用一块连续的内存空间并按照顺序存储数据，创建数据时，我们需要首先指定数组的容量大小，然后根据大小分配内存。即使我们只在数组中存储一个数字，也需要为所有的数据预先分配内存，因此数组的空间效率不是很好，经常会有空闲的区域没有得到充分利用。

数组中的内存是连续的，因此我们可以根据下标在O(1)时间读/写任何元素，因此它的时间效率是很高的。我们可以根据数组时间效率高的优点来实现简单的哈希表，把数组的下标设为哈希表的键值(key)，数组中的数据设为哈希表的value。这样就可以在O(1)时间内实现查找，从而快速，高效地解决很多问题。

Vector

针对数组空间效率不高的问题，人们有设计实现了多种动态数组，比如STL中的vector，为了避免浪费，我们首先为数组开辟较小的空间，然后往数组中添加数据，当数据的数目超过数字的容量时，我们再重新分配一个更大的空间(STL中vector每次扩容时，新的容量都是前一次的两倍)，把之前的数据复制到新的数组中，再把之前的内存释放，这样就减小内存的浪费。每次扩容都需要

大量的额外操作，因此尽量减小改变数组容量大小的次数。

简单设计Vector：一开始，新建一个大小为N的数组（弄成数组是保证内存是连续的），当vector中的元素内存超出开始的数组内存大小时，就新建一个大小为2N的数值，把原来的数组copy到新的数组，再释放原来的内存。用这种节奏来创建更大的数组来容纳更多的vector。

```
void CList::ReplaceEmpty(char str[], int length)
{
    if(str == NULL || length <=0)
        return;
    int count = 0;
    int num = 0;
    while(str[num] != '\0')
    {
        if(str[num] == ' ')
            count++;
        num++;
    }
    int newStringLength = num + 2*count;
    int newNum = newStringLength;
    if(newStringLength >= length)
        return;
    for(int n = num; n >= 0; n--)
    {
        if(str[n] == ' ')
        {
            str[newNum--] = '0';
            str[newNum--] = '2';
            str[newNum--] = '%';
        }
        else
            str[newNum--] = str[n];
    }
}
```

二叉树：

树的遍历

1. 前序遍历：先访问根结点，再访问左子结点，最后访问右子结点。
2. 中序遍历：先访问左子结点，再访问根结点，最后访问右子结点。
3. 后序遍历：先访问左子结点，再访问右子结点，再访问根结点。

前中后表示访问根结点的时间。

- 前序遍历：先访问根结点，再访问左子结点，最后访问右子结点。
图 2.5 中的二叉树的前序遍历的顺序是 10、6、4、8、14、12、16。
- 中序遍历：先访问左子结点，再访问根结点，最后访问右子结点。
图 2.5 中的二叉树的中序遍历的顺序是 4、6、8、10、12、14、16。
- 后序遍历：先访问左子结点，再访问右子结点，最后访问根结点。
图 2.5 中的二叉树的后序遍历的顺序是 4、8、6、12、16、14、10。

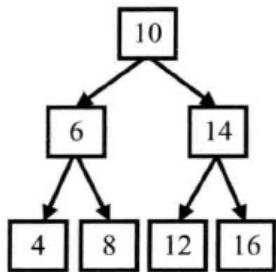


图 2.5 一个二叉树的例子

根据前序，中序来重建树：

如图 2.7 所示，前序遍历序列的第一个数字 1 就是根结点的值。扫描中序遍历序列，就能确定根结点的值的位置。根据中序遍历特点，在根结点的值 1 前面的 3 个数字都是左子树结点的值，位于 1 后面的数字都是右子树结点的值。

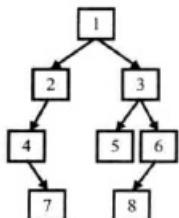


图 2.6 根据前序遍历序列{1, 2, 4, 7, 3, 5, 6, 8}和中序遍历序列{4, 7, 2, 1, 5, 3, 8, 6}重建的二叉树

前序中，第一个点就是根结点，根据根结点的值，在中序中找到根结点的值，则根结点之前的是左子树，根结点之后的是右子树。根据中序排列中左子树的大小(长度)L，在前序排列中找到左子树(从1到L)，因此对于左子树，又得到了前序和中序排列。对右子树也可以得到前序与中序排列。

由此递归实现。

由于在中序遍历序列中，有 3 个数字是左子树结点的值，因此左子树总共有 3 个左子结点。同样，在前序遍历的序列中，根结点后面的 3 个数字就是 3 个左子树结点的值，再后面的所有数字都是右子树结点的值。这样我们就在前序遍历和中序遍历两个序列中，分别找到了左右子树对应的子序列。

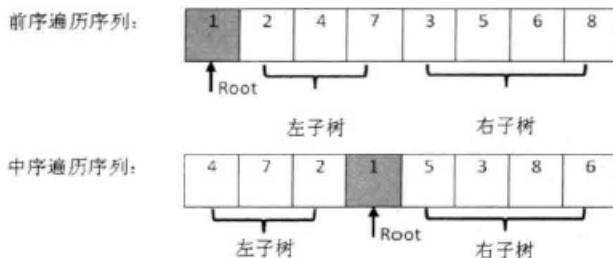


图 2.7 在二叉树的前序遍历和中序遍历的序列中确定根结点的值、左子树结点的值和右子树结点的值

```
BinaryTreeNode* CTree::ConstructBinaryTree(int* preorderS, int* preorderEnd, int* inorderS, int* inorderEnd)
{
    int rootValue = preorderS[0];
    int* rootNode = inorderS;

    while(rootNode <= inorderEnd && *rootNode != rootValue) //find root in inorder
    {
        ++rootNode;
    }
    int LTLen = rootNode - inorderS;
    BinaryTreeNode* RootTree = new BinaryTreeNode();
    RootTree->m_nValue = rootValue;
    if(LTLen >0)
    {
        RootTree->m_pLeft = ConstructBinaryTree(preorderS+1, preorderS+LTLen, inorderS, rootNode-1);
    }
    if(LTLen < preorderEnd - preorderS)
    {
        RootTree->m_pRight = ConstructBinaryTree(preorderS+LTLen + 1, preorderEnd, rootNode+1, inorderEnd);
    }
    return RootTree;
}

void CTree::PreOrderPrint(BinaryTreeNode* BTree)
{
    if(BTree != NULL)//print root first
    {
        m_preorder.push_back(BTree->m_nValue);
        cout<<BTree->m_nValue<<endl;
    }
}
```

```

    }
    if(BTree->m_pLeft != NULL)
    {
        PreOrderPrint(BTree->m_pLeft);
    }
    if(BTree->m_pRight != NULL)
    {
        PreOrderPrint(BTree->m_pRight);
    }
}

void CTree::InOrderPrint(BinaryTreeNode* BTree)
{
    if(BTree->m_pLeft != NULL)
    {
        InOrderPrint(BTree->m_pLeft);
    }
    if(BTree != NULL)//print root second
    {
        m_preorder.push_back(BTree->m_nValue);
        cout<<BTree->m_nValue<<endl;
    }
    if(BTree->m_pRight != NULL)
    {
        InOrderPrint(BTree->m_pRight);
    }
}

void CTree::PostOrderPrint(BinaryTreeNode* BTree)
{
    if(BTree->m_pLeft != NULL)
    {
        PostOrderPrint(BTree->m_pLeft);
    }

    if(BTree->m_pRight != NULL)
    {
        PostOrderPrint(BTree->m_pRight);
    }

    if(BTree != NULL)//print root last
    {
        m_postorder.push_back(BTree->m_nValue);
        cout<<BTree->m_nValue<<endl;
    }
}

```

栈与队列

栈:先进后出, 压入push,弹出pop

队列:后进先出, 压入push,弹出pop

用两个栈来实现队列。模板类的实现要在.h里面

```
#pragma once
#include <stack>
using namespace std;

template <class T>
class CStackDeque
{
public:
    CStackDeque(void){};
    ~CStackDeque(void){};
    void appendTail(const T& node);
    T deleteHead();

private:
    stack<T> m_stack1;
    stack<T> m_stack2;
};

template<class T>
void CStackDeque<T>::appendTail(const T& node)
{
    m_stack1.push(node);
}

template<class T>
T CStackDeque<T>::deleteHead()
{
    if(m_stack2.size() <= 0)
    {
        while(m_stack1.size() > 0)
        {
            T& node = m_stack1.top();
            m_stack1.pop();
            m_stack2.push(node);
        }
    }

    if(m_stack2.size() <= 0)
        throw new exception("queue is empty!");

    T node2 = m_stack2.top();
    m_stack2.pop();
    return node2;
}

void main()
{
    CStackDeque<int> queue;
```

```

        queue.appendTail(1);
        int value = queue.deleteHead();
    }
}

```

排序算法

核心是在数组中选择一个值，重新排列数组，使得该值左边的元素都小于该值，右边的元素都大于该值。分成两组后，再继续这种操作，以此递归下去，最终得到全排序。

下面都是对数组操作，因此要注意下标问题。

```

int CSort::Partition(int data[], int length, int start, int end)
{
    if(start >= end)
        return start;
    if(data == NULL || start < 0 || end > length || length <= 0)
        throw new exception("Invalidate parameters!");
    int small = start;
    srand((unsigned)time(NULL)); //random seed
    int randInt = rand()%(end - start);
    int value = data[start + randInt];
    cout<<"Value: "<<value<<endl;
    swap(data[start+randInt],data[end]); //all element start from start,
    for(int index = start; index < end; index++)
    {
        if(data[index] < value)
        {
            swap(data[index], data[small]);
            small++;
        }
    }
    swap(data[small], data[end]);
    return small;
}

void CSort::Quicksort(int data[], int length, int start, int end)
{
    if(end <= start)
        return;

    int index = Partition(data,length,start,end);
    if(index>start)
    {
        Quicksort(data,length,start, index-1);
    }
    if(index < end)
    {
        Quicksort(data, length, index + 1 ,end);
    }
}

```

与，或，异或

负数的二进制表示

举例：

-5 在计算机中表达为:11111111 11111111 11111111 11111011。转换为十六进制：

0xFFFFFFFFB。

-1在计算机中如何表示：

先取1的原码:00000000 00000000 00000000 00000001

得反码: 11111111 11111111 11111111 11111110

得补码: 11111111 11111111 11111111 11111111

可见, -1在计算机里用二进制表达就是全1。16进制为:0xFFFFFFFF。

注:十六进制前缀是0x。

表 2.1 与、或、异或的运算规律

与 (&)	0 & 0 = 0	1 & 0 = 0	0 & 1 = 0	1 & 1 = 1
或 ()	0 0 = 0	1 0 = 1	0 1 = 1	1 1 = 1
异或 (^)	0 ^ 0 = 0	1 ^ 0 = 1	0 ^ 1 = 1	1 ^ 1 = 0

左移运算符 $m \ll n$ 表示把 m 左移 n 位。左移 n 位的时候, 最左边的 n 位将被丢弃, 同时在最右边补上 n 个 0。比如:

00001010 $\ll 2$ = 00101000

10001010 $\ll 3$ = 01010000

计算二进制中1的个数

```
int CRecursion::CountNumber1(int n)
{
    int count = 0;
    while(n)
    {
        if(n&1)
            count++;
        n = n>>1;
    }
    return count;
}
```

链表

在O(1)时间内删除一个节点

方法:通过用节点下一个节点来覆盖这个节点, 因此不需要查询将被删除节点前面的所有节点。

问题：

如果你传入一个指针，实际上你传入的就是一个物理地址，对于链表而言，你不能在链表头接入一个元素，因为最终出来的时候，指针（的地址）一直没变，因此技术你在函数里面对指针进行赋值，但是出了函数，有没有效果了。

一种会出错的删除做法：

```
void CList::DeleteNode(ListNode* pListHead, ListNode* pToBeDeleted)
{
    if(!pListHead || !pToBeDeleted)
        return;

    if(pToBeDeleted->m_pNext == NULL)
    {
        pToBeDeleted = NULL;
    }
    if(pToBeDeleted->m_pNext != NULL)
    {

        /*pToBeDeleted->m_value = pToBeDeleted->m_pNext->m_value; /出错的做法
        pToBeDeleted->m_pNext = pToBeDeleted->m_pNext->m_pNext;
        delete pToBeDeleted->m_pNext; */ //因为删除了pToBeDeleted->m_pNext, 因此索引到此, 访问了空
        地址, 程序会崩溃。正确的做法如下

        ListNode* pNext = pToBeDeleted->m_pNext; //将要被删除的节点, 在删除之前, 复制它的值
        pToBeDeleted->m_value = pToBeDeleted->m_pNext->m_value;
        pToBeDeleted->m_pNext = pToBeDeleted->m_pNext->m_pNext;
        delete pNext;
    }
}
```

对数组中奇偶数据分类排序

```
void CCArray::ReorderOddEven(int* data, int length, bool (*Func)(int))
{
    if(data==NULL || length <= 0)
        return;
    int* pBegin = data;
    int* pEnd = data + length - 1;

    while(pBegin < pEnd)
    {
        while(!Func(*pBegin))
        {
            pBegin++;
        }

        while(Func(*pEnd))
        {
            pEnd--;
        }
    }
}
```

```

    {
        pEnd--;
    }

    int temp = *pEnd;
    *pEnd = *pBegin;
    *pBegin = temp;
}

void main()
{
    const int length = 6;
    int data[] = {4,1,5,3,6,7};
    CCArray* test_arr = new CCArray();
    test_arr->ReorderOddEven(data, length, IsEven); //函数指针的调用
    for(int i = 0; i < length; i++)
    {
        cout<<data[i]<<endl;
    }
}
bool IsEven(int value)
{
    return (value&1) == 0;
}

```

为啥要用C++智能指针

1. 内存泄漏:是指操作系统将空间分配给你,但是那个空间被你申请后并没有被使用,并且没有相应的释放语句。也就是该空间不再被任何指针或引用所引用,成为一个幽灵空间,操作系统以为你在控制它,但其实你并没有控制它。
2. 重复释放:程序通过free或delete语句释放已经不属于该程序的空间。这是很危险的,因为第二次free的空间已经被别的程序所使用。所以C++中把这种错误当成了致命错误。
栈上的空间是由系统分配的。堆上的空间是由用户自己分配的。通过new创建, free释放。

Windows C++

常规问题

数值的整数次方

■ $a^n = a^{(n-1)/2}a^{(n-1)/2}$, a is even

■ $a^n = a^{(n-1)/2}a^{(n-1)/2}a$, a is odd

```
double Chapter3::Power(double base, int exponent)
{
    if(base <= 0)
    {
        this->bmInvideSetting = false;
        return 0;
    }
    if(exponent == 0)
    {
        return 1;
    }

    if(exponent < 0)
    {
        base = 1.0/base;
        exponent = -exponent;
    }
    double result = Power(base, exponent>>1);
    result *= result;
    if(exponent & 0x1 == 1)
        result *= base;
    return result;
}
```

数组奇偶分类

奇数在前，偶数在后排列，复杂度 $O(n)$

```
void Chapter3::RecordOddEven(int *pData, unsigned int length)
{
    if(pData == NULL || length == 0)
        return;
    int *pStart = pData;
    int *pEnd = pData + length - 1;
    int temp;
    while(pStart < pEnd)
    {
        if(*pStart & 1 == 1)
```

```

    {
        pStart++;
    }
    else
    {

        temp = *pEnd;
        *pEnd = *pStart;
        *pStart = temp;
        pEnd--;
    }
}
}

```

pStart < pEnd比大小，就是比较内存中位置先后。

一次查找链表倒数第k个节点

```

ListNode* Chapter3::FindKthToTail(ListNode* pHeadList, unsigned int k)
{
    if(pHeadList == NULL)
        return NULL;
    ListNode *KthNode = pHeadList;
    int num = 0;

    while(++num<k)
    {
        pHeadList = pHeadList->m_pNext;
        if(pHeadList ==NULL)
            return NULL;
    }
    while(pHeadList != NULL)
    {
        pHeadList = pHeadList->m_pNext;
        if(pHeadList ==NULL)
            return KthNode;
        KthNode = KthNode->m_pNext;
    }
}

```

```

//test FindKthToTail
int _tmain(int argc, _TCHAR* argv[])
{
    Chapter3* chp = new Chapter3();
    ListNode* p;
    ListNode* head = new ListNode();
    p = head;
    for(int n = 0; n < 10; n++)

```

```
{  
    ListNode* node = new ListNode();  
    node->m_value = n;  
    p->m_pNext = node;  
    p = node;  
}  
p->m_pNext = NULL;  
int k_th = 2;  
ListNode *kthNode = chp->FindKthToTail(head, k_th);  
cout << "Last "<< k_th << " is:"<<kthNode->m_value<<endl;  
return 0;  
}
```

树

结束