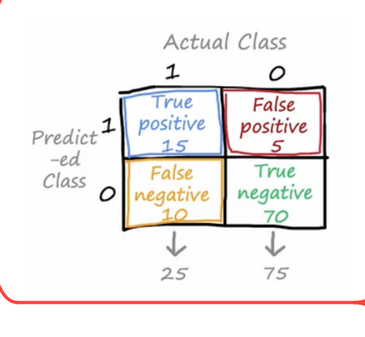
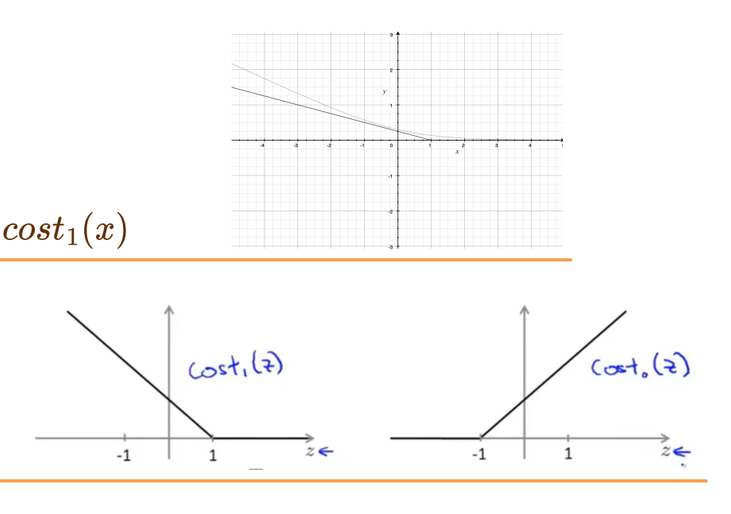
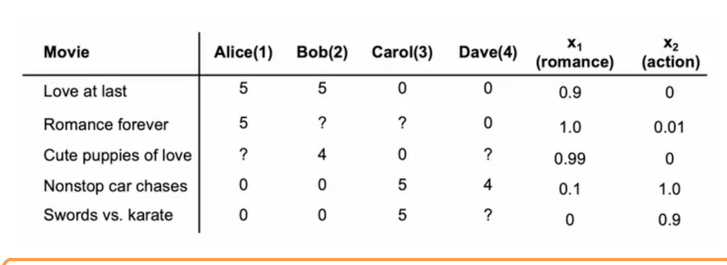
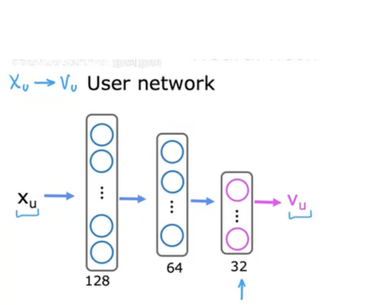
Machine Learning

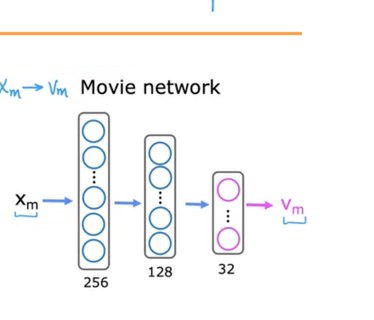
- **Techniques**
  - 什么是Decision Boundary — 样本空间中，区分不同预测结果的分界线
  - Cost Function
    - Mean Square Error
    - Cross Entropy
      - Binary Cross Entropy
      - Sparse Categorical Cross Entropy
      - 为什么logistic regression要用 Binary Cross Entropy作为损失函数 — 因为如果用MSE，损失函数图像将会有很多local minimum （non-convex），梯度下降会困在一个local minimum 里面， 而cross entropy的图像比较平滑，且只有一个global minimum（convex）
  - Grediant Decscent
    - 同时更新所有参数 $\vec{w}_i, b_i$
      - $$w_i^{(j)} = w_i^{(j)} - \alpha \frac{\delta J(\vec{w}, b)}{\delta w_i^{(j)}}$$
      - $$b^{(j)} = b^{(j)} - \alpha \frac{\delta J(\vec{w}, b)}{\delta w^{(j)}}$$
    - 如何判断梯度下降已经收敛?
      - 画出J(w,b) - #iteration图像
      - 如果两次iteration之间， $\Delta J(\vec{w}, b) < \epsilon$ — ϵ 是人为设置的一盒很小的值， 例如0.001
    - 学习率 α
      - 设置太大 — 梯度下降不能收敛，在最小值左右来回横跳
      - 设置太小 — 梯度下降收敛太慢
      - 尝试 0.001 , 0.003 , 0.01 , 0.03 , 0.1 , 0.3 , 1 , 3 ......
    - Overfitting
      - Underfitting: High bias vs. Overfitting: High variance
      - addressing overfitting options:
        - Collect more data
        - Select features (to include or exclude)
        - Regularization (reduce the size of params) terms $\frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n} w_j^2$
  - feature engineering
    - feature scaling
      - 将不同尺度的特征缩放到相似的尺度，例如正态化所有数据
      - 为什么我们需要特征缩放 — 如果没有特征缩放，不同权重可能相差几个数量级，损失函数的图像可能会非常"扁平"，梯度下降时损失函数会来回横跳
        - 加快梯度下降速度
        - 统一权重，增加模型准确性
      - mean normalization — 将样本平均的散布在坐标轴零点的周围，除以极差 $\frac{x-\mu}{max-min}$
      - z-score normalization — 同样也是散布在零点周围，但是除以正态分布的方差 $\frac{x-\mu}{\sigma}$
    - feature encoding — 将离散的特征编码到数字，例如红色，绿色，蓝色编码到0，1，2
    - One-Hot Encoding — 用0和1 encode features — 例如 — 耳朵的形状: {圆形，尖型，椭圆} 改为 耳朵是圆形吗 :{0,1}，耳朵是尖型吗：{0,1}, 耳朵是椭圆吗:{0， 1}
    - 画出 correlation 热力图，去除feature
      - 去除与要预测的结果不相关的feature
      - 两个高度相关的feature，去除一个
      - 寻找可以合并的feature，例如房子的宽和高，合并为面积
  - Model Selection
    - Cross Validation
      - Validation
        - 将数据集划分为training set (60%) , validation set (20%) , test set (20%)
        - 使用模型在training set上训练 （包含正则项），并计算在validation set上的损失 （不包含正则项） $J_{cv}(w^n, b^n)$
        - 选择在validation set上损失最小的模型，并计算模型在test set上的损失（不包含正则项），将其作为模型泛化能力的评估
      - K-Fold Cross Validation
        - 将数据随机分为平均的K份subset，每次训练用K-1个subset训练，留出一个subset作validation
        - 如果K就等于数据集的数量（相当于每次只留出一条数据作为validation set），那么这个叫做Leave-One-Out-Cross-Validation
      - Cross-Validation 如何解决Overfitting的问题?
        - 每次留出一部分数据作为验证集，重复多次，可以保证模型不仅仅在记忆数据
        - 每次validation都可以给我们一个相对客观的，对模型泛化能力的评价
    - High Variance vs. High Bias
      - 如果 loss on training set 非常大，我们说这个模型High Bias （underfitting）
      - 如果 loss on training set 很小，但是 loss on validation set 很大，，并且远大于training set loss那么我们说这个模型High Variance （overfitting）
      - 模型可以同时High Bias和High Variance，那说明模型某一部分underfitting，另一部分overfitting
      - 如何判断underfitting还是overfitting ?
        - 确定baseline performance
          - human level performance
          - peers' performance
          - 靠遗忘经验判断
        - 比较baseline和 training，training和validation 的差距
        - 画出学习曲线，画出validation error和training error随着数据集size的增长而增长
        - 神经网络 — 如果神经网络的尺寸够大，就不会有underfit的问题，合适的添加regularisation terms，也能有效抑制overfit problem
    - 为什么不直接使用test set选择模型? — 直接使用test set得来的损失J_test会比实际小（optimistic estimation），因为选择模型时，我们选择在测试数据上表现更好的模型，因此模型可能带有对测试数据的bias
  - Error Analysis — 确定模型，输入输出 -----> 训练模型 -----> 寻找问题（bias， variance）
  - Precision, Recall, and F1 Score
    - 如果数据是skewed classes 或者 rare class，使用accuracy并不能准确的反映模型的精度， — 例如模型识别的精度是99%，但是人群中只有0.5%的人患有这种疾病
    - 

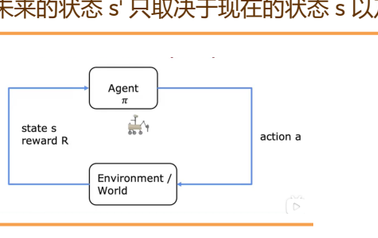
    - $$Precision = \frac{True\ Positives}{\#Predicted\ Positives} = \frac{True\ Positives}{True\ Positives + False\ Positives}$$ 高精度意味着，如果模型告诉我这个病人有病，那么大概率这个病人真的有病
    - $$Recall = \frac{True\ Positives}{\#Actual\ Positives} = \frac{True\ Positives}{True\ Positives + False\ Negtives}$$ 高Recall意味着，如果这个病人真的有病，那么大概率会被模型识别出来
    - $$F1\ Score = \frac{1}{\frac{1}{2}(\frac{1}{P}+\frac{1}{R})} = \frac{2 \times P \times R}{P+R}$$ Precision和Recall的harmonic mean，会偏向更小的一边
    - Trade off
  - batch processing
    - 传统的Full Batch Learning — 在所有数据上做一遍foreward propagation，计算所有损失平均值，再做backward propagation，更新参数
    - mini-Batch Learning
      - 将所有数据划分成小的批次/子集，每个批次/子集做一遍backward propagation，更新梯度
      - 优缺点：梯地下降更慢，效率更低，但是对内存的要求降低
    - epoch — 每次用全部数据训练一遍后，称为一个epoch
- **Model**
  - 有监督学习
    - Linear Regression
      - Polynomial Regression — 如果同时使用x , x^2 , x^3作为input，记得rescaling x^2 x^3
      - Loss Function — Square Error $(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2$
      - Cost Function — Mean Square Error $J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2$ — 为什么多个1/2? — 为了后面平方求导方便
    - Logistic Regression
      - Sigmoid Function $f_{\vec{w},b}(x) = \frac{1}{1+e^{-\vec{w}x+b}}$
      - Loss function $L(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}), y^{(i)})$
        - Binary Cross Entropy
          - 当 y = 1 的时候 $-log(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}))$
          - 当 y = 0 的时候 $-log(1 - f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}))$
          - $-y \times log(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)})) - (1-y) \times log(1 - f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}))$
        - 为什么logistic regression要用 Binary Cross Entropy作为损失函数 — 因为如果用MSE，损失函数图像将会有很多local minimum （non-convex），梯度下降会困在一个local minimum 里面， 而cross entropy的图像比较平滑，且只有一个global minimum（convex）
      - Cost function $J(\vec{w}, b) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L(f_{\vec{w},b}(\vec{x}^{(i)}), y^{(i)})$
    - Multiclass classification
      - Activision Function of the output layer — Softmax $a_n = \frac{e^{z_n}}{\sum_{n=1}^{N} e^{z_n}}$ $z_n = \vec{w}_n \times a_{n-1} + b_n$
      - Loss Function — Sparse Categorical Cross Entropy $$loss(a_1, \dots, a_n, y) = \begin{cases} -log\ a_1 & \text{if } x = 1, \\ \dots \\ -log\ a_N & \text{if } x = N. \end{cases}$$
    - Neural Network
      - forward propagation — 矩阵计算
      - backward propagation
        - gradient decscent — 偏导求导
        - computation graph
      - 梯度消失/爆炸 exploding / vanishing gradient
        - 在多层神经网络中，权重变化可能会呈现指数级变化，当层数太多，可能会导致梯度过大/过小
        - 一定程度上的 解决办法： 初始化权重时，将参数初始化为 $Var(w_i) = \frac{2}{n}$
      - Activision fuction
        - output layer
          - sigmoid
            - binary classification
            - multi-label classification — 一个神经网络输出多个问题答案，例如，图片里有车吗，有人吗，有房子吗，答案应该为一个向量例如 [0,0,1]，神经网络的输出层是一个激活函数为sigmoid 的，有三个neuron的输出层，这与multiclass classification 很像，但请注意不要混淆了
          - softmax — multiclass classification
          - ReLU — non-negative value — 比如房价
          - Linear Activision Func — 线性问题 — 例如股票预测
        - hidden layer
          - most frequently used ReLU
          - 为什么不使用linear function — 因为linear function of linear function == linear function, 这跟直接使用线性回归没有区别
      - regularisation for neural network
        - random dropout
          - 每次训练（过一遍一整个训练集），每个neuron都有一定概率消失，在剩下的neuron组成的网络内训练，然后下次训练，放回原先的neuron，再按一定概率随机去除一些neuron — inverted dropout — 在去除一定比例（例如0.2）的neuron后，把这层剩余的神经元的输出 除以0.8，这样，输出的期望就不会变
          - 为什么dropout可以减少过拟合 — 下一层neuron不会单一依赖来自上层某个neuron的输出，而是倾向于依赖来自上层多个输出，这样自己的每个权重就会均匀分布，不会太大
          - 缺点 — Error和#iteration之间的关系多了随机性，不好从Error - #iteration图观察出过拟合 — 建议不要再测试神经网络的时候使用
        - Data Augmentation — 例如将图像数据拉伸，旋转，缩放，镜像
        - Early Stopping — 画出Error - #Iteration图，找到分岔点，让训练在分岔点停下
        - L2 Regularisation — 添加正则化项
      - Convolutional Neural Network — Pooling
        - 窗口滑动计算 — 卷基层对像素位移很敏感，而池化层帮助消除对位移的敏感，同时还能减少后续神经网络的计算
        - Mean pooling — 计算窗口内平均值作为输出 — 保留更多的背景信息
        - Max pooling — 找到窗口内最大值进行输出 — 保留最突出信息，更突出边缘和纹理
    - Support Vector Machine
      - prediction
        - $\vec{w} \times \vec{x} + b \geq 1$ 预测 y = 1
        - $\vec{w} \times \vec{x} + b \leq -1$ 预测 y = 0
      - Cost Function
        - Recitifed Binary Cross Entropy $$min_\theta C\sum_{i=1}^{m}[y \times cost_1(\vec{w} \times x + b) + (1-y) \times cost_0(\vec{w} \times x + b)] + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} w_j^2$$ $cosy_1(x), cost_0(x)$ == rectified -log sigmoid(x) — $cost_1(x)$
          

        - 当 C 很小的时候（正则化力度很大），SVM会选取margin最大的decision boundary
      - Kernel
        - 把数据集中每一个点作为一个feature，将要预测的点 x，计算 $l_n = sim(x, f_n)$
          - 用 $\vec{x} = [l_0(=1), l_1, \dots, l_n]$ 表示 x — prediction
            - $\vec{w} \times \vec{x} + b \geq 1$ 预测 y = 1
            - $\vec{w} \times \vec{x} + b \leq -1$ 预测 y = 0
          - sim函数可以是不同的kernel function
        - Gaussian Similarity $exp(-\frac{||x - l_n||^2}{2\sigma^2})$
      - multi-classification — 训练多个SVM模型，每个SVM负责将一种类别和其他类别分开
    - Decision Tree
      - 怎么决定每个节点用什么feature分 — Maximize purity
        - 离散的值
          - maximize the purity意味着减少impurity，我们用信息熵来度量impurity，其公式为: $H(p_1) = -p_1 \times log_2(p_1) - (1-p_1) \times log_2(1-p_1)$ — p_1 是 选项一的个数除以总数
          - 计算Information gain来决定使用那个feature，使用information gain最大的feature $IG = H(p_1^{root}) - (w^{left} \times H(p_1^{left}) + w^{right} \times H(p_1^{right}))$
        - 连续的值 — 尝试不同的分割点，计算Information Gain，使用IG最大的分割点
      - 什么时候**停止**继续往下分
        - 当纯度达到100%
        - 当纯度提升不再明显
        - 当节点深度超过最大深度 — 设置最大深度可以防止过拟合
        - 当落入这个节点的example小于threshold — 防止过拟合
      - One-Hot Encoding — 用0和1 encode features — 例如 — 耳朵的形状: {圆形，尖型，椭圆} 改为 耳朵是圆形吗 :{0,1}，耳朵是尖型吗：{0,1}, 耳朵是椭圆吗:{0， 1}
      - Regression Tree
        - 用Decision Tree predicting continuous variable
        - 用数据的方差代替熵
          - 计算加权方差 $w_{left} \times Var(left) + w_{right} \times Var(right)$
          - 计算减少的方差，使用减少方差最多的feature $Var(Orginal\ Set) - Weighted\ Variance$
      - Tree ensemble — 构建多个Decision Tree，并在预测时遵循最多的投票结果
      - Random Forest
        - sampling with replacement 放回取样 — 例如，四个颜色的牌 红 黄 绿 蓝，每次取样后放回，连续取样四次，得到 红 绿 蓝 蓝。重复n次，得到n个子数据集
        - 每个子数据集构建一个Decision Tree，在做预测的时候，共同投票决定，投票最多的结果为最终结果
        - 这样得出的Tree大多都很相似，如何避免这个问题? — 每个树在构建的时候都只随机选择一部分feature，作为构建的节点 — 例如原先有100个feature，那么每个树在构建的时候都只随机取10个feature作为分类的节点
      - XGBoost
        - 在resampling 的时候，有更高的几率采样到之前已经构建好的Tree表现不好的数据上
        - 自带regularization，防止过拟合
        - 在处理结构化数据时推荐
  - 无监督学习
    - K-means
      - 随机选择K个点作为centroid
      - repeat
        - assign point：把每个点分给最近的centroid，分给同一个centroid的点叫做一个cluster
        - update centroid：计算每个cluster的中心点（mean point），作为新的centroid
      - 一直到每个cluster内的点不在发生变化
      - cost function — distortion algo $J(c^{(1)}, .., c^{(m)}, \mu_1, .., \mu_K) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}||x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}}||^2$
      - K-means 有可能会卡在local minimum — 解决办法：多跑几次，每次随机初始centroid，选择损失最小的
      - 如何确定K的值
        - 看我们要什么样的结果
        - 或者画出J损失随K的变化图，选择最明显的拐点
    - Anomaly Detection
      - $p_x = \prod_{j=1}^{n} p(x_j; \mu_j, \sigma_j^2)$
        - anomaly if $p_x < \epsilon$
        - 有n个正态分布(mean μ, standard deviation σ)的feature x
      - 无监督学习 特征选择更重要，因为没有一个label来给你确定哪些feature有关，哪些feature无关
      - 如果有的feature不是normal distribution，我们可以对x做一些转换，让其近似于一个normal distribution — 对数据集做转换后，记得对预测值也做相应转换
      - 创造达成目的的新feature — 例如 cpu load / network traffic，针对网络中心里的计算机
  - recommender system
    - Collaborative Filtering
      - 

Movie	Alice(1)	Bob(2)	Carol(3)	Dave(4)	x_1 (romance)	x_2 (action)
Love at last	5	5	0	0	0.9	0
Romance forever	5	?	?	0	1.0	0.01
Cute puppies of love	?	4	0	?	0.99	0
Nonstop car chases	0	0	5	4	0.1	1.0
Swords vs. karate	0	0	5	?	0	0.9

        - 预测Alice对Movie 1st的评分 $w^{Alice} \times x^{(i)} + b^{Alice}$ $x^{(i)} = [x_1\ x_2]^T$
        - 学习， 预测 用户评分 w_A, b_A, w_B, b_B — cost function
          - 对于单个用户j $$J(w^j, b^j) = \frac{1}{2}\sum_{i:r(i,j)}(w^{(j)} \times x^{(i)} + b^{(j)} - y^{(i,j)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{k=1}^{n}(w_k^{(j)})^2$$
          - 对于所有用户来说 $$J\begin{pmatrix} w^{(1)} & \dots & w^{(n_u)} \\ b^{(1)} & \dots & b^{(n_u)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n_u}\sum_{i:r(i,j)}(w^{(j)} \times x^{(i)} + b^{(j)} - y^{(i,j)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{n_u}\sum_{k=1}^{n}(w_k^{(j)})^2$$
        - 学习电影情感分数 x_1, x_2 — cost function $$J(x_1, \dots x_{n_m}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n_m}\sum_{j:r(i,j)}(w^{(j)} \times x^{(i)} + b^{(j)} - y^{(i,j)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{i=1}^{n_m}\sum_{k=1}^{n}(x_k^{(i)})^2$$
      - 以上公式综合起来的
        - cost function $$\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n_u}\sum_{i:r(i,j)}(w^{(j)} \times x^{(i)} + b^{(j)} - y^{(i,j)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{n_u}\sum_{k=1}^{n}(w_k^{(j)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{i=1}^{n_m}\sum_{k=1}^{n}(x_k^{(i)})^2$$
        - Gradient Descent
          - $$w_i^{(j)} = w_i^{(j)} - \alpha \frac{\delta J(\vec{w}, b, \vec{x})}{\delta w_i^{(j)}}$$
          - $$b^{(j)} = b^{(j)} - \alpha \frac{\delta J(\vec{w}, b, \vec{x})}{\delta w^{(j)}}$$
          - $$x_i^{(j)} = x_i^{(j)} - \alpha \frac{\delta J(\vec{w}, b, \vec{x})}{\delta x_i^{(j)}}$$
      - for binary labels — Loss function $L(f_{w,b,x}(x), y_{(i,j)}) = -y^{(i,j)}\log(f_{w,b,x}(x)) - (1-y^{(i,j)})\log(1 - f_{w,b,x}(x))$ — $f_{w,b,x}(x) = Sigmoid(w^{(j)} \times x^{(i)} + b^{(j)})$
      - mean normalisation — 如果一个用户还没有个给任何一个电影打分，那么用现有所有该电影的评分的平均值代表其评价 — 为什么我们需要 mean normalisation
        - 更符合直觉，更合理
        - 让协同过滤运行的更快
      - 缺点
        - cold start problem — 新电影预测不准
        - 缺少side information — 并不能知道电影或者是用户的 side information，例如用户多大，喜欢什么电影
    - Content-based filtering
      - 收集用户和电影的不同特征，例如
        - x_u = [用户的性别，年龄，......，国籍，看过的电影，对各个类别电影的平均评分]
        - x_m = [电影的类别，出版日期，......，平均评分]
      - 使用两个神经网络分别将两组特征转换为**相同维度的**特征向量，例如
        - $f(x_u) = v_u$
          

        - $f(x_m) = v_m$
          

          — 相似的特征向量意味着相似的电影 $||v_m^k - v_m^i||^2$ small
      - 计算两个特征的点积作为预测结果 $v_u \cdot v_m$
      - cost function $J = \sum_{(i,j):r(i,j)=1}(v_u^{(j)} \cdot v_m^{(i)} - y^{(i,j)}) + NN\ Regularization\ term$
      - 从大目录里推荐
        - retrieval step
          - 用常理选出一些名单，例如
            - 与用户最后一个看的电影最相似的10个电影
            - 现在最火的10部电影
            - 该国家最火的10部电影
          - 去除其中重合的部分
        - ranking step — 把选出来的电影和用户的特征向量做点积，按结果从高到低排列
  - reinforcement learning
    - 概念
      - states — 所有可能的状态 — 例如 直升机的高度，朝向，前/后飞，左/右滚
      - actions — 所有可以采取的行动 — 例如 向左，向右
      - rewards R — 所有可能的回报 — 例如 100，0，40
      - discount factor γ — 回报随时间的折现率
      - return — 折现后的回报 $return = R_1 + \gamma R_2 + \gamma^2 R_3 + \dots$
      - policy π — 采取行动的规则 — 例如 去最近的奖励，去return最高的奖励
      - Markov Decision Process（MDP） — 未来的状态 s' 只取决于现在的状态 s 以及即将采取的行动 a
        

      - $Q(s,a)$ — 能获得的最好的return，如果你在state s，采取action a后
    - Bellman equation
      - $Q(s,a) = R(s) + \gamma \times max_{a'}Q(s', a')$
        - s': 在采取a行动后的状态
        - a': 在采取a行动后，下一步动作
      - 在不确定的（stochastic）环境中 $Q(s,a) = R(s) + \gamma \times E[max_{a'}Q(s', a')]$
    - Deep Reinforcement Learning
      - 用到的神经网络
        - 输入，火箭的状态s = [高度，角度，...]
        - 中间：任意层隐藏神经元
        - 输出层：单个神经元，输出 预测Q（s，a）
          - a可以是 nothing，left，main，right
          - 改进：输出层四个神经元，分别对应Q(s,nothing); Q(s,left); Q(s,main); Q(s,right)
      - 算法
        - 随机初始化神经网络参数，得到 Q
        - 重复
          - 随机尝试不同的动作
          - 记录最近10000（replay buffer）条数据，其前后状态，动作，以及回报 $(s, a, R(s), s')$
          - 训练神经网络 Q_{new} — 用以上随机尝试得到的例子
            - $x = (s, a)$
            - $y = R(s) + \gamma \times max_{a'}Q(s', a')$
            - 训练新的神经网络使其 $Q_{new}(s,a) \approx y$
          - set $Q = Q_{new}$
    - epsilon-greedy policy
      - 有epsilon的概率随机做选择 — 有1-epsilon的概率做回报最大的选择
      - 为什么我们需要epsilon greedy policy — 为了避免初始化神经网络后，神经网络从来不做某些决策
      - 在训练的开始，建议把epsilon设置得很大，随着训练慢慢减小
    - mini-batch — 每次训练神经网络，把replay buffer分为几个子集，用子集挨个训练神经网络，更新权重
    - soft update
      - 在set Q = Q_new的时候
        - $w = 0.99 \times w_{old} + 0.01 \times w_{new}$
        - $b = 0.99 \times w_{old} + 0.01 \times w_{new}$
      - 防止神经网络训练结果反而更差