Contents

1 概述 **2**
- 1.1 统计学习三要素 . . . 2
  - 1.1.1 模型 . . . 2
    - 1.1.1.1 模型的假设空间 . . . 2
      - 1.1.1.1.1 定义 1 . . . 2
      - 1.1.1.1.2 定义 2 . . . 2
  - 1.1.2 策略 . . . 3
    - 1.1.2.1 损失函数与风险函数 . . . 3
    - 1.1.2.2 经验风险最小化与结构风险最小化 . . . 4
  - 1.1.3 算法 . . . 4
- 1.2 模型评估与模型选择 . . . 4
  - 1.2.1 训练误差与测试误差 . . . 4
  - 1.2.2 过拟合与模型选择 . . . 5
- 1.3 正则化与交叉验证 . . . 5
  - 1.3.1 正则化 . . . 5
  - 1.3.2 交叉验证 . . . 5
- 1.4 泛化能力 . . . 5
  - 1.4.1 泛化误差 . . . 5
  - 1.4.2 泛化误差上界 . . . 5
- 1.5 生成模型与判别模型 . . . 5
- 1.6 分类问题 . . . 5
- 1.7 标注问题 . . . 5
- 1.8 回归问题 . . . 5

2 感知机 **6**

3 k 近邻法 **6**

4 朴素贝叶斯法 **6**
- 4.1 贝叶斯公式 . . . 6
- 4.2 极大似然估计（MLE） . . . 6
- 4.3 最大后验估计（MAP） . . . 7
- 4.4 贝叶斯估计 . . . 7

5 决策树 **7**

6 logistic 回归与最大熵模型 **7**

7 支持向量机 **7**

8 提升方法 **7**
- 8.1 gbdt . . . 7
  - 8.1.1 gbdt 概述 . . . 8
  - 8.1.2 gbdt 的负梯度拟合 . . . 8

9 EM 算法及其推广 **8**

10 隐马尔可夫模型 **8**

11 条件随机场 **8**

12 附录 **8**
- 12.1 矩阵 . . . 8
- 12.2 优化 . . . 8

12.2.1 拉格朗日乘子法 . . . 8
12.2.1.1 等式约束 . . . 8
12.2.1.2 不等式约束 . . . 10
12.2.1.3 带等式和不等式约束的拉格朗日乘子法 . . . 10
12.2.2 梯度下降 . . . 11
12.2.2.1 《统计学习方法》的视角 . . . 11
12.2.2.2 《机器学习》的视角 . . . 12
12.2.3 牛顿法 . . . 12
12.2.3.1 二阶导基本性质 . . . 12
12.2.3.2 牛顿法 . . . 12
12.2.4 拟牛顿法的思路 . . . 13
12.2.5 DFP(Davidon-Fletcher-Powell) . . . 14
12.2.6 BFGS(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno) . . . 14
12.3 拉格朗日对偶性 . . . 14
12.4 信息论相关 . . . 14
12.4.1 凸集 . . . 14
12.4.2 凸函数 . . . 14
12.4.3 KL 散度 . . . 14
12.5 采样 . . . 16
12.5.1 拒绝采样 . . . 16
12.5.2 重要性采样 . . . 16
12.5.3 马尔可夫蒙特卡洛采样（MCMC） . . . 17
12.5.3.1 Metropolis-Hastings 采样 . . . 17
12.5.3.2 吉布斯采样 . . . 17

下载地址：https://github.com/daiwk/collections/blob/master/pdfs/int-ml.pdf

本文参考自李航的《统计学习方法》、周志华的《机器学习》、Hulu 的《百面机器学习》等。

1 概述

1.1 统计学习三要素

1.1.1 模型

监督学习中，模型是**要学习的条件概率分布或决策函数。**

1.1.1.1 模型的假设空间

假设空间是所有可能的条件概率分布或决策函数

1.1.1.1.1 定义 1

可以定义为**决策函数的集合**：

$$\mathcal{F} = \{f|Y = f(X)\}$$

- X 和 Y 是定义在 $\mathcal{X}$ 和 $\mathcal{Y}$ 上的变量
- $\mathcal{F}$ 是一个参数向量决定的**函数族**：

$$\mathcal{F} = \{f|Y = f_\theta(X), \theta \in R^n\}$$

参数向量 θ 取值于 n 维欧式空间 R^n，称为**参数空间**

1.1.1.1.2 定义 2

也可以定义为**条件概率的集合**：

$$\mathcal{F} = \{P|P(Y|X)\}$$

- X 和 Y 是定义在 $\mathcal{X}$ 和 $\mathcal{Y}$ 上的**随机变量**
- $\mathcal{F}$ 是一个参数向量决定的**条件概率分布族**:

$$\mathcal{F} = \{P|P_\theta(Y|X), \theta \in R^n\}$$

1.1.2 策略

1.1.2.1 损失函数与风险函数 损失函数（**loss function**）或代价函数（**cost function**）: 度量预测值 $f(X)$ 与真实值 Y 的误差程度，记为 $L(Y, f(X))$，是个非负实值函数。损失函数越小，模型越好。

- 0-1 损失函数:

$$L(Y, f(X)) = \begin{cases} 0 & Y \neq f(X) \\ 1 & Y = f(X) \end{cases}$$

- 平方损失函数:

$$L(Y, f(X)) = (Y - f(X))^2$$

- 绝对损失函数:

$$L(Y, f(x)) = |Y - f(X)|$$

- 对数损失函数 (logarithmic loss function)/对数似然损失函数 (log-likelihood loss function):

$$L(Y, P(Y|X)) = -logP(Y|X)$$

风险函数 (risk function) 或期望损失 (expected loss): X 和 Y 服从联合分布 $P(X, Y)$，理论上模型 $f(X)$ 关于**联合分布**$P(X, Y)$ 的平均意义下的损失:

$$R_{exp}(f) = E_P[L(Y, f(X))] = \int_{\mathcal{X}\times y} L(y, f(x))P(x, y)dxdy$$

学习的目标：选择期望风险最小的模型。但联合分布 $P(X, Y)$ 是未知的，所以无法直接计算 $R_{exp}(f)$。所以监督学习是病态问题 (ill-formed problem)：一方面需要联合分布，另一方面联合分布是未知的。

给定训练集:

$$T = \{(x_1, y_1), ...(x_N, y_N)\}$$

经验风险 (expirical risk)/经验损失 (expirical loss): 模型 $f(X)$ 关于**训练集**的平均损失

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

根据**大数定律**，当样本容量 N 趋向无穷时，经验风险 R_{emp} 趋于期望风险 $R_{exp}(f)$。

1.1.2.2 经验风险最小化与结构风险最小化

经验风险最小化（empirical risk minimization, ERM）：经验风险最小的模型就是最优模型。所以需要求解的最优化问题是：

$$\min_{f\in\mathcal{F}} R_{erm} = \min_{f\in\mathcal{F}} \frac{1}{N} L(y_i, f(x_i))$$

当满足以下两个条件时，**经验风险最小化**就等价于**极大似然估计**（maximum likelihood estimation）：

- 模型是**条件概率分布**
- 损失函数是**对数损失函数**

当样本量足够大时，ERM 能有很好的效果，但样本量不够多时，为了防止过拟合，需要用下面的方法。

结构风险最小化（structual risk minimization, SRM）：结构风险 = 经验风险 + 表示**模型复杂度**的正则化项 (regularizer) 或罚项 (penalty term)。结构风险定义如下：

$$R_{srm}(f) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(y_i, f(x_i)) + \lambda J(f)$$

其中，$J(f)$ 是模型的复杂度，模型越复杂，$J(f)$ 越大。$\lambda \geq 0$ 是用于权衡经验风险和模型复杂度的系数。

当满足以下 3 个条件时，**结构化风险最小化**等价于）**贝叶斯估计中的最大后验概率估计** (maximum posterior probability estimation, MAP)：

- 模型是**条件概率分布**
- 损失函数是**对数损失函数**，对应后验估计中的**似然函数**
- 模型复杂度由**模型的先验概率**表示

似然函数和**先验概率**的**乘积**即对应**贝叶斯最大后验估计**的形式

参考https://www.zhihu.com/question/23536142

所以结构风险最小化就是求解优化问题：

$$\min_{f\in\mathcal{F}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(y_i, f(x_i)) + \lambda J(f)$$

1.1.3 算法

算法指的是学习模型的具体方法，即使用什么计算方法求解最优模型。

因为统计学习问题归结为最优化问题，所以统计学习的算法就是**求解最优化问题的算法。**

- 如果有显式的解析解，此最优化问题就比较简单
- 如果没有，需要用数值计算方法求解，需要考虑如何**保证找到全局最优解，并使求解过程高效**

1.2 模型评估与模型选择

1.2.1 训练误差与测试误差

假设学习到的模型是 $Y = \hat{f}(X)$，训练误差是模型 $Y = \hat{f}(X)$ 关于训练数据集的平均损失（N 是样本容量）：

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

测试误差是模型 $Y = \hat{f}(X)$ 关于测试数据集的平均损失（N' 是测试样本容量）：

$$e_{test}(\hat{f}) = \frac{1}{N'}\sum_{i=1}^{N'} L(y_i, \hat{f}(x_i))$$

- 训练误差的大小，对判断给定的问题是不是一个容易学习的问题是有意义的
- 测试误差反映了学习方法对未知数据的预测能力，即泛化能力（generalization ability）

1.2.2 过拟合与模型选择

当模型复杂度增加时，训练误差会逐渐减小并趋向于 0；测试误差会先减小，达到最小值后又会增大。

当模型复杂度过大时，就会出现过拟合。所以需要在学习时防止过拟合，选择复杂度适当的模型。

1.3 正则化与交叉验证

1.3.1 正则化

模型选择的典型方法是正则化（regularization）。正则化是**结构风险最小化**策略的实现，即在经验上加一个正则化项（regularizer）或罚项（penalty term）。

正则化项一般是**模型复杂度**的**单调递增函数**，模型越复杂，正则化值越大。比如，正则化项可以是模型参数向量的范数。

$$\min_{f\in\mathcal{F}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L(y_i, f(x_i)) + \lambda J(f)$$

其中 $\lambda \geq 0$

正则化符合奥卡姆剃刀（Occam’s razor）原理：在所有可能选择的模型中，能够**很好地解释已知数据**并且**十分简单**才是最好的模型，也就是应该选择的模型。

从贝叶斯估计的角度来看，**正则化项**对应于模型的**先验概率**。可以假设复杂的模型有较小的先验概率，简的模型有较大的先验概率。

1.3.2 交叉验证

1.4 泛化能力

1.4.1 泛化误差

1.4.2 泛化误差上界

1.5 生成模型与判别模型

1.6 分类问题

1.7 标注问题

1.8 回归问题

一个常问的问题：平方损失在做分类问题的损失函数时，有什么缺陷?

一方面，直观上看，平方损失函数**对每一个输出结果都十分看重**，而交叉熵**只看重正确分类**的结果。例如三分类问题，如果预测的是 (a, b, c)，而实际结果是 $(1, 0, 0)$，那么：

$$mse = (a-1)^2 + b^2 + c^2$$

$$crossentropy = -1 \times \log a - 0 \times \log b - 0 \times \log c = -\log a$$

所以，交叉熵损失的梯度只和正确分类有关。而平方损失的梯度和错误分类有关，**除了让正确分类尽可能变大，还会让错误分类都变得更平均。**实际中后面这个调整在分类问题中是不必要的，而回归问题上这就很重要。

另一方面，从理论角度分析。两个损失的源头不同。平方损失函数**假设最终结果都服从高斯分布**，而高斯分布的随机变量实际是一个**连续变量**，而非离散变量。如果假设结果 变量服从均值 t，方差 σ 的高斯分布，那么利用最大似然法可以优化其负对数似然，最终公式变为：

$$\max \sum_{i}^{N}[-\frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{(t_i - y)^2}{2\sigma^2}]$$

除去与 y 无关的项，剩下的就是平方损失函数。

2 感知机

3 k 近邻法

4 朴素贝叶斯法

参考https://www.cnblogs.com/jiangxinyang/p/9378535.html

4.1 贝叶斯公式

$$p(\theta|X) = \frac{p(X|\theta)p(\theta)}{p(X)}$$

又可以写为：

$$posterior = \frac{likelihood * prior}{evidence}$$

其中：

- $posterior$：通过样本 X 得到参数 θ 的概率，即后验概率
- $likelihood$：通过参数 θ 得到样本 X 的概率，即似然函数。
- $prior$：参数 θ 的先验概率
- $evidence$：$p(X) = \int p(X|\theta)p(\theta)d\theta$。样本 X 发生的概率，是各种 θ 条件下发生的概率的积分。

4.2 极大似然估计（MLE）

极大似然估计的核心思想是：认为**当前发生的事件**是**概率最大的事件。**因此就可以给定的数据集，使得该数据集**发生的概率最大**来求得模型中的参数。

似然函数如下：

$$p(X|\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\theta)$$

为便于计算，对似然函数两边取对数，得到对数似然函数：

$$\begin{aligned} LL(\theta) &= \log p(X|\theta) \\ &= \log \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\theta) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \log p(x_i|\theta) \end{aligned}$$

极大似然估计**只关注当前的样本**，也就是只关注当前发生的事情，**不考虑事情的先验情况。**由于计算简单，而且不需要关注先验知识，因此在机器学习中的应用非常广，最常见的就是**逻辑回归。**

4.3 最大后验估计（MAP）

最大后验估计中引入了**先验概率**（先验分布属于**贝叶斯学派**引入的，像 L1，L2 正则化就是对参数引入了**拉普拉斯先验**分布和**高斯先验**分布），而且最大后验估计要求的是 $p(\theta|X)$

$$\begin{aligned} f(x) &= \arg\max_{\theta} p(\theta|X) \\ &= \arg\max_{\theta} \frac{p(X|\theta)p(\theta)}{p(X)} \\ &= \arg\max_{\theta} p(X|\theta)p(\theta) \end{aligned}$$

其中因为分母 $p(X)$ 与 θ 无关，所以可以去掉，同样地，取 log:

$$\begin{aligned} f(x) &= \arg\max_{\theta} \log p(X|\theta)p(\theta) \\ &= \arg\max_{\theta} \{\sum_{i=1}^{n} \log p(x_i|\theta) + \log p(\theta)\} \end{aligned}$$

最大后验估计不只是关注当前的样本的情况，还关注**已经发生过的先验知识。**

最大后验估计和最大似然估计的区别：

最大后验估计允许我们**把先验知识加入到估计模型中**，这在**样本很少的时候是很有用的**（因此朴素贝叶斯在较少的样本下就能有很好的表现），因为**样本很少**的时候我们的**观测结果很可能出现偏差**，此时先验知识会把估计的结果“拉”向先验，实际的预估结果将会在先验结果的两侧形成一个顶峰。通过调节先验分布的参数，比如 beta 分布的 α，β，我们还可以调节把估计的结果“拉”向先验的幅度，α，β 越大，这个顶峰越尖锐。这样的参数，我们叫做预估模型的“超参数”。

4.4 贝叶斯估计

贝叶斯估计和极大后验估计有点相似，都是以最大化后验概率为目的。区别在于：

- 极大似然估计和极大后验估计都是**只返回了的预估值。**
- 极大后验估计在计算后验概率的时候，把**分母** $p(X)$ 忽略了，在进行**贝叶斯估计的时候则不能忽略**
- 贝叶斯估计要计算**整个后验概率**的概率分布

5 决策树

6 logistic 回归与最大熵模型

7 支持向量机

8 提升方法

8.1 gbdt

参考https://www.cnblogs.com/pinard/p/6140514.html

梯度提升树 (Gradient Boosting Decison Tree, 以下简称 GBDT) 有很多简称，有 GBT（Gradient Boosting Tree）, GTB（Gradient Tree Boosting ），GBRT（Gradient Boosting Regression Tree）, MART(Multiple Additive Regression Tree) 等等。

8.1.1 gbdt 概述

在 Adaboost 中，我们是利用前一轮迭代弱学习器的误差率来更新训练集的权重，这样一轮轮的迭代下去。

GBDT 也是迭代，但是弱学习器限定了只能使用 CART 回归树模型，同时迭代思路和 Adaboost 也有所不同。

假设我们前一轮迭代得到的强学习器是 $f_{t-1}(x)$，损失函数是 $L(y, f_{t-1}(x))$，本轮迭代的目标是找到一个 CART 回归树模型的弱学习器 $h_t(x)$，使得本轮的损失函数 $L(y, f_t(x)) = L(y, f_{t-1}(x) + h_t(x))$ 最小。也就是说，要找到一个决策树，使得样本的损失 $L(y - f_{t-1}(x), h_t(x))$ 最小。

8.1.2 gbdt 的负梯度拟合

第 t 轮的第 i 个样本的损失函数的负梯度：

$$r_{ti} = -\left[\frac{\partial L(y_i, f(x_i)))}{\partial f(x_i)}\right]_{f(x)=f_{t-1}(x)}$$

利用

9 EM 算法及其推广

10 隐马尔可夫模型

11 条件随机场

12 附录

12.1 矩阵

12.2 优化

12.2.1 拉格朗日乘子法

拉格朗日乘子法 (Lagrange multipliers) 是一种寻找多元函数在**一组约束下**的极值的方法。通过引入拉格朗日乘子，将 d 个变量和 k 个约束条件的最优化问题转化为具有 $d + k$ 个变量的无约束优化问题求解。

12.2.1.1 等式约束 假设 x 是 d 维向量，要寻找 x 的某个取值 x^*，使目标函数 $f(x)$ 最小且同时满足 $g(x) = 0$ 的约束。

从几何角度看，目标是在由方程 $g(x) = 0$ 确定的 $d - 1$ 维曲面上，寻找能使目标函数 $f(x)$ 最小化的点。

1. 对于约束曲面 $g(x) = 0$ 上的**任意点**x，该点的梯度 $\nabla g(x)$ 正交于约束曲面
2. 在**最优点**x^*，目标函数 $f(x)$ 在该点的梯度 $\nabla f(x^*)$ 正交于约束曲面

对于**第 1 条**，梯度本身就与曲面的切向量垂直，**是曲面的法向量**，并且**指向数值更高的等值线。**

证明：

参考http://xuxzmail.blog.163.com/blog/static/25131916201032810322765 4/

假设 $z = f(x, y)$ 的等值线：$\Gamma : f(x, y) = c$，两边求微分：

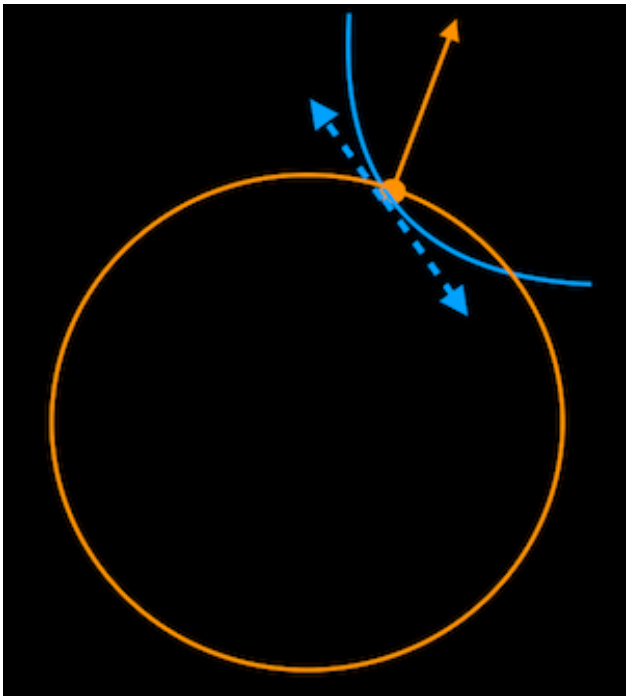
$$\begin{gathered} df(x, y) = dc \\ \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy = 0 \end{gathered}$$

看成两个向量的内积：

$$\frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy = \{\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\} \cdot \{dx, dy\} = 0$$

而内积 $a \cdot b = |a||b|cos\theta$ 为 0 说明夹角是 90 度，而 $\{\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\}$ 是梯度向量，$\{dx, dy\}$ 是等值线的切向量，所以梯度向量和切向量是垂直的。

对于**第 2 条**，可以用反证法，如下图，蓝色是 $g(x) = 0$，橙色是 $f(x)$ 的等值线 (图里假设 $f(x) = x^2 + y^2$)，交点的 $\nabla f(x^*)$ 的梯度和 $g(x)$ 的切面不垂直，那么，可以找到更小的等值线，使夹角更接近 90 度，也就是说，这个点不是真正的最优点 x^*。



所以，在最优点 x^* 处，梯度 $\nabla g(x)$ 和 $\nabla f(x)$ 的方向必然**相同或相反**，也就是存在 $\lambda \neq 0$，使得：

$$\nabla f(x^*) + \lambda \nabla g(x^*) = 0$$

其中 λ 是拉格朗日乘子，定义拉格朗日函数

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

其中 $L(x, \lambda)$ 对 x 的偏导 $\nabla_x L(x, \lambda)$ 置 0，就得到：

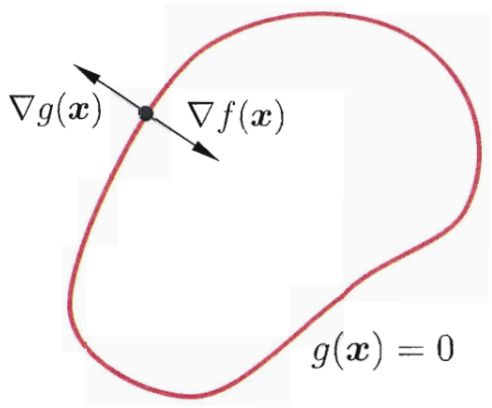
$$\nabla f(x) + \lambda \nabla g(x) = 0$$

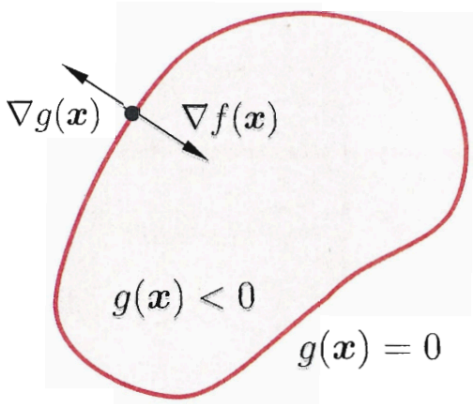
而 $L(x, \lambda)$ 对 λ 的偏导 $\nabla_\lambda L(x, \lambda)$ 置 0，就得到

$$g(x) = 0$$

所以，原约束问题可以转化为对 $L(x, \lambda)$ 的无约束优化问题。

12.2.1.2 不等式约束 考虑不等式约束 $g(x) \leq 0$，最优点或者在边界 $g(x) = 0$ 上，或者在区域 $g(x) < 0$ 中。





- 对于 $g(x) < 0$

相当于使 $f(x)$ 取得最小值的点落在可行域内，所以**约束条件相当于没有用**，所以，直接对 $f(x)$ 求极小值即可。因为 $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$，所以

$$\nabla_x L(x, \lambda) = \nabla f(x) + \lambda \nabla g(x)$$

因为 $g(x) < 0$，想要只让 $\nabla f(x) = 0$，那么令 $\lambda = 0$ 即可。

- 对于 $g(x) = 0$

这就变成了等式约束，且此时 $\nabla f(x^*)$ 和 $\nabla g(x^*)$ 反向相反。因为在 $g(x) = 0$ 越往里值是越小的，而梯度是指向等值线高的方向，所以梯度是指向外的。而 $f(x)$ 的可行域又在 $g(x)$ 的里面和边界上，我们要找的是 $f(x)$ 的最小值，所以 $f(x)$ 的梯度是指向内部的。

而 $\nabla f(x) + \lambda \nabla g(x) = 0$，两个又是反向的，所以 $\lambda > 0$。

结合 $g(x) \leq 0$ 和 $g(x) = 0$ 两种情况的结论，就得到了 KKT（Karush-Kuhn-Tucker）条件

$$\left.\begin{matrix} g(x) = 0, \lambda > 0 \\ g(x) < 0, \lambda = 0 \end{matrix}\right\} \Rightarrow \begin{cases} g(x) \leq 0 \\ \lambda \geq 0 \\ \lambda g(x) = 0 \end{cases}$$

其中 $\lambda g(x) = 0$ 是因为 λ 和 $g(x)$ **至少一个是 0，而且不能都不是 0**。

以上三个条件有各自的名字：

- Primal feasibility(原始可行性)：$g(x) \leq 0$
- Dual feasibility(对偶可行性)：$\lambda \geq 0$
- Complementary slackness：$\lambda g(x) = 0$

12.2.1.3 带等式和不等式约束的拉格朗日乘子法 对于多个约束的情形，m 个等式约束和 n 个不等式约束，可行域 $\mathbb{D} \subset \mathbb{R}^d$ 非空的优化问题：

$$\min_x f(x)$$

$$\begin{aligned} s.t \quad & h_i(x) = 0, i = 1, ..., m \\ & g_j(x) \leq 0, j = 1, ..., n \end{aligned}$$

引入拉格朗日乘子 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m)^T$ 和 $\mu = (\mu_1, \mu_2, ..., \mu_n)^T$，相应的拉格朗日函数为：

$$L(x,\lambda,\mu)=f(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i h_i(x)+\sum_{j=1}^{n}\mu_j g_j(x)$$

由不等式约束引入的 KKT 条件 $(j=1,2,...n)$ 为

$$\begin{cases} g_j(x)\le 0 \\ \mu_j \ge 0 \\ \mu_j g_j(x)=0 \end{cases}$$

12.2.2 梯度下降

12.2.2.1 《统计学习方法》的视角 假设 $f(x)$ 有一阶连续偏导，对于无约束的最优化问题而言：$\min_{x\in R^n} f(x)$

而 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 附近的一阶泰勒展开如下，其中 $g_k=g(x^{(k)})=\nabla f(x^{(k)})$ 是 $f(x)$ 在 $x^{(k)}$ 的梯度：

$$f(x)=f(x^{(k)})+g_k^T(x-x^{(k)})$$

所以对于 $x=x^{(k+1)}$：

$$f(x^{(k+1)})=f(x^{(k)})+g_k^T(x^{(k+1)}-x^{(k)})$$

令 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k p_k$，$p_k$ 是搜索方向，λ_k 是步长，代入上式，有

$$\begin{aligned} f(x^{(k+1)}) &= f(x^{(k)})+g_k^T(x^{(k)}+\lambda_k p_k-x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)})+g_k^T\lambda_k p_k \end{aligned}$$

为了让每次迭代的函数值变小，可以取 $p_k=-\nabla f(x^{(k)})$

把 λ_k 看成是可变化的，所以需要搜索 λ_k 使得

$$f(x^{(k)}+\lambda_k p_k)=\min_{\lambda\ge 0} f(x^{(k)}+\lambda p_k)$$

梯度下降法：

输入：目标函数 $f(x)$，梯度 $g(x)=\nabla f(x)$，精度要求 ε。

输出：$f(x)$ 的极小点 x^*。

1. 取初始值 $x^{(0)}\in R^n$，置 $k=0$
2. 计算 $f(x^{(k)})$
3. 计算梯度 $g_k=g(x^{(k)})$，当 $\|g_k\|<\varepsilon$，则停止计算，得到近似解 $x^*=x^{(k)}$；否则，令 $p_k=-g(x^{(k)})$，求 λ_k 使得 $f(x^{(k)}+\lambda_k p_k)=\min_{\lambda\ge 0} f(x^{(k)}+\lambda p_k)$
4. 置 $x^{(k+1)}=x^{(k)}+\lambda_k p_k$，计算 $f(x^{(k+1)})$ 当 $\left\|f(x^{(k+1)})-f(x^{(k)})\right\|<\varepsilon$ 或 $\left\|x^{(k+1)}-x^{(k)}\right\|<\varepsilon$ 时，停止迭代，令 $x^*=x^{(k+1)}$
5. 否则，置 $k=k+1$，转第 3 步

只有当目标函数是**凸函数**时，梯度下降得到的才是**全局最优解**。

12.2.2.2 《机器学习》的视角 梯度下降是一阶 (first order)（只用一阶导，不用高阶导数）优化方法，是求解无约束优化问题最简单、最经典的方法之一。

考虑无约束优化问题 $\min_x f(x)$，$f(x)$ 是连续可微函数，如果能构造一个序列 $x^0, x^1, x^2, ...$ 满足

$$f(x^{t+1}) < f(x^t),\ t = 0, 1, 2, ...$$

那么不断执行这个过程，就可以收敛到局部极小点，根据泰勒展开有：

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) \\ f(x + \Delta x) &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x + \Delta x - x^{(k)}) \\ &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T (x - x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x \\ &= f(x) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x \end{aligned}$$

而 $\nabla f(x^{(k)})^T \Delta x$ 是一个标量，其转置等于自己，所以

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x^T \nabla f(x^{(k)})$$

想要让 $f(x + \Delta x) < f(x)$，只需要令：

$$\Delta x = -\gamma \nabla f(x)$$

其中的步长 γ 是一个小常数

如果 $f(x)$ 满足 L-Lipschitz 条件，也就是说对于任意的 x，存在常数 L，使得 $\|\nabla f(x)\| \leq L$ 成立，那么设置步长为 $\frac{1}{2L}$ 就可以确保收敛到局部极小点。

同样地，当目标函数是凸函数时，局部极小点就对应全局最小点，此时梯度下降可以确保收敛到全局最优解。

12.2.3 牛顿法

12.2.3.1 二阶导基本性质 对于点 $x = x_0$，

- 一阶导 $f'(x_0) = 0$ 时，如果二阶导 $f''(x_0) > 0$，那么 $f(x_0)$ 是极小值，x_0 是极小点
- 一阶导 $f'(x_0) = 0$，如果二阶导 $f''(x_0) < 0$，那么 $f(x_0)$ 是极大值，x_0 是极大点
- 一阶导 $f'(x_0) = 0$，如果二阶导 $f''(x_0) = 0$，那么 x_0 是鞍点

证明：

对于任意 x_1，根据二阶泰勒展开，有

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x_1 - x_0)^2 + ... + R_n(x_1)$$

因为 $f''(x_0) > 0$ 且 $f'(x_0) = 0$，所以，不论 $x_1 > x_0$ 还是 $x_1 < x_0$，总有 $f(x_1) > f(x_0)$，也就是周围的函数值都比 $f(x_0)$ 大，而 x_0 又是极值点，所以是极小点。

12.2.3.2 牛顿法 对于矩阵形式，x 是一个 nx1 的列向量，$H(x)$ 是 $f(x)$ 的海赛矩阵，即二阶导，shape 是 $n \times n$：

$$f(x) = f(x^{(x)}) + g_k^T (x - x^{(k)}) + \frac{1}{2} (x - x^{(k)})^T H(x^{(k)}) (x - x^{(k)})$$

函数 $f(x)$ 有极值的必要条件是在极值点处一阶导为 0，特别地，当 $H(x^{(k)})$ 是正定矩阵时（二阶导大于 0），是极小值。

牛顿法利用极小点的必要条件 $\nabla f(x)=0$，每次迭代从点 $x^{(k)}$ 开始，求目标函数极小点，作为第 $k+1$ 次迭代值 $x^{(k+1)}$，具体地，假设 $\nabla f(x^{(k+1)})=0$，有

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x^{(x)}) + g_k^T(x-x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x-x^{(k)})^T H(x^{(k)})(x-x^{(k)}) \\ &= f(x^{(x)}) + [g_k^T + \frac{1}{2}(x-x^{(k)})^T H(x^{(k)})](x-x^{(k)}) \\ &= f(x^{(x)}) + [g_k + \frac{1}{2}H(x^{(k)})(x-x^{(k)})]^T(x-x^{(k)}) \end{aligned}$$

把其中的 $g_k + \frac{1}{2}H(x^{(k)})(x-x^{(k)})$ 看成一阶导，则上式就是一阶泰勒展开。记 $H^k = H(x^{(k)})$，令 $x = x^{(k+1)}$，令一阶导为 0:

$$\begin{gathered} g_k + \tfrac{1}{2}H^k(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0 \\ g_k = -\tfrac{1}{2}H^k(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\ -2H_k^{-1}g_k = x^{(k+1)} - x^{(k)} \\ x^{(k+1)} = -2H_k^{-1}g_k + x^{(k)} \end{gathered}$$

可以无视这个 2，变成:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H_k^{-1}g_k$$

或者

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + p_k$$

其中，

$$H_k p_k = -g_k$$

牛顿法:

输入：目标函数 $f(x)$，梯度 $g(x)=\nabla f(x)$，海赛矩阵 $H(x)$，精度要求 ε。

输出：$f(x)$ 的极小点 x^*。

1. 取初始点 $x^{(0)}$，置 $k=0$
2. 计算 $g_k = g(x^{(k)})$
3. 若 $\|g_k\| < \varepsilon$，则停止计算，得到近似解 $x^* = x^{(k)}$
4. 计算 $H_k = H(x^{(k)})$，并求 p_k，满足 $H_k p_k = -g_k$
5. 置 $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p_k$
6. 置 $k = k+1$，转到第 2 步

其中的步骤 4，求 p_k 时，$p_k = -H_k^{-1}g_k$ 需要求解 H_k^{-1} 很复杂。

12.2.4 拟牛顿法的思路

基本想法就是通过一个 n 阶矩阵 $G_k = G(x^{(k)})$ 来近似代替 $H^{-1}(x^{(k)})$。

12.2.5 DFP(Davidon-Fletcher-Powell)

12.2.6 BFGS(Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

12.3 拉格朗日对偶性

12.4 信息论相关

12.4.1 凸集

假设 S 为在实或复向量空间的集。若对于所有 $x, y \in S$ 和所有的 $t \in [0,1]$ 都有 $tx + (1-t)y \in S$，则 S 称为凸集。

也就是说，S 中任意两点间的线段都属于 S

性质：

如果 S 是凸集，对于任意的 $u_1, u_2, ..., u_r \in S$，以及所有的非负 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_r$ 满足 $\lambda_1 + \lambda_2 + ... + \lambda_r = 1$，都有 $\sum_{k=1}^{r} \lambda_k u_k \in S$。这个组合称为 $u_1, u_2, ..., u_r$ 的凸组合。

12.4.2 凸函数

函数是凸函数：曲线上任意两点 x 和 y 所作割线（与函数图像有两个不同交点的直线，如果只有一个交点，那就是切线）一定在这两点间的函数图象的上方：

$$tf(x) + (1-t)f(y) \geq f(tx + (1-t)y), 0 \leq t \leq 1$$

有如下几个常用性质：

- 一元可微函数在某个区间上是凸的，当且仅当它的**导数**在该区间上**单调不减。**
- 一元连续可微函数在区间上是凸的，当且仅当函数位于**所有它的切线的上方**：对于区间内的所有 x 和 y，都有 $f(y) \geq f(x) + f'(x)(y-x)$**(右边就是一阶泰勒展开)。**特别地，如果 $f'(c) = 0$，那么 $f(c)$ 是 $f(x)$ 的最小值。
- 一元二阶可微的函数在区间上是凸的，当且仅当它的**二阶导数是非负的**；这可以用来判断某个函数是不是凸函数。如果它的二阶导数是正数，那么函数就是严格凸的，但反过来不成立。
- 多元二次可微的连续函数在凸集上是凸的，当且仅当它的**黑塞矩阵**在凸集的内部是**半正定的**

12.4.3 KL 散度

熵的小结：https://blog.csdn.net/haolexiao/article/details/70142571

相对熵（relative entropy）又称为 **KL 散度**（Kullback–Leibler divergence，简称 KLD），**信息散度**（**information divergence**），**信息增益**（**information gain**）。

KL 散度是两个概率分布 P 和 Q 差别的**非对称性**的度量。KL 散度是用来度量使用**基于 Q 的编码**来编码**来自 P 的样本 平均所需的额外的位元数。**典型情况下，**P 表示数据的真实分布，Q 表示数据的理论分布，模型分布，或 P 的近似分布。**

注意：$D_{KL}(P||Q)$ 是指的用**分布 Q** 来**近似**数据的**真实分布 P**，先写 P 再写 Q，公式里没有-ln 的时候，就是 p/q

对于离散随机变量：

$$D_{KL}(P||Q) = \sum_i P(i) ln \frac{P(i)}{Q(i)} = -\sum_i P(i) ln \frac{Q(i)}{P(i)}$$

KL 散度仅当**概率 P 和 Q 各自总和均为 1**，且对于任何 i 皆满足 $Q(i) > 0$ 及 $P(i) > 0$ 时，才有定义。如果出现 $0 ln 0$，当做 0

对于连续随机变量：

$$D_{KL}(P||Q) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) ln \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

性质：

KL 散度大于等于 0

证明：

先了解一下 Jensen 不等式：

如果 φ 是一个凸函数，那么有：

$$\varphi(E(x)) \leq E(\varphi(x))$$

对于**离散随机变量**，$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$：

$$\varphi(\sum_{i=1}^{n} g(x_i)\lambda_i) \leq \sum_{i=1}^{n} \varphi(g(x_i))\lambda_i$$

当我们取 $g(x) = x$，$\lambda_i = 1/n$，$\varphi(x) = log(x)$ 时，就有

$$log(\sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{n}) \geq \sum_{i=1}^{n} \frac{log(x_i)}{n}$$

对于**连续随机变量**，如果 f(x) 是非负函数，且满足（f(x) 是概率密度函数）：

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1$$

如果 φ 在 g(x) 的值域中是凸函数，那么

$$\varphi(\int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx) \leq \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(g(x))f(x)dx$$

特别地，当 $g(x) = x$ 时，有

$$\varphi(\int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx) \leq \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)f(x)dx$$

回到这个问题中，$g(x) = \frac{q(x)}{p(x)}$，$\varphi(x) = -logx$ 是一个严格凸函数，那么 $\varphi(g(x)) = -log\frac{q(x)}{p(x)}$，所以

$$\begin{aligned}
D_{KL}(P||Q) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(x)ln\frac{p(x)}{q(x)}dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} p(x)(-ln\frac{q(x)}{p(x)})dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} (-ln\frac{q(x)}{p(x)})p(x)dx \\
&\geq -ln(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q(x)}{p(x)}p(x)dx) \\
&\geq -ln(\int_{-\infty}^{\infty} q(x)dx) \\
&= -ln1 = 0
\end{aligned}$$

12.5 采样

假设有一个很复杂的概率密度函数 $p(x)$，求解随机变量基于此概率下的某个函数期望，即：

$$E_{x\sim p(x)}[f(x)]$$

求解有两种方法：

解析法：

将上式展开成积分，并通过积分求解：

$$\int_x p(x)f(x)dx$$

对于简单的分布，可以直接这么做。但 dnn 就不可行了。

蒙特卡洛法：

根据大数定理，当采样数量足够大时，采样的样本就可以无限近似地表示原分布：

$$\frac{1}{N}\sum_{x_i\sim p(x),i=1}^{N} f(x_i)$$

12.5.1 拒绝采样

拒绝采样又叫接受/拒绝采样 (Accept-Reject Sampling)，对于目标分布 $p(x)$，选取一个容易采样的参考分布 $q(x)$，使得对于任意 x 都有 $p(x) \leq M \cdot q(x)$，则可以按如下过程采样：

- 从参考分布 $q(x)$ 中随机抽取一个样本 x_i
- 从均匀分布 $U(0,1)$ 产生一个随机数 u_i
- 如果 $u_i \leq \frac{p(x_i)}{Mq(x_i)}$，则接受样本 x_i，否则拒绝。

重新进行如上 3 个步骤，直到新产生的样本 x_i 被接受

其中的第三步是因为 $p(x) \leq M \cdot q(x)$，所以 $\frac{p(x_i)}{Mq(x_i)} \leq 1$，说明只有函数值在 $p(x_i)$ 下方的 x_i 才接受，所以 $x_i \sim p(x)$。相当于为目标分布 $p(x)$ 选一个包络函数 $M \cdot q(x)$，包络函数紧，每次采样时样本被接受的概率越大，采样效率越高。实际应用中还有自适应拒绝采样等。

12.5.2 重要性采样

强化学习经常使用重要性采样。重要性采样主要应用在一些**难以直接采样**的数据分布上。

我们令待采样分布为 $p(x)$，有另一个简单可采样且定义域和 $p(x)$ 相同的概率密度函数为 $\tilde{p}(x)$，可以得到：

$$\begin{aligned}
E_{x\sim p(x)}[f(x)] &= \int_x p(x)f(x)dx \\
&= \int_x \tilde{p}(x)\frac{p(x)}{\tilde{p}(x)}f(x)dx \\
&= E_{x\sim \tilde{p}(x)}[\frac{p(x)}{\tilde{p}(x)}f(x)] \\
&\simeq \frac{1}{N}\sum_{x_i\sim \tilde{p}(x),i=1}^{N}\frac{p(x)}{\tilde{p}(x)}f(x)
\end{aligned}$$

因此，只需要从简单分布 $\tilde{p}(x)$ 中采样，然后分别计算 $p(x)$、$\tilde{p}(x)$ 和 $f(x)$ 就可以了。

最好选择一个和原始分布尽量接近的近似分布进行采样。

例如，要对一个均值 1，方差 1 的正态分布进行采样，有两个可选的分布：均值 1 方差 0.5 和均值 1 方差 2。

从图像上可以看到方差为 0.5 的过分集中在均值附近，而且方差为 2 的与原分布重合度较高，所以应该选方差为 2 的。

12.5.3 马尔可夫蒙特卡洛采样（MCMC）

如果是高维空间的随机向量，拒绝采样和重要性采样经常难以找到合适的参考分布，采样效率低下（样本的接受概率低或者重要性权重低），此时可以考虑马尔可夫蒙特卡洛采样法。

蒙特卡洛法指基于采样的数值近似求解方法，马尔可夫链用于进行采样。

基本思想是：

- 针对待采样的目标分布，**构造一个马尔可夫链**，使得该马尔可夫链的平稳分布就是目标分布；
- 然后**从任何一个初始状态出发**，沿着马尔可夫链进行**状态转移**，最终得到的状态转移序列会收敛到目标分布
- 由此可以得到目标分布的一系列样本

核心点是**如何构造合适的马尔可夫链**，即确定马尔可夫链的状态转移概率。

12.5.3.1 Metropolis-Hastings 采样

对于目标分布 $p(x)$，首先选择一个容易采样的参考条件分布 $q(x^*|x)$，并令

$A(x, x^*) = \min\{1, \frac{p(x^*)q(x|x^*)}{p(x)q(x^*|x)}\}$

然后根据如下过程采样：

- 随机选一个初始样本 $x^{(0)}$
- For t = 1, 2, 3, ⋯:
  - 根据参考条件分布 $q(x^*|x^{(t-1)})$ 抽取一个样本 x^*；
  - 根据均匀分布 $U(0,1)$ 产生随机数 u；
  - 若 $u < A(x^{(t-1)}, x^*)$，则令 $x^{(t)} = x^*$ **【接受新样本】**，否则令 $x^{(t)} = x^{(t-1)}$ **【拒绝新样本，维持旧样本】**

可以证明，上述过程得到的样本序列 $\{..., x^{(t-1)}, x^{(t)}, ...\}$ 最终会收敛到目标分布 $p(x)$

12.5.3.2 吉布斯采样

吉布斯采样是 **Metropolis-Hastings 算法的一个特例**，核心思想是**只对样本的一个维度**进行采样和更新。对于目标分布 $p(x)$，其中 $x = (x_1, x_2, ..., x_d)$ 是一个多维向量，按如下过程采样：

- 随机选择初始状态 $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, ..., x_d^{(0)})$
- For t = 1, 2, 3, ⋯:
  - 对于前一步产生的样本 $x^{(t-1)} = (x_1^{(t-1)}, x_2^{(t-1)}, ..., x_d^{(t-1)})$，依次采样和更新每个维度的值，即依次抽取分量 $x_1^{(t)} \sim p(x_1|x_2^{(t-1)}, x_3^{(t-1)}, ..., x_d^{(t-1)})$，$x_2^{(t)} \sim p(x_1|x_1^{(t-1)}, x_3^{(t-1)}, ..., x_d^{(t-1)})$，⋯，$x_d^{(t)} \sim p(x_1|x_1^{(t-1)}, x_2^{(t-1)}, ..., x_{d-1}^{(t-1)})$
  - 形成新的样本 $x^{(t)} = (x_1^{(t)}, x_2^{(t)}, ..., x_d^{(t)})$

同样可以证明，上述过程得到的样本序列 $\{..., x^{(t-1)}, x^{(t)}, ...\}$ 会收敛到目标分布 $p(x)$。另外，步骤 2 中对样本每个维度的抽样和更新操作，**不是必须按下标顺序进行的，可以是随机顺序。**

注意点：

- 拒绝采样中，如果某一步中采样被拒绝，则**该步不会产生新样本，需要重新采样。**但 MCMC 采样**每一步都会产生一个样本**，只是有时候这个样本与之前的样本一样而已。
- MCMC 采样是在**不断迭代**过程中**逐渐收敛**到平稳分布的。实际应用中一般会对得到的样本序列进行”burn-in”处理，即截除掉序列中最开始的一部分样本，**只保留后面的样本。**

MCMC 得到的样本序列中相邻的样本是**不独立的**，因为后一个样本是由前一个样本根据特定的转移概率得到的。如果仅仅是采样，并不要求样本之间相互独立。

如果确实需要产生独立同分布的样本，可以：

- 同行运行多条马尔可夫链，这样不同链上的样本是独立的
- 或者在同一条马尔可夫链上每隔若干个样本才选取一个，这样选出来的样本也是近似独立的。