第一章　机器学习基础

1.1　机器学习简介

人工智能是我们想要达到的目标，机器学习则是实现人工智能的手段，深度学习则是机器学习的其中一种。

那么机器学习是什么？机器学习可以看做是从数据中学习一个函数 (function)，对于给定输入得到输出结果。如在语音辨识、图像识别等领域的应用。

机器学习框架如图 1.1 所示，首先包含一系列函数 model 的集合，利用训练数据评价函数的品质，并挑选出最优函数模型。

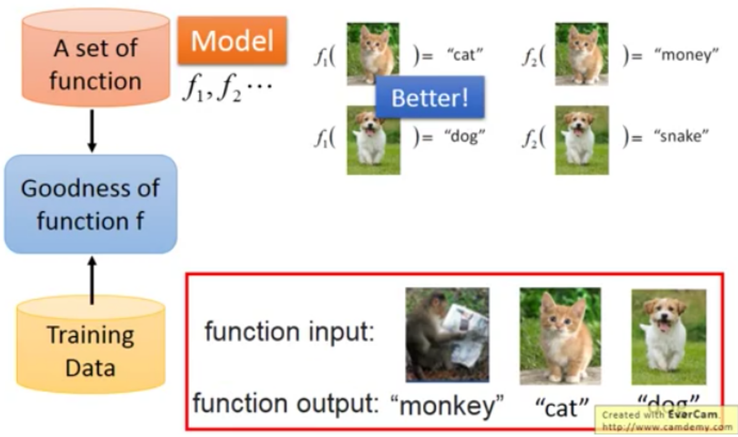


图 1.1: 机器学习框架

详细步骤如图 1.2 所示，可以总结为：

1. 挑选模型
2. 评价函数品质 goodness
3. 挑选最优函数 f^*

机器学习的学习图谱如图 1.3 所示, 具体描述如下：

1. 监督学习

    回归

    线性模型

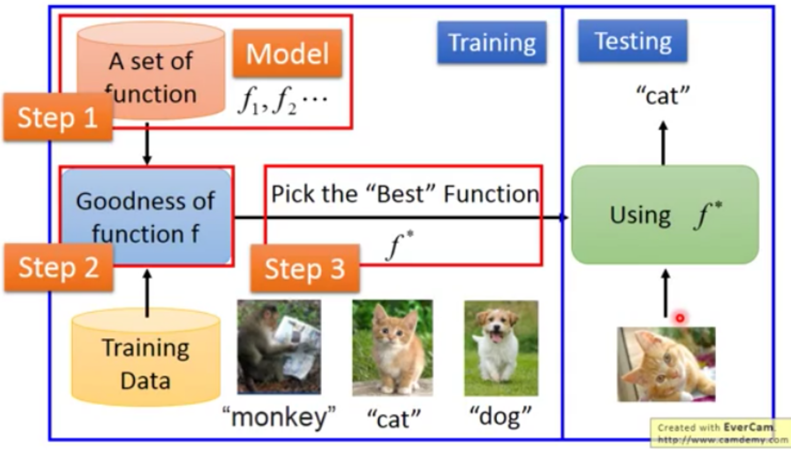


图 1.2: 机器学习三步骤

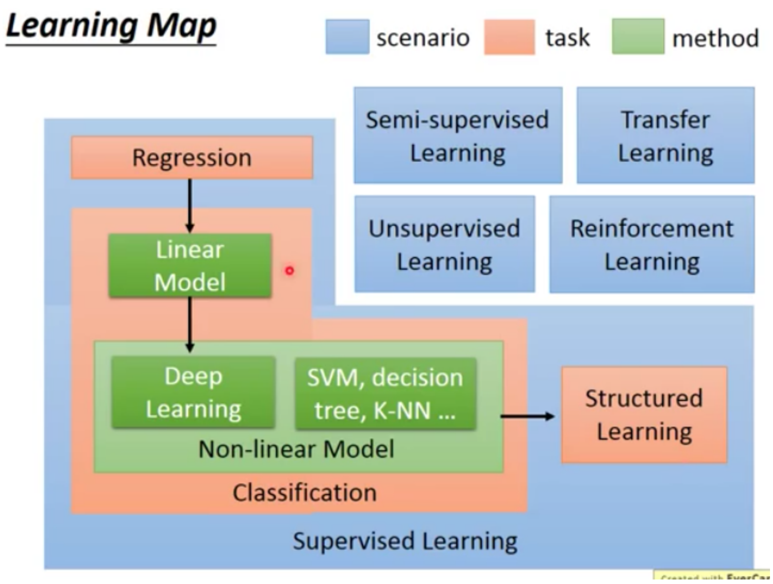


图 1.3: 机器学习图谱

深度学习，非线性模型

其它非线性模型，如 SVM、决策树、knn。

structure learning

2. 无监督学习

3. 半监督学习

4. 迁移学习

5. 强化学习

1.2 回归问题

线性模型：$y = b + \sum w_i x_i$，其中 x_i 为输入数据的特征，w_i 为权重，b 为偏置。使用损失函数评价选定模型的好坏。如对于模型 f，样本 x^n，对应的输出真值为 $\hat{y}$:

$$L(f) = \sum_{n=1}^{N} \left(\hat{y}^n - f(x_{cp}^n)\right)^2$$

对于线性模型：

$$L(w, b) = \sum_{n=1}^{N} \left(\hat{y}^n - (b + w \cdot x_{xp}^n)\right)^2$$

最优化模型：

$$w^*, b^* = \arg\min_{w,b} L(w, b) = \arg\min_{w,b} \sum_{n=1}^{N} \left(\hat{y}^n - (b + w \cdot x_{cp}^n)\right)^2$$

为求得最优解，使用梯度下降法进行优化求解。若将 b 看做权重 w 的一部分，优化模型：

$$w^* = \arg\min_{w} L(w)$$

权重通过梯度进行迭代：

$$w^1 \leftarrow w^0 - \eta \left.\frac{dL}{dw}\right|_{w=w^0}$$

其中，η 为学习率。梯度下降实例如图 1.4所示：对参数的偏导：

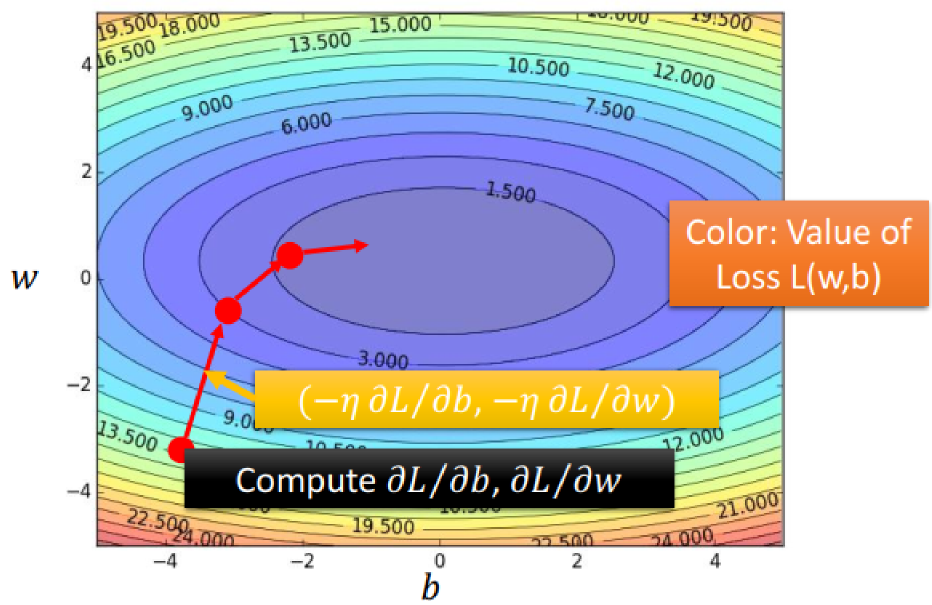
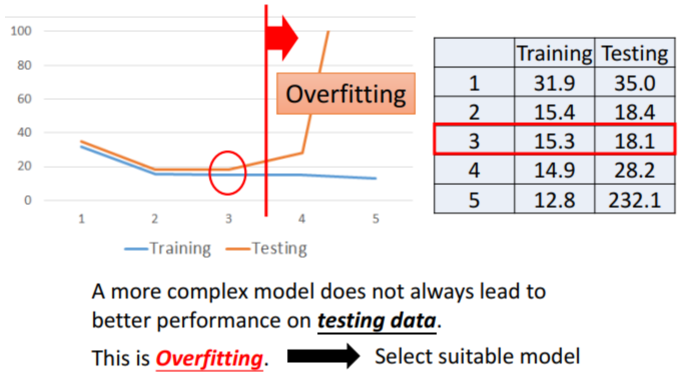


图 1.4: gradient descent

$$\frac{\partial L}{\partial w} = \sum_{n=1}^{N} 2\left(\hat{y}^n - (b + w \cdot x^n)\right)(-x^n)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = -\sum_{n=1}^{N} 2\left(\hat{y}^n - (b + w \cdot x^n)\right)$$



	Training	Testing
1	31.9	35.0
2	15.4	18.4
3	15.3	18.1
4	14.9	28.2
5	12.8	232.1

图 1.5: 过拟合现象

对于更为复杂的模型，如：

$$
\begin{aligned}
y &= b + w_1 \cdot x + w_2 \cdot x^2 \\
y &= b + w_1 \cdot x + w_2 \cdot x^2 + w_3 \cdot x^3 \\
y &= b + w_1 \cdot x + w_2 \cdot x^2 + w_3 \cdot x^3 + \cdots + w_5 \cdot x^5
\end{aligned}
$$

过于复杂的模型在训练集上能够取得小的误差，但在测试集的误差会异常大，即发生了过拟合 (overfitting)。同时对于复杂模型使用简单的模型会出现欠拟合现象，不同模型在训练集和测试集上的误差如图 1.5所示：为缓解过拟合，可以通过正则化实现，对权重 w 加以约束。

$$
L = \sum_{n=1}^{N} \Big(\hat{y}_n - (b + \sum w_i x_{ni}) \Big)^2 + \lambda \sum w_i^2
$$

正则化参数的选择不宜过大或过小，以宝可梦 cp 值回归模型为例，参数 λ 影响如图 1.6所示：

1.3 误差来自何处

简单的模型有着较大的偏差 (bias)，使用相同模型，不同数据得到的最优函数 f^* 的取值区间可能不包括理论最优解 $\hat{f}$，因此偏差较大。而对于过于复杂的模型，又容易产生对数据的过拟合，出现大的方差。对于复杂模型，多次实验求取的模型均值能够更加接近理论解 $\hat{f}$，但同时一个模型对于新的测试集数据容易产生大的误差，此时误差主要来自方差 (variance)。偏差与误差的形象解释如图 1.7所示：

针对方差和偏差导致的过拟合和欠拟合问题，分别通过以下方法改善：

- 偏差

  重新修正模型，使用更加复杂的模型

  使用更多的样本特征

- 方差

  增加样本数据量

  模型正则化

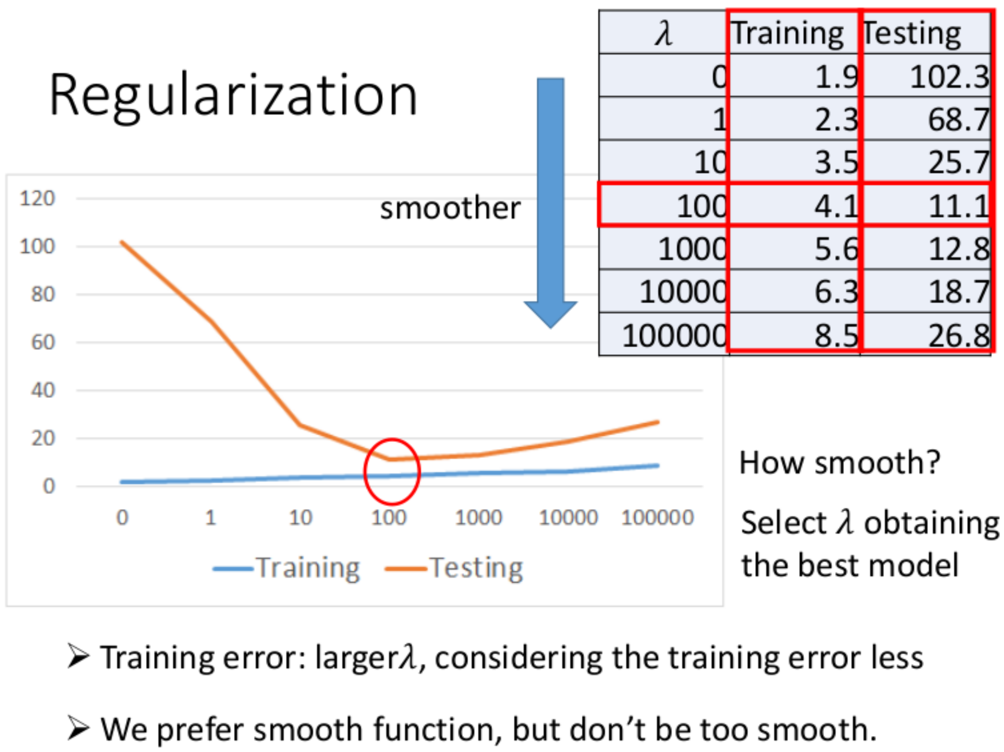
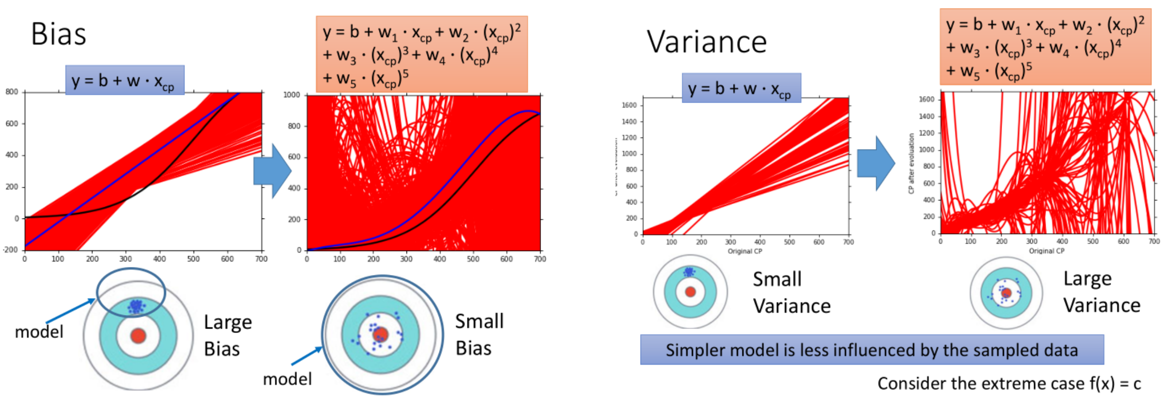
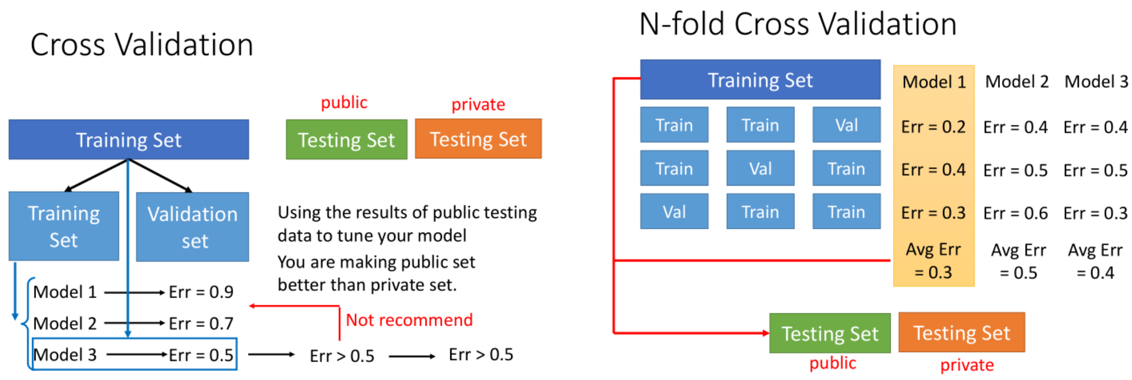


图 1.6: 正则化参数对模型误差的影响



(a) 误差之偏差　(b) 误差之方差

图 1.7: bias VS variance



(a) 划分验证集 (b) N-折交叉验证

图 1.8: 交叉验证

对于在实际训练模型过程中，训练集上得到的模型，通过 public 测试集得到的错误率与在 private 测试集上的错误率不一定是一致的。为了在没有 private 测试集的前提下能够较好的预知错误率，可以通过在训练集上划分训练集和验证集加以实现。如图 1.8subfig:validation 所示：同时为了充分利用训练集数据可以采用 N-折交叉验证。模型的正确率由 N 个正确率的均值决定。如图 1.8b所示。

1.4 梯度下降

损失函数的优化求解可以通过梯度下降法实现，对于以下参数优化：

$$\theta^* = \arg\min L(\theta) \tag{1.1}$$

其中，L 为损失函数，θ 为优化参数。使用梯度下降迭代求解：

$$\theta_n = \theta_{n-1} - \eta \frac{\partial L)}{\partial \theta}\bigg|_{\theta_{n-1}} \tag{1.2}$$

1.4.1 学习率微调

1.4.2 随机梯度下降法 Stochastic Gradient Descent

1.4.3 特征缩放

1.4.4 梯度下降数学理论

标题 12425 dfadf

自定义数据