第一部分

监督学习：我们数据集中的每个样本都有相应的“正确答案”，再根据这些样本作出预测；处理分类和回归；回归问题，即通过回归来推出一个连续的输出；分类问题，其目标是推出一组离散的结果；如k近邻，线性回归和多项式回归，逻辑回归，SVM，决策树和随机森林。

无监督学习：无监督学习中没有任何的标签或者是有相同的标签或者就是没标签。有已知数据集，却不知如何处理，也未告知每个数据点是什么。别的都不知道，就是一个数据集。无监督学习算法可能会把这些数据分成两个不同的簇，所以叫做聚类算法。

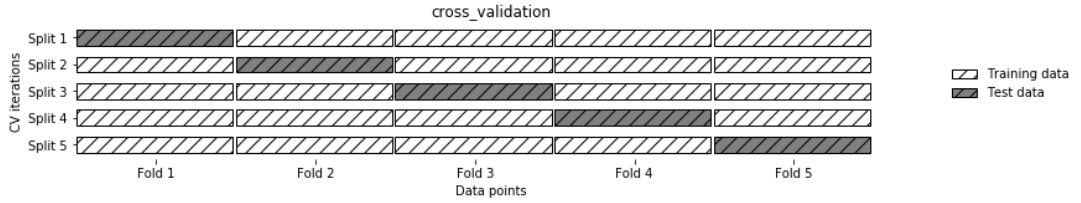
泛化能力（generalization ability）：由该方法学习到的模型对未知数据的预测能力，是学习方法本质上重要的性质。现实中采用最多的办法是通过测试误差（泛化误差）来评价学习方法的泛化能力。 但这种评价是依赖于测试数据集的。因为测试数据集是有限的，很有可能由此得到的评价结果是不可靠的。

过拟合：曲线很好的拟合了样本，太过于注重训练数据的细节，甚至将一些噪声错误的当成特征；模型在训练集上表现好，验证和测试阶段就大不如意了，模型的泛化能力很差；
解决过拟合(高方差)的方法：
1. 增加训练数据数
发生过拟合最常见的现象就是数据量太少而模型太复杂；过拟合是由于模型学习到了数据的一些噪声特征导致，增加训练数据的量能够减少噪声的影响，让模型更多地学习数据的一般特征；增加数据量有时可能不是那么容易，需要花费一定的时间和精力去搜集处理数据；利用现有数据进行扩充或许也是一个好办法，例如在图像识别中，如果没有足够的图片训练，可以把已有的图片进行旋转，拉伸，镜像，对称等，这样就可以把数据量扩大好几倍而不需要额外补充数据；注意保证训练数据的分布和测试数据的分布要保持一致。
2. 使用正则化约束
在代价函数后面添加正则化项，可以避免训练出来的参数过大从而使模型过拟合。使用正则化缓解过拟合的手段广泛应用，不论是在线性回归还是在神经网络的梯度下降计算过程中，都应用到了正则化的方法。常用的正则化有l1l1正则和l2l2正则，具体使用哪个视具体情况而定，一般l2l2正则应用比较多；
3. 减少特征数
欠拟合需要增加特征数，那么过拟合自然就要减少特征数。去除那些非共性特征，可以提高模型的泛化能力
4. 调整参数和超参数
不论什么情况，调参是必须的
5. 降低模型的复杂度
欠拟合要增加模型的复杂度，那么过拟合正好反过来
6. 使用Dropout
这一方法只适用于神经网络中，即按一定的比例去除隐藏层的神经单元，使神经网络的结构简单化
7. 提前结束训练
即early stopping，在模型迭代训练时候记录训练精度(或损失)和验证精度(或损失)，倘若模型训练的效果不再提高，比如训练误差一直在降低但是验证误差却不再降低甚至上升，这时候便可以结束模型训练了

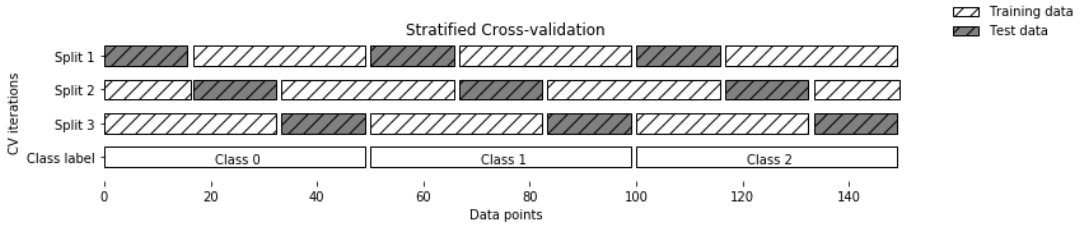
欠拟合：模型拟合能力不足，对于细节把握的还不够完善；在训练集、验证集和测试集上

均表现不佳。
解决欠拟合(高偏差)的方法：
1. 模型复杂化
对同一个算法复杂化。例如回归模型添加更多的高次项，增加决策树的深度，增加神经网络的隐藏层数和隐藏单元数等；弃用原来的算法，使用一个更加复杂的算法或模型，例如用神经网络来替代线性回归，用随机森林来代替决策树等
2. 增加更多的特征
特征挖掘十分重要，尤其是具有强表达能力的特征，往往可以抵过大量的弱表达能力的特征
特征的数量往往并非重点，质量才是，总之强特最重要，能否挖掘出强特，还在于对数据本身以及具体应用场景的深刻理解，往往依赖于经验
3. 调整参数和超参数
超参数包括：神经网络中的学习率、学习衰减率、隐藏层数、隐藏层的单元数、Adam优化算法中的β1β1和β2β2参数、batch_size数值等；其他算法中的随机森林的树数量，k-means中的cluster数，正则化参数λλ等
4. 增加训练数据往往没有用
欠拟合本来就是模型的学习能力不足，增加再多的数据给它训练它也没能力学习好
5. 降低正则化约束
正则化约束是为了防止模型过拟合，如果模型压根不存在过拟合而是欠拟合了，那么就考虑是否降低正则化参数λλ或者直接去除正则化项

交叉验证：交叉验证是一种评估泛化性能的统计学方法，它比单次划分训练集和测试集的方法更加稳定、全面。最常用的交叉验证是k折交叉验证，在此思想上改进的交叉验证方法还有分层交叉验证、打乱划分交叉验证、分组交叉验证、嵌套交叉验证。
1. k折交叉验证
将数据划分为大致相等的k折（部分），轮流将某一折作为测试集，其它折作为训练集来训练模型和评估精度。

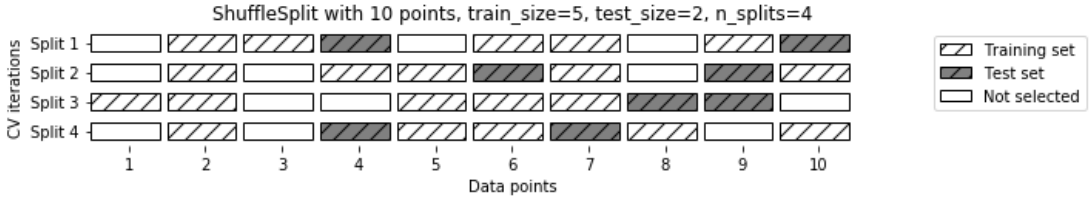


2. 分层交叉验证
分折时，使每个折中类别之间的比例与整个数据集中的比例相同。



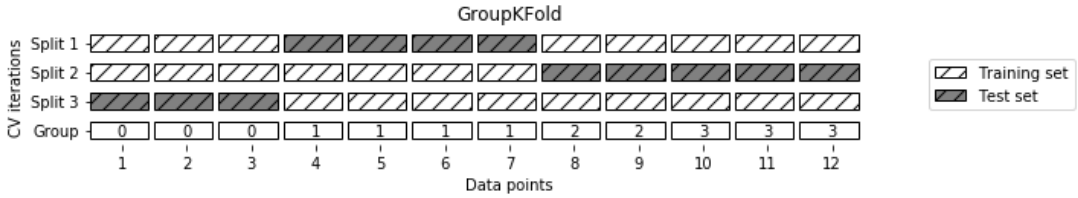
3. 打乱划分交叉验证

将数据打乱来代替分层。每次划分为训练集取样train_size个点，为测试集取样test_size个不相交的点，将这一划分方法重复n_iter次。每次划分的训练集和测试集不相交，但是不同次的划分可能重复选取部分数据作为测试集。



4. 分组交叉验证

对于每次划分，每个分组都是都是整体出现在训练集或测试集中。



5. 嵌套交叉验证

外层for循环将原始数据使用交叉验证进行多次划分，内层for循环在划分好的训练集中再使用交叉验证进行多次划分，主要用于网格搜索里面。

重要知识点：

①Scikit-Learn是利用model_selection模块中的cross_val_score函数来实现交叉验证的。

②总结交叉验证精度的一种常用方法是计算平均值。

③使用交叉验证可以消除偶然性得分，使得对模型的评估更具准确性。

④交叉验证的主要缺点是增加了计算成本。

⑤交叉验证不会返回一个模型，其目的是评估给定算法在特定数据集上训练后的泛化能力。

⑥打乱划分交叉验证中允许在每次迭代中仅使用部分数据。

单变量线性回归(LinearRegressionwithOneVariable)：监督学习回归问题；$h_\theta(x)=\theta_0+\theta_1 x$

只含有一个特征/输入变量，这样的问题叫作单变量线性回归问题。

代价函数（Cost Function）：

$$J(\theta_0,\theta_1)=\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)}\right)^2$$

代价函数也被称作平方误差函数，有时也被称为平方误差代价函数。还有其他的代价函数也能很好地发挥作用，但是平方误差代价函数可能是解决回归问题最常用的手段了。

Hypothesis:

$$h_\theta(x)=\theta_0+\theta_1 x$$

Parameters:

$$\theta_0,\theta_1$$

Cost Function:

$$J(\theta_0,\theta_1)=\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)}\right)^2$$

Goal: $\underset{\theta_0,\theta_1}{\text{minimize}}\ J(\theta_0,\theta_1)$

梯度下降：

开始时随机选择一个参数的组合($\theta_0, \theta_1, \ldots\ldots, \theta_n$)，计算代价函数，然后寻找下一个能让代价函数值下降最多的参数组合。持续这么做直到到到一个局部最小值(local minimum)，不确定是不是全局最小值(global minimum)，选择不同的初始参数组合，可能会找到不同的局部最小值。

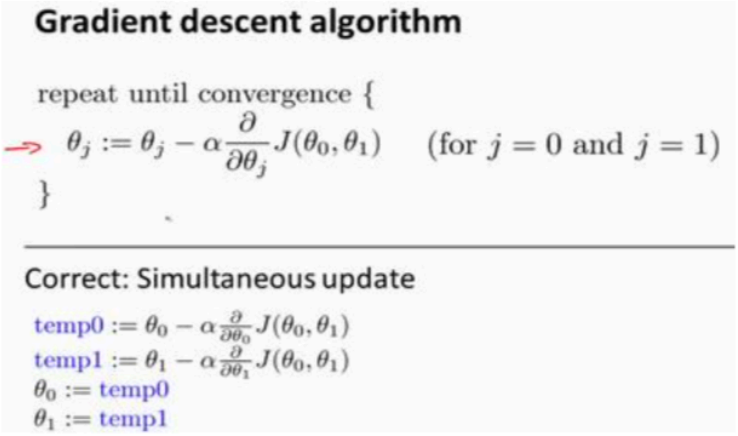
批量梯度下降（**batch gradient descent**）算法的公式为：

repeat until convergence {

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1) \quad (\text{for } j = 0 \text{ and } j = 1)$$

}

其中a是学习率（**learning rate**），它决定了我们沿着能让代价函数下降程度最大的方向向下迈出的步子有多大，在批量梯度下降中，我们每一次都同时让所有的参数减去学习速率乘以代价函数的导数。



在梯度下降算法中，还有一个更微妙的问题，梯度下降中，我们要更新θ_0和θ_1，当 $j = 0$ 和$j = 1$时，会产生更新，所以你将更新$J(\theta_0)$和$J(\theta_1)$。实现梯度下降算法的微妙之处是，在这个表达式中，如果你要更新这个等式，你需要同时更新θ_0和θ_1，我的意思是在这个等式中，我们要这样更新：

θ_0:= θ_0 ，并更新θ_1:= θ_1。

实现方法是：你应该计算公式右边的部分，通过那一部分计算出θ_0和θ_1的值，然后同时更新θ_0和θ_1。

多变量线性回归(LinearRegressionwithMultipleVariables)：

支持多变量的假设 h 表示为：$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_n x_n$，

这个公式中有$n + 1$个参数和n个变量，为了使得公式能够简化一些，引入$x_0 = 1$，则公式转化为：$h_\theta(x) = \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_n x_n$

此时模型中的参数是一个$n + 1$维的向量，任何一个训练实例也都是$n + 1$维的向量，特征矩阵X的维度是 $m * (n + 1)$。 因此公式可以简化为：$h_\theta(x) = \theta^T X$，其中上标T代表矩阵转置。

多变量梯度下降：

与单变量线性回归类似，在多变量线性回归中，我们也构建一个代价函数，则这个代价函数是所有建模误差的平方和，即：$J(\theta_0,\theta_1\ldots\theta_n)=\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$ ，

其中：$h_\theta(x)=\theta^T X=\theta_0+\theta_1x_1+\theta_2x_2+\ldots+\theta_nx_n$ ，

我们的目标和单变量线性回归问题中一样，是要找出使得代价函数最小的一系列参数。

多变量线性回归的批量梯度下降算法为：

Repeat {

$$\theta_j:=\theta_j-\alpha\frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta_0,\theta_1,\ldots,\theta_n)$$

}

即：

Repeat {

$$\theta_j:=\theta_j-\alpha\frac{\partial}{\partial\theta_j}\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)})^2$$

}

求导数后得到：

Repeat {

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

(simultaneously update θ_j for j=0,1,...,n)

}

当$n>=1$时，

$$\theta_0:=\theta_0-a\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)})\,x_0^{(i)}$$

$$\theta_1:=\theta_1-a\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)})\,x_1^{(i)}$$

$$\theta_2:=\theta_2-a\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)})\,x_2^{(i)}$$

代码示例：

计算代价函数 $J(\theta)=\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$ 其中：$h_\theta(x)=\theta^T X=\theta_0x_0+\theta_1x_1+\theta_2x_2+\ldots+\theta_nx_n$

Python 代码：

```
def computeCost(X, y, theta):
    inner = np.power(((X * theta.T) - y), 2)
    return np.sum(inner) / (2 * len(X))
```

特征缩放：在面对多维特征问题的时候，要保证这些特征都具有相近的尺度，这将帮助梯度下降算法更快地收敛。

学习率：梯度下降算法收敛所需要的迭代次数根据模型的不同而不同，我们不能提前预知，可以绘制迭代次数和代价函数的图表来观测算法在何时趋于收敛；梯度下降算法的每次迭代受到学习率的影响，如果学习率过小，则达到收敛所需的迭代次数会非常高；如果学习率过大，每次迭代可能不会减小代价函数，可能会越过局部最 小值导致无法收敛。

损失函数：

我们要做的是依据我们的训练集，选取最优的θ，在我们的训练集中让h(x)尽可能接近真实的值。h(x)和真实的值之间的差距，我们定义了一个函数来描述这个差距，这个函数称为损失函数，表达式如下：

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

这里的这个损失函数就是著名的**最小二乘损失函数**，这里还涉及一个概念叫**最小二乘法**，这里不再展开了。

目标函数：

线性回归的目标函数，一般使用均方误差：

$$J(w) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2 = \frac{1}{n}\|y - Xw\|^2$$

牛顿法：

求解无约束最优化问题的常用方法，有收敛速度快的优点，也属于迭代算法，每一步需要求解目标函数的海塞矩阵的逆矩阵；基本思想是利用迭代点处的一阶导数(梯度)和二阶导数(Hessen矩阵)对目标函数进行二次函数近似，然后把二次模型的极小点作为新的迭代点，并不断重复这一过程，直至求得满足精度的近似极小值。牛顿法的速度相当快，而且能高度逼近最优值。牛顿法分为基本的牛顿法和全局牛顿法。

拟牛顿法：

拟牛顿法是在牛顿法的基础上引入了Hessian矩阵的近似矩阵，避免每次迭代都计算Hessian矩阵的逆，它的收敛速度介于梯度下降法和牛顿法之间。拟牛顿法跟牛顿法一样，也是不能处理太大规模的数据，因为计算量和存储空间会开销很多。拟牛顿法虽然每次迭代不像牛顿法那样保证是最优化的方向，但是近似矩阵始终是正定的，因此算法始终是朝着最优化的方向在搜索。

线性回归的评估指标：

评价线性回归的指标有四种，均方误差（Mean Squared Error）、均方根误差（Root Mean Squared Error）、平均绝对值误差（Mean Absolute Error）以及R Squared方法。

1、均方误差 MSE

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_{test}^{(i)}-\hat{y}_{test}^{(i)})^2$$

MSE的值越小，说明预测模型描述实验数据具有更好的精确度

2、均方根误差 RMSE

$$\sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_{test}^{(i)}-\hat{y}_{test}^{(i)})^2}=\sqrt{MSE_{test}}$$

3、平均绝对值误差 MAE

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}|y_{test}^{(i)}-\hat{y}_{test}^{(i)}|$$

4、R平方 R2S

$$R^2=1-\frac{SS_{residual}}{SS_{total}}$$

(Residual Sum of Squares)

(Total Sum of Squares)

$$R^2=1-\frac{\sum_i(\hat{y}^{(i)}-y^{(i)})^2}{\sum_i(\bar{y}-y^{(i)})^2}$$

$$R^2=1-\frac{\sum_i(\hat{y}^{(i)}-y^{(i)})^2}{\sum_i(\bar{y}-y^{(i)})^2}$$

- R^2 <= 1
- R^2 越大越好。当我们的预测模型不犯任何错误是，R^2得到最大值1
- 当我们的模型等于基准模型时，R^2为0
- 如果R^2 < 0，说明我们学习到的模型还不如基准模型。此时，很有可能我们的数据不存在任何线性关系。

代码实现：

```
def mean_squared_error(y_true, y_predict):
```

```
    """计算y_true和y_predict之间的MSE"""
    assert len(y_true) == len(y_predict), \
        "the size of y_true must be equal to the size of y_predict"

    return np.sum((y_true - y_predict)**2) / len(y_true)


def root_mean_squared_error(y_true, y_predict):
    """计算y_true和y_predict之间的RMSE"""

    return sqrt(mean_squared_error(y_true, y_predict))


def mean_absolute_error(y_true, y_predict):
    """计算y_true和y_predict之间的RMSE"""
    assert len(y_true) == len(y_predict), \
        "the size of y_true must be equal to the size of y_predict"

    return np.sum(np.absolute(y_true - y_predict)) / len(y_true)


def r2_score(y_true, y_predict):
    """计算y_true和y_predict之间的R Square"""

    return 1 - mean_squared_error(y_true, y_predict)/np.var(y_true)
```

sklearn参数详解：

class sklearn.linear_model.LogisticRegression(penalty='l2', dual=False, tol=0.0001, C=1.0,fit_intercept=True, intercept_scaling=1, class_weight=None, random_state=None,solver='liblinear', max_iter=100, multi_class='ovr', verbose=0,warm_start=False, n_jobs=1)

penalty : str, 'l1'or 'l2', default: 'l2'

fit_intercept:布尔值，指定是否需要计算线性回归中的截距，即b值。如果为False,那么不计算b值。

normalize:布尔值。如果为False，那么训练样本会进行归一化处理；当为True的时候，则回归量X将在回归之前通过减去平均值并除以l2范数来归一

copy_X：布尔值。如果为True，会复制一份训练数据。

n_jobs:一个整数。任务并行时指定的CPU数量。如果取值为-1则使用所有可用的CPU。

coef_:权重向量

intercept_:截距b值

参考连接：https://blog.csdn.net/weixin_41712499/article/details/82526483