随机梯度下降算法

1.梯度下降算法的作用

随机梯度下降算法，是用于求解机器学习算法参数的方法。梯度下降算法具体是什么呢?

1）导数

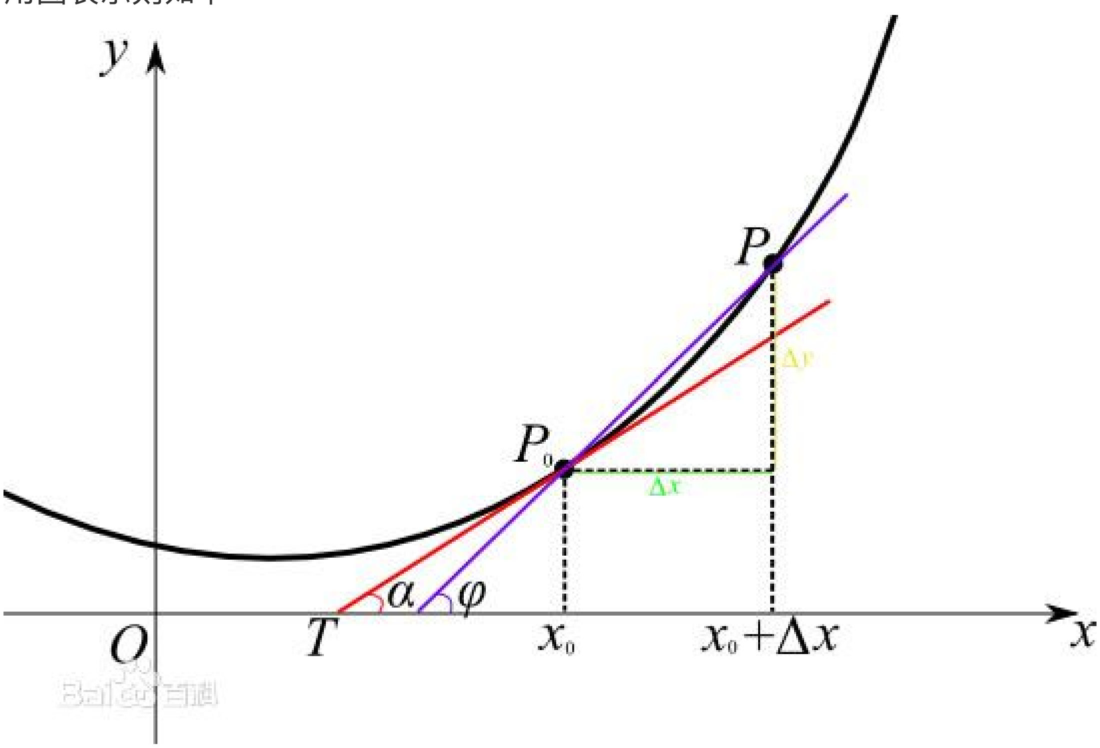
要求梯度，先说导数。知道导数的定义如下：

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

$=\frac{\partial(y)}{\partial(x)}$

反映的是函数y=f(x)在某一点处沿x轴正方向的变化率。再强调一遍，是函数f(x)在x轴上某一点处沿着x轴正方向的变化率/变化趋势。直观地看，也就是在x轴上某一点处，如果f’(x)>0，说明f(x)的函数值在x点沿x轴正方向是趋于增加的；如果f’(x)<0，说明f(x)的函数值在x点沿x轴正方向是趋于减少的。

用图表示则如下：



上图中的Δy、dy等符号的意义及关系如下：

Δx:x的变化量；

dx:x的变化量Δx趋于0时，记作微元dx；

Δy:Δy=f(x0+Δx)-f(x0)，是函数的增量；

dy:dy=f’(x0)dx，是切线的增量；

当Δx→0时，dy与Δy都是无穷小，dy是Δy的主部，即Δy=dy+o(Δx).

2）偏导数

上述导数的定义是针对单变量的，对于多变量的函数，如：$f(x,y,z,w)=x^2+y^2+z^2+w^2$,对某个变量求导，则得到该变量的偏导数。如：

$\frac{d(f)}{d(x)}=2x$,即为函数在变量x上的求导得到的导数。

偏导数的定义如下：

$$\frac{\partial}{\partial x_j}f(x_0,x_1,\ldots,x_n)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0,\ldots,x_j+\Delta x,\ldots,x_n)-f(x_0,\ldots,x_j,\ldots,x_n)}{\Delta x}$$

可以看到，导数与偏导数本质是一致的，都是当自变量的变化量趋于0时，函数值的变化量与自变量变化量比值的极限。直观地说，偏导数也就是函数在某一点上沿坐标轴正方向的的变化率。 区别在于：导数，指的是一元函数中，函数$y=f(x)$在某一点处沿x轴正方向的变化率； 偏导数，指的是多元函数中，函数$y=f(x_1,x_2,...,x_n)$在某一点处沿某一坐标轴$(x_1,x_2,...,x_n)$正方向的变化率

3)方向导数

方向导数的定义如下：

$$\frac{\partial}{\partial l}f(x_0,x_1,\ldots,x_n)=\lim_{\rho\to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x}=\lim_{\rho\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x_0,\ldots,x_j+\Delta x_j,\ldots,x_n+\Delta x_n)-f(x_0,\ldots,x_j,\ldots,x_n)}{\rho}$$

$$\rho=\sqrt{(\Delta x_0)^2+\cdots+(\Delta x_j)^2+\cdots+(\Delta x_n)^2}$$

方向导数就是函数在特定方向上的变化率。

4)梯度

梯度的定义如下：

$$gradf(x_0,x_1,\ldots,x_n)=\left(\frac{\partial f}{\partial x_0},\ldots,\frac{\partial f}{\partial x_j},\ldots,\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)$$

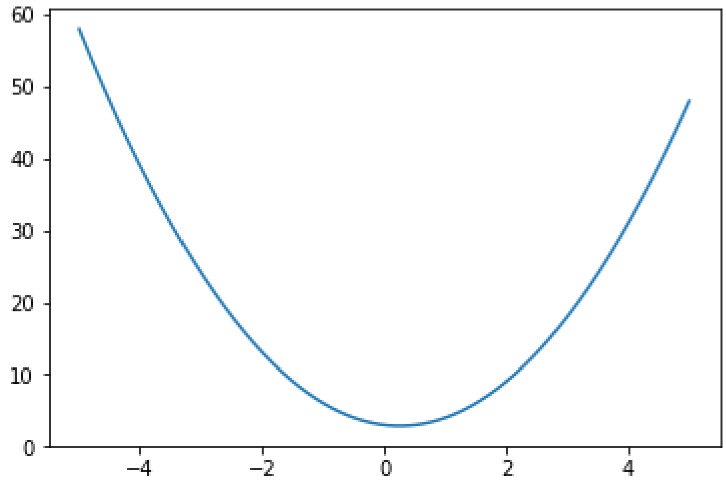
可见，梯度是一个向量，由各个分量上的导数所组成。梯度的方向就是最大方向导数的方向，梯度的模就是最大方向导数的值。

2.梯度下降算法

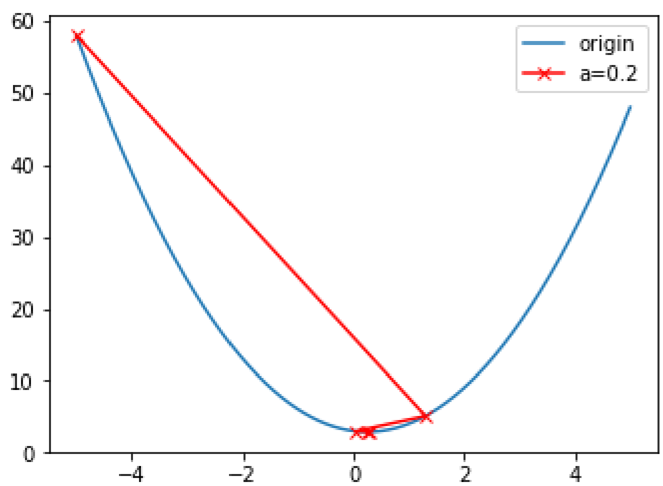
梯度下降算法是机器学习领域最常用的优化算法。通常机器学习的任务是：已知数据集$D=\{X_1,X_2,X_3,...,X_n\}$,其中$X_i\in R^m$是m维实数向量。然后在特定任务下，有一个目标函数，求目标函数的最佳参数，能够使得目标函数最优，一般来说是使损失函数最小。

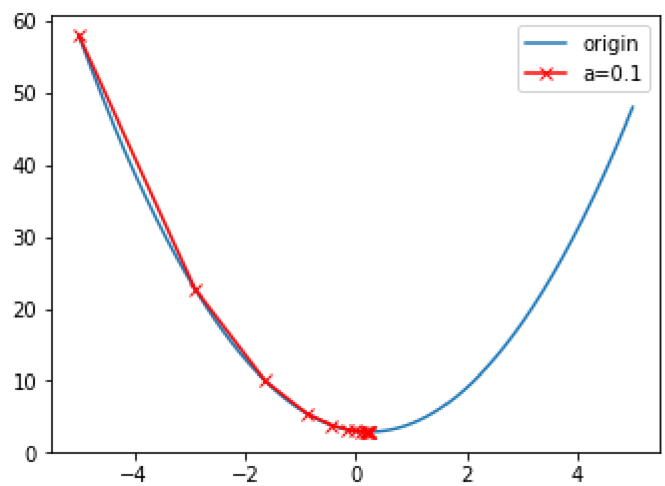
1）一维梯度下降算法示例

设当前有一个函数：$J(\theta)=2\theta^2-\theta+2$，其函数图像如下：



我们进行如下操作：
(a)计算$J(\theta)' = 4\theta - 1$
(b)令 $\alpha = 0.2$,初始$\theta = 2$,,然后不断重复$\theta := \theta - \alpha * J(\theta)'$,直到$|J(\theta)| <= 0.01$
我们可以得到下图：





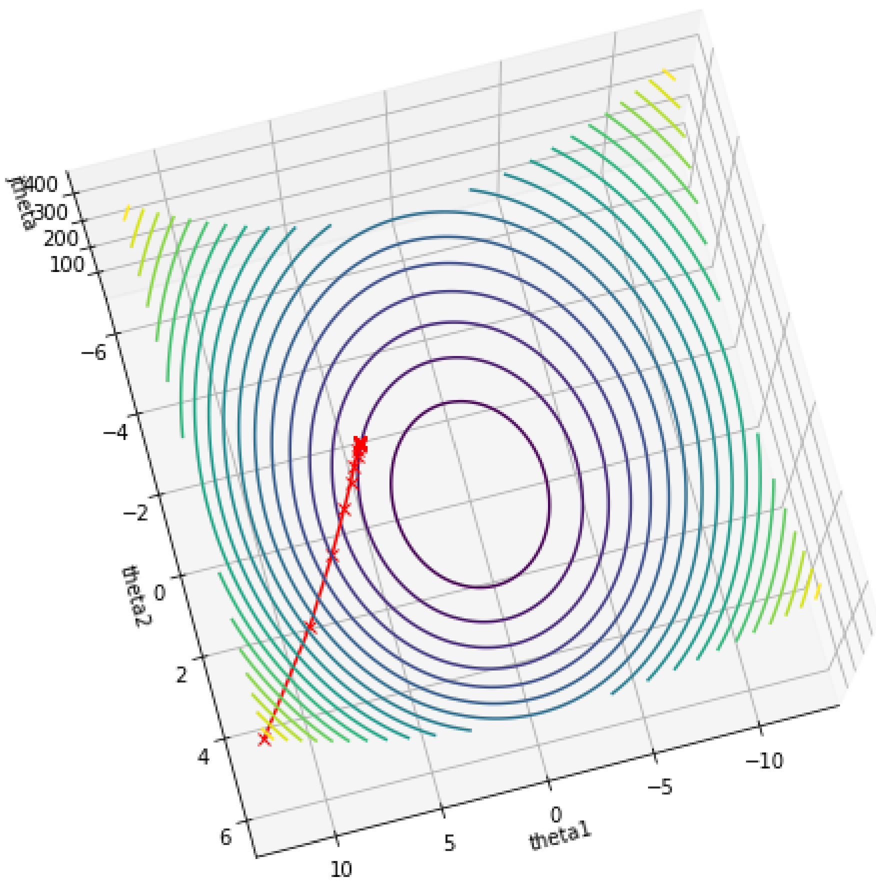
可见在左边图中，几个红色点的值在不断的减小，但是它是跳跃的，先左边，再到右边，最终到达底部，右边的图则是在单调往下。
同时我们可以看到，不同的α下，下降的幅度不一样。α大的时候下降快，小的时候下降慢。但是下降过快的时候，容易陷入震荡，一会儿跳到左边，一会儿在曲线右边，但是下降趋势不变。因此在很多算法里面，会将这个参数设置成可变，一开始下降快，然后变慢。α也被称作步长。

2）二维梯度下降算法示例

假设损失函数为$J(\theta) = 2\theta_1^2 + 5\theta_2^2$,求此式子下，使$J(\theta)$的参数$\theta_1, \theta_2$

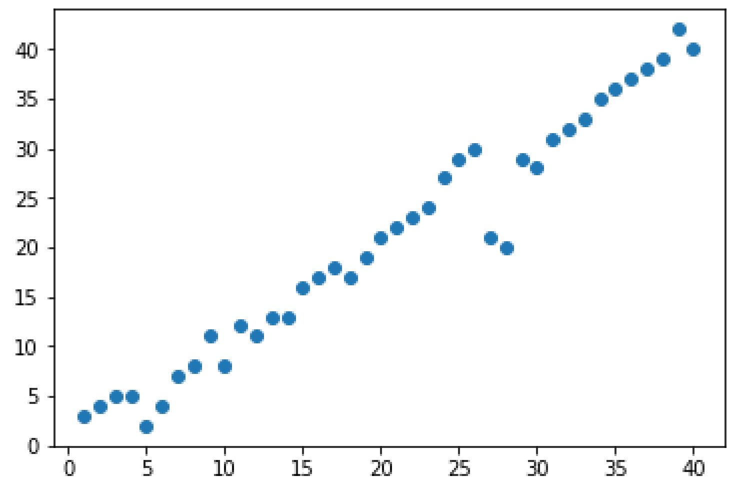
那么我们进行如下操作：
(a)计算函数的梯度：$\Delta J(\theta) = (4\theta_1, 10\theta_2)$,是一个向量
(b)进行梯度下降，$(\theta_1, \theta_2) = (\theta_1, \theta_2) - \alpha * \Delta J(\theta)$ 直到梯度中的每个值都小于0.01，输出最终终止时候的(θ_1, θ_2)

计算之后，可以得到效果图如下：



可见函数取值一直在往底部走，越来越接近最低点。

3）梯度下降算法实战
在实现了一维和二维梯度下降算法之后，我们下面进入到真实的梯度下降算法实践。以线性回归算法为例，假设我们有一系列下面的数据点
Y =[3, 4, 5, 5, 2, 4, 7, 8, 11, 8,
12,11, 13, 13, 16, 17, 18, 17,19, 21,
22,23,24,27,29,30,21,20,29,28,
31,32,33,35,36,37,38,39,42,40]
如下图所示:



想找到一个线性函数$h_\theta(x^i) = \theta_0 * x_0^i + \theta_1 * x_1^i$,使得$h_\theta(x)$能够尽可能准确的拟合该条曲线，因此我们有平方误差函数如下:

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

其中$(h_\theta(x^i)$是预测值，y^i是真实值，我们的目标是得到参数(θ_0, θ_2),使得$J(\theta)$能够最小。跟上面两个例子一样，先计算梯度，然后进行梯度下降。

计算梯度如下：

$\frac{\partial(J(\theta))}{\theta_0} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\theta_0 * x_0^i + \theta_1 * x_1^i - y^i)$

$\frac{\partial(J(\theta))}{\theta_1} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\theta_0 * x_0^i + \theta_1 * x_1^i - y^i) * x_1^i$

也是一个向量。这里不一样的是，有很多个x，所以是求和之后的平均。故而$J(\theta)$的梯度为：

$grad(J(\theta)) = [\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\theta_0 * x_0^i + \theta_1 * x_1^i - y^i), \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(\theta_0 * x_0^i + \theta_1 * x_1^i - y^i) * x_1^i]$

然后我们可以编写代码，计算一下在$\alpha = 0.1$的时候，最优化的参数θ_0, θ_1分别是多少。

我们知道，对于二维坐标里的直线来说，$h_\theta(x^i)$的x_0是1，即为常数，x_1才是自变量，一般都是$y = ax + b$的形式，这里我们写的是一般形式的。但是这样写比较繁琐，所以我们以矩阵的形式来计算。

于是有

$$J(\theta) = \frac{1}{2m}(X\theta - Y)^T * (X\theta - Y)$$

$$\frac{\partial(J(\theta)}{\theta} = \frac{1}{2m}X^T(X\theta - Y) + \frac{1}{2m}(X\theta - Y)^T X$$

由于矩阵运算满足：

$$(XY)^T = Y^T X^T$$

，因此对上式第二部分进行转换，则得到:

$$\frac{1}{2m}(X\theta - Y)^T X = \frac{1}{2m} X^T (X\theta - Y)$$

所以我们推得：

$$\frac{\partial(J(\theta)}{\theta} = \frac{1}{m} X^T (X\theta - Y)$$

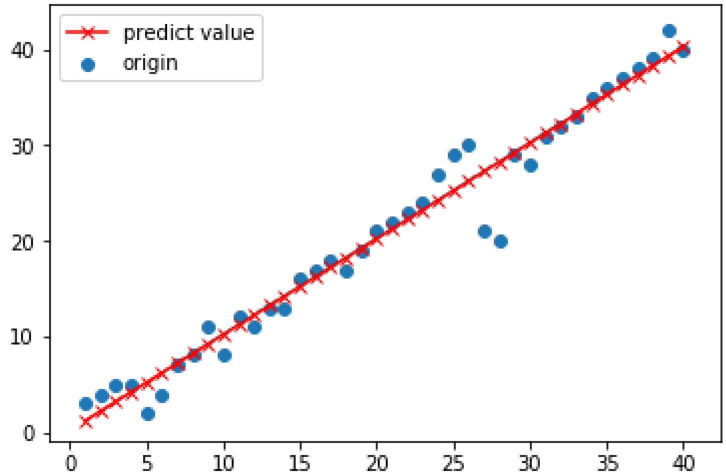
于是我们得到梯度更新的公式，即为:

$$\theta := \theta - \alpha * \frac{\partial(J(\theta))}{\theta} = \alpha * \frac{1}{m} X^T (X\theta - Y)$$

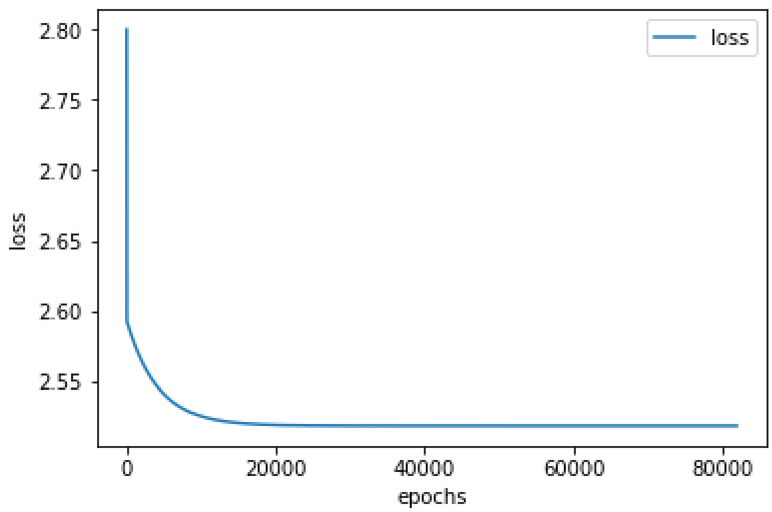
下面我们将此算法转换成代码如下：

```
#梯度下降算法
def gradient_descent(x,y,alpha,threshold):
    theta=np.array([1,1]).reshape(2,1)
    gradient=gradient_func(x,y,theta)
    while not np.all(np.absolute(gradient) <= threshold):
        theta=theta-alpha*gradient
        gradient=gradient_func(x,y,theta)
    return theta

#计算梯度的函数
def gradient_func(x,y,theta):
    diff=np.dot(x,theta)-y
    grad=(1.0/(x.shape[0]))*np.dot(np.transpose(x),diff)
    return grad

#计算损失的函数
def errors_func(x,y,theta):
    diff=np.dot(x,theta)-y
    error=(1.0/(2*x.shape[0]))*np.dot(np.transpose(diff),diff)
    return error
```

最后得到最佳参数为:
$[\theta_0, \theta_1]$ =[0.21158005336805769 1.001874631500372]
损失函数的值为:
$J(\theta)$ =2.518515478632242
可见损失函数很小。最后的拟合函数$h_\theta(x) = \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1$,拟合的结果如下图所示:



可见拟合的很好。损失函数的变化也如下图所示:



损失函数也一直是在往下降。
具体代码示例看 *线性回归梯度下降参数求解*。最重要的是将函数式转换成代码。上述算法也叫批量梯度下降算法(BGD)。每次计算梯度下降的时候，用的都是全量的样本数据。

那么我们可以思考一个问题：如果数据量极大，超出了计算机的内存限制，每次都无法装下所有的样本数据，应该去如何计算?

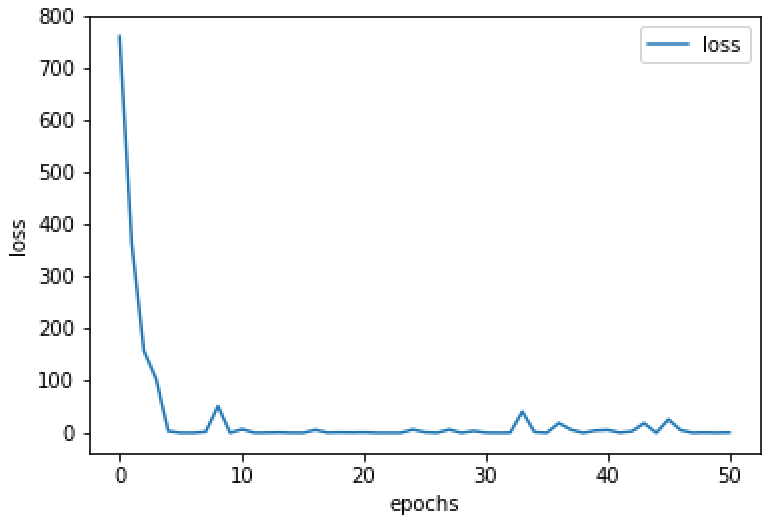
4.随机梯度下降算法和小批量梯度下降算法
小批量梯度下降算法和随机梯度下降算法就是为了解决上述的问题。
1）随机梯度下降算法(SGD)
随机梯度下降算法，则是每次随机的选择一个样本数据来计算梯度。随机梯度下降算法的损失函数为:

$$J(\theta) = \frac{1}{2}(h_\theta(x_i) - y_i)^2$$

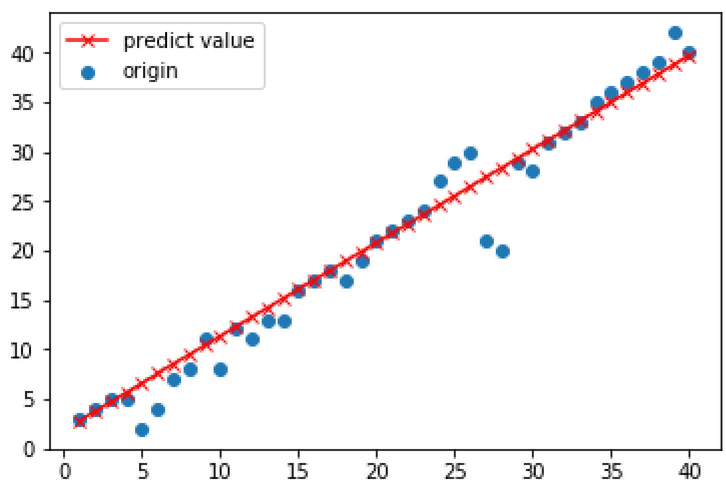
其中i为随机选择的样本编号，因此梯度更新的方式为:

$$\theta := \theta - \alpha * (x_i * \theta - y_i) * x_i$$

对于上面的数据，其损失函数变化如下:



拟合的结果为:



实现代码如下:

```python
#随机梯度下降算法
def gradient_descent(x,y,alpha,threshold,maxIter):
    cnt=0
    loss={}
    #初始化theta,[theta0,theta1]=[2,3]
    theta=np.array([2,3]).reshape(2,1)
    #计算梯度
    gradient,sample=gradient_func(x,y,theta)
    #计算误差
    error=errors_func(x,y,theta,sample)
    loss[cnt]=error
    while not np.all(np.absolute(gradient) <= threshold) and cnt<maxIter:
        cnt=cnt+1
        #利用梯度更新参数，参数是求解最优模型的目标
        theta=theta-alpha*gradient
        #计算梯度
        gradient,sample=gradient_func(x,y,theta)
        #计算误差
        error=errors_func(x,y,theta,sample)
        loss[cnt]=error
    print('迭代到第{}次，结束迭代！'.format(cnt))
    #画出loss函数
    lossdf=pd.DataFrame.from_dict(loss,orient='index')
    plt.plot(lossdf)
    plt.xlabel('epochs')
    plt.ylabel('loss')
    plt.legend(labels=['loss'])
    plt.show()
    return theta

#计算梯度的函数
def gradient_func(x,y,theta):
    #随机选取一个样本,sample是随机选取样本在数组中的索引
    sample=random.randrange(0,x.shape[0],1)
    #计算预测值和真实值的误差
    diff=np.dot(x[sample],theta)-y[sample]
    #计算梯度
    grad=(x[sample]*diff[0]).reshape(theta.shape[0],theta.shape[1])
    return grad,sample

#计算误差的函数
def errors_func(x,y,theta,sample):
    #预测值减真实值，得到误差
    diff=np.dot(x[sample],theta)-y[sample]
    #误差的平方和
    error=0.5*np.dot(np.transpose(diff),diff)
    #返回误差
    return error
```

2） 小批量梯度下降算法(MBGD)
小批量梯度下降算法(MBGD),是每次只从所有的X集合中，选择一小部分的样本数据来计算梯度。在数据量很大的情况下，小批量梯度下降算法就能够比较快的算出梯度。
其损失函数为:

$$J(\theta)=\frac{1}{2L}\sum_{i=t}^{t+L-1}(\theta_0*x_0^i+\theta_1*x_1^i-y^i)^2$$

其梯度更新方式为:

$$\theta:=\theta-\alpha*\frac{1}{L}\sum_{i=t}^{t+L-1}(x_t\theta-y_t)x_t$$

3)SGD、MBGD、和BGD算法的优缺点
BGD算法：优点是精度最高，因为每次使用的是全量数据；缺点是在数据量很大的情况下，计算开销很大

MBGD算法:优点是速度较BGD快一些,计算开销较小，且可以调整量级，会比较灵活;缺点是牺牲了部分精度

SGD:优点是速度最快，计算开销最小；缺点是下降速度较慢，可能在最优点附近震荡，接近最优点但是无法到达最优点