梯度下降算法

前言

机器学习的主要任务之一就是通过训练得到一组参数，然后通过损失函数(loss function)来评价这组参数的好坏，因此机器学习的任务就转变成了如何最小化损失函数，而梯度下降(Gradient descent)是最小化损失函数的一种常用方法.

基本概念

- 特征向量(feature vector)：指的是具体的输入实例的向量写法，通常记作：

  $$x = (x^{(1)}, x^{(2)} \ldots, x^{(n)})^T$$

  注意，$x^{(i)}$与x_i不同，$x^{(i)}$表示x的第i个特征，x_i表示多个输入变量的第i个.

- 假设函数(hypothesis function)：在监督学习中，为了拟合输入样本，而使用的假设函数，记作：

  $$h(x) = h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_n x_n$$

  在这里，x是已知的输入实例，θ是我们需要求出的参数.

- 梯度(gradient)：在微积分里面，对多元函数的参数求偏导数，把求得的各个参数的偏导数以向量的形式写出来，就是梯度，通常记作：

  $$\Delta(\theta) = \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} \\ \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_n} \end{bmatrix}$$

- 步长(learning rate)：步长决定了在梯度下降迭代的过程中，每一步沿梯度负方向前进的长度.

- 损失函数(loss function)：为了评估模型拟合的好坏，通常用损失函数来度量拟合的程度，损失函数极小化，意味着拟合程度最好，对应的模型参数即为最优参数，在线性回归中，损失函数通常为样本输出和假设函数的差取平方。比如对于m个样本$(x_i, y_i)(i = 1, 2, \ldots m)$，采用线性回归，损失函数为：

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

其中$x^{(i)}$表示第i个样本特征，$y^{(0)}$表示第i个样本对应的输出，$h_\theta(x)$为假设函数。

梯度下降的详细算法

- 确认模型的假设函数和损失函数：
    - 假设函数为$h_\theta(x)=\theta_0+\theta_1x_1+\theta_2x_2+...+\theta_nx_n$， 设$x_0=1$，则:

$$h_\theta(x)=\theta_0x_0+\theta_1x_1+\theta_2x_2+...+\theta_nx_n=\sum_{i=1}^{n}\theta_ix_i$$

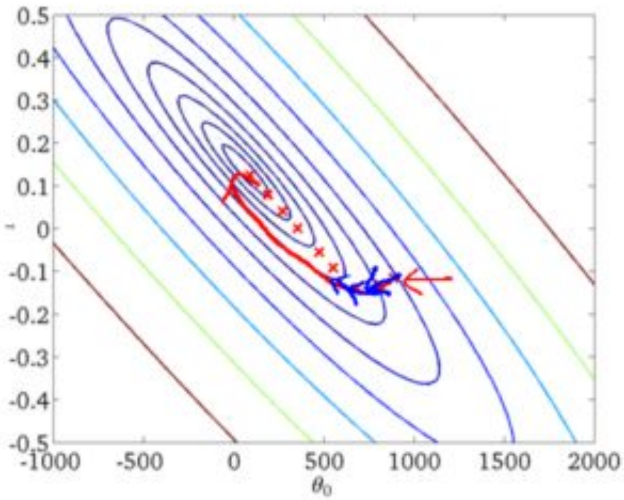
    - 损失函数为

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

- 参数初始化
    - 随机初始化一组θ_0，θ_1，...，θ_n.
    - 初始化ε，作为梯度下降的终止条件.
    - 初始化η作为步长
- 梯度下降
    - 算出在当前参数下的梯度$\Delta(\theta)=\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta}=\begin{bmatrix}\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta_0}\\ \vdots\\ \frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta_n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_{\theta_0}(x^{(i)})-y^{(i)})x_0^i\\ \vdots\\ \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_{\theta_n}(x^{(i)})-y^{(i)})x_n^i\end{bmatrix}$
    - 用梯度乘以步长η，检查是否所有的梯度都小于ε，如果都小于ε，终止下降，否则的话更新所有的θ：$\theta=\theta-\eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta}=\begin{bmatrix}\theta_0-\eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta_0}\\ \vdots\\ \theta_n-\eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta_n}\end{bmatrix}$
    - 重复上面两步

梯度下降的不同形式

- 批量梯度下降(batch gradient descent)
    - 上面的详细算法描述的就是批量梯度下降算法，其特点是每一次更新参数时都会考虑所有的输入实例，这样得到的梯度比较平滑且方向大致相同，缺点是运算量很大，下降过程大致如图



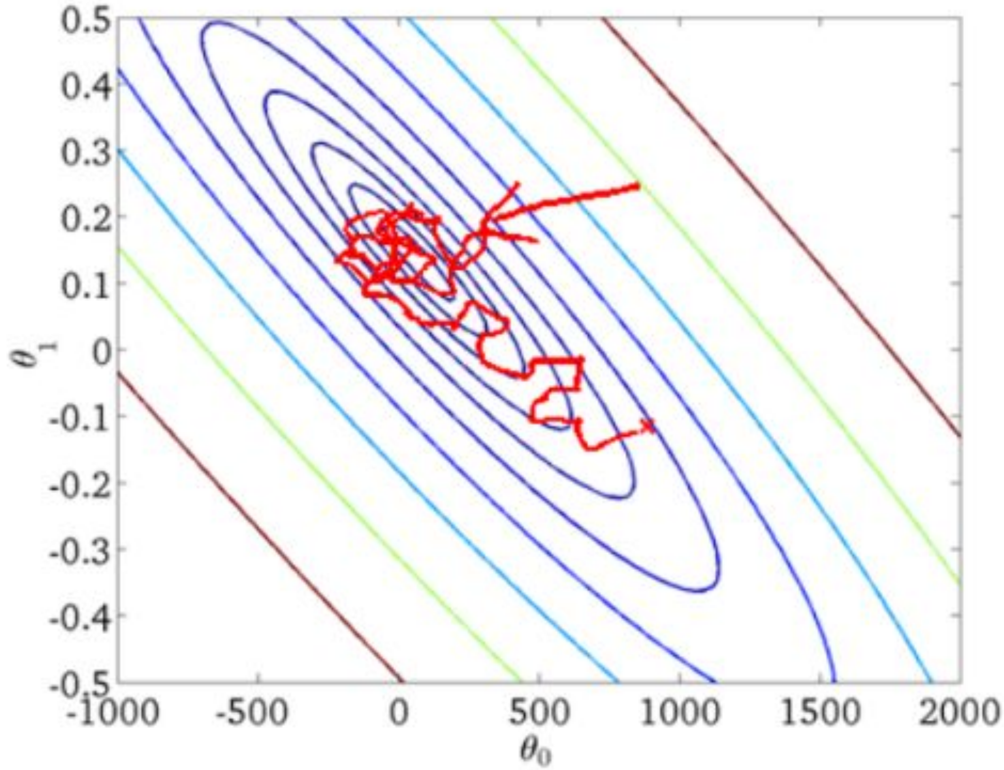
- 随机梯度下降(stochastic gradient descent)
  - 随机梯度下降算法是一个一个实例计算梯度，每计算一次更新一次参数，它的损失函数为：

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

    梯度为：

    $$\Delta(\theta) = \begin{bmatrix} (h_{\theta_0}(x^{(i)}) - y^{(i)})x_0^i \\ \vdots \\ (h_{\theta_n}(x^{(i)}) - y^{(i)})x_n^i \end{bmatrix}$$

    下降过程大致如图



- 小批量梯度下降(mini-batch gradient descent)