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：

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

  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： $$h(x)= h_{\theta}(x) = {\theta}*{0} + {|theta}*{1}x_1 + {\theta}_{2}x_2 + ...+\theta_nx_n$$在这里，x是已知的输入实例，(\theta)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,...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}*{1}x_1 + {\theta}*{2}x_2 + ...+|theta_nx_n)，设(x_0 = 1)，则: $$h*{\theta}(x) = {\theta}*{0}x_0 + {|theta}*{1}x_1 + {\theta}*{2}x_2 + ...+|theta_nx_n = |sum*{i=1}^{n}\theta_ix_i$$
  - 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(\theta_0，\theta_1，...，\theta_n).

- 初始化(\varepsilon)，作为梯度下降的终止条件.
- 初始化(\eta)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(\eta)，检查是否所有的梯度都小于(\varepsilon)，如果都小于(\varepsilon)，终止下降，否则的话更新所有的(\theta) :(\theta = \theta - \eta \frac{\partial J{(\theta)}}{\partial \theta} =

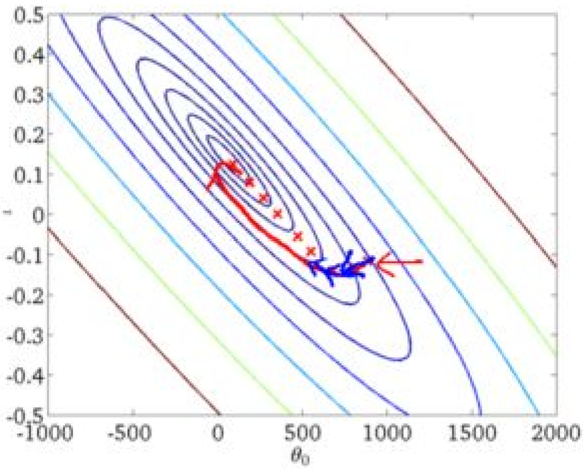
$$\begin{bmatrix} \theta_0 - \eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_0} \\ \vdots \\ \theta_n - \eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_n} \end{bmatrix}$$

)

    - 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



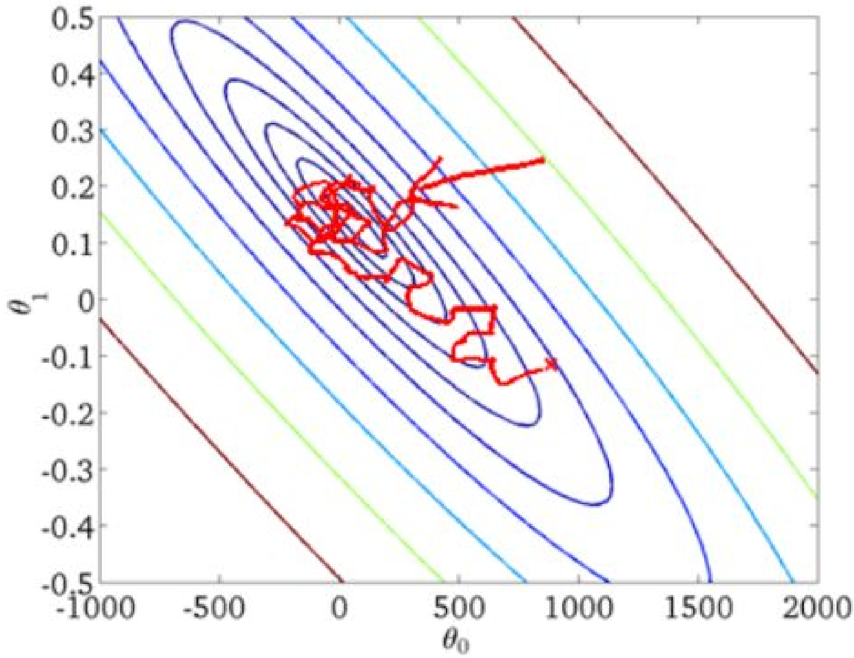
- 随机梯度下降(stochastic gradient descent)
    - 随机梯度下降算法是一个一个实例计算梯度，每计算一次更新一次参数，它的损失函数为：

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

      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)