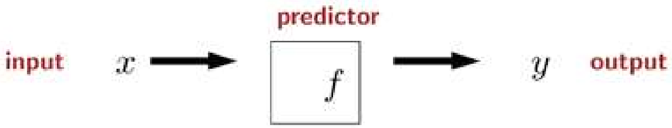
lecture 2 机器学习基础 I：线性模型

预测任务概述

predictor f 接受一个输入 x 同时输出一个预测结果 y

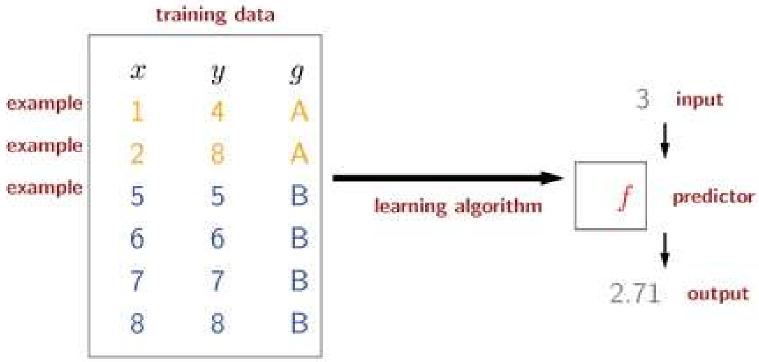
- 分类任务：y通常是类别标签，离散的
- 回归任务：y通常是一个实数$\mathbb{R}$
- 结构化预测：y是一个复杂的对象

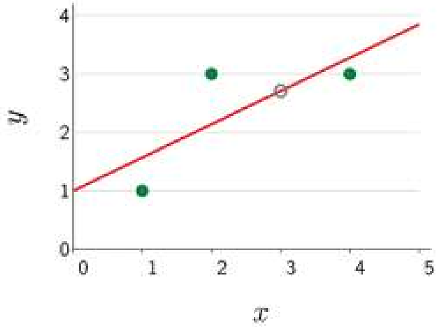
线性分类/线性回归模型



是一种Reflex模型

线性回归模型的框架

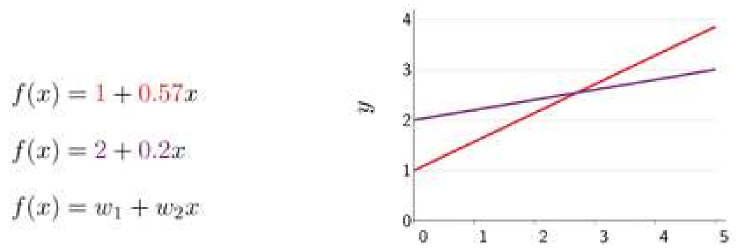




机器学习三要素：

1. **假设空间**(hypothesis class)：模型f所处的集合
2. **损失函数**(loss function)：评价假设空间中具体某一个模型的优劣
3. **优化方法**(optimization method)：基于损失函数的引导，在假设空间中寻找最优的模型

假设空间



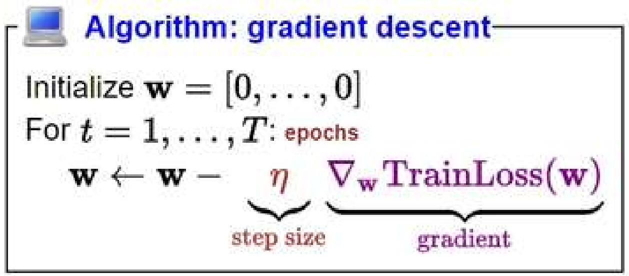
向量表示：**权重向量**：$\vec{w} = [w_1, w_2]$ **特征向量**：$\phi(x) = [1, x]$
$f_w(x) = w \cdot \phi(x)$
假设空间：$F = f_w : w \in \mathbb{R}^2$

损失函数

损失函数用于评价每个预测器的优劣：对于一个样本(x, y)而言，预测的输出$f_w(x)$和真实输出y之间的差距被称作残差。一般而言，残差越小预测越准
残差：$Loss(x, y, w)$
训练损失(训练错误、经验风险):$TrainLoss(w) = \frac{\Sigma_{(x,y)\in D_{train}} Loss(x,y,w)}{|D_{train}|}$
常用的损失函数：**平方损失函数**(Squared loss)$Loss(x, y, w) = (f_w(x) - y)^2$

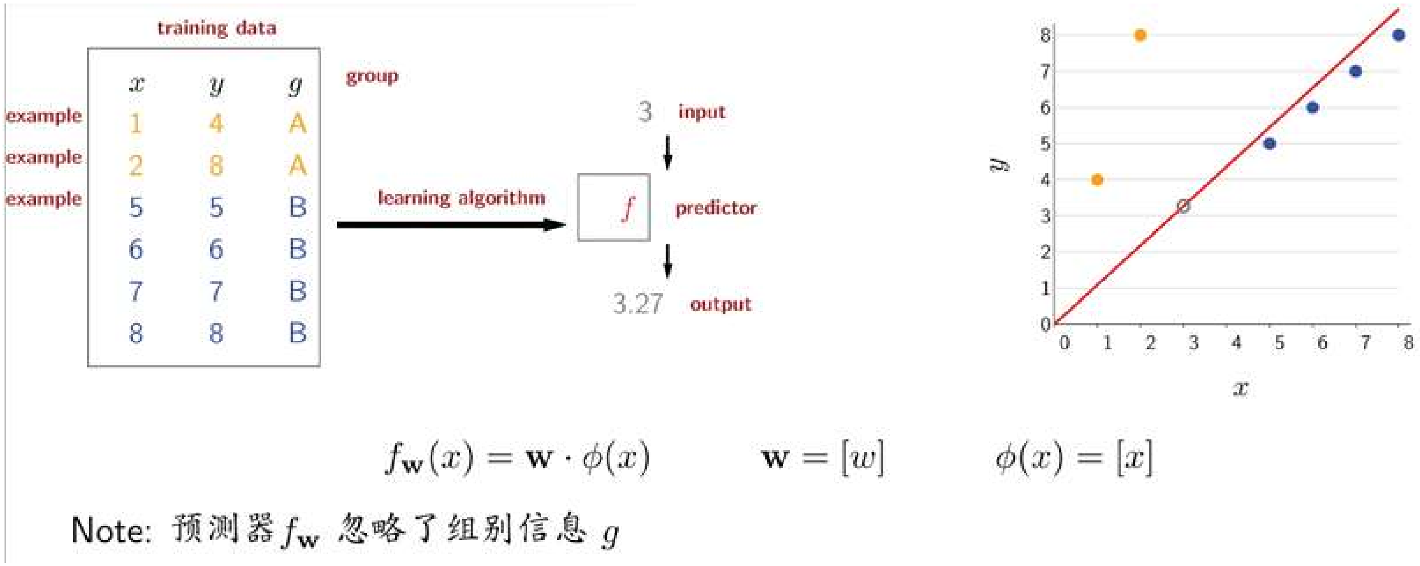
优化算法

Goal：$\min_w TrainLoss(w)$
梯度：$\nabla_w TrainLoss(w)$是训练损失增加最快的方向
优化算法：梯度下降(gradient descent)
梯度下降是一种迭代式优化，我们从某一个随机的权重参数开始，然后每次都对他进行调整使得损失变小，这样我们就可以逐步的得到一个较好的预测器

- 

其中，η称为**学习率**(learning rate),T称为**回合数**(epoch)

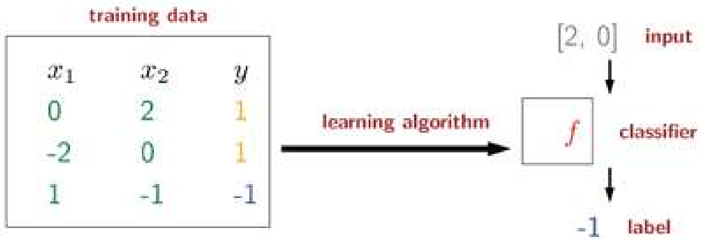
分组线性回归模型

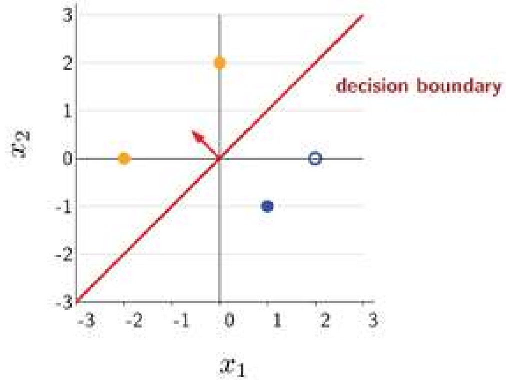


对于这种训练数据中出现明显分组现象的情况，一个简单的线性回归预测器很难同时兼顾不同组之间的数据。一个非常重要的问题是如何在不同组之间折衷权衡

- **平均损失**:$TrainLoss(w)$训练数据的所有样本上的平均
- **分组损失**：$TrainLoss_g(w) = \frac{\Sigma_{(x,y)\in D_{train}(g)} Loss(x,y,w)}{|D_{train}(g)|}$每个组中的样本上的平均
- **最大组损失**：$TrainLoss_{\max}(w) = \max_g TrainLoss_g(w)$所有组之间的最大分组损失

线性分类模型



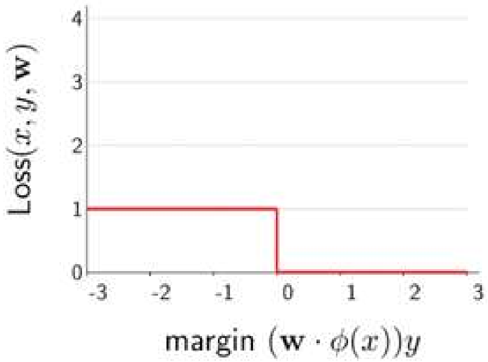


假设空间：$F = f_w : w \in \mathbb{R}^2$,其中,$f_w = \text{sign}(w \cdot \phi(x))$
损失函数：适用于分类的损失函数

- 0-1损失：$Loss_{0-1}(x, y, w) = 1[f_w(x) \neq y]$
  - 分数(score)：$w \cdot \phi(x)$体现了分类器将x分类正类（+1）的置信度
  - 间隔(margin)：$(w \cdot \phi(x))y$ 这个值反映了预测的正确性，间隔越大，预测就越正确；如果间隔是非正的(≤0)，那么说明分错了

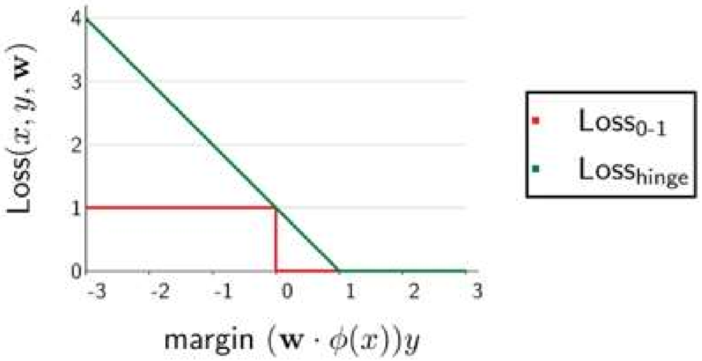
Definition: zero-one loss

$$\text{Loss}_{0\text{-}1}(x, y, \mathbf{w}) = \mathbf{1}[f_{\mathbf{w}}(x) \neq y]$$
$$= \mathbf{1}[\underbrace{(\mathbf{w} \cdot \phi(x))y}_{\text{margin}} \leq 0]$$



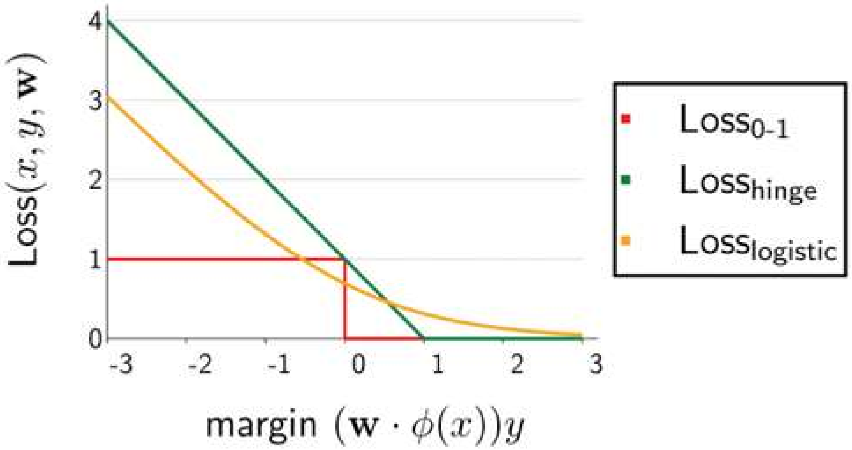
  这时我们会遇到问题：0-1损失函数在几乎所有地方都是平的（除了在间隔等于0的地方），因此几乎所有地方的梯度都是零，在具有零梯度的函数上运行梯度下降，会无法收敛（无法更新参数）

- Hinge损失(铰链损失)



- $Loss_{hinge}(x,y,w) = \max{1-(w\cdot\phi(x))y, 0}$
- Hinge损失的梯度:$\nabla Loss_{hinge}(x,y,w) = \begin{cases} -\phi(x)y,\ if\ 1-(w\cdot\phi(x))y>0 \\ 0,\ \text{otherwise} \end{cases}$

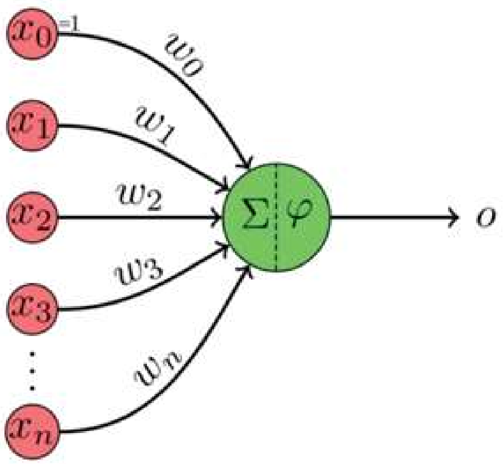
- 逻辑损失(logistic loss)
  对应的方法叫逻辑回归(logistic regression),逻辑回归虽然叫"回归"，但是却是用来做分类任务的
  - ParseError: KaTeX parse error: Undefined control sequence: \logistic at position 7: Loss_{\logistic}(x,y,w)=\log(1…



*激活函数：sigmoid函数$sigmoid(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$

感知机(perception)

模拟生物神经元行为的机器，有与生物神经元相对应的部件，如权重(突触)、偏置(阈值)、激活函数(细胞体)，输出为+1或-1



$$f_{\mathbf{w}}(x) = \begin{cases} +1 & \text{if } \mathbf{w}x \geq 0 \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

学习算法：错误驱动的在线学习算法

- 先初始化一个权重向量(通常是全0向量)
- 每次分错一个样本时，即$ywx < 0$，用这个样本来更新权重，$w \leftarrow w + yx$
- 根据感知机的学习策略，可以反推出感知器的损失函数为$\max(0, -ywx)$

算法 3.1　两类感知器的参数学习算法

输入: 训练集 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}^{(n)}, y^{(n)})\}_{n=1}^{N}$，最大迭代次数 T

```
初始化: w_0 ← 0, k ← 0, t ← 0;
repeat
    对训练集 D 中的样本随机排序;
    for n = 1 ··· N do
        选取一个样本 (x^(n), y^(n));
        if w_k^T (y^(n) x^(n)) ≤ 0 then        表示分错
            w_{k+1} ← w_k + y^(n) x^(n);
            k ← k + 1;
        end
        t ← t + 1;
        if t = T then break;                    // 达到最大迭代次数
    end
until t = T;
```

输出: w_k

梯度下降的变形

- 原始的梯度下降计算非常慢，迭代的每一步都需要遍历整个训练集来计算训练损失

Algorithm: gradient descent

Initialize $\mathbf{w} = [0, \ldots, 0]$
For $t = 1, \ldots, T$:
  $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \nabla_{\mathbf{w}} \text{TrainLoss}(\mathbf{w})$

- 随机梯度下降

Algorithm: stochastic gradient descent

Initialize $\mathbf{w} = [0, \ldots, 0]$
For $t = 1, \ldots, T$:
  For $(x, y) \in \mathcal{D}_{\text{train}}$:
    $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \nabla_{\mathbf{w}} \text{Loss}(x, y, \mathbf{w})$

  随机梯度下降每一次更新只计算一个样本对应的梯度。这样好处是：每一次更新所需要的时间就会大幅缩短，缺点是：仅依赖一个样本确定的更新方向可能不太靠谱
- mini-batch梯度下降(批量随机梯度下降)
  每一步更新时需要计算 个样本上的梯度，并进行更新，这 个样本称作一个批次（batch）， 被称为批量大小（batch size）这是一个常用的重要超参数

步长/学习率

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \underbrace{\eta}_{\text{step size}} \nabla_{\mathbf{w}} \text{Loss}(x, y, \mathbf{w})$$

Question: what should η be?

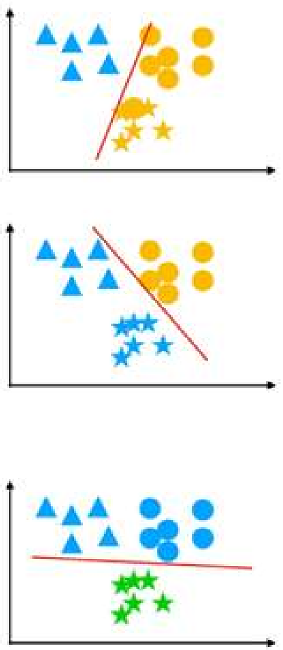
Strategies:

- Constant: $\eta = 0.1$
- Decreasing: $\eta = 1/\sqrt{\#\text{ updates made so far}}$

一般来说，越大的学习率会收敛的更快，但是训练过程会不太稳定，极端情况下甚至不收敛。相反，较小的学习率会使得收敛变慢，耗时变长，但是相应的收敛过程也会更加稳定。当学习率设为0时，优化过程不会收敛，什么都不会发生(等于没有优化)

从二分类到多分类

- 一对其余（one vs all）
  假设多分类的类别是K个，那么一共需要训练K个二分类器，其中每个二分类器将第k类样本作为正例，其余都作为负例



One vs all——一对其余

- 一对一（one vs one）
  假设多分类的类别为K个，那么一共需要训练$\frac{K(K-1)}{2}$个二分类器。新的样本到来时，遍历一遍所有二分类器，最终得到的结果频次最多的类就是最终该样本的分类结果（投票、集成）