梯度下降

cs299 lecture 2

今天讲：

- 线性回归 Linear regression
- 梯度下降 Gradient descent
- 正规方程组 Normal equations

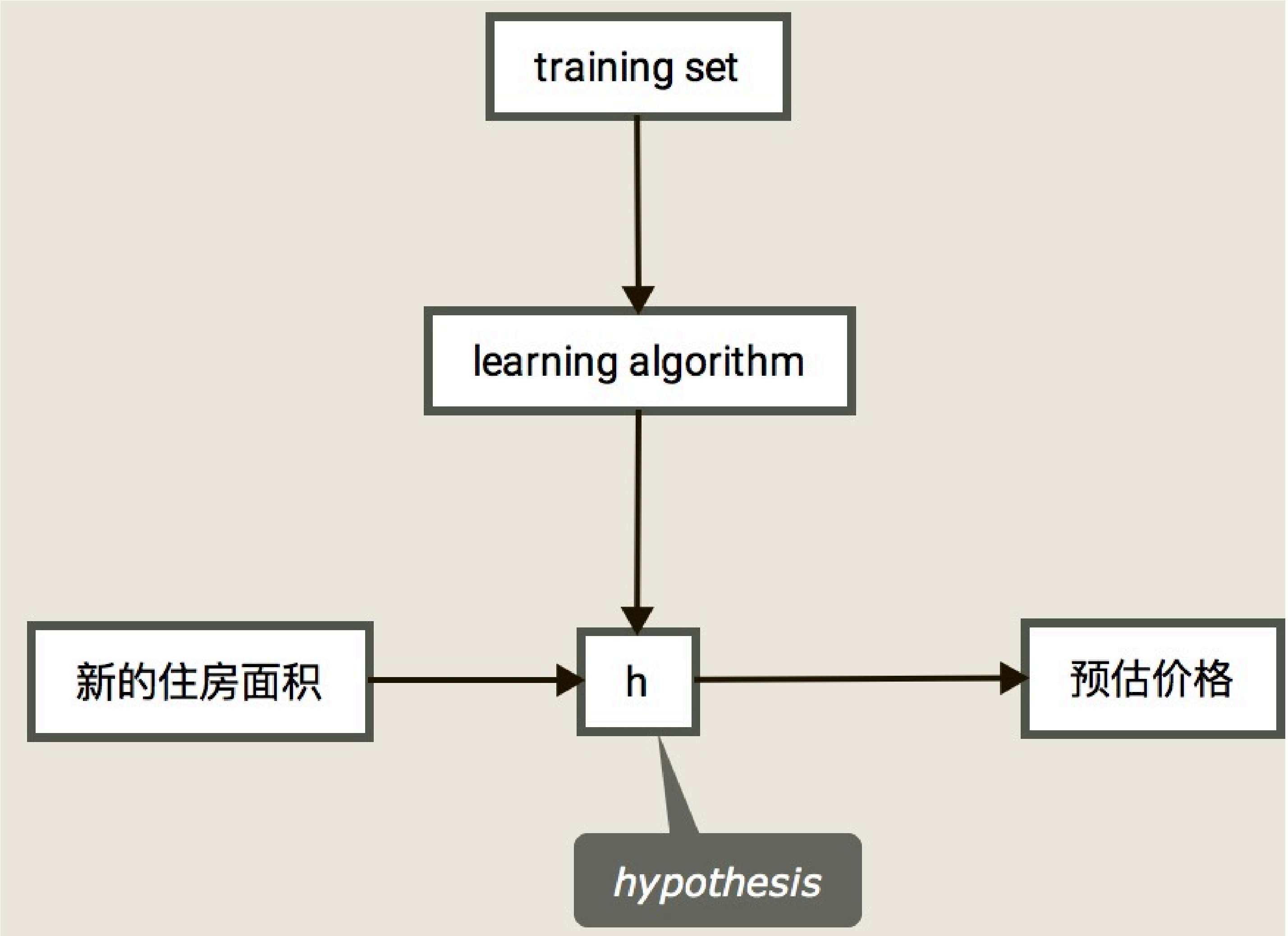
看lecture note学习详细的公式推导

视频：自动驾驶汽车Alvin，15年前的例子，CMU，监督学习（人司机提供了一系列正确的驾驶方向），神经网络算法，核心是梯度下降。是一个回归问题，因为是一系列连续变量

引入一些符号

- m 训练样本的数目
- x 输入变量，也称为特征（features）
- y 输出变量，也称目标变量 target varible *（x, y） 表示一个训练样本 one training example
- 第i个训练样本 $(x^{(i)}, y^{(i)})$

在监督学习中，由给的m大小的训练集， 通过我们的算法生成一个函数h， 这个函数称为假设（hypothesis，历史原因），这个假设的任务就是接受某个输入，产生相应的预测估计



线性表示： $h(x) = \theta_0 + \theta_1 x$

通常情况下，回归问题都是有多个输入变量，比如房屋的面积（x1）和卧室的数量(x2)共同影响房价

此时有，$h(x) = h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$

为了表达的简洁定义 X0 = 1

$$h(x) = h_\theta(x) = \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$
$$h(x) = \sum_{i=0}^{2} \theta_i x_i = \theta^T x$$

定义n=特征的个数， $h(x) = \sum_{i=0}^{n} \theta_i x_i$

θ称为参数，学习算法的任务就是通过训练集求得这样的参数

现在看房价预测问题，选定怎样的参数theta，让算法做出准确的预测呢?

一种合理的方法就是让预测和正确的答案之间的误差尽可能小，问题转化为要使得一个关于theta的函数取得最小值

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

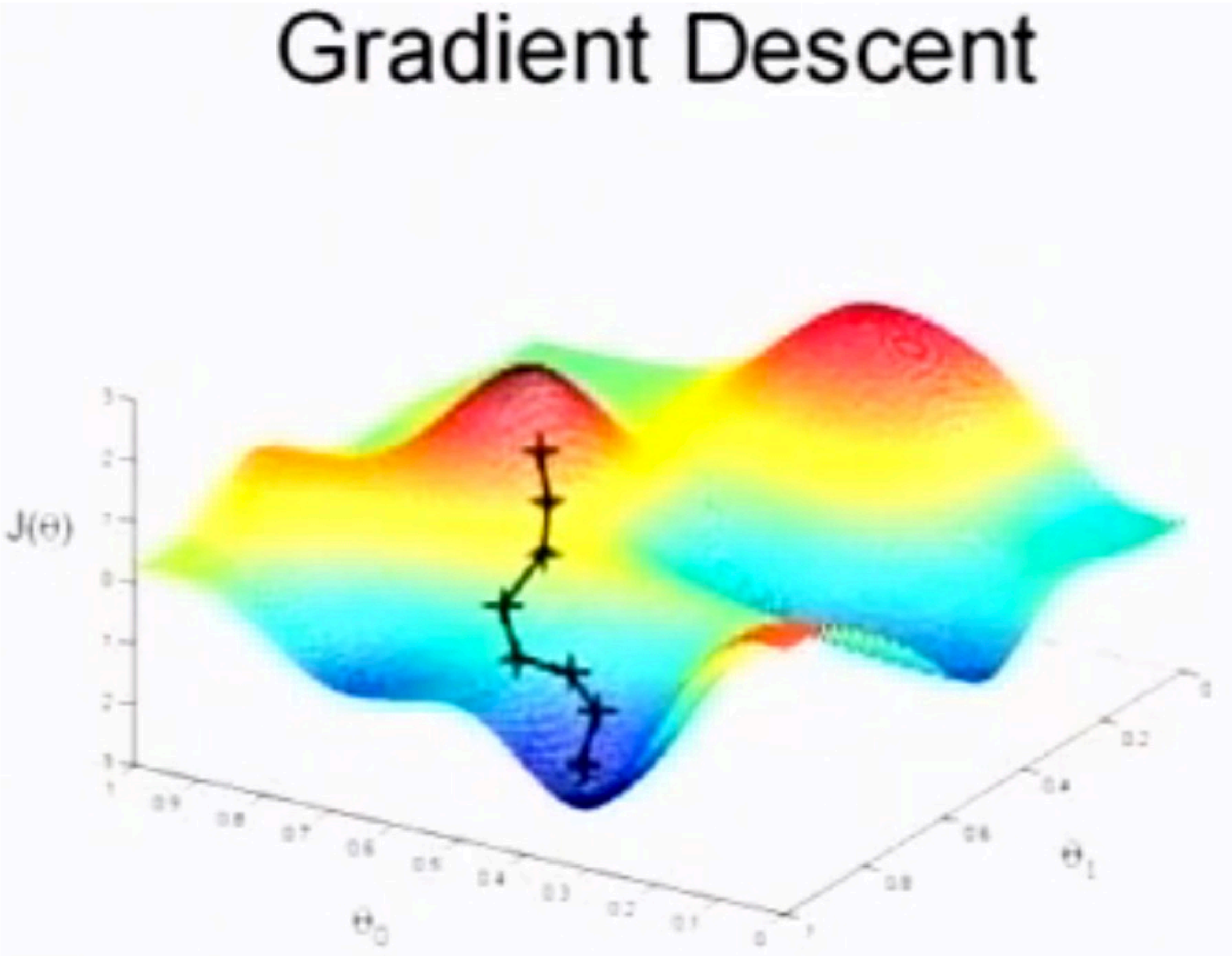
$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h_{\theta}(x^{i})^{2}-(y^{i})^{2})$$

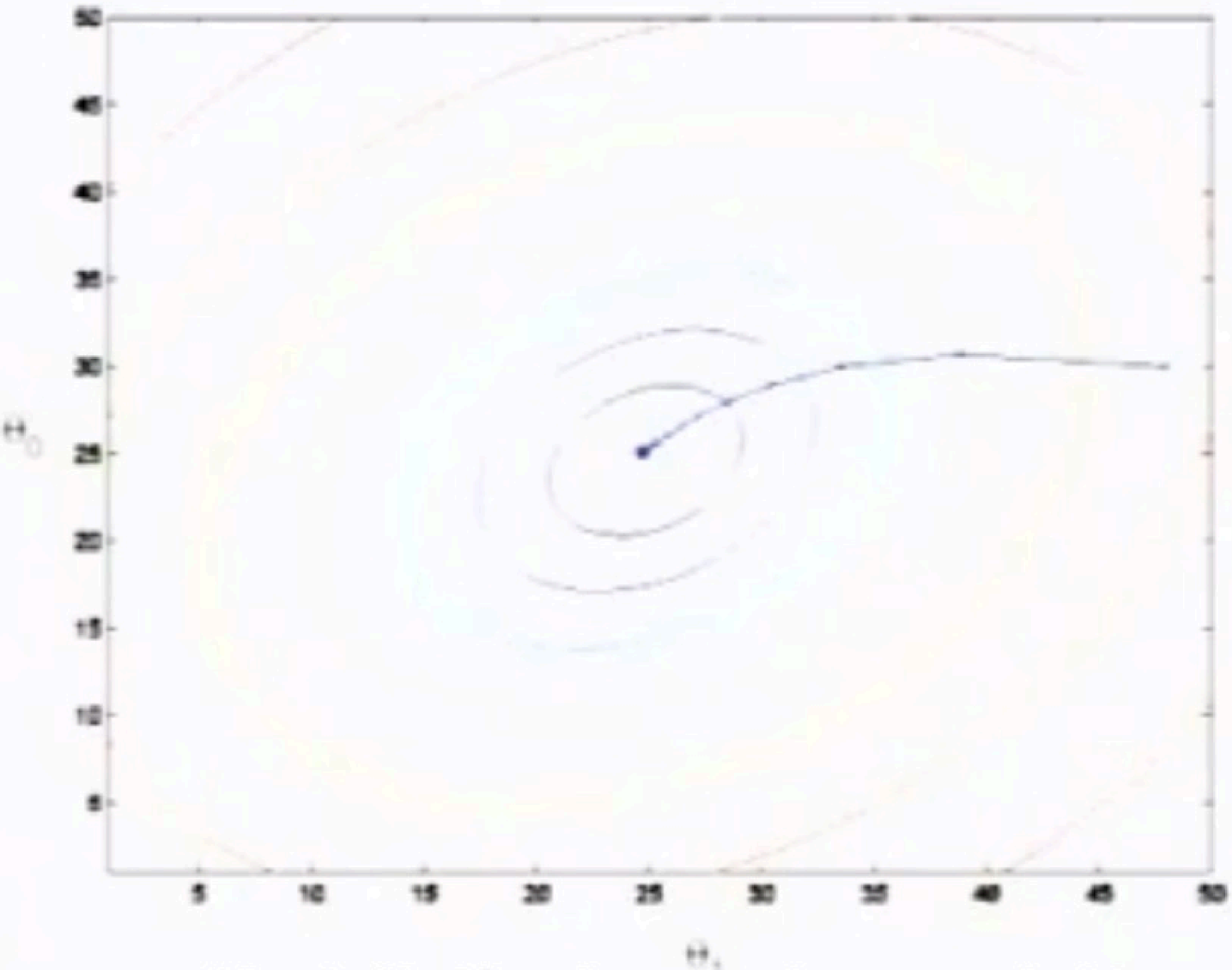
就是要求$minimize_{\theta}J(\theta)$

下面讲几个求取最小值的算法

搜索算法：先给参数一些初始值，如 theata向量 = 0， 然后不断的改变 theta 使得 J(theta)减小，直到我们满怀希望的找到了使得其取最小值的theta

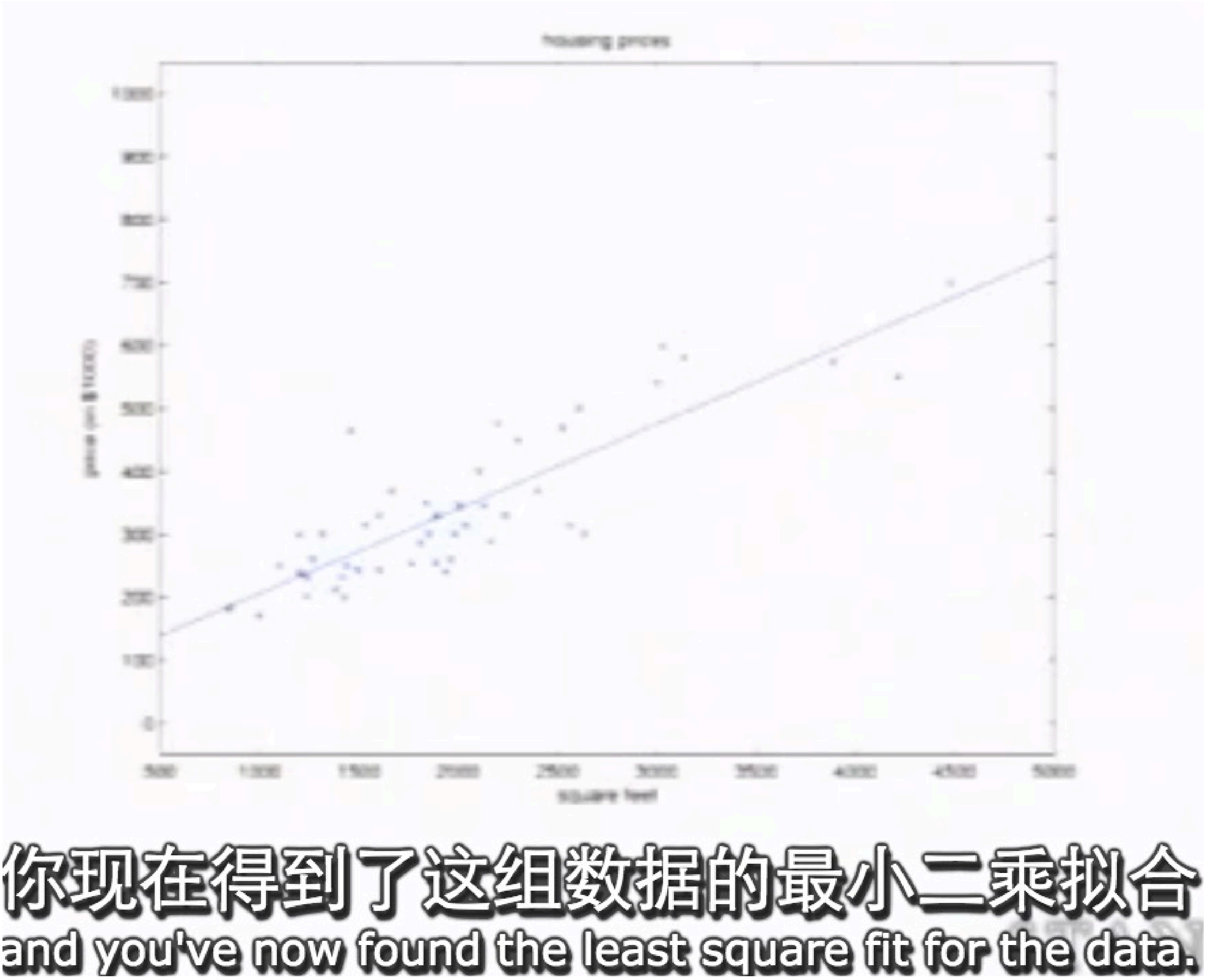
为了找到最小值，一种方法是梯度下降，就是总是沿着下降最快的方向下山， 最终到达函数的局部最小值，换不同的起始点可能会到达不同的局部最优值





快速收敛到了的全局最小值

to the global minimum of this function J of theta.



梯度下降：

$$\theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) \text{不断迭代求得第} i \text{个参数}$$

$$\text{应用到我们的问题中}$$

$$\text{如果只有一组训练数据} \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta_i} \frac{1}{2} (h_\theta(x) - y)^2$$

$$= (h_\theta(x) - y) \frac{\partial}{\partial \theta_i} (h_\theta(x) - y)$$

$$= (h_\theta(x) - y) \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + .. + \theta_i x_i + ... + \theta_n x_n - y)$$

$$= (h_\theta(x) - y) x_i$$

$$\text{这样我们得到了学习规则}(learningrule)$$

$$\theta_i := \theta_i - \alpha (h_\theta(x) - y) x_i$$

注意alpha称为学习的速度 learning rate, 控制你的步子迈的有多大，通常手动设置， 设置的越小，朝着最陡

峭方向每次迈很小的一步， 会花很长时间去收敛

重复以下算法，直到收敛（这里是m个样本，而非一个）

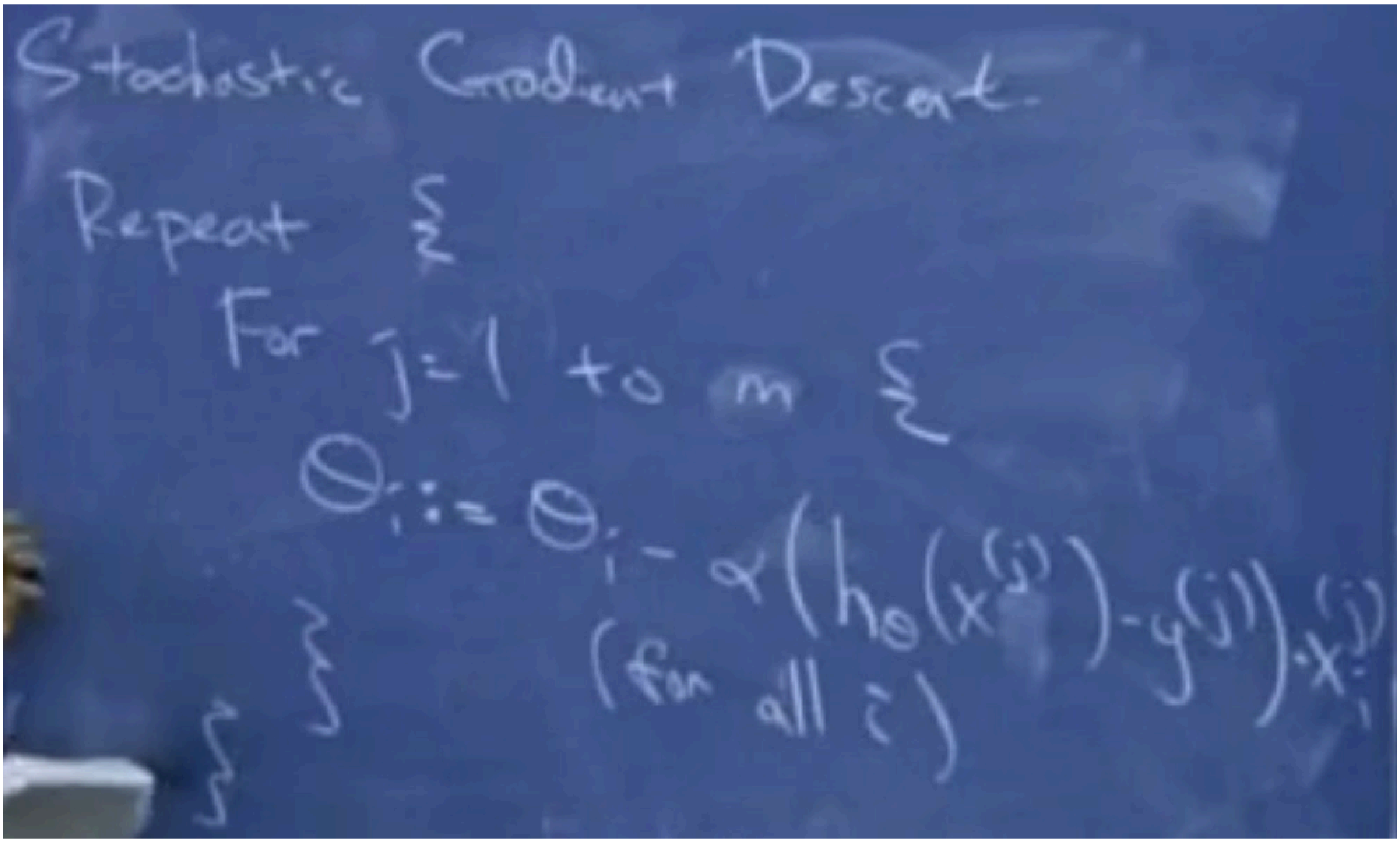
$$\theta_i := \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta)$$

$$\theta_i := \theta_i - \alpha \sum_{j=1}^{m} (h_\theta(x^{(j)}) - y^{(j)}) x_i$$

J(theta)不会太复杂，通常是平方函数，所以不会存在多个最优解.梯度下降的过程中步子会越来越小，因为达到局部最优的时候梯度是0.

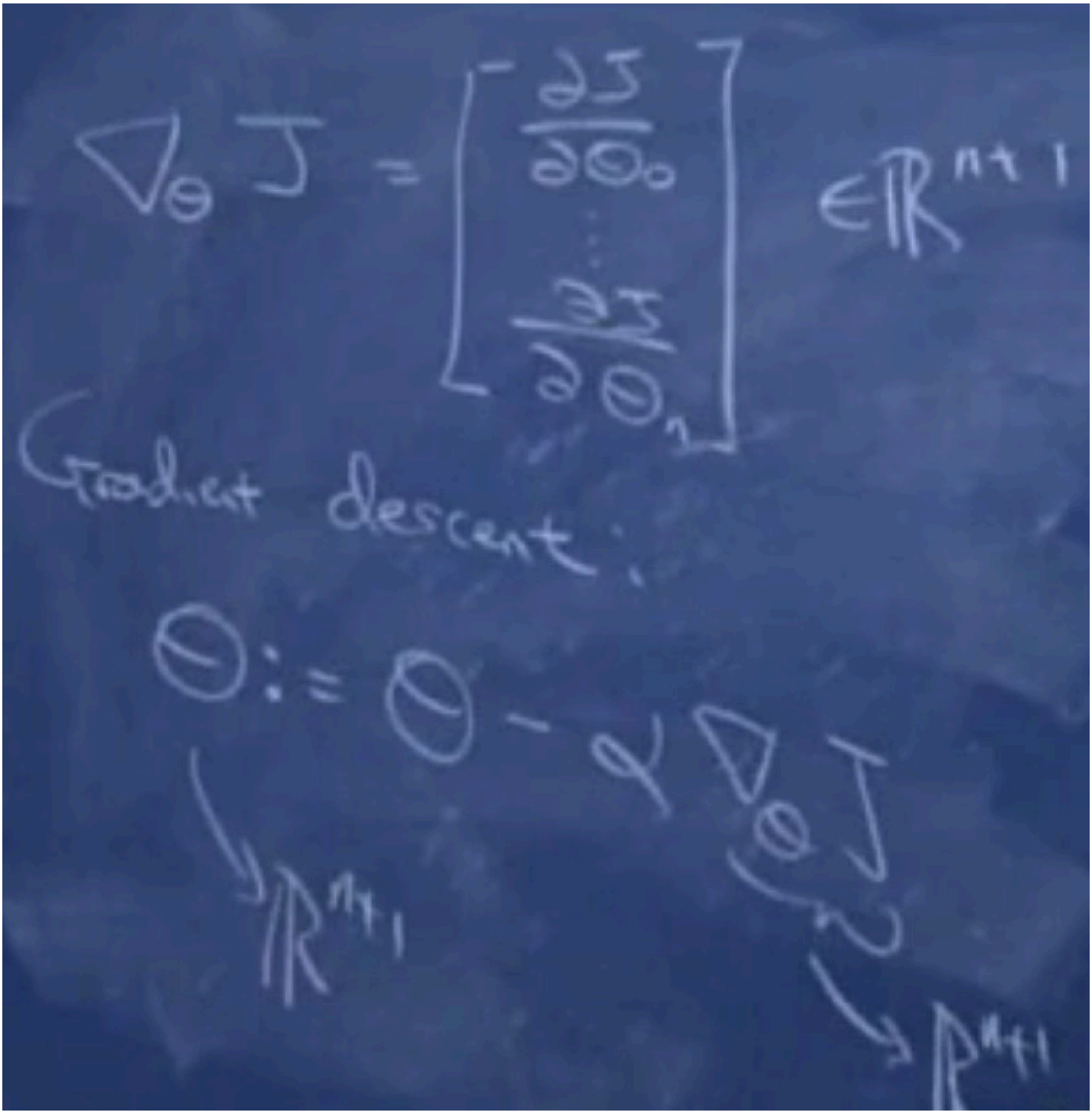
最小二乘拟合least square fit

上述算法称为 batch gradient descent， batch指的是每次迭代都需要巡视整个训练集，not good当m很大的时候。 所以有另一个alternative方法，叫随机梯度下降 statistic gradient descent,也称增量梯度下降， 如下图，这个方法的好处是， 使用一次训练样本就可以更新一次参数（使用当前第j个样本），无需在调整参数之前遍历所有的训练集，对于大规模数据集，随机梯度下降通常会快很多，但是随机梯度下降不会精确的收敛到全局最优点，中途可能会徘徊

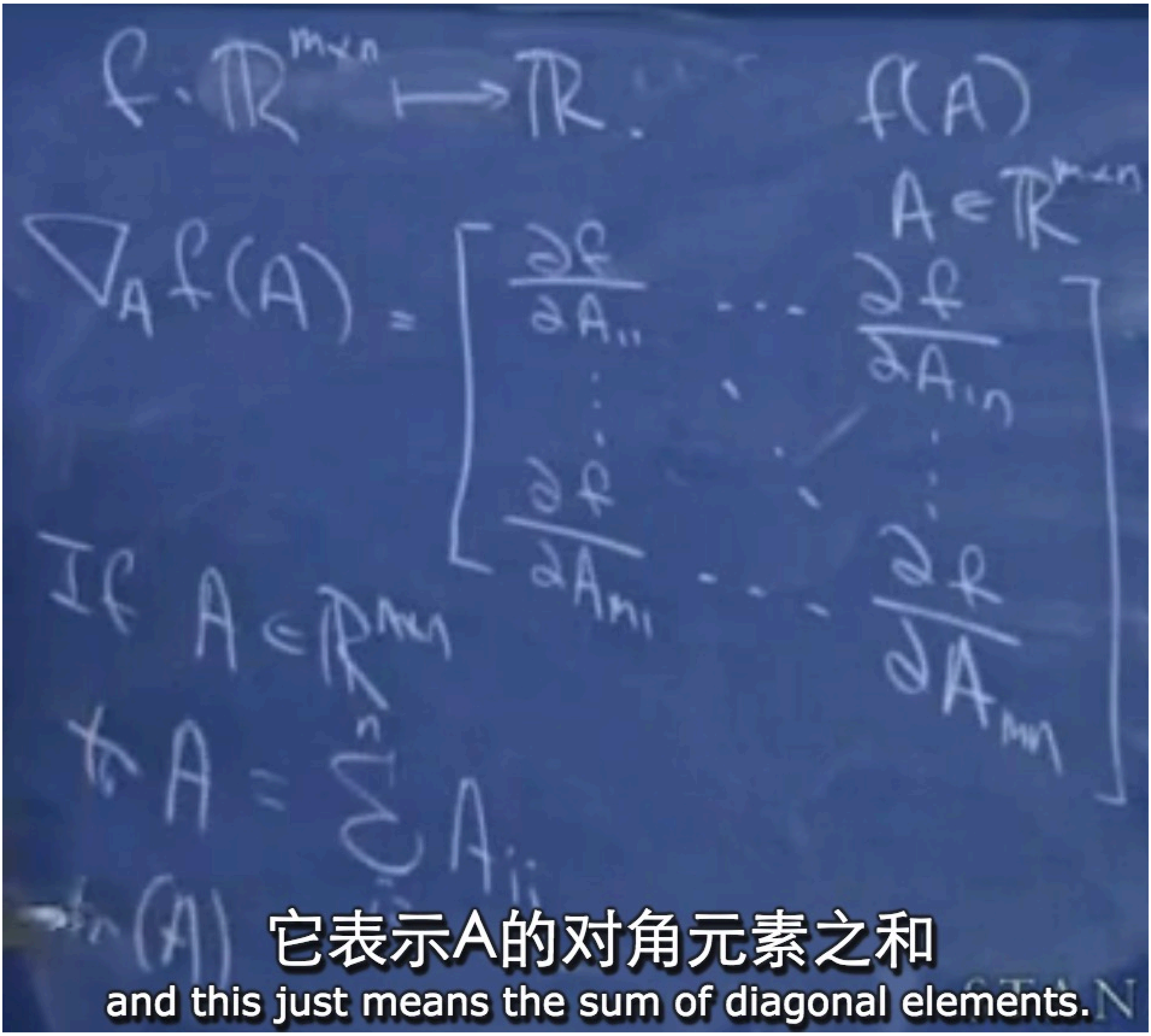


接下来引入矩阵表示的符号

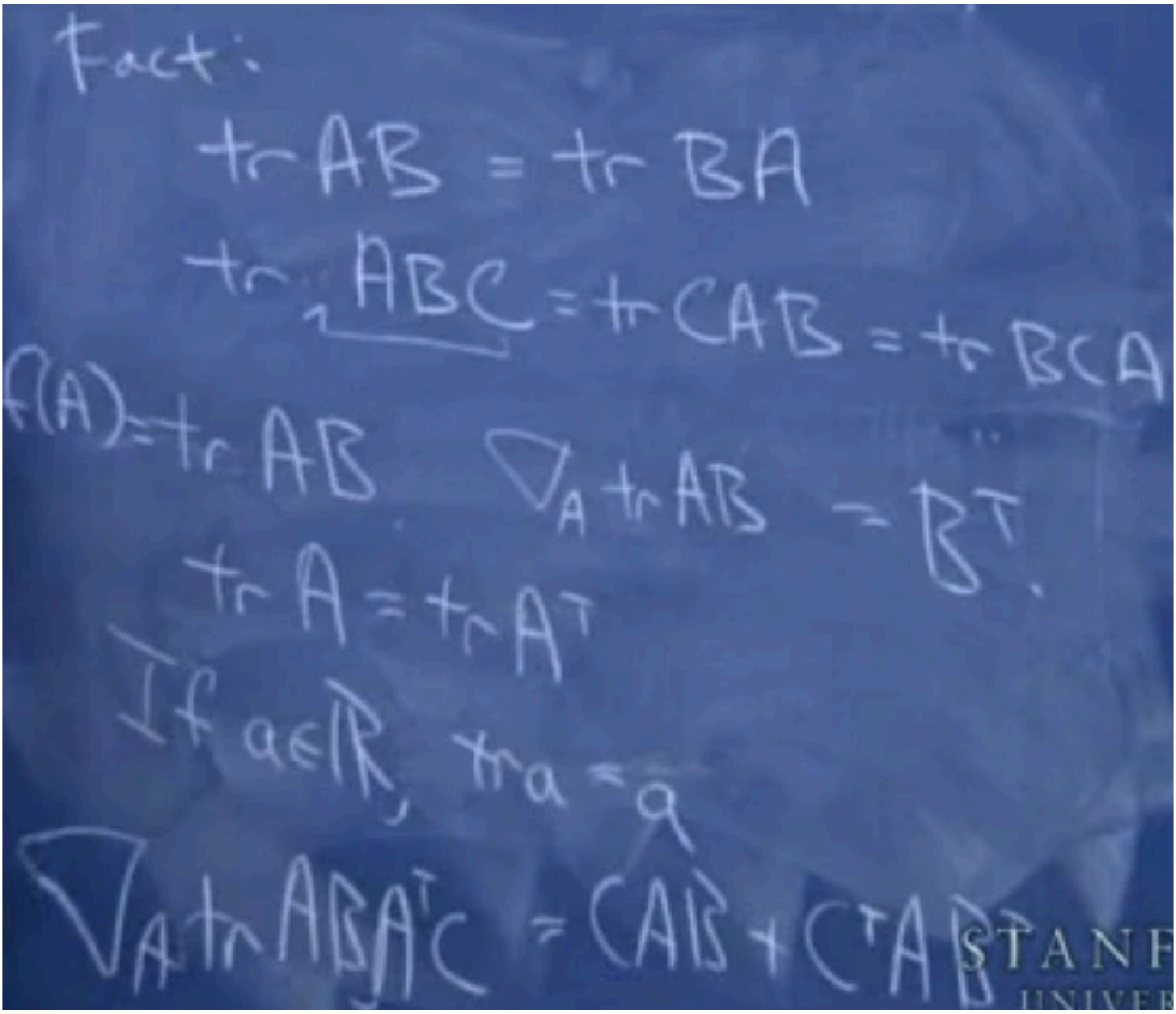
定义J(theta)对theta偏导数的矩阵向量



定义函数f从M x N的矩阵A映射到实数空间，然后是f关于矩阵A的导数，也是一个矩阵，是f关于A中每个元素的偏导数。如果A是一个方阵，A的迹是对角元素之和，迹是一个实数



关于迹的一些规律，后面会用到：



下面利用上面的工具，进行推导

X称为设计矩阵（design matrix）， 矩阵与其转置的内积是实数，最终会得到对J(theta)的定义，样本个数m是从1到m，特征向量（参数个数）是从0到n，

$$\nabla_\theta J = \begin{bmatrix} \frac{\partial J}{\partial \theta_0} \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial \theta_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

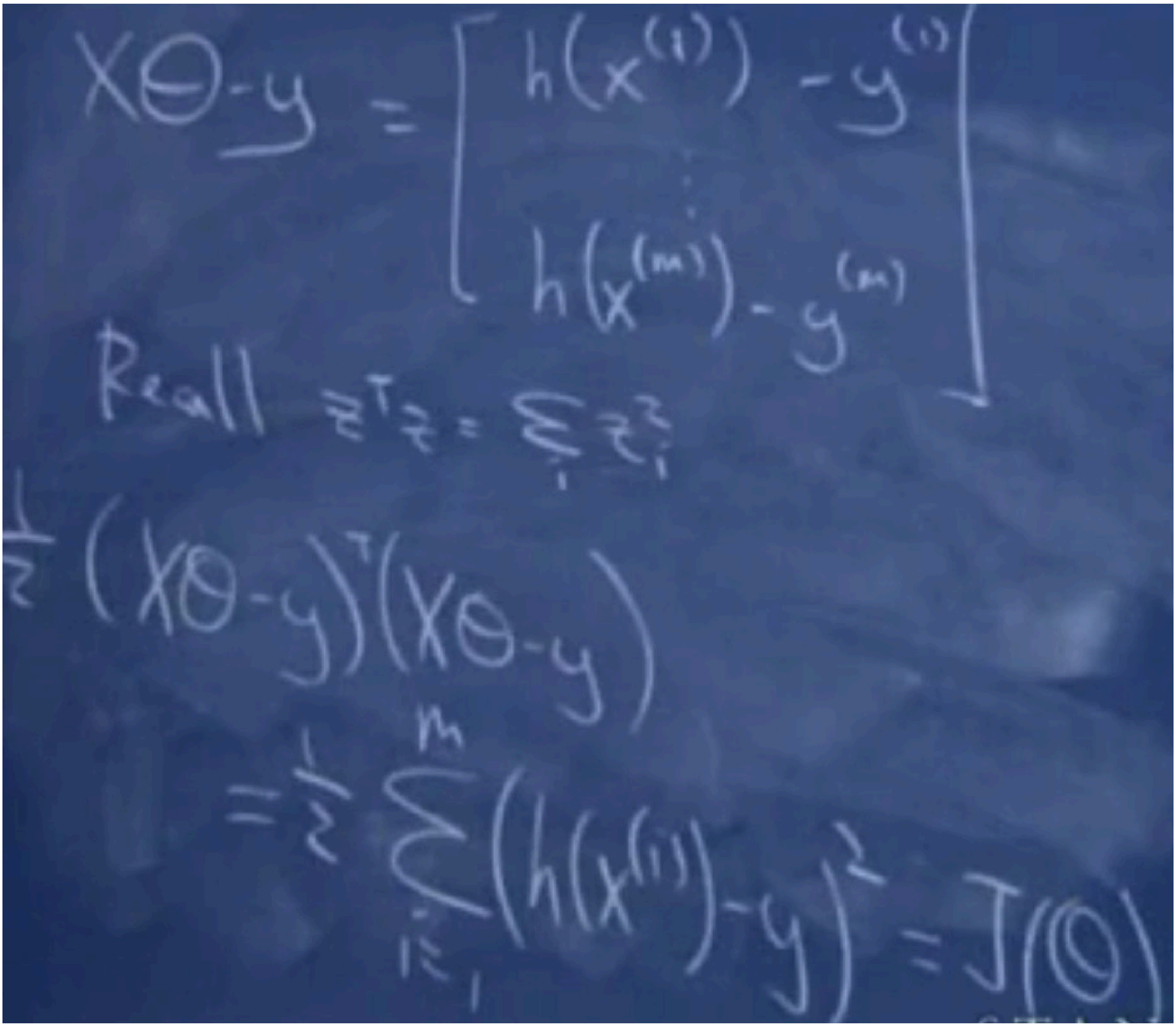
Gradient descent:

$$\underbrace{\theta}_{\mathbb{R}^{n+1}} := \theta - \alpha \underbrace{\nabla_\theta J}_{\mathbb{R}^{n+1}}$$

$$X\Theta = \begin{bmatrix} — & (x^{(1)})^T & — \\ — & (x^{(2)})^T & — \\ & \vdots & \\ — & (x^{(m)})^T & — \end{bmatrix} \Theta$$

$$X\Theta = \begin{bmatrix} x^{(1)T}\Theta \\ \vdots \\ x^{(m)T}\Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_\theta(x^{(1)}) \\ \vdots \\ h_\theta(x^{(m)}) \end{bmatrix}$$

$$\vec{y} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \vdots \\ y^{(m)} \end{bmatrix}$$



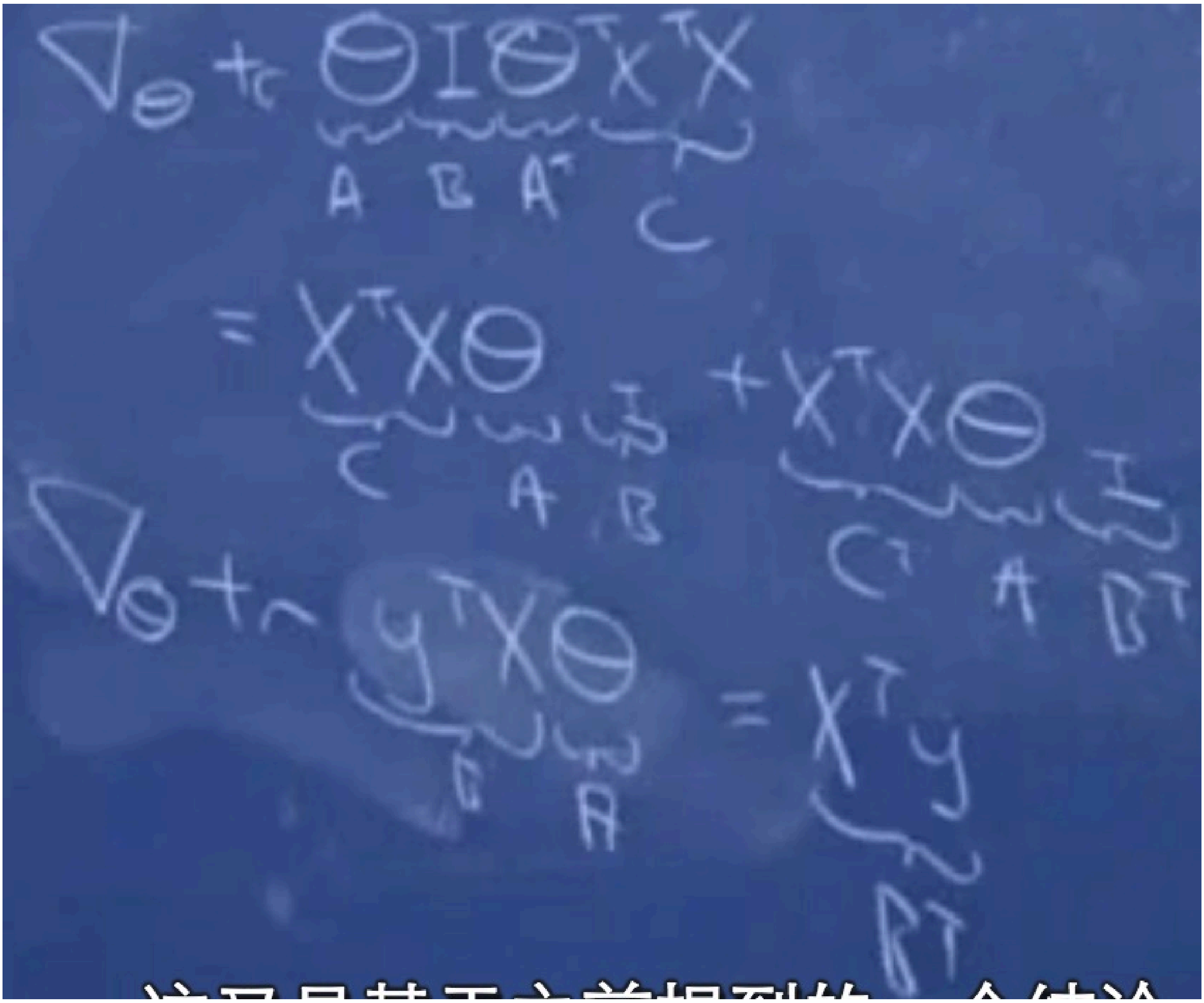
现在要求最小值，让导数设置为0，矩阵与其转置的内积是实数，在这里就等于迹trace,

$$\nabla_\theta J(\theta) \overset{\text{set}}{=} \vec{0}$$

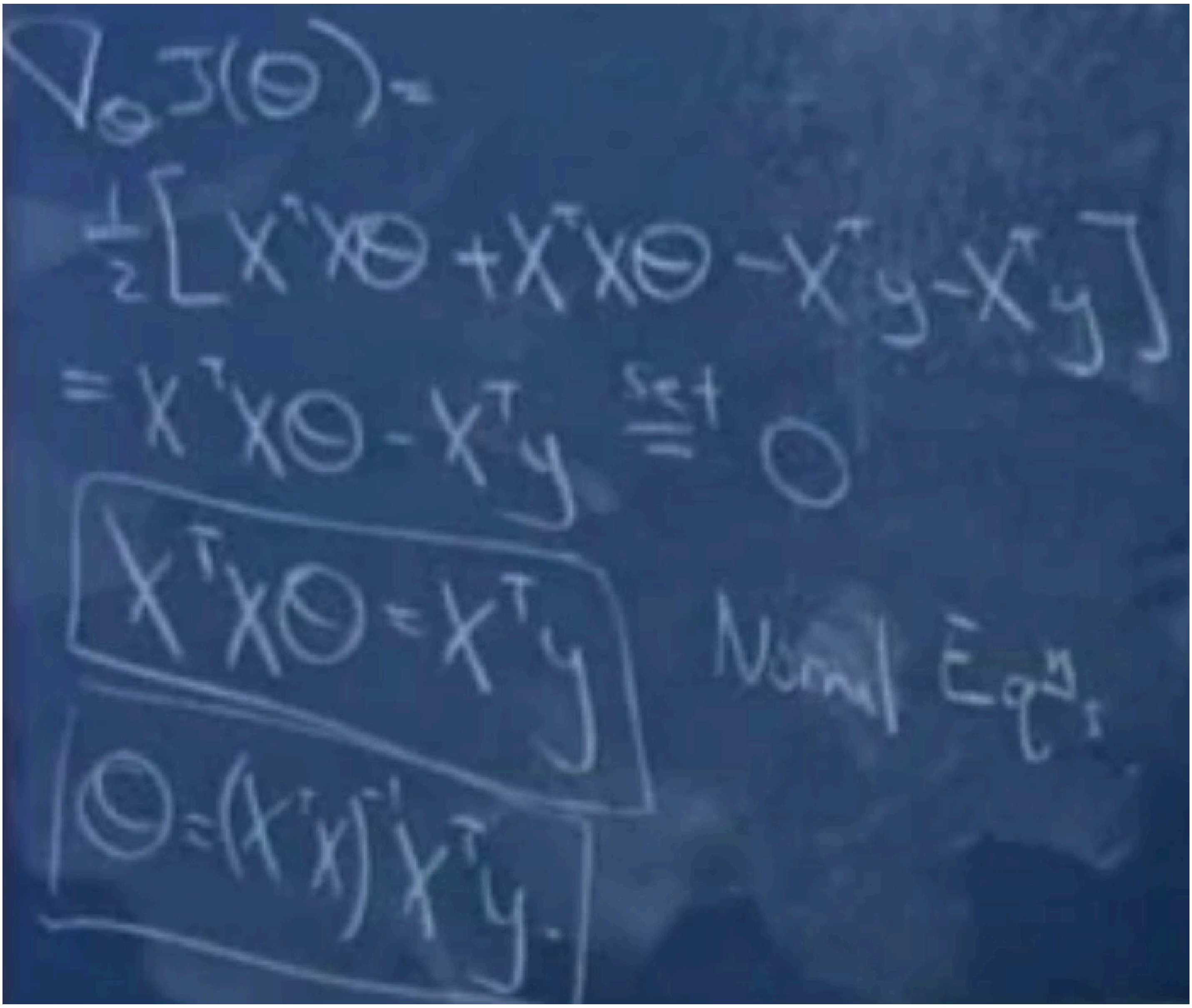
$$\nabla_\theta \frac{1}{2}(X\theta - y)^T(X\theta - y)$$

$$= \frac{1}{2}\nabla_\theta \operatorname{tr}\left(\theta^T X^T X\theta - \boxed{\theta^T X^T y} - y^T X\theta + y^T y\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left[\nabla_\theta \operatorname{tr}\theta\,\theta^T X^T X - \nabla_\theta \operatorname{tr} y^T X\theta - \nabla_\theta y^T X\theta\right]$$



最终得到了正规等式（normal equation），使用矩阵符号，就不需要上面那样的迭代过程，



需要恶补的知识：

- 梯度下降
- 矩阵转置的展开
- 矩阵迹

vonzhou 2016.3.10 3 hours