CS229 Lecture Notes

Andrew Ng and Tengyu Ma

July 12, 2024

Part I

监督学习

Chapter 1

线性回归

为了让我们的住房案例更有趣，让我们考虑一个稍微复杂些的数据集，我们额外知晓每套住房的卧室数量：

居住面积（平方英尺）	# 卧室数量	价格（1000 美元）
2104	3	400
1600	3	330
2400	3	369
1416	2	232
3000	4	540
⋮	⋮	⋮

其中，x 为属于 $\mathbb{R}^2$ 的二维向量。例如，$x_1^{(i)}$ 为训练集中第 i 套住房的居住面积，$x_2^{(i)}$ 为其卧室数量。（通常，当设计一个学习问题时，需要由你自己来决定选择哪些特征，因此，如果你在波特兰（Portland）收集住房数据，可能也会选择其他特征，比如，每套住房是否有壁炉及浴室的数量等。我们后续会讨论更多有关于特征选择的内容，但目前只考虑上面给出的特征。）

为了开展监督学习，我们必须决定如何在计算机中表示函数或假设 h。作为初始选择，我们将 y 近似为一个关于 x 的线性函数：

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$

其中，θ_i 为参数（也称为权重），参数化从 $\mathcal{X}$ 映射到 $\mathcal{Y}$ 的线性函数空间。我们将 $h_\theta(x)$ 简写为 $h(x)$。为了简化我们的表示，我们引入 $x_0 = 1$（截距项，Intercept Term），可以得到如下等式：

$$h(x) = \sum_{i=0}^{d} \theta_i x_i = \theta^T x$$

其中，我们可以将上述等式右侧的 θ 与 x 视为向量，d 为输入变量的数量（不计算 x_0）。

1.1 LMS 算法

我们需要找到一个 θ 使 $J(\theta)$ 最小化。让我们使用一种搜索算法，该算法以一个对 θ 的初始猜测值开始，然后不断调整 θ 使 $J(\theta)$ 更小，直至收敛至某一个能够使 $J(\theta)$ 最小化的 θ。特别地，让我们考虑梯度下降（Gradient Descent）算法，以某个初始值 θ 开始，不断进行如下更新：

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

（同时对所有 $j = 0, \ldots, d$ 使用此更新。）其中，α 被称为学习率，这是一个非常自然的算法，每次向 J 最陡峭的衰减方向前进一步。

Chapter 2

分类与逻辑回归

2.1 多分类问题

考虑这样一个分类问题，响应值 y 满足 $y \in \{1, 2, \dots, k\}$。举个例子，我们可能想要将邮件划分为三种类型，比如垃圾邮件、个人邮件及工作邮件，而不是只划分为垃圾邮件与非垃圾邮件（这是一个二分类问题）。标签或响应值仍然是离散的，但可以取两个以上的值。因此我们将使用多项式分布对这种问题进行建模。

在这种情况下，$p(y|x;\theta)$ 是基于 k 个离散值的分布，这是一个多项式分布。对于包含 k 个值的多项式分布，$\phi_1, \dots, \phi_k$ 表示每一种可能的概率，必须满足 $\sum_{i=1}^{k} \phi_i = 1$。我们将设计一个参数化模型，在给定输入 x 的前提下，输出满足这个约束的 $\phi_1, \dots, \phi_k$。

我们引入 k 组参数 $\theta_1, \dots, \theta_k$，每一组参数都是空间 $\mathbb{R}^d$ 中的一个向量。根据直觉，我们应该可以使用 $\theta_1^T x, \dots, \theta_k^T x$ 来表示 $\phi_1, \dots, \phi_k$，即概率 $P(y=1|x;\theta), \dots, P(y=k|x;\theta)$。然而，采用这种直接的办法有两个问题，首先，$\theta_j^T x$ 不一定在 $[0, 1]$ 内，其次，$\sum_{j=1}^{k} \theta_j^T x$ 不一定为 1。因此，我们将使用 softmax 函数将向量 $(\theta_1^T x, \dots, \theta_k^T x)$ 转化为每个元素都是非负的并且和为 1 的概率向量。

定义 softmax 函数 $\mathrm{softmax} : \mathbb{R}^{\mathrm{k}} \to \mathbb{R}^{\mathrm{k}}$ 为

$$\mathrm{softmax}(\mathrm{t}_1, \dots, \mathrm{t}_\mathrm{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp(t_1)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(t_j)} \\ \vdots \\ \frac{\exp(t_k)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(t_j)} \end{bmatrix} \tag{2.1.1}$$

softmax 函数的输入，向量 t 一般被称为 logits，在定义中，softmax 函数的输出必为每个元素都是非负的并且和为 1 的概率向量。

令 $(t_1, \dots, t_k) = (\theta_1^T x, \dots, \theta_k^T x)$，将 $(t_1, \dots, t_k)$ 作为 softmax 函数的输入，将 softmax 函数的输出作为概率 $P(y=1|x;\theta), \dots, P(y=k|x;\theta)$，得到如下概率模型：

$$\begin{bmatrix} P(y=1|x;\theta) \\ \vdots \\ P(y=k|x;\theta) \end{bmatrix} = \mathrm{softmax}(\mathrm{t}_1, \dots, \mathrm{t}_\mathrm{k}) = \begin{bmatrix} \frac{\exp(\theta_1^T x)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(\theta_j^T x)} \\ \vdots \\ \frac{\exp(\theta_k^T x)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(\theta_j^T x)} \end{bmatrix} \tag{2.1.2}$$

为了表示方便，我们令 $\phi_i = \frac{\exp(\theta_i^T x)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(\theta_j^T x)}$，上面等式可以简写为：

$$P(y=i|x;\theta) = \phi_i = \frac{\exp(t_i)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(t_j)} = \frac{\exp(\theta_i^T x)}{\sum_{j=1}^{k} \exp(\theta_j^T x)} \tag{2.1.3}$$

接下来，我们计算一个样例 (x, y) 的负对数-似然（log-likehood）。

$$-\log P(y|x,\theta) = -\log\left(\frac{\exp(t_y)}{\sum_{j=1}^{k}\exp(t_j)}\right) = -\log\left(\frac{\exp(\theta_y^T x)}{\sum_{j=1}^{k}\exp(\theta_j^T x)}\right) \tag{2.1.4}$$

因此，训练数据的负对数-似然，即损失函数可以写为：

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{n} -\log\left(\frac{\exp(\theta_{y^{(i)}}^T x^{(i)})}{\sum_{j=1}^{k}\exp(\theta_j^T x^{(i)})}\right) \tag{2.1.5}$$

通过模块化上面的等式，可以很方便地定义交叉熵损失（Cross-entropy Loss）$\ell_{ce} : \mathbb{R}^k \times \{1, \ldots, k\} \to \mathbb{R}_{\leq 0}$ 为：[1]

$$\ell_{ce}((t_1, \ldots, t_k), y) = -\log\left(\frac{\exp(t_y)}{\sum_{j=1}^{k}\exp(t_j)}\right) \tag{2.1.6}$$

通过上述等式，我们可以将等式(2.1.5)简写为：

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^{n} \ell_{ce}((\theta_1^T x^{(i)}, \ldots, \theta_k^T x^{(i)}), y^{(i)}) \tag{2.1.7}$$

并且交叉熵损失也具有一个简单的梯度表示。令 $t = (t_1, \ldots, t_k)$，且 $\phi_i = \frac{\exp(t_i)}{\sum_{j=1}^{k}\exp(t_j)}$，通过基本微积分，我们可以推导出：

$$\frac{\partial \ell_{ce}(t, y)}{\partial t_i} = \phi_i - 1\{y = i\} \tag{2.1.8}$$

其中，$1\{\cdot\}$ 为指示函数（Indicator Function），即如果 $y = i$，$1\{y = i\} = 1$，如果 $y \neq i$，$1\{y = i\} = 0$。另外，基于矢量表示法我们有如下表示法，该表示在第 7 节非常有用：

$$\frac{\partial \ell_{ce}(t, y)}{\partial t_i} = \phi_i - e_s \tag{2.1.9}$$

其中，$e_s \in \mathbb{R}^k$ 为第 s 个自然基向量（Natural Basis Vector，向量的第 i 个元素为 1，其他元素为 0），使用链式法则，我们可以得到：

$$\frac{\partial \ell_{ce}((\theta_1^T x, \ldots, \theta_k^T x), y)}{\partial \theta_i} = \frac{\partial \ell_{ce}(t, y)}{\partial t_i} \cdot \frac{t_i}{\theta_i} = (\phi_i - 1\{y = i\}) \cdot x \tag{2.1.10}$$

因此，损失函数相对于参数 θ_i 的的梯度为：

$$\frac{\partial \ell(\theta)}{\partial \theta_i} = \sum_{j=1}^{n} (\phi_i^{(j)} - 1\{y^{(j)} = i\}) \cdot x^{(j)} \tag{2.1.11}$$

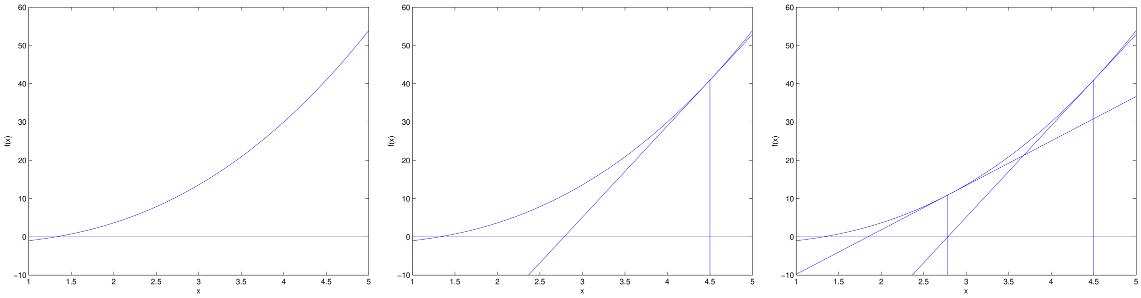
其中，$\phi_i^{(j)} = \frac{\exp(\theta_i^T x^{(j)})}{\sum_{s=1}^{k}\exp(\theta_s^T x^{(j)})}$ 为模型将样例 $x^{(j)}$ 预测为 i 的概率。根据上面的梯度公式，可以实现（随机）梯度下降以最小化损失函数 $\ell(\theta)$。

2.2 最大化 $\ell(\theta)$ 的另一种算法

回到逻辑回归问题，$g(z)$ 为 sigmoid 函数，让我们讨论另一种用于最大化 $\ell(\theta)$ 的算法。

让我们开始吧，考虑使用牛顿法寻找函数的零点。假设我们有一个函数 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，期望找到一个

[1]这里的命名有些许歧义。一些人将交叉熵损失定义为将概率向量（在我们的定义中为 ϕ）与标签 y 映射为一个实数的函数，称我们的交叉熵损失为 softmax-交叉熵损失。我们选择这种命名习惯是因为它与大多数现代深度学习库是一致的，比如 PyTorch 与 Jax。



值 θ 满足 $f(\theta)=0$，其中 $\theta \in \mathbb{R}$ 为实数。牛顿法进行如下操作：

$$\theta := \theta - \frac{f(\theta)}{f'(\theta)}$$

这个方法可以视为，在当前猜测值 θ 处，通过一个正切于 f 的线性函数近似 f，以求解该线性函数的零值，然后将下一个 θ 设置为线性函数的零值。

这里有一张展示牛顿法具体步骤的图片：

在最左边的图片中，可以看到函数 f 与直线 $y=0$ 绘制在一起，我们尝试寻找满足 $f(\theta)=0$ 的 θ，能够满足这个目标的 θ 约为 1.3。假设我们设置 θ 为 4.5 初始化此算法。