

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
\vdots	\vdots	\vdots

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：

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

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 $j = 0, \dots, d$ 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， ϕ_1, \dots, ϕ_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 ϕ_1, \dots, ϕ_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 ϕ_1, \dots, ϕ_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 $\text{softmax} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$ 为

$$\text{softmax}(t_1, \dots, t_k) = \begin{bmatrix} \frac{\exp(t_1)}{\sum_{j=1}^k \exp(t_j)} \\ \vdots \\ \frac{\exp(t_k)}{\sum_{j=1}^k \exp(t_j)} \end{bmatrix} \quad (2.1.1)$$

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：

$$\begin{bmatrix} P(y = 1|x; \theta) \\ \vdots \\ P(y = k|x; \theta) \end{bmatrix} = \text{softmax}(t_1, \dots, t_k) = \begin{bmatrix} \frac{\exp(\theta_1^T x)}{\sum_{j=1}^k \exp(\theta_j^T x)} \\ \vdots \\ \frac{\exp(\theta_k^T x)}{\sum_{j=1}^k \exp(\theta_j^T x)} \end{bmatrix} \quad (2.1.2)$$

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：

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

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

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

因此，训练数据的负对数-似然，即损失函数可以写为：

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

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） $\ell_{ce} : \mathbb{R}^k \times \{1, \dots, k\} \rightarrow \mathbb{R}_{\leq 0}$ 为：¹

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

通过上述等式，我们可以将等式(2.1.5)简写为：

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

并且交叉熵损失也具有一个简单的梯度表示。令 $t = (t_1, \dots, t_k)$ ，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：

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

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：

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

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：

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

因此，损失函数相对于参数 θ_i 的的梯度为：

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

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 $\ell(\theta)$ 。

¹这里的命名有些歧义。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。