

机器学习

监督学习 (Supervised learning)

指的是学习x到y或输入到输出映射的算法 关键特征：提供学习算法示例以供学习

回归



- 拟合曲线或更复杂的函数
- 指的是通过建立数学模型(算法)来对因变量进行分析，算法预测的结果是无数可能值中的一个
- 其学习从无限多的可能数字中预测数字

线性回归模型

- 根据数据进行模型训练，然后根据数据拟合成一条直线
- 字母仅仅是 y 时，表明是训练集中的真实值；是 \hat{y} 则是模型的预测值
- $f(x) = wx + b$

成本函数

- 成本函数（平方误差成本函数）：
$$J = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2$$
- 成本函数是w和b的函数,取斜率为0的切线的那个切点即为极小值，使得成本函数最小



梯度下降

- 其是一种可用于尝试最小化任何函数的算法，适用于具有两个以上参数的模型

* 梯度下降会用最快的方式把自己带到局部最小值，但局部最小值不一定相同，因为参数初始化的不同会让自己站在不同的位置，从而使得选择路线发生变化 ##### 梯度

下降算法 $w = w - \alpha \frac{\partial}{\partial w} J(w, b)$
 $b = b - \alpha \frac{\partial}{\partial b} J(w, b)$ * 当 α (学习率)非常大时，那么其对应一个非常激进的梯度下降过程，其就是在尝试采取最大的步骤下坡 * 学习率太小，梯度下降会起作用，但需要花费十分多时间 * 学习率太大，会导致发散，找不到局部最优解 * 随着导数的不断变化自动调整步长，不断逼近最小值 *

左边为正确的代码写法：要实现并行计算

```
##### 用于线性回归的梯度下降 通过求偏导可得: $w = w - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{w,b}(x^{(i)}) - y^{(i)}) x^{(i)}$ $b = b - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{w,b}(x^{(i)}) - y^{(i)})$
```

多元线性回归

```
##### 多维特征 有多个因素可以影响$y$, 因此自变量可以看成一个行向量 模型可以写成: $f_{w,b}(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4 + b$ 即: $\vec{w} = [w_1, w_2, w_3, w_4]$ $\vec{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4]$ 模型可以写成: $f_{\vec{w},b}(\vec{x}) = \vec{w} \cdot \vec{x} + b$
```

向量化 使用numpy进行运算，使运算速率加快

```
##### 带有向量化多元线性回归的梯度下降 成本函数: $J(\vec{w},b)$ 梯度下降: $$ w_j = w_j - \alpha \frac{\partial}{\partial w_j} J(w_1, \dots, w_n, b) \quad b = b - \alpha \frac{\partial}{\partial b} J(w_1, \dots, w_n, b) \quad w_j = w_j - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w},b}(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} \quad b = b - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w},b}(x^{(i)}) - y^{(i)})$$
```

特征缩放 通过缩放特征使得梯度下降更为方便，更易找到局部最小值 方法：

1. 使用数据除以原始数据的范围的最大值，得出来的数据范围在x轴正半轴
2. 归一化: $x_1 = \frac{x_1 - \bar{x}}{x_{max} - x_{min}}$

学习曲线：利于帮助我们看到梯度下降迭代次数和成本函数之间的关系

选择好的学习率

- 从小的学习率开始试，尝试几个不同的值后便可选取较为合适的学习率

分类

- 预测的是可能输出类别的有限集合，但不是介于两者之间的所有可能数字
-  alt text
- 拟合边界线

逻辑回归(单一分类算法)

- sigmoid函数： $g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$ $0 < g(z) < 1$
- 使用sigmoid函数将实数域映射到(0,1),并将其作为概率值

逻辑回归函数

- $f_{w,b}(\vec{x}) = \frac{1}{1 + e^{-(\vec{w}\vec{x} + b)}}$
- 模型可以有多个特征，即多元；也可以有高次幂
- 决策边界:不同类别的分界线

逻辑回归中的成本函数

损失函数是对单个样本的预测误差，成本函数通常是损失函数求和的平均 线性回归中的成本函数在逻辑回归中并不适用，因为其有许多极小值，不利于找到最低成本  alt text

所以要构建一个新的损失函数，即对数似然损失  alt text

下图为真实值为1的损失函数图像，当 $f \rightarrow 1$ ，即预估值趋近1时，y的值很小且斜率趋于0，表明此时损失很小  alt text

目标就是找到最适合的参数使得损失函数(成本函数)的值最小 损失函数： $L(f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)}), y^{(i)}) = -y^{(i)} \log(f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)})) - (1 - y^{(i)}) \log(1 - f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)}))$ 成本函数： $J(\vec{w},b) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y^{(i)} \log(f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)}))$

使用梯度下降来拟合模型

其梯度下降算法与线性回归的基本相同(要进行数学推导)，但f的定义不一样，线性回归的f是 $f = wx + b$ ，而逻辑回归的是sigmoid函数 梯度下降算法：
 $w_j = w_j - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$
 $b = b - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\{\vec{w},b\}}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})$

过拟合与欠拟合

- 欠拟合：模型与数据不匹配，具有高偏差(特征较少)
- 过拟合：模型太过完美，能够通过所有训练集，但具有高方差(特征较多，高阶多项)
- 防止过度拟合：
 - i. 使用更多的训练数据
 - ii. 使用更少的特征
 - iii. 正则化

正则化(线性回归)

通过缩小系数使得特征减少，从而使拟合的曲线更加平滑，不容易产生过拟合

- 正则化参数： λ
- 正则化项： $\frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^n (w_j)^2$
- 成本函数： $J(\vec{w}, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^n (w_j)^2$ 正则化参数的大小决定了正则化项所占的权重，我们最后的目的是取什么参数时成本函数能取到最小值。如果正则化参数很大，说明 w 要很小，这时候回到模型去看会导致欠拟合；如果正则化参数为0，说明 w 随意取，这时候会导致过拟合 梯度下降算法：正则化的本质就是让 w 在每次更新中减小一点，从而让 w 更小防止过拟合 $\frac{\partial J}{\partial w_j} = w_j - \frac{\lambda}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} + \frac{\lambda}{m} w_j$ $\frac{\partial J}{\partial b} = b - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})$

正则化(逻辑回归)

成本函数： $J(\vec{w}, b) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y^{(i)} \log(f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)})) + \frac{\lambda}{2m} \sum_{j=1}^n w_j^2$
 $\frac{\partial J}{\partial w_j} = w_j - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} + \frac{\lambda}{m} w_j$ $\frac{\partial J}{\partial b} = b - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (f_{\vec{w}, b}(\vec{x}^{(i)}) - y^{(i)})$

正则化(神经网络)



多类分类

每个样本只能属于一个类别

逻辑回归里面的分类不局限于二元，可以是多元 在输出的时候要换成多个输出单元



softmax回归

$$\begin{aligned}
 \$\$ z_1 &= w_1x + b_1 \\
 z_2 &= w_2x + b_2 \\
 z_3 &= w_3x + b_3 \\
 a_1 &= \frac{e^{z_1}}{e^{z_1} + e^{z_2} + e^{z_3} + e^{z_4}} = P(y = 1 | \vec{x}) \\
 a_2 &= \frac{e^{z_2}}{e^{z_1} + e^{z_2} + e^{z_3} + e^{z_4}} = P(y = 2 | \vec{x}) \\
 a_3 &= \frac{e^{z_3}}{e^{z_1} + e^{z_2} + e^{z_3} + e^{z_4}} = P(y = 3 | \vec{x}) \\
 \{e^{z_1} + e^{z_2} + e^{z_3} + e^{z_4}\} &= P(y = 4 | \vec{x})
 \end{aligned}$$

softmax回归成本函数

 alt text

softmax激活函数是多元函数 误差问题：在编写代码的时候，最好不要设置太多的中间变量，不然计算结果会有较大的误差

多标签分类

每个样本可以属于多个类别 可以构建多层神经层，一个神经层来判别一个类别

无监督学习 (Unsupervised Learning)

数据仅带有输入x而无输出标签y

聚类算法

- 数据集无标签，会把数据分成不同的集群  alt text

K-means聚类算法

会重复做的两件事：将点分配给集群质心与移动集群质心

- 随机猜测你可能要求它找到的两个聚类的中心位置
- 遍历每一个点，查看其是否接近红十字还是蓝十字，将点染成对应的颜色
- 查看所有红点的平均位置，并将红十字移到这个平均位置，蓝十字同理  alt text

成本函数

- $c^{(i)}$ 可以看作集群中心的索引
- μ_k 指的是集群中心k的位置
- $\mu_{c^{(i)}}$ 指的是这个数字所属的集群中心的位置

成本函数(失真函数) $J = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \|x^{(i)} - \mu_{c^{(i)}}\|^2$

- m是样本的总体数量， x^i 是训练样例

- 降低成本函数：
 - 将点分配给最近的集群中心，对 c_i 操作
 - 移动集群中心，移到点的中间位置，对 u_i 操作

随机猜测

随机抽取训练样例，让他们成为集群中心，但很有可能会使成本函数达到局部最小值，从而分类不太完美 可以运行多次，找到多次里面成本函数的最小值

选择集群数量

- 绘制集群数量和成本函数的关系，选择最小的成本函数

异常检测与降维

- 异常检测：金融系统中的欺诈检测
- 降维：将一个大数据集神奇地压缩成一个小的多的数据集，同时丢失尽可能少的信息

密度估计

根据密度来进行区域划分，然后根据概率来判断是否是异常 根据高斯分布来进行异常检测，概率的判断

参数调整

- 根据训练集，交叉验证集，测试集
- 可以混入一些异常样例，在模型对交叉验证集进行异常检测的时候调整参数

多种特征

- 用一个向量来表示多个特征
- 出现的特征是相互独立的，直接相乘 

监督学习和异常检测的选择

- 例子少可以用异常检测，且异常检测检测的是从来没有在训练集中出现的样本
- 使用监督学习会需要使用更多的样本来判断正例是什么样的，从而做出正确的判断，只会判断未来的样本和训练集的是否相似

选择合适特征(后续补充)

- 数据选择高斯分布的分布特征

神经网络

神经网络中， w 称为权重(一定有)， b 称为偏置(可有可无)，神经元会根据权重对信号进行缩放，权重是神经元之间的连接强度

与传统的机器学习算法如逻辑回归，线性回归相比，神经网络能带来显著的性能的提高 可以自己学习不同隐藏层的特征检测器 工作原理：

- 神经元是最小工作单元，多个神经元在一起组成层
 - 一个神经元有一个输出值，前层的输出(激活)是后层的输入
 - 一个神经网络由多个神经层组成，可以接受数字向量的输入和输出
 - 有输入层，输出层和多个隐藏层
-

- 本质上是用多个神经元分别处理特征，然后将他们的输出值作为一个神经元的输入值，再由其输出概率
 - 如下图所示，将处理特征的多个神经元称为层，最左边为输入层，中间为隐藏层，右边为输出层 
-

每个输出和参数右上角的数字表示他隶属于第几层的神经层 

激活

指的是一个神经元向他下游的其他神经元发送多少高输出，换句话来说就是神经元输出的计算过程 激活函数：处理输入，得到输出的那部分

泛化

指的是模型不仅在训练集上表现良好，还能再从未见过的新数据上保持良好表现

前向传播

在传播神经元的激活

tensorflow

使用sequential方法将神经层串联起来 

使用tensorflow来编写神经网络代码

1. 指定模型
2. 使用特定损失函数编译模型

3. 训练模型

密集函数及其聚合

看懂代码实现，要有一定numpy基础，要注意是向量还是矩阵 

激活函数

- 线性激活函数： $g(z) = z$
- sigmoid函数，值域范围是(0,1),适合处理二元分类问题，因为其有两个平坦面，其梯度下降速度会更慢
- ReLU函数： $g(z) = \max(0, z)$

优化算法

Adam算法(自动调整学习率)

当梯度下降的方向确实朝着目标方向移动，增加学习率；当参数来回震荡，降低学习率

1. 导入必要的库(torch.optim)
2. 将模型参数和初始学习率导入优化器
3. 记得要把梯度清零

网络层类型

- 密集层：该层中的每个神经元都从前一层获得所有激活的输入
- 卷积层：通过卷积核在图片上进行滑动提取特征，输出通常是三维的

模型性能评估

将数据集分成测试集和训练集(计算训练集和测试集成本时不用加正则化项),通过对测试集和训练集进行成本函数计算，可以知道模型性能 

可将数据分为测试集，训练集，交叉验证集，并且基于这三个数据子集的成本函数选择模型
通过交叉验证集去验证模型泛化性能，选择模型，找到最合适的模型 

通过偏差和方差评估模型性能

- 高偏差(欠拟合)：训练集的成本函数高
- 高方差(过拟合)：训练集的成本函数低，但交叉验证集的成本函数高

多项式次数和成本函数之间关系， J_{cv} 为交叉验证集的成本函数 

交叉验证集帮助确定正则化参数

使用不同的正则化参数，得出不同的成本函数，找到成本函数的最小值 正则化参数和成本函数关系图像 

学习曲线

训练集大小和成本函数的关系 增加数据集不会改变成本函数的大小 

高偏差图像 因为其模型拟合有问题，所以增加再多的训练集也不会提升模型性能 

高方差图像 增加足够多的训练集可以帮助提升模型性能 

解决高偏差高方差的方法 

大型神经网络可以降低高偏差

法则：

- 分析偏差方差帮助我们找到解决问题方法，分析数据帮助我们往哪个方向解决问题
- 尝试添加更多有帮助的数据，可以使用数据增强方式来修改原有数据以获取更多数据
- 也可以通过数据合成获取全新数据样例，需要花费较长时间
- 迁移学习：可以复制除输出层之外的参数，然后使用优化算法或者梯度下降更新输出层参数；也可以重新训练所有参数。(先在大型数据集上进行训练，再在较小的数据集上进一步调整参数) 使用别人预训练好的神经网络再对输出层进行微调也是很常见的。

误差指标

横轴为真实类别 纵轴为预测类别 

- 左上角为真阳性，右上角为假阳性
- 左下角为假阴性，右下角为真阴性
- 精度： $\frac{\text{真阳性}}{\text{真阳性} + \text{假阳性}}$
- 召回率： $\frac{\text{真阳性}}{\text{真阳性} + \text{假阴性}}$ 高精度意味着如果患者被诊断患有这种罕见疾病，那么他确实可能患有这种疾病，高召回率意味着如果患者确实有这种疾病，那么他有很大的概率会被诊断出患病

- 二元分类中提高阈值会降低召回率，提高精度
- 降低阈值会降低精度，提高召回率
- 要权衡精确率与召回率，使用F1分数方法(调和平均数)，越高越好 $F1_SCORE = \frac{1}{\frac{1}{2}(\frac{1}{P} + \frac{1}{R})} = \frac{2PR}{P+R}$

决策树

- 决定在根节点用什么特征
- 选择能获得最大纯度(区分后都是一个类型)的特征

熵: 衡量不纯程度的指标 熵和样品比例的关系  两个类别的特殊情况，多类别参考周志华的西瓜书 $p_0 = 1 - p_1$ $H(p_1) = -p_1 \log_2(p_1) - p_0 \log_2(p_0) = -p_1 \log_2(p_1) - (1-p_1) \log_2(1 - p_1)$

熵的减少称为信息增益 使用根节点的熵减去左右分支熵的加权平均(加权的是样本的数量)，可以把左右分支看作是不断减熵优化的过程。最后要选择结果最大的那个 

p表示具有正标签的分数，w表示样本数量占总样本的分数 信息增益计算公式： $H(p_{1^{\text{root}}}) - (w^{\text{left}} H(p_{1^{\text{left}}}) + w^{\text{right}} H(p_{1^{\text{right}}}))$

单热编码 如果一个分类特征可以取k个可能的值，那么我们将通过创建k个只能取值0或1的二进制特征来替换他 对于其它特征也可以采用0，1来替换

- 如果遇到特征是用多个数字表示，那么我们要选择能获得最大信息增益的阈值来进行划分

回归树

我们要尝试减少每个数据子集的值Y的权重方差 使用根节点的方差减去左右分支方差的加权平均(加权的是样本的数量)，要选择的是方差减小最多的那个。 

使用多个决策树(树集成)

使用多个树对同一特征进行递归判断，最后让他们投票，判断最后结果

替换采样(有放回采样)

- 在已有数据里面进行随机抽样，抽取后记录并放回
- 得到一个新的数据集，和原有数据集有些不同但大致相同
- 根据得到的数据集创建新的决策树

随机森林算法

- 训练多个决策树，并将他们合并为一个集合(一般不超过100棵)
- 随机抽取k个特征，在这k个特征里面找到最大的信息增益并选取他作为划分依据

XGBoost

- 对分类错误的样本进行刻意的训练，使得他们能做的更好
- 内置正则化，防止过拟合
- 一个很方便的库，可用于分类与回归

决策树和神经网络优缺点

- 决策树适用于结构性数据，即表格化数据，训练时间短
- 神经网络适用于非结构性数据和结构性数据，如图片，音频，文字等，训练时间长

推荐系统

- 有一定数量的用户和一定数量的项目
- 其目标是向特定用户进行个性化推荐

开发算法

- 拥有电影特征和数据集(用户对电影的评分)
- 会为不同的用户设置不同的权重和偏置

参数

- $r(i,j)$ 表示用户参与评分，反之则没有
- $y^{(i,j)}$ 表示用户对电影的评分
- $w^{(j)}, b^{(j)}$ 表示为每个用户设定的参数
- $X^{(i)}$ 表示电影i的特征向量
- $m^{(j)}$ 表示用户评价的电影数量

预测： $w^{(j)} \cdot X^{(i)} + b^{(j)}$

成本函数(对于所有用户)：包括了正则化系数 

协同过滤算法

- 根据用户的评分来推荐
- 在开发中我们往往不知道电影特征的参数值，但我们知道用户的评分

- 根据w值进行特征值的选取，即使用 $wx+b$ 去拟合用户评分，选取恰当的x特征值

电影特征的成本函数

将他们放在一起，成本函数是w, b, x的函数 

梯度下降

泛化到二进制标签

- 在用户在网站进行操作的时候分配二进制标签
- 使用逻辑回归中的sigmoid函数
- 损失函数使用二元交叉熵成本函数 

均值归一化

有利于对未评级的用户做出良好的预测 

- 对于未评级的用户，其前面的损失函数为0，因此w和x会为0，这会导致预测值 $wx+b$ 为0

解决方法： 

- 将电影的评分放在一个矩阵中，计算每一部电影的评分均值得到一个列向量
- 让评分分别减去对应电影的均值得到新的矩阵
- 此时预测函数为 $wx+b+\mu$, μ 为电影均值，这样未评级的用户就会被预测较为正常的值

基于内容的过滤

根据用户的特征和物品特征向你推荐物品，需要特征来决定哪些项目可能和用户相匹配

- 根据用户的特征来进行推荐，但用户特征和物品特征大小很可能不一样
- 拟合的模型： $v_u^{(j)} \cdot v_m^{(j)}$, 通过这两个特征来预测用户的评分
- 使用神经网络进行拟合 

Momentum梯度下降优化算法

- 在常规的SGD中，梯度的下降效率并不是那么高，其会在某一方向上不断震荡，导致下降的速度慢，并且可能会陷入鞍点无法逃出



- 我们在常规的梯度下降中加入一个超参数 β , 这个值一般取0.9

- 我们在这里使用指数加权平均，这个方法可以让之前的梯度占取一部分的权重，并且离该点越近权重越大，使得当前的下降方向不完全由当前梯度决定，使得震荡不那么剧烈。并且在陷入鞍点的时候，之前的梯度的累加可以帮助其不陷入鞍点
- $v_t = \beta v_{t-1} + (1 - \beta) \frac{\partial J}{\partial w}$ $w = w - \alpha v_t$ (α 为学习率)