本页PDF

Linear Regression

Gradient Descent

- 给定**Model**：$y = w \cdot x + b$
  - Model可以更加复杂，即使用更高阶的参数来描述
    - 这使得**Model**在**training data**上表现得更优秀，但在**testing data**中容易出现**Overfitting**
- **Loss**：$L(w,b) = \sum_{i=1}^{n}(y - (w \cdot x + b))^2$
- 两个参数实现不断更新
  - $w_1 = w_0 - \alpha \frac{\partial L}{\partial w}|_{w=w_0}$
  - $b_1 = b_0 - \alpha \frac{\partial L}{\partial b}|_{b=b_0}$
  - α表示**Learning rate**，控制梯度下降的步长

Regularization

- 重新定义**Loss function**
  - $L(w,b) = \sum_{i=1}^{n}(y - (w \cdot x + b))^2 + \lambda \sum(w_i)^2$
  - 根据λ的值来确定w占**Loss function**的权重
    - **λ越大**，正则项的影响越大，使得权重w更趋向于 0，减少过拟合，使曲线更平滑
    - **λ越小**，正则项影响越小，模型会更关注数据拟合，可能会导致过拟合

Classification

- **1. 分类的基本概念**
  - 分类的核心任务是**预测数据点所属类别**。
  - 使用**概率模型**来计算每个类别的后验概率$P(y = k \mid x)$，选择概率最高的类别作为最终分类结果。
  - 主要依赖**贝叶斯公式**进行计算：

    $$P(y = k \mid x) = \frac{P(x|y=k)P(y=k)}{P(x)}$$

    其中：

- $P(y = k \mid x)$：后验概率，表示给定 x，属于类别 k 的概率。
- $P(x \mid y = k)$：似然，表示类别 k 生成特征 x 的可能性。
- $P(y = k)$：先验概率，表示类别 k 本身的出现概率。
- $P(x)$：归一化项，保证概率总和为 1，但分类时可以忽略。

---

2. 为什么用贝叶斯定理？

- **直接计算 $P(y = k \mid x)$ 很难**，但 $P(x \mid y = k)$ **和** $P(y = k)$ **比较容易建模。**
- **贝叶斯定理提供了一种从已知概率推导后验概率的方法**，从而进行分类。
- 通过最大化后验概率，**找到最可能的类别。**

---

3. 具体实现步骤

i. **计算先验概率 $P(y = k)$**：在训练数据集中统计每个类别出现的频率。

ii. **计算似然 $P(x \mid y = k)$**：
   - 输入为特征向量x，将输入给到训练好的模型，由模型计算出似然值

iii. **计算后验概率 $P(y = k \mid x)$**，然后选取最大值的类别作为分类结果。

---

4. 训练模型的过程

- **最大似然估计（MLE）：** 估计每个类别的均值μ 和协方差矩阵 Σ。**（前提是假设样本服从高斯分布）**
  - 给定$L(\mu, \Sigma) = f_{\mu,\Sigma}(x^1) f_{\mu,\Sigma}(x^2) f_{\mu,\Sigma}(x^3) f_{\mu,\Sigma}(x^4) \dots f_{\mu,\Sigma}(x^{79})$
  - 找出使得$L(\mu, \Sigma)$最大的μ, Σ
  - **优化目标：**找到 $\mu 1, \mu 2, \Sigma \mu^1, \mu^2, \Sigma \mu 1, \mu 2, \Sigma$使得训练数据的似然函数最大：
- **最终分类：**对于新的数据点 x，计算 $P(y = 1 \mid x)$ 和 $P(y = 2 \mid x)$，选择概率大的类别。

---

5. 最终结果

- $P(C_1|x) = \frac{P(x|C_1)P(C_1)}{P(x|C_1)P(C_1)+P(x|C_2)P(C_2)} = \frac{1}{1+\frac{P(x|C_2)P(C_2)}{P(x|C_1)P(C_1)}} = \frac{1}{1+e^{-z}} = \sigma(z)$
  - $\sigma(z)$**是sigmoid**函数，取值范围在[0,1]，适用于二分类问题
- 可以把z看成$z = wx + b$

- 根据$z = ln\frac{P(x|C_1)P(C_1)}{P(x|C_2)P(C_2)}$，经过数学推导得：
  - $w^T = (\mu^1 - \mu^2)\Sigma^{-1}$
  - $b = -\frac{1}{2}(\mu^1)^T(\Sigma^1)^{-1}\mu^1 + \frac{1}{2}(\mu^2)^T(\Sigma^2)^{-1}\mu^2 + ln\frac{N_1}{N_2}$
    - 其中μ^1、μ^2、Σ^1、Σ^2、N_1、N_2分别是训练集一和训练集二的均值，协方差矩阵和样本数量，其中$\Sigma^1 = \Sigma^2 = \Sigma$

Logistic Regression

Loss function

假设数据服从$f_{w,b}(X) = P_{w,b}(C_1|x)$，二分类问题

- 给定训练集

特征向量	x^1	x^2	x^3	$\cdots$
类别	C_1	C_1	C_2	$\cdots$
类别	$\hat{y} = 1$	$\hat{y} = 1$	$\hat{y} = 0$	$\cdots$

- 可得似然函数：$f(w,b) = f_{w,b}(x^1)f_{w,b}(x^2)(1 - f_{w,b}(x^3))\dots f_{w,b}(x^N)$
- 这里的 $f_{w,b}(x)$ 表示的是在给定输入 x的情况下，数据属于类别 C_1 的概率，即：

  $$f_{w,b}(x) = P_{w,b}(C_1|x)$$

  由于只有两个类别（假设是 C_1 和 C_2），那么属于 C_2 的概率就是：

  $$P_{w,b}(C_2|x) = 1 - P_{w,b}(C_1|x) = 1 - f_{w,b}(x)$$

  - 先找出**最佳w, b*使得似然函数最大，而*w^,b^ = argmaxL(w,b) = argmin (- lnL(w,b))
  - -lnL(w,b) = lnf_{w,b}(x^1)+lnf_{w,b}(x^2)+ln(1-f_{w,b}(x^3)) = \sum_{n}-[\hat{y}^nlnf_{w,b}(x^n)+(1-\hat{y}^n)ln(1-f_{w,b}(x^n))]
  - 可得**Cross entropy：**
    $C(f(x^n), \hat{y}^n) = \sum_n -[\hat{y}^n ln f_{w,b}(x^n) + (1 - \hat{y}^n)ln(1 - f_{w,b}(x^n))]$（**交叉熵损失函数**）

使用Gradient Descent求解最佳参数

对**Cross entropy：**$C(f(x^n), \hat{y}^n) = \sum_n -[\hat{y}^n ln f_{w,b}(x^n) + (1 - \hat{y}^n)ln(1 - f_{w,b}(x^n))]$
使用**Gradient Descent：**

- $\frac{\partial ln(1-f_{w,b}(x))}{\partial w_i} = \frac{\partial ln(1-f_{w,b}(x))}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial w_i} = -\sigma(z)x_i$
  - $\frac{\partial ln(1-\sigma(z))}{\partial z} = -\frac{1}{1-\sigma(z)}\sigma(z)(1-\sigma(z))$
  - $\frac{\partial z}{\partial w_i} = x_i$
- 同理：$\frac{\partial ln f_{w,b}(x)}{\partial w_i} = \frac{\partial ln f_{w,b}(x)}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial w_i} = (1-\sigma(z))x_i$
- 最后：$\frac{\partial(-ln(w,b))}{w_i} = \sum_n -(\hat{y}^n - f_{w,b}(x^n))x_i^n$
  - **根据此结果进行参数迭代更新即可**

不用Square Error的原因

- 令Loss function为：$L(f) = \frac{1}{2}\sum_n (f_{w,b}(x^n) - \hat{y}^n)^2$
- $\frac{\partial(f_{w,b}(x)-\hat{y}^n)^2}{\partial w_i} = 2(f_{w,b}(x)-\hat{y})f_{w,b}(x)(1-f_{w,b}(x))x_i$
  - 当$\hat{y}^n = 0$时，如果预测值$f_{w,b}(x) = 1$，此时梯度为0，会导致参数无法更新，**使得函数无法收敛找到最佳参数**
  - 当$\hat{y}^n = 1$时，如果预测值$f_{w,b}(x) = 0$，此时梯度为0，会导致参数无法更新，**使得函数无法收敛找到最佳参数**

Multi-class Classification

对于每个类别，有自己的weight和bias

- $C_1: w^1, b_1\ z_1 = w^1 \cdot x + b_1$
- $C_2: w^2, b_2\ z_2 = w^2 \cdot x + b_2$
- $C_3: w^3, b_3\ z_3 = w^3 \cdot x + b_3$

1. 使用`softmax`函数进行分类

- $f(z) = \frac{e^z}{\sum_{i=1}^n e^i}$
- $f(z)$取值范围为[0,1]，且各个样本概率之和为1

2. 使用`Cross entropy`进行误差估计，并进行参数更新

- $-\sum_{i=1}^n \hat{y}_i lny_i$

Limitation of Logistic Regression

- 逻辑回归最后的**决策边界是一条直线**，意味着不能对某些复杂数据进行准确分类
- 决策边界为$\sigma(z) = 0.5$，即$w \cdot x + b = 0$

解决办法：使用**Feature transformation**，对数据进行特征变换再进行分类

Discriminative and Generative

Discriminative（判别式模型）

核心思想：直接学习类别之间的决策边界，使得分类误差最小

- 不关心数据具体分布，只关心**给定特征值x，它属于哪个类别**
- 直接对**后验概率**$P(y|x)$建模
- 表现通常更好，因为不依赖**数据的分布**，当**数据量大且分布未知**时用判别式模型

Generative（生成式模型）

核心思想：先学习数据概率分布，再推导出分类决策边界

- 先对**先验概率**$P(x|y)$建模，再根据**贝叶斯公式**计算后验概率
- 在前面例子中可以很直观看到，**生成式模型是先对数据统计分布（均值和协方差）进行估计**，再计算w和b
- **依赖数据分布**，若真实数据不满足数据分布假设表现可能不好，当**数据量小且分布已知**用生成式模型

Deep Learning

Three steps for Deep Learning

1. Define a set of funtion

- 需要定义神经网络的架构，用来表示问题的模型
- 需要决定
  - **模型架构：**选择神经网络的类型（如前馈神经网络、卷积神经网络、递归神经网络等）
  - **激活函数：**为每一层选择激活函数（如 ReLU、Sigmoid、Tanh 等）
  - **损失函数：**选择一个损失函数，用来衡量模型预测结果与实际标签之间的误差（如均方误差、交叉熵损失等）
  - **优化函数：**选择优化算法（如随机梯度下降、Adam等），用于在训练过程中最小化损失函数

激活函数

- 为什么不在所有层都使用 Sigmoid，而更偏向使用 ReLU？ReLU 有哪些优缺点？

  ## Sigmoid 的问题：

  - **输出范围是 (0, 1)**，这会导致：
    - 梯度太小，尤其当输入很大或很小的时候，梯度几乎为 0（**梯度消失问题**）
  - **它不是零中心的**，输出总是正的，会导致网络收敛慢

  ## ReLU 的优势：

  - **输出是 [0, ∞)**，只要是正数就保留，负数直接变 0
  - **计算简单，不会饱和**（不会出现 sigmoid 那种梯度快变没的情况）
  - **训练更快、更深的网络更稳定**

  ## 但 ReLU 也有问题：

  - **ReLU 死亡现象**：一旦某个神经元输出为 0，在训练中可能永远都不会激活（比如输入是负数时）

2. Goodness of function

- 在评估多个模型之后，选择表现最好的模型。这个阶段包括：

  - **超参数调优**：调整超参数（如学习率、批量大小、网络层数等），找到能使模型表现最佳的配置

  - **交叉验证**：使用交叉验证技术（如k折交叉验证）在不同数据子集上测试模型的性能，减少过拟合的风险

  - **模型比较**：如果有多个模型或架构，使用评估指标对它们进行比较，选择能在新数据上泛化表现最好的模型

  - **最终测试**：一旦选择了最佳模型，使用一个独立的测试集进行最终评估，确认其在真实场景中的表现

3. Pick the best function

- 在评估多个模型之后，选择表现最好的模型。这个阶段包括：

  - **超参数调优**：调整超参数（如学习率、批量大小、网络层数等），找到能使模型表现最佳的配置

  - **交叉验证**：使用交叉验证技术（如k折交叉验证）在不同数据子集上测试模型的性能，减少过拟合的风险

- **模型比较：**如果有多个模型或架构，使用评估指标对它们进行比较，选择能在新数据上泛化表现最好的模型
- **最终测试：**一旦选择了最佳模型，使用一个独立的测试集进行最终评估，确认其在真实场景中的表现

Gradient Descent

- Learning Rate需要设置**适宜**
  - 设置太小训**练时间长**
  - 设置太大反而**无法收敛**

梯度下降的本质可以由Taylor Series（泰勒展开式）解释

Adagrad优化器

一个自适应调整学习率的算法

Stochastic Gradient Descent

给定**损失函数**$L = \sum_n (\hat{y^n} - (b + \sum(w_i x_i^n)))^2$

- **Gradient Descent：**$\theta^i = \theta^{i-1} - \eta \nabla L(\theta^{i-1})$，选取先前测过的所有样本
- **Stochastic Gradient Descent：**随机取样本，**只算某一个example的损失函数，再进行参数更新**
  - 因为每次只取一个样本，计算时间变短，使得**随机梯度下降**更新参数的速度**快于梯度下降**

Feature Scaling

将不同尺度的特征值转换到相似范围，常见特征缩放方法有：**归一化**，标准化等

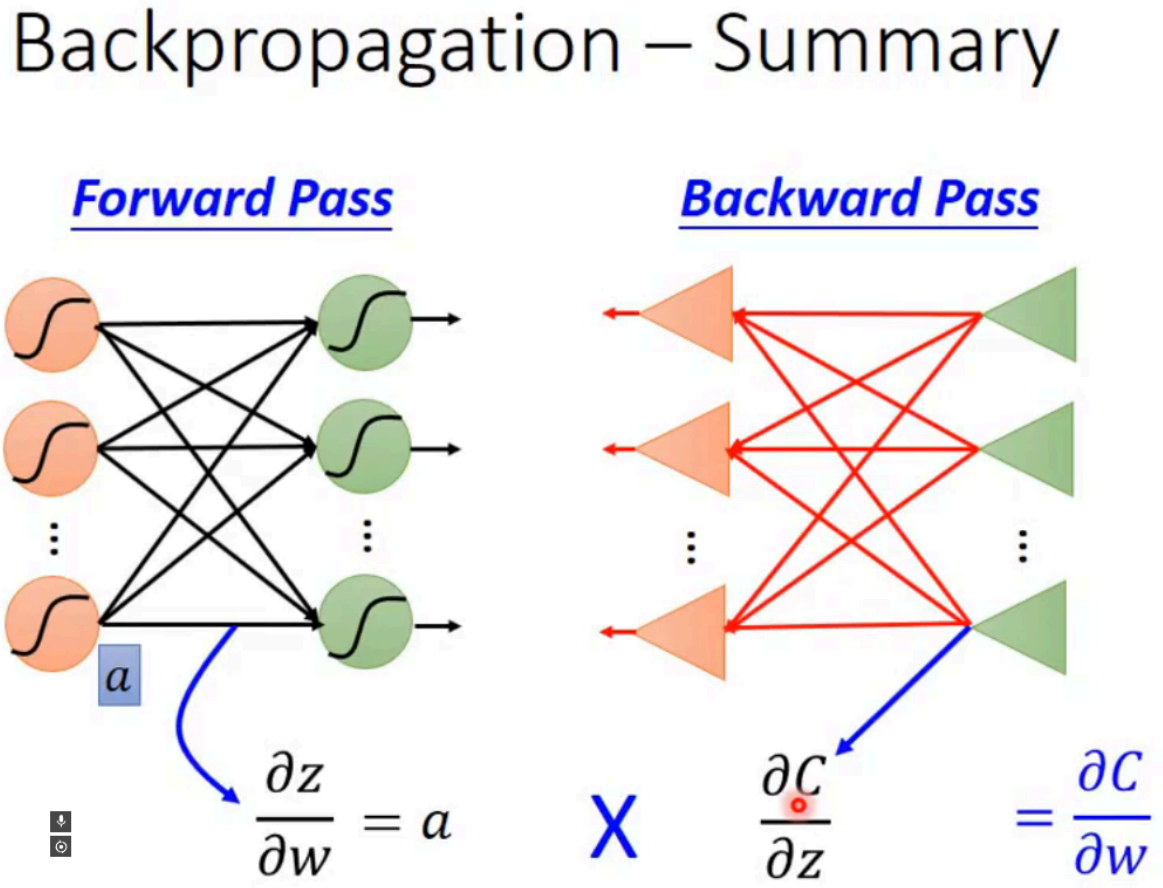
- 能够防止某些特征因数值过大主导模型训练
- 加速模型训练，有利于模型收敛

方法：

- $x_i^r \leftarrow \frac{x_i^r - m_i}{\sigma_i}$
  - 求每个维度第i个值得**均值**m_i**与方差**σ_i
  - 最后得到的数据的**均值为0，方差为1**

Backpropagation

- 由**Forward pass**和**Backword pass**组成
  - 前向传播会计算网络中**每一层输出值**和一些**特定中间值**，并计算损失
    - **特定中间值**包括一些可以直接计算的偏导数等
  - 反向传播会根据前向传播计算的**中间值**计算**张量的梯度**



Forward pass（前向传播）

Backword pass（反向传播）

BERT

做的是**文字填空**的工作

Unsupervised Learning

Self-supervised Learning

Word Embedding（词嵌入）

可以说是一种降维技术

降维过程：

1. **从高维到低维的转换：**

- 传统的词表示如独热编码**(one-hot encoding)**将每个词表示为词表大小维度的向量(可能是数万甚至数十万维)
- 词嵌入将这些高维稀疏向量转换为低维密集向量(通常仅50-300维)

2. **保留语义信息：**

- 尽管维度大幅降低，但词嵌入空间保留了词语之间的语义关系
- 相似词在嵌入空间中距离较近，实现了语义压缩

Predication-based

Prediction-based（预测式）模型 是一种通过**预测一个词或上下文中其它词**来学习词向量的方法

以根据目标词的前两个词预测目标词为例子

训练过程

1. **输入：**目标词的前两个词的单热编码（one-hot encoding）
    - 比如预测"我喜欢吃"中的"吃"，输入就是"我"和"喜欢"的单热编码
2. **转换为词向量：**单热编码与词嵌入矩阵相乘
    - "我"的单热编码 × 词嵌入矩阵 → "我"的词向量

- "喜欢"的单热编码 × 词嵌入矩阵 → "喜欢"的词向量
    - **处理词向量：**对这两个词向量进行处理
    - 可以求平均、拼接或通过其他方式组合
    - 然后通过神经网络层进行进一步处理

4. **预测目标词：**输出所有词的概率分布
    - 模型预测词表中每个词作为目标词的概率
    - 理想情况下，正确目标词的概率应该最高
5. **训练优化：**通过比较预测概率和真实标签（目标词的单热编码）来更新参数
    - 使用交叉熵损失函数
    - 反向传播更新词嵌入矩阵和其他网络参数

在基于预测的词嵌入训练中，模型会更新多个地方的参数：

1. 词嵌入矩阵（**最重要的**）：
    - 这是模型的核心参数，也是我们最终想要得到的词向量
    - 在训练过程中不断更新，使相似上下文的词获得相似的向量表示
2. 其他网络参数：
    - 如果使用了隐藏层，那么隐藏层的权重和偏置也会更新
    - 输出层的权重矩阵（用于将隐藏层表示转换为预测概率）

Seq2Seq

Sequence to Sequence Model，专门设计用于处理序列数据到序列数据的转换任务

主要组件

Seq2Seq模型的**核心架构**包括两个主要组件：

1. 编码器（Encoder）：接收输入序列，并将其编码为固定长度的上下文向量或表示
2. 解码器（Decoder）：根据编码器产生的表示生成输出序列

AT（Auto-regressive（自回归））VS NAT（Non-Autoregressive Transformer（非自回归））

自回归模型（AR/AT）：

- 顺序生成输出，每次预测一个元素（如一个词或字符）
- 每个预测依赖于先前已生成的所有元素
- 生成质量通常更高，但速度较慢
- 例如：GPT系列、**原始Transformer的解码器部分**

非自回归模型（NAT）：

- 并行生成输出，**一次性预测**所有元素
- 预测之间相互独立，不依赖于模型自己生成的其他输出
- 生成速度快（理论上可以获得显著的推理速度提升）
- 但通常质量较低，可能产生重复或缺失内容