machine learning 笔记

徐世桐

1 基础定义

二元分类：输出分类个数为 2

多元分类：输出分类个数不限

$one-versus-the-rest$ OvR：计算属于每一分类的可能性，取可能性最大的分类为输出分类

$one-versus-one$ OvO：对所有分类两两使用二元分类，每一分类器训练只需一部分数据

multilabel 多标签分类：目标检测，对一图像中的物体加 label

multioutput 多类分类：多标签分类，每一标签可包含多种信息

learning schedule：根据迭代次数更新学习率

early stopping：提早结束训练

对于每一 epoch，当验证集 MSE 值增高时，证明开始 overfit，停止训练

即在 epoch-error 图中泛化误差最低时停止训练

在训练中使用正则化代价函数，训练结束后测试中代价函数不使用正则化项

2 数学计算

MSE $= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)}-\bar{x})^2$

rigid regression：回归方法，$J(\theta)=MSE(\theta)+\frac{\alpha}{2}\sum_i\theta_i^2$

降低所有权重值

lasso regression：回归方法，$J(\theta)=MSE(\theta)+\alpha\sum_i|\theta_i|$

降低不重要的权重值

elastic net：回归方法，$J(\theta)=MSE(\theta)+\gamma\alpha\sum_i|\theta_i|+(1-\gamma)\frac{\alpha}{2}\sum_i\theta_i^2$

Normal Equation：$\hat{\theta}=(X^TX)^{-1}X^Ty$

直接得到权重 $\hat{\theta}$，适用于仅有一个输出值的模型

X 为 (批量大小, 参数个数) 输入矩阵，y 为 (批量大小,) 向量

当 X^TX 无逆矩阵时，用 psudo inverse$\hat{\theta}=X^+y$

pseudo inverse:

对矩阵 $X=USV^T$，pseudo inverse $X^+=VS^+U^T$。S^+ 求法：

1. 对所有 S 元素，接近 0 的值赋为 0
2. 对所有非零元素取倒数
3. 取矩阵转置，得到 S^+

log loss：代价函数

$J(\theta)=-\frac{1}{|B|}\sum_{i=1}^{|B|}[y^{(i)}log(\hat{p}^{(i)})+(1-y^{(i)})log(1-\hat{p}^{(i)})]$

标签值 $y^{(i)}$ 为离散 1/0 值，计算值 $\hat{p}^{(i)} \in [0,1]$

微分：** 推导 **

$\frac{dJ(\theta)}{d\theta_j} = \frac{1}{|B|}\sum_{i=1}^{|B|}(\hat{p}^{(i)} - y^{(i)})x_j^{(i)}$

Hinge loss：代价函数

$HingeLoss(y,\hat{y}) = max(0, 1 - y * \hat{y})$

应用于 SVM，$y \in \{0,1\}$，$\hat{y} \in R$

代表当预测值 $\hat{y}$ 和 y 同号，$\hat{y} \geq 1$，则预测值和标签匹配，代价 $= 0$。否则 $y * \hat{y} < 1$。代价值上升

Gaussian Radial Basis Function RBF：一种 similarity function

$\phi_\gamma(x,l) = exp(-\gamma||x-l||^2)$

l 为 landmark，即 ϕ_γ 由一样本 x_i 和一 landmark 的距离得来

Lagrange multipliers method 拉格朗日乘数法

将 有前提的多项式求最值 问题转化为 无前提多项式最值问题

定义：

对输入向量 W，$g(W) \geq 0$ 为 constrain。目标为在满足 $g(W) \geq 0$ 的前提下取 $f(W)$ 最值

Lagrange function $\mathcal{L}(W,\alpha) = f(W) - \alpha(g(W))$

α 为需要求解的变量之一，参与最终计算 W 的值。

当有多个 constrain $g^{(i)}(W)$ 时，$\vec{\alpha}$ 为向量，求偏导对每一 $\vec{\alpha}^{(i)}$ 求导

只有当 $\alpha \geq 0$ 或每一 $\vec{\alpha}^{(i)} \geq 0$，结果才有效

$\vec{\alpha}^{(i)} = 0$ 代表对应的 constrain $g^{(i)}(W)$ 为一个 support vector

计算：

对每一 W 的元素 和 α 取偏导，即向量 $\begin{bmatrix} \frac{d\mathcal{L}(W,\alpha)}{dw_1} \\ \frac{d\mathcal{L}(W,\alpha)}{dw_n} \\ ... \\ \frac{d\mathcal{L}(W,\alpha)}{dw_n} \\ \frac{d\mathcal{L}(W,\alpha)}{d\alpha} \end{bmatrix}$，计算向量 $= \vec{0}$ 时的 W, α 取值

3 分类模型

logistic regression:

判断输入符合每一输出类别的可能性，

前向计算：

1.$\hat{p} = \sigma(\theta^T x + b)$

2.$\hat{y} = 1(if \hat{p} \geq 0.5)$

$= 0(if \hat{p} < 0.5)$

代价函数为 log loss

SVM

找到分界，分离多种数据

support vector: 最靠近分界线的样本

hard margin classification 硬性分类：限制数据必须被分界隔开，同一类数据不可同时出现在分界 2 端

soft margin classification：与硬性分类相反，避免被 outlier 离群值影响

前向计算：$\hat{p} = f(x_1, x_2, ...)$，其余同 logistic regression

区别：f 可为 polynomial，非线性函数。可使用 kernel trick

线性分类训练：$\hat{p} = W^T x + b$，W 为参数**向量**

硬性分类：

$||W||_2$ 代表线性函数斜率

最小化 $\frac{1}{2}W^T W$，使得分界平面的斜率最小，最大化分界线和两种数据的距离

前提：对每一样本 i, 1.$y^{(i)}\hat{p}^{(i)} \geq 1$，即标签和计算结果相同

求解：1. 直接解以上带前提的不等式

' 当样本数高于参数数量时使用，由于 dual form 的复杂度为 $O(|S|^2)$ - $O(|S|^3)$，直接解复杂度为 $O(|S|)$'

2. 使用拉格朗日乘数法得到 dual form，其中 $\vec{\alpha}$ 为向量。$\mathbf{x}^{(i)}$ 为第 i 样本的特征值向量 $\mathcal{L} = \frac{1}{2}W^T W - \sum_{i=1}^{|B|} \vec{\alpha}^{(i)}(y^{(i)}\hat{p}^{(i)} - 1)$

使偏导向量为 $\vec{0}$，得到 $2.W = \sum_{i=1}^{m} \vec{\alpha}_i y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$, $3. \sum_{i=1}^{m} \vec{\alpha}_i y^{(i)} = 0$

带入得 $\mathcal{L}(W, \vec{\alpha}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{|B|}\sum_{j=1}^{|B|} \vec{\alpha}_i \vec{\alpha}_j y^{(i)} y^{(j)} \mathbf{x}^{(i)^T} \mathbf{x}^{(j)} - \sum_{i=1}^{|B|} \vec{\alpha}^{(i)}$

$= \frac{1}{2}\vec{\alpha}^T (\mathbf{x} * y)(\mathbf{x} * y)^T \vec{\alpha} - \sum_{i=1}^{|B|} \vec{\alpha}^{(i)}$

其中 $(\mathbf{x} * y)$ 为广播乘法 将训练集矩阵每一样本乘以对应标签值，y 为标签列向量

使用 QP solver 得到使 $\mathcal{L}(W, \vec{\alpha})$ 最小，$\vec{a}^{(i)} \geq 0$ 的向量 $\vec{\alpha}$

解 W：由 $\vec{\alpha}$ 带入 2. 式计算，$\vec{\alpha}$ 已被 clamp，见经验 2.

解 b：由于所有 support vector $\mathbf{x}^{(i)}$ 满足 1. 式，则对所有 support vector 计算 b 取平均值

$b = E_{a^{(i)} \geq 0}(y^{(i)} - W^T \mathbf{x}^{(i)})$

3. 直接进行梯度下降，代价函数 $J(W, b) = \frac{1}{2}W^T W + const \sum_i HingeLoss(y^{(i)}, \hat{p}^{(i)})$

软性分类：

最小化 $\frac{1}{2}W^T W + C\sum_{i=1}^{|B|} \zeta_i$

ζ_i 定义第 i 样本被忽视为误差样本的可能性，C 定义忽视率相对斜率的权重

前提：对每一样本 i，$y^{(i)}\hat{p}^{(i)} \geq 1 - \zeta^{(i)}$

非线性分类方法：

- 使用 polynomial 做 f

必须使用拉格朗日乘数法求解，目的为**对 $\phi(x)$ 得到线性权重和偏差**，求解使用 dual form，其中包含 $\phi(a)^T \cdot \phi(b)$ 项即可使用 kernel method

权重 W 公式不再适用，由于结果不为线性

偏差 $b = \sum_{\vec{\alpha}^{(i)} \geq 0} y^{(i)} - \sum_{\vec{\alpha}^{(j)} \geq 0} \vec{\alpha}^{(i)} * y^{(j)} * K(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)})$

- 使用 similarity function：

选择多个 landmark$\mathcal{L} = l_1, l_2, ..., l_n$，对每一样本 x_i 计算其和每一 l_j 的 ϕ_γ 值 $\phi_\gamma(x_i, l_j)$

每个样本用新的向量 $x_i' = \begin{bmatrix} \phi_\gamma(x_i, l_1) \\ \phi_\gamma(x_i, l_2) \\ ... \\ \phi_\gamma(x_i, l_n) \end{bmatrix}$ 表示。新的向量组成训练集，进行 SVM 训练

kernel：

定义：能够从输入向量 a,b，不通过计算 $\phi(a), \phi(b)$ 直接得到点乘结果 $\langle \phi(a), \phi(b) \rangle$ 的函数

例：** 是否通过取 linear 为 phi 得到 kernel 函数 **

linear: $f(a, b) = a^T b$

polynomial: $f(a,b)=(\gamma a^T b+r)^d$

poly 的 $\phi(x)$ 为对向量 x 每一元素进行 poly 运算，结果向量元素数不变

Gaussian RBF: $f(a,b)=exp(-\gamma||a-b||^2)$

Sigmoid: $f(a,b)=tanh(\gamma a^T b+r)$

经验总结:

1.QP solver 中需限定 $\sum_{i=1}^{m}\vec{\alpha}_i y^{(i)}=0$，否则得出 $\hat{\alpha}$ 不遵循此等式

2. 当样本有重叠，仍可使用拉格朗日乘数法，异常样本被分入错误类别。

此时 $\vec{\alpha}$ 包含负值，对应的样本在计算权重 偏差时被忽略，即需 clamp 使 $\vec{\alpha}\geq 0$

若不进行 clamp，得到的分界仅有略微差别，不会造成大幅误差。(在线性 非线性分类都有验证)

3. 梯度下降直接得到最优 W,b，无法通过梯度下降得到 $\vec{\alpha}$ 由于梯度下降忽略限制条件

4.QP solver 需要 $(\mathbf{x}*y)(\mathbf{x}*y)^T$ 为 positive definite，计算时加上对角矩阵 $diag(\epsilon)$ 即可，ϵ 多取 10^{-4}

否则迭代解 QP 时出现 KKT condition not met 或 positive definite 条件不满足

条件不满足时中断得到的 $\vec{\alpha}$ 无法作为有效结果参与后续计算权重和偏差

优先将此矩阵转为 float64 类型，否则需要 ϵ 较大才能保证 positive definite

4 决策树

定义:

节点 N_i:

节点条件：判断样本进入哪一子节点，叶节点没有节点条件

sample 属性 S_i：有多少样本**进入 N_i 节点**，非满足 N_i 节点条件的样本个数

value 属性 $V_i=v_{i1},...,v_{in}$：S_i 进入节点的样本中 v_i 个属于第 i 分类

gini 属性 G_i：数据混杂度，$G_i=1-\sum_{j=1}^{n}(\frac{v_{ij}}{S_i})^2$

子节点仅有 2 个，对应节点条件为 true/false 的情况

分类方式：数据从根节点开始，根据节点条件传向对应子节点。直到到达叶节点。叶节点中 V 属性中最大项即数据分类

CART algorithm 创建决策树:

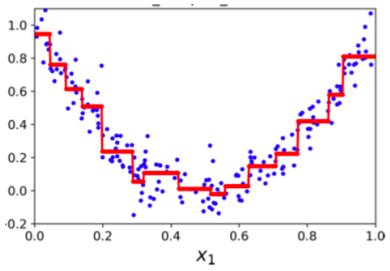
根节点初始化为叶节点，没有节点条件

对每一叶节点 S_i 选取一特征 k，一特征门槛 t_k，将样本集分为 2 组 S_{true},S_{false}。

选取 (k,t_k) 方式：使代价函数 $J(k,t_k)=\frac{S_{true}}{S_i}G_{true}+\frac{S_{false}}{S_i}G_{false}$ 最小

直到决策树层数达到固定上限，或对所有分组条件 (k,t_k)，$J(k,t_k)\geq G_i$

使用决策树进行 regression



输入样本，分类进不同值域

更改：

每一节点 value 值为一常数，为 S_i 样本的平均值。

输出值为叶节点的 value，非最大 value 对应的类别

G_i 为 S_i 样本的方差 $\frac{1}{S_i}\sum_{j=1}^{S_i}(x_i^{(j)}-\bar{x}_i)^2$

5 ensemble learning & 随机森林

ensemble learning：使用一组预测机制进行学习，预测机制可为不同算法

random forest 随机森林：

训练方法：随机选择 n 个训练子集 $s_1, s_2, ..., s_n \in S$，训练 n 个决策树 $t_1, ..., t_n$。

前向计算：对 n 个树产生的 n 个分类结果，选取投票最多的一分类作为结果

训练子集选取：bagging：子集可重复选取一样本，pasting：样本不重复

out-off-bag oob 样本：当使用 bagging 选取时，平均只有 $1-e^{-1}$ 样本被选择，余下样本被称为 oob 样本

优化：

random patches 随机贴片：对特征和训练集同时取子集进行训练

random subspace 随机子空间：对特征取子集，对整个总训练集进行训练

extra-trees 极度随机森林：' 使用随机 t_k 而不使用最小化数据混杂度的 t_k'

$k$feature importance 特征重要性：对所有取 k 为判断条件的节点 N_i，计算加权平均值 $\sum_i(S_i$imprity 降低百分比)

(hypothesis) boosting：合并多个预测机制据结果的方法

AdaBoost：串联预测机制，对上一预测机制遗漏的样本加更高权重，进行训练

gradient boosting

6 维度下降

根据 manifold assumption，高维空间中训练集参数点稀疏。则将数据压缩到低维

principle component analysis PCA：

对训练集参数矩阵取 SVDUSV^T

取 V 中前 d 个向量 $V'=[v_1, ..., v_d]$，新训练集 $A_{compressed}=A_{origin}V'$

从 新训练集 延展回 原训练集纬度：$A_{expand}=A_{compressed}V'^T$

Incremental PCA：无需整个训练集存在内存中即可进行 SVD

kernel PCA：**

local linear Embedding LLE：

对每一样本 $x^{(i)}$ 寻找 k 个相邻样本 相邻样本 index 的集合称 $C_{x^{(i)}}$

构建 $(|S|,|S|)$ 矩阵 W：

每一行向量 $[W_{i1}, ..., W_{i|S|}]$ 满足 $x^{(i)}-\sum_{j\in C_{x^{(i)}}}W_{ij}x^{(j)}$

每一行向量 W_i 求和为 1：$\sum_{i=1}^{|S|}W_i=1$

由 W 创建新训练集：

令 $z^{(i)}$ 为 $x^{(i)}$ 在低维的投影

使所有 $z^{(i)}$ 满足最小化 $(z^{(i)} - \sum_{j=1}^{|B|} w_{ij} z^{(j)})^2$

7 无监督学习

clustering

K-mean:

将数据分为 k 个 cluster，每个 cluster 有中心点称 centroid

算法:

1. 初始化随机选择 k 个样本位置做 centroid
2. 分配样本：每个样本分入距离最近的 centroid 的 cluster
3. 更新 centroid：新 centroid 为 cluster 中样本坐标平均值。

重复第 2.3. 步，直至 centroid 不再移动

迭代:

多次随机初始化 centroid，选择其中 inertia 最小的 centroid 取法进行训练

interia = $\frac{1}{|S|}\sum_x (C_x - x)^2$。

C_x 为样本 x 距离最近的 centroid

k-mean++ 初始化 centroid:

1. 随机选择 1 个样本做 centroid
2. 剩余每一样本 $x^{(i)}$ 有 $\frac{D(x^{(i)})}{\sum_{j=1}^{|S|} D(x^{(j)})}$ 几率被选做新 centroid

$D(x^{(i)})$ 为样本 $x^{(i)}$ 距离最近的 centroid 的距离

3. 重复 2. 步直至得到 k 个 centroid

（在尝试多种 cluster 训练后）选择 cluster 数量 k:

sihouette score：所有样本的 sihouette coefficient 的均值

一样本 $x^{(i)}$ 的 sihouette coefficient：$\frac{b-a}{max(a,b)}$

a 为 $x^{(i)}$ 到同一 cluster 内所有样本的平均距离

$b = min(E_{x^{(j)} \in othercluster}(D(x^{(i)} - x^{(j)})))$

sihouette score$\in [-1, 1]$，偏向取 score 高的 cluster 数

使用 k-mean 进行数据预处理:

将数据首先进行 k-mean 分类，将每一样本替换为 样本到最近的 centroid 距离，传入另一模型进行学习

用于半无监督学习：将数据进行 k-mean 分类，从每一 cluster 选取离 centroid 最近的样本，产生大小为 k 的训练集。则只需得到 k 个样本的标签即可进行训练

DBSCAN

适用于一 cluster 内样本密度较高的训练集

算法:

1. 对每一样本 x_i 计算集合 $S_{i\varepsilon}$，称 $\varepsilon - neighbourhood$，包含所有距离在 ε 内的其他样本

$|S_{i\varepsilon}| >$ 超参数 s_{min} 的样本称 core instance

2. 所有属于同一 $S_{i\varepsilon}$ 的样本判为属于同一 cluster，当一样本 x_i 同时存在样本 x_i, x_j 的 $\varepsilon - neighbourhood$ 中时，合并 $S_{i\varepsilon}, S_{j\varepsilon}$。

3. 没有被分配进任何 $S_{i\varepsilon}$ 的样本判为异常值

Gaussian Mixtures

GM Model：假设所有样本都由多个正态分部产生

8 GAN 对抗网络

基本结构：

generator：得到正则噪声，生成伪数据。

discriminator，从实际数据集或 generator 得到数据判断真伪 (是否来自实际数据集)。

一次训练：

1.discriminator 从数据集得到一批量真实数据 和 一批量伪数据。使用二元交叉熵损失函数训练

目标为：对伪数据输出 0 真数据 1

2.generator 生成图像

目标为生成 discriminator 输出为 1 的数据

Deep Convolutional GAN

9 RL 强化学习

基本定义

程序在 environment 环境中根据观测得到的 state 状态，选择 action 行为，得到 reward 反馈

模型整体符号定义 <A, S, R, P>

Action space A

State space S

Reward R: $\sum \times A \times S \to R$

Transition P: $\sum \times A \to S$

第 i 决策的符号定义：

$a_i \in A$ 采取的行为

$r_i \in R$ 得到的 reward，每一行为可以立即得到反馈值

exploring 探索：模型尝试新行为

exploiting 利用：模型使用已知高反馈行为

policy

根据观测选择 a_i 的算法

stochastic policy：policy 中有随机性

随机性提高模型 explore 新行为

generic algorithm：遗传算法

policy gradients：对参数求导，更新参数

credit assignment：

对每一决策分配 discounted reward，代表此决策对随后几次决策的反馈值影响

定义：

l 此次试验一共包含的决策数

计算：

第 $l-1$ 决策有决策有 discounted reward：$d_i = r_i$

第 i 决策有 discounted reward：$d_i = r_i + \gamma * d_{i+1}$

正则化：对所有实验中每一次决策 r_i 取整体平均值，方差，求标准化

neural network policy

前向传播：使用神经网络得到行为可能性，根据可能性选择行为。属于 generic gradient policy

单次迭代：

定义：一次决策

1. 从 policy 得到行为可能性

2. 用交叉熵代价函数求代价值，`y_hat` 为 1. 中可能性，`y` 为实际采取的行为

3. 根据代价函数求斜率，斜率使神经网络输出可能性更偏向采取的行为。**但不立即使用斜率**

1. 随机初始化 1 次模型，对 n 个随机初始化环境进行试验，每一试验中包含多个决策

每一环境得到决策数不一定相同，取决于试验中进行的决策次数

2. 对每一决策求 discounted reward，结果包含 n 组数组，第 l_i 组数组对应第 i 次实验的 discount reward 数组

3. 对所有 discounted reward 标准化，平均值 方差为所有 dis reward 值

4. 对每一参数每一决策的斜率乘对应决策的 dis reward。对结果中所有属于同一参数的乘积取平均值，为此参数的斜率

5. 使用斜率更新参数值

Markov Decison Process MPD

每一状态 s_i 有可执行的行为集合 $A_{s_i} \subseteq A$。不同状态行为集合可有交集

行为 $a_{ij} \in A_{s_i}$ 代表状态 s_i 执行行为 a_j。执行 a_{ij} 后有 p_{a_{ij},s_k} 几率到达状态 s_k

optimal state value $V^*(s_i)$：

模型到达状态 s_i 后 选择最理想的 a_{ij} 能得到的 discounted reward 总和

$V^*(s_i) = max_j \sum_s [p_{a_{ij},s_k}(R(s_i, a_{ij}, s_j) + \gamma \cdot V^*(s_j))]$

Q-value iteration algorithm：

得到 从 s_i 选择 a_{ij} 后期望的 discounted reward 值

迭代：$Q_{n+1}(s_i, a_{ij}) = \sum_j [p(a_{ij}, s_j)(R(s_i, a_{ij}, s_j) + \gamma \cdot max_{a_{jk}}(Q_n(s_k, a_{jk})))]$

policy：状态为 s_i 时选取 $a_{ij} = max_{a_{ij}} Q^*(s_i, a_{ij})$

Temporal Difference Learning TD learing

在 p_{a_{ij},s_j}, R 未知的情况下迭代得到 $V(s_i)$

Q-Learning

方法 1：在 p_{a_{ij},s_j}, R 未知的情况下**每次决策更新一个** $Q(s_i, a_{ij})$ 值。每次决策选择 $Q_{s_i,a_{ij}}$ 最大的行为

更新函数：$Q(s_i, a_{ij}) = r + \gamma \cdot max_{a_{jk}}(Q_n(s_j, a_{jk}))$

所有 $Q(s_i, a_{ij})$ 初始化为 0

r 为实际得到的 reward

$max_{a_{jk}}(Q_n(s_j, a_{jk}))$ 为估计的 discounted reward 总和，取值为：决策后**实际到达的下一状态** s_j 的所有 $Q(s_j, a_{jk})$ 中最大值

方法 2：为避免需要过多实验才能得到准确的 $Q^*(s_i, a_{ij})$，使用 $\epsilon - greedy\ policy$。

决策时每一步有 ϵ 几率随机选择下一行为，$1 - \epsilon$ 几率选择 $Q_{s_i,a_{ij}}$ 最大的行为

Q 更新函数同方法 1

方法 3：另一随机 explore 算法，使用 exploration function 根据行为被选择的次数判断行为被 explore 的程度

选择行为时仍选取 $max_{a_{ij}}Q(s_i,a_{ij})$

更新函数：$Q(s_i,a_{ij})=r+\gamma*max_{a_{jk}}f(Q_n(s_j,a_{jk}),N(s_j,a_{jk}))$

$N(s_j,a_{jk})$ 为行为 a_{jk} 在状态 s_j 下被选择的次数。

$f(Q,N)$ 根据选择次数和 Q 值决定行为的优先级。例：$f(Q,N)=Q+\frac{\kappa}{1=N}$

Approximate Q-Learning

解决当模型的状态数 行为数过大时训练过慢的问题。通过找到方程 $Q_\theta(s_i,a_{ij})$ 估计实际 $Q^*(s_i,a_{ij})$，根据给定参数向量 $\vec{\theta}$

deep Q-networks DQNs

使用神经网络估计 $Q_\theta(s_i,a_{ij})$ 值，使用的神经网络称 DQN

DQN 得到 s_i，返回 $Q_\theta(s_i,a_{ij})$。最终选取行为时根据 $Q_{target}(s_i,a_{ij})=r+\gamma*max_{a_{jk}}Q_\theta(s_j,a_{jk})$

得到训练集：

一个样本包含 s_i，a_{ij}，得到的 reward$r$，进入的下一 s_j，bool 值 *done* 代表下一状态为终止状态

将所有样本加入集合 replay buffer，取样本时随机选取，避免相邻样本的 correlation 影响训练

s_i 可为图片，无需人工得到参数

迭代：

1. 进行多组试验，每组试验的每一决策加入 replay buffer。前几次迭代不进行训练，由于 replay buffer 中样本多样性较低

2. 训练从 replay buffer 取一批量样本，对于每一样本 (s_i, a_{ij}, r, s_j, *done*)

得到 $Q_{target}(s_i,a_{ij})$

将下一状态 s_j 通过 DQN 得到向量 $Q_\theta(\vec{s_j},a_{jk})$，元素数为行为数

对 $Q_\theta(\vec{s_j},a_{jk})$ 取最大值，即得到 $max_{a_{jk}}Q_\theta(s_j,a_{jk})$ 值

根据 $max_{a_{jk}}Q_\theta(s_j,a_{jk})$ 计算 s_i 的新 target 值 $Q_{target}(s_i,a_{ij})$

得到 $Q_\theta(s_i,a_{ij})$

将 s_i 传入 DQN，得到 $Q_\theta(\vec{s_i},a_{ij})$。并和 one hot 向量点乘 得到决策实际选取的行为 a_{ij} 的 $Q(s_i,a_{ij})$

3. 代价值为一批量的 $Q_\theta(s_i,a_{ij})$ 和 $Q_{target}(s_i,a_{ij})$ 的平均平方代价值，根据代价值梯度下降训练 DQN

Fixed Q-Value Target

使用 2 神经网络，分别负责计算 Q_{target}，Q_θ

两网络初始参数一致，每 n 次循环后将计算 Q_θ 的网络参数抄入 Q_{target} 网络

计算 target 时使用 s_i 传入 Q_{target} 网络的结果。即 使得 target 计算不再每一循环一更新而是每 n 循环更新。训练更稳定

Generic algorithm

通过交换参数的一部分得到更优的参数组合

模型：

对参数向量 $\vec{x}=[x_1,x_2,...]$ 评估方程 $f(\vec{x})\in R$

目标：得到 $\vec{x}$ 使 $f(\vec{x})$ 值最大化

算法：

1. 随机初始化 n 参数向量

2. 每一迭代中取 m 个参数向量进入集合 S

取法 1：每一参数向量 $\vec{x_i}$ 有 $\frac{f(x_i)}{\sum_i f(x_i)}$ 几率被选中进入 S

取法 2：将每一参数向量 $\vec{x_i}$ 根据 $f(\vec{x_i})$ 排序，排名第 j 向量有 $P(\vec{x_i}) = p * (1-p)^(j-1)$ 几率被选中进入 S。第 m 参数向量有可能性 1−(1 到 m-1 参数可能性之和)

取法 3：定义参数向量间间距 $D(\vec{x_i}, \vec{x_j})$，用于保证选取的参数分部范围广泛

取 $f(\vec{x_i})$ 最大的 $\vec{x_i}$ 放入 m 集合

随后选取 m-1 个向量，选取 $\vec{x_j}$ 使得 $f(\vec{x_j}) * E_{v \in S}(D(\vec{x_j}, v))$ 最大的

即选取参数向量使得 其与已经选择的向量平均距离 * 自身 $f(\vec{x_j})$ 值 最大化

3. 根据最优 m 个参数向量，交换参数得到 m 个下一代参数向量，变异出剩余 n-m 个参数向量

交换参数：对 $\vec{x} = [x_1, x_2, ...]$，$\vec{y} = [y_1, y_2, ...]$ 交换结果为 $\vec{x'} = [x_1, y_2, ...]$，$\vec{y'} = [y_1, x_2, ...]$

交换元素的位置根据算法可变

变异向量由已有的 m 个后代参数向量变异得到

对 $\vec{x} = [x_1, x_2, ...]$，变异参数向量每一元素 x_i' 有 $x_i' U(-step\_size + x_i, step\_size + x_i)$

使用的分部不一定为 Uniform 分部

10 分析结果

confusion matrix 困惑矩阵：分析二元/多元分类

$$\begin{bmatrix} TN & FP \\ FN & TP \end{bmatrix}$$

一行对应同一期望输出，一列对应同一计算输出

T/F: 此位置的计算输出是否和预计输出一致

P/N: 此位置的预计输出是否为真

precision $= \frac{TP}{TP+FP}$

即 $P($ 计算结果匹配 | 计算结果为正 $)$

recall $= \frac{TP}{TP+FN}$

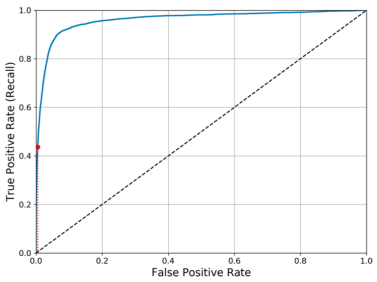
即 $P($ 计算结果匹配 | 预计结果为正 $)$

$F_1 = \frac{2}{\frac{1}{precision} + \frac{1}{recall}}$

precision 和 recall 的调和平均值

specificity $= \frac{TN}{TN+FN}$

ROC curve：分析二元/多元分类

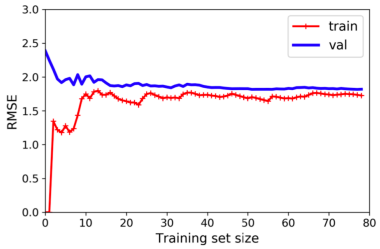


y 轴 recall 值，x 轴 false positive rate$FPR = \frac{FN}{FN+TN} = \frac{FN}{1-specificity}$

期望的 ROC curve 为 recall 从 0 快速增长到 1。并保持直到 FPR 为 1。

即期望曲线下方面积接近 1

learning curves：观察模型是否有 over underfit



x 轴为**一整次训练 (包含多次 epoch) 使用的训练集大小**，y 轴为 root MSE。

画出训练集 测试集在使用不同训练集大小后的 root MSE。

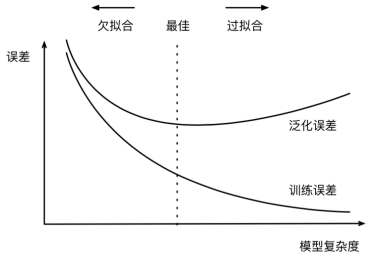
分析：

期望 2 曲线平缓值低且相近，

当 2 曲线平缓值差值较大，测试集平缓值较低，则过拟合

当 2 曲线平缓值较高，则欠拟合

模型复杂度-error epoch-error：



2 种图，形状类似，x 轴内容不同