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
semi-supervised learning: 部分样本有对应标签
weakly-supervised learning: 对样本标记包含的物体，而不标注对应目标的具体位置
non parametric model: 无法用有限的 distribution parameter 代表的模型，如 Nearest neighbour
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
curse of dimentionality
令 d 为特征数，e 为一特征覆盖范围
为了在 n 总样本中覆盖 k 个样本，平均需要 e 满足 $e^d = \frac{n}{k}$
随 d 升高，e 值接近 1。即每一特征需覆盖大部分取值范围使得 k 样本每个参数能同时被 d 个特征覆盖
其余 n-k 样本存在特征取值范围的边界上，即**距离 k 样本距离几乎相同远**
imperative programming：按照代码给定顺序执行，没有优化空间，易于 debug
symbolic programming：
仅当确定所需操作已经被全部定义才进行计算
将操作编译进可执行文件进行执行。提供输入，调用可执行文件得到结果。优化空间大
boosting
对一个模型多次初始化 学习，得到多个较弱训练结果。将参数按准确率加权求和做新模型参数
轴自注意力机制：对图像行和列分别进行自注意力机制，一种将 transformer 应用在图像上的方法
denoising self-supervised pre-training task 即 BERT 中 mask 词后训练网络预测的训练方法
language model 即根据前句预测下一词输出的模型
消融实验：去除部分算法，观察是哪一更改对模型影响最大
autoregressive：使用模型上一输出做下一次预测的输入。如 GPT，RNN

正向反向遍历时序分开进行预测仍属于 autoregressive，如双向 RNN
autoencoder：同时得到前后时序的输入，预测当前被 mask 的词。
linear protocol：迁移学习时只学习最后一 linear layer 参数
mlp：全连接层 + 激活函数，模型可有多层全连接和激活函数，在于 mlp 并非单层全连接
知识蒸馏：拥有一 teacher 网络和一 student 网络，教师网络较为复杂但有较高准确率。目标为使用较简单的 student 网络学习教师网络。

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，$y \in \{0,1\}$，$\hat{y} \in \mathbb{R}$
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

Distance Metrics

Manhattan distance(L1-norm): $d(x^{(i)}, x^{(j)}) = \sum_k |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}|$

Euclidean distance(L2-norm): $d(x^{(i)}, x^{(j)}) = \sqrt{\sum_k (x_k^{(i)} - x_k^{(j)})^2}$

Chebyshev distance(Linf-norm): $d(x^{(i)}, x^{(j)}) = \max_k |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}|$

information entropy

对单一一组数据 $X = [x_1, ...x_n]$，x_i 在 X 中出现百分比为 $p(x_i)$

X 的数据熵 $H(X) = -\sum_i p(x_i) log_2(p(x_i))$

当 x_i 为 continuous，不为离散值时，X 即一分部。此时 $H(X) = -\int_x p(x) log_2(p(x))\, dx$

3 分类模型

classification:

binary classification: 拥有 2 类标签

Multi-class classification: 拥有多类标签

Milti-lable classification: 单个样本可以属于多个标签

logistic regression:

判断输入符合每一输出类别的可能性，

分类：

Simple regression：单个样本变量个数为 1

Multiple regression：样本变量个数 > 1

Mutivariate regression: 单个样本对应标签个数 > 1

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: $f(a,b)=a^Tb$

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

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

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 KNN

lazy learner: 仅在得到特征后进行计算，得到训练集后仅仅保存训练集

定义:

得到样本集 S，每次得到需要预测的特征向量 x

算法:

从样本特征集中选取 k 个最邻近 x 的样本，距离由 distance metric 计算，返回 k 个样本标签中占比较大的标签

distance weighted KNN

算法:

对 k 个邻近样本，每一分配权重 w_i。

对 k 个样本中同一标签下的样本权重求和，总和较高的标签作为结果

取 w_i 方法 1:

1. $w_i=\frac{1}{d(x^{(i)},x)}$

2. $w_i=\frac{1}{2\pi}exp(-\frac{d(x^{(i)},x)^2}{2})$

$d(x^{(i)},x)$ 来自 distance metric

优劣:

1. k 值影响较小，由于较远的样本 w_i 较小

2. 受 curse of dimentionality 影响。可对每一特征加权重 或 feature extraction 解决

KNN regression

样本标签不为离散值，而为连续值，求 regression。

算法:

对所有可能的 feature 向量 x，取距离 x 最近的 k 个样本。

x 的标签值为 k 个样本的平均值。此值即为 regression 结果

Locally weighted regression

distance-weighted KNN，将 K 个邻近样本的距离作为权重 w_i。计算 x 标签 $= \sum_i w_i \cdot d(x^{(i)}, x)$

5 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_{ij} 个属于第 j 分类

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

在 imbalanced dataset 上训练效果不好

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

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

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

information gain 创建决策树

允许单个节点 N_i 有多个子节点 $C_i = N_j$,(在特征为离散分类时)

选取子集方式：最大化 information gain $IG(N_i, C_i) = H(N_i) - \sum_{N_j \in C_i} (\frac{S_j}{S_i} H(S_j))$

$H()$ 为 information entropy，**替换 CART 法中的 gini 属性**

所有特征为实数创建决策树：

将 S_i 样本按照实数特征排序，随后选择特征 门槛 (k, t_k)，将数据分为 2 组，最大化 information gain

即 CART algorithm，使用不同数据混杂度函数

所有特征为类别参数：

选择类别特征 t，t 中每一类别对应一子节点。即 t 的值域 = 子节点数

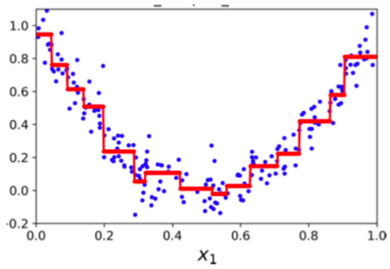
避免 overfit

1. 设置决策树层数上限

2. 设置节点样本下限，若样本数量低于下限则停止继续分类

3.pruning

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 $\frac{1}{S_i}\sum_{j=1}^{S_i}(x_i^{(j)}-\bar{x}_i)^2$

6 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

dropout 为一种 ensemble learning，由于丢弃神经元即改变网络结构

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

** 使用 bagging 无法减少 variance，需要对特征取子集提高效果 **

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

7 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 $(z^{(i)} - \sum_{j=1}^{|B|} w_{ij}z^{(j)})^2$

8 聚类分析

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，避免得到空 cluster

   当迭代过程中出现空 cluster，从其他 cluster 中分配一随机参数点给此 cluster

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，或移动距离小于定值

vornoid diagram:

画有不同 cluster 的分界线的图

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

选择 cluster 数量 k：

elbow approach:

实验多次，每次选择不同 k 值。记录最终 loss 大小，k-loss 图像应当最初快速减小，随后连线平缓。选择拐点处的 k 值作为最优超参数

cross validation:

数据分为 n fold，得到 n 组训练集，验证集分配

选择不同 k 值，对每一 k 值 在每一训练集上训练，在验证集得到验证代价值。共得到 n*k 验证代价

取 k 使得平均验证代价值最小

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

k-mode

选择 centroid 使每一特征值分别为 对应特征中出现次数最多的特征值

Probability Density Estimate PDE

得到样本分布的 pdf：$\hat{p}$，对特征 x 输出可能性 $\hat{p}(x)$

non-parametic approach：不对数据的分部做任何假设

根据整个训练集集 S 训练，lazy learning

kernel density estimation：

1.$\hat{p}(x) = \frac{1}{|S|}\sum_{x^{(i)}\in S}\frac{1}{h^D}H(\frac{x-x^{(i)}}{h})$

D 为 feature 个数，h 为 bandwidth，h^D 即 window 体积

H 称 Parzen Window/kernel function

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \forall i \in \{1,...,D\}, |x_i| < \frac{1}{2} \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

$H(\frac{x-\hat{x}^{(i)}}{h})$ 即判断 x 是否在给定数据 $x^{(i)}$h 大小 window 内

2.$\hat{p}(x) = \frac{1}{|S|}\sum_{x^{(i)}\in S}\frac{1}{(2\pi h^2)^{\frac{D}{2}}}exp(-\frac{||x-x^{(i)}||^2}{2h^2})$

parametic approach：

Gaussian distribution：假设 pdf 为 Normal 分部

直接根据训练集得到最优参数，没有迭代

1.univariate Normal distribution：仅有一特征

$\hat{p}(x) = N(x|\mu,\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}exp(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$

$\mu = \frac{1}{|S|}\sum x^{(i)}$

$\sigma^2 = \frac{1}{|S|}\sum(x^{(i)} - \mu)^2$

即 multivariate Normal dis 中 $D = 1$ 情况

2.multivariate Normal distribution：有多个特征

$\hat{p}(\mathbf{x}) = N(\mathbf{x}|\mu,\Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^D|\Sigma|}}exp(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mu)^T\Sigma^{-1}(\mathbf{x}-\mu))$

$|\Sigma|$ 项为 Σdeterminant

D 为特征数

$\mu = \frac{1}{|S|}\sum_{x^{(i)}\in S}\mathbf{x}^{(i)}$

covariance matrix $\Sigma = \frac{1}{|S|}\sum_{x^{(i)}\in S}(\mathbf{x}^{(i)} - \mu)(\mathbf{x}^{(i)} - \mu)^T$

计算 performance：neg. log-likelihood

$\mathcal{L} = -log(p(S|\mu, \Sigma)) = -\sum_{x^{(i)} \in S} log(p(\mathbf{x}^{(i)}|\mu, \Sigma))$

Theorem：当 neg. log-likelihood 最小化，μ 和 σ 有以上公式求解

$= \frac{N}{2} log(2\pi) + \frac{N}{2} log(\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{x^{(i)} \in S} (x^{(i)} - \mu)^2$

当 $\frac{d\mathcal{L}}{d\mu} = 0$ 和 $\frac{d\mathcal{L}}{d\sigma^2} = 0$，$\mu$ 和 σ 有以上公式求解

Gaussian Mixtures Model(GMM)：一种 PDE，假设所有子分部都为正态分部

参数：$\theta = \{\pi_k, \mu_k, \Sigma_k | k = 1..K\}$

共 K 个子分部，每一分部 $\sim N(\mu_k, \Sigma_k)$

使用多个子分部之和代表样本 pdf 分部，$p(x) = \sum_{k=1}^{K} \pi_k N(x|\mu_k, \Sigma_k)$

x 可为向量，则 $p(x)$ 计算方法同 Multivariate Normal Distribution

此时称多元混合高斯分布

$0 \le \pi_k \le 1$, $\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1$，保证产生的 pdf 积分为 1

迭代：

1. 随机初始化所有参数，仅保证 $\sum \pi_k = 1$

2.E-Step

对每一样本 i，子分部 k 计算 responsibility $r_{ik} = \frac{\pi_k N(\mathbf{x}^{(i)}|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_j^K \pi_j N(\mathbf{x}^{(i)}|\mu_j, \Sigma_j)}$

3.M-Step

定义 $N_k = \sum_{i=1}^{|B|} r_{ik}$ 对一子分部的 responsibility 求和

更新 $\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{|B|} r_{ik} \mathbf{x}^{(i)}$

更新 covariance matrix $\Sigma_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{|B|} r_{ik} (\mathbf{x}^{(i)} - \mu_k)(\mathbf{x}^{(i)} - \mu_k)^T$

使用当前 M-Step 已更新的 μ

更新 $\pi_k = \frac{N_k}{|B|}$

4. 当 θ 不再大幅改变，**或当 neg. log likelihood 不再下降**则停止，否则回到 2.

neg. log likelihood $\mathcal{L} = -\sum_{x^{(i)} \in S} log(p(\mathbf{x}^{(i)}|\mu, \Sigma))$

p 为 K 个子分部加权求和值，即一样本输出的 fit 值

调参：选择子分部个数 K

$BIC_K = \mathcal{L}(K) + \frac{P_K}{2} log(|B|)$

$\mathcal{L}(K)$ 为使用 K 类别时的 neg. log likelihood

当使用特征个数 n 时，$P_K = n * \frac{(n+1)n}{2} * k - 1$ 为使用的参数个数

n 对应使用的 μ 个数

$\frac{(n+1)n}{2}$covariance 参数个数，由于 Σ 为 n*n symmetric matrix

区别 K-mean：

GMM-EM 可得到一样本 i 属于每一类别 k 的可能性，即 r_{ik}

GMM-EM cluster 等高线可以为非正圆，K-mean 每一 cluster 为正圆从 centroid 向外发散

GMM-EM cluster 等高线集中程度可不同，K-mean 每一 cluster 等高线间距相同

cluster 间分界不受等高线的弧形影响，受交接的 2 子分部影响

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

9 GAN 对抗网络

基本结构:

generator G：得到正则噪声 $\mathbf{z}$，生成伪数据 $\mathbf{x}'$。目标为使 $D(\mathbf{x}') = 1$

discriminator D，从实际数据集 $\mathbf{x}$ 或伪数据集 $\mathbf{x}'$ 得到数据判断真伪。即对伪数据输出 0 真数据 1。

一次训练：(首先进行 D 更新，后进行 G 更新)

两部分使用不同 trainer，每一部分计算代价值后立即更新参数

1.discriminator 部分：

得到一批量正则噪声 $\mathbf{z}$，计算伪数据 $\mathbf{x}' = G(\mathbf{z})$，标签为 $\vec{0}$。

取一批量真实数据 $\mathbf{x}$，标签为 $\vec{1}$。

对 2 批量数据分别使用二元交叉熵损失函数训练。最终代价值为两部分代价值平均值。

调用 D 部分的 trainer

2.generator 生成数据

与 D 部分使用同一批量正则噪声，使用未更新的 G 参数和**已更新的 G 参数**前向计算。输出的标签期望为 $\vec{1}$

即代价函数为 $J_G = -ylog(D(G(\mathbf{z})))$

$= -log(D(G(\mathbf{z})))$ (y 必为 1，由于期望产生 $\mathbf{x}'$ 使 $D(\mathbf{x}') = \vec{1}$)

调用 G 部分的 trainer

Deep Convolutional GAN

VAE Divergence

定义 divergence function$D : \mathcal{P} \times \mathcal{P} \to \mathbb{R}$

有 $D(P, Q) \geq 0$，$D(P, P) = 0$

Jensen's inequality

有函数 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，random variable$\mathbf{x} \sim D$。令 $p(\mathbf{x})$ 为 D 的 pdf

则有 $E_{p(\mathbf{x})}(f(\mathbf{x})) \geq f(E_{p(\mathbf{x})}(\mathbf{x}))$

Law of Unconscious Statisticians：对 $Y = g(\mathbf{x})$

若 $E_{p_X(\mathbf{x})}(g(\mathbf{x})) < \infty$，则 $E_{p_Y(y)}(y) = E_{p_X(\mathbf{x})}(g(\mathbf{x}))$

Generalized Jensen's inequality：$E_{p_X(\mathbf{x})}(f(g(\mathbf{x}))) = f(E_{p_X(\mathbf{x})}(g(\mathbf{x})))$

Kullback-Leibler KL divergence

divergence KL：$KL(P\|Q) = \int p(\mathbf{x}) \ln(\frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})})\, dx$

令真实数据集分部 X_{data}，GAN 根据参数 θ 生成的数据集分部 X_θ

θ 代价函数 $KL(X_{data}\|X_\theta) = E_{p_{data}(\mathbf{x})}(\ln(p_{data}(\mathbf{x}))) - E_{p_{data}(\mathbf{x})}(\ln(p_\theta(\mathbf{x})))$

即最优化参数 θ 为最小化 $E_{p_{data}(\mathbf{x})}(\ln(p_\theta(\mathbf{x})))$

Variational Inference：

1. $p_\theta(\mathbf{x}) = \int p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})\, dz$

z 为 GAN 生成使用的输入 Gaussian noise，即 $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I)$

$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$ 为使用 θ 生成 $\mathbf{x}$ 特征的几率

由于对高维向量 $\mathbf{z}$ 求积分，难以计算

2. $\log(p_\theta(\mathbf{x})) = \log \int p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})\,dz$

$= \log \int q(\mathbf{z}) \frac{p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})}\,dz$

$\geq \int q(\mathbf{z}) \log(\frac{p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})})\,dz$ (由 Jensen's inequality)

$= E_{q(\mathbf{z})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))) - KL(q(\mathbf{z})\|p(\mathbf{z}))$

** 结论：$q(\mathbf{z}) \approx p_\theta(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ 时 代价值 $E_{q(\mathbf{z})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})))$ 较小 **

Variational auto-encoder

根据上结论，令 $q(\mathbf{z}) = q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$，$\phi$ 为另一神经网络，得到 $\mathbf{x}$，输出 $\mathbf{z}$。

令 $\vec{\mu}_\phi(\mathbf{x}), \log(\vec{\sigma}_\phi(\mathbf{x}))$ 为网络 $NN_\phi(\mathbf{x})$ 输出的均值 log std。有 $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ 为 $\mathcal{N}(\vec{\mu}_\phi(\mathbf{x}), diag(\vec{\sigma}^2_\phi(\mathbf{x})))$

VAE 目标即得到 ϕ,θ 使得 $L(\phi,\theta)$ 最大

$L(\phi,\theta) = E_{p_{data}(\mathbf{x})}(E_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))) - KL(q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\|p(\mathbf{x})))$

Theorem：$KL(q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\|p(\mathbf{x})) = \frac{1}{2}(\|\vec{\mu}(\mathbf{x})\|^2 + \|\vec{\sigma}(\mathbf{x})\|^2) - 2(\log(\vec{\sigma}(\mathbf{x}))\cdot\vec{1} - d)$，d 为 z 向量元素数

求导：

Monte Carlo Estimation：$L(\phi,\theta)$ 中 $E_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))) \approx \log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))$，其中 $\mathbf{z} \sim q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$

则对 θ 求导：$\frac{dL(x,\phi,\theta)}{d\theta} = \frac{d\log(p_\theta(x|z))}{d\theta}$，其中 $\mathbf{z} \sim q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$

对 ϕ 求导：$\frac{dL(x,\phi,\theta)}{d\phi} = \frac{dE_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})))}{d\phi} - \frac{dKL(q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})\|p(\mathbf{z}))}{d\phi}$

Reparameterisation trick：$\mathbf{z} \sim q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ iff $\mathbf{z} = \vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi \odot \vec{\epsilon}$，其中 $\vec{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I)$

则 $E_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))) = E_{\vec{\epsilon}\sim\mathcal{N}(\vec{0},I)}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi \odot \vec{\epsilon})))$

则 $\frac{E_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})))}{d\phi} = E_{\vec{\epsilon}\sim\mathcal{N}(\vec{0},I)}(\frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi\odot\vec{\epsilon}))}{d\phi})$

$= E_{\vec{\epsilon}\sim\mathcal{N}(\vec{0},I)}(\frac{d\mathbf{z}}{d\phi}\frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))}{d\mathbf{z}}|_{\mathbf{z}=\vec{\mu}_\phi+\vec{\sigma}_\phi\odot\vec{\epsilon}})$

$= \frac{d\mathbf{z}}{d\phi}\frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))}{d\mathbf{z}}|_{\mathbf{z}=\vec{\mu}_\phi+\vec{\sigma}_\phi\odot\vec{\epsilon}})$，其中 $\vec{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I)$

应用：

$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ 中 y 代表期望产生的数据类别，生成网络输入为 y, z

10 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

genetic 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，γ 为 discount factor

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 $V(s_i)$

更新函数：$V(s) = (1-\alpha)V(s) + \alpha \cdot (r + \gamma \cdot V(s'))$

$= \leftarrow_\alpha r + \gamma \cdot V(s')$ 简介写法

s' 为状态 s 能达到的下一状态

α 为学习率，γ 为 discount factor

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：$Q(s_i, a_{ij}) \leftarrow_\alpha r + \gamma \cdot max_{a_{jk}}(Q(s_j, a_{jk}))$

α 为学习率，γ 为 discount factor

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：$Q(s_i, a_{ij}) \leftarrow_\alpha r + \gamma * max_{a_{jk}} f(Q(s_j, a_{jk}), N(s_j, a_{jk}))$

$N(s_j, a_{jk})$ 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

Double DQN

类似 Fixed Q-Value layer，每次循环更新 Q_{target} 网络，每 n 次循环后将 Q_{target} 抄入 Q_θ

Pritorized Experience Relay

Evolutionary 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 $f(\vec{x}) \in \mathbb{R}$

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

tornament 取法：每次随机选择 n 个参数向量，选择其中 fit 值最高者加入 S

支持 concurrent 创建 S

无需准确得到 fit 值，只需能够比较两参数向量优劣即可

Elitism 取法：选择 fit 最优的部分参数向量直接加入 S，比例多取 10%

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

4. 当迭代次数达到限制，当一参数向量 fit 值达到限度，当 fit 值不再大幅改变，停止

Genetic algorithm

定义：

Gene：单一可选的参数值

Genetype：一段二进制值，对应一参数向量

当参数使用编码导致可选值大于限定值域，将多余编码的评估值设为 0，使其不被选入下一迭代

Phenotype：将 Genetype 分离成单个参数对应参数向量中每一元素

crossover 交换数据时交换 Genotype 一段 bit 值

mutation 变异：每一 bit 有 m 几率取相反值，m 常取 $\frac{1}{genotype\_length}$

Evolutionary strategy $(\mu+\lambda)$ **- ES**

定义：

Genotype：一数组实数

μ, λ 为给定超参数。常取 $\frac{\lambda}{\mu}=5$

初始化：随机创建 $\mu+\lambda$ 个参数向量

选择 S：选择 fit 值最高的 μ 个参数向量

生成下一迭代参数：

1. 使用超参数 σ：随机选择 λ 个向量 $\vec{x}_i$，分别生成 $\vec{x}_j=\vec{x}_i+N(0,\sigma)$

   + 为对每一 $\vec{x}_i$ 中参数值加 normal 变量

   σ 较大则数据分散。较小则学习率低，受局部最优影响。

2. 在迭代过程中改变 σ，有超参数 $\tau_0 \propto \frac{1}{\sqrt{n}}$，n 为参数向量元素数

   前一迭代有 σ_i，选择 λ 个参数向量 $\vec{x}_i$

   下一迭代有 $\sigma_j=\sigma_i exp(\tau_0 N(0,1))$

   生成新参数向量 $\vec{x}_j=\vec{x}_i+\sigma_j N(0,1)$

Novelty Search

定义：

Novelty(x, A) $=\frac{1}{N}\sum_i^N d(x,x_i)$，即参数向量到 A 中 N 个邻近参数向量的平均距离。A 为 Novelty Archive，为一参数向量集合

behavioural descriptor：定义参数向量对应的策略类型，Novelty Search 目标为找到合适的 behaviour descriptor

迭代：

fit 函数即 Novelty(x)，一次迭代从参数向量中选择 Novelty 最高向量加入 Archive，由 archive 生成下一代参数向量

Novelty Search with Local Competition

为一 Multi-objective EA：同时最大化 Novelty 和 Local Competition

Local Competition LC(x)：对 Archive 中邻近的 N 个参数向量，其中 fit 值 < f(x) 的向量个数

迭代时将 $f(x_i)<f(x)$ 的 x_i 替换为 x

MAP-Elites

将参数向量对应到 2d 网格，每一格仅存在 0-1 个向量。

向量在网格的分部不一定为 uniform

迭代时随机选择一个参数，变异。得到新的参数向量对应网格中一格，若已有一参数向量对应此格，则选择两参数向量中 fit 值较大的加入 archive，较小参数被移除

performance 计算：

diversity：archive size，即网格中有参数对应的格数

fit 值：archive 中参数的最大或平均 fit 值

converge 速度

QD-Score：archive 中参数的 fit 值总和
假设 fit 值全部为正
同时考虑 diversity 和 fit 值的表现

11 机器翻译

分析翻译结果
Bilingual Evaluation understudy BLEU-n：
对预测翻译 $\hat{s} = [\hat{s}_1, \hat{s}_2, ...]$，计算和给定目标翻译 s 的相似度
BLEU-n= $BP * (\prod_i^n (i \cdot precision(i)))^{\frac{1}{n}}$
$precision(i)$：
使用 i 词长度的窗口，选取 $\hat{s}$ 的子字符串 $\{[\hat{s}_1, ..., \hat{s}_i], [\hat{s}_2, \hat{s}_{i+1}], ...\}$
$precision(i) =$ 子字符串中同时为目标翻译 substring 的个数 / 子字符串个数
$BrevityPenaltyBP$：当输出远小于目标长度，惩罚更多
$BP = \min(1, \frac{|\hat{s}|}{|s|})$
BERTScore：
对预测和目标翻译每一词转为词向量
对每一目标词向量，和每一预测词向量点乘，取最高值作为权重
求目标词权重平均值，当赋目标词权重时可计算加权平均值
Recurrent Network Machine Translate RNMT
使用两 RNN，分别为 encoder，decoder
encoder RNN 得到输入句，产生隐藏状态作为 decoder 的隐藏状态。
decoder 初始输入为 $< s >$ 代表句子开始产生词序，直至输出为 $< /s >$ 作为句末结束

12 分析结果

训练过程
分离训练，验证，测试数据集：
- 将数据集按 (0.6, 0.2, 0.2) - (0.8, 0.1, 0.1) 分为训练 验证 测试集
- cross validation
样本分为 N 个 fold$F = \{f_1, ..., f_N\}$
1.k-fold cross validation
当无需对超参数调参时使用，不能分离验证集的原因为：验证集过小，将没有代表性
算法：
$f_1, ..., f_N$ 分别作为测试集 f_i，剩余 N-1 fold$\{F \setminus f_i\}$ 作为训练集。进行 N 次训练，得到 N 个**同一超参数**产生的训练结果
N 个训练后模型在对应测试集准确率为 $x_1, ..., x_N$。**模型的**准确率为 $\frac{1}{N}\sum_i x_i$
2.nested k-fold cross validation
比较 M 组不同超参数 $p_1, ..., p_M$ **时使用**
算法：
$f_1, ..., f_N$ 分别作为测试集 f_i，在剩余 N-1 fold$\{F \setminus f_i\}$ 中每一 fold 分别作为验证集 f_j。

- 每次 tuning 使用 $\{F \setminus \{f_i, f_j\}\}$ 做训练集，f_j 做验证集。
- 每一 p_m 在 $f_j \in \{F \setminus f_i\}$ 上测试有平均验证代价值 $c_{(p_m, f_j)}$
- 对每一 p_m，得到 p_m 的平均验证代价值。取代价值最小的模型 p_i^* 在测试集 f_i 上测试

最优模型在测试集上得到测试集代价值 $c_{(p_i^* f_i)}$。最终总代价值为 $\sum_i \frac{c_{(p_i^* f_i)}}{N}$

最终测试集代价平均值为**选取模型的算法的代价值**

hyperparameter tuning 得到最优模型设计：

使用不同超参数在训练集上训练，得到多个训练结束的模型。

在验证集上测试，选取准确度最高的 hyperparameter。选取 hyperparameter 后可将测试集和验证集合并重新训练，使模型使用的训练数据集更大。

最终在测试集上运行，得到模型准确度。

confusion matrix 困惑矩阵：分析二元/多元分类

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

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期望输出一致

P/N: 此位置的计算输出是否为真

对一个类别/一元：

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

即 $P($ 计算结果匹配 | 计算结果为正 $)$：所有计算为真的样本中预测正确的概率

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

即 $P($ 计算结果匹配 | 期望结果为正 $)$：所有期望为真的样本被正确预测的概率

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

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

precision 和 recall 的调和平均值

$F_\beta = (1+\beta^2) \cdot \frac{precision \cdot recall}{(\beta^2 \cdot precision) + recall}$

β：当 precision 为 recallβ 倍重要

accuracy $= \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$

classification error = 1 - accuracy

macro-average recall：所有 recall 的平均值，此处 recall 为每行正确预测的概率

macro-average precision：所有 precision 平均值，即每列求 precision 取均值

多类标签 confusion matrix

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

对第一类标签的 confusion matrix

micro-avaeraging：将所有类别的 TP 之和 / 所有类别的 TP + FN 之和

当所有样本只能符合一个类别时 = accuracy

imbalanced dataset

1 类标签样本数远多于另一样本

1. 将 confusion matrix 所有值换为关于横行的百分比，**假设所有期望类别下的样本数相同**
2. down/up sample：舍弃/复制部分样本，使每一期望类别下样本数相同

无法反应整个模型 generalise 性，由于实际使用时数据为 imbalance 的

confidence interval

true error$error_D(h)$：模型 h 实际的代价值

sample error$error_S(h)$：模型 h 在测试集上运行的平均代价值 或预测错误类别的样本比例

error 的 confidence interval= $error_S(h) \pm Z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{error_S(h)(1-error_S(h))}{n}}$

比较两个模型

randomisation test：随机交换 2 模型多个测试结果，比较交换前后模型 performance

two-sample T-test：两模型在不同测试集上测试，得到 performance 个数不同。使用 common variance 求 p 值

paired T-test：两模型在相同测试集上测试，performance 个数相同。取 performance 差求 T-test p 值

p-hacking

定义：模型依赖于无关的参数得到 p 值 <sig. level

例：对 M pair 特征，验证是否两个参数存在相关性。当增加实验的特征对时，仅有小部分相关性真实存在

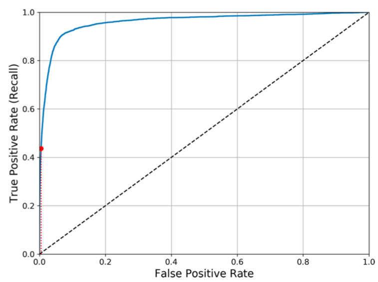
解决：

对 M 组特征的 p 值排序，得到 $p_i < ... < p_M$

第 i 位置的特征使用 sig. level$z_i = sig.level * \frac{i}{M}$

实际存在的特征对 i 为 $p_i < z_i$

ROC curve：分析二元/多元分类

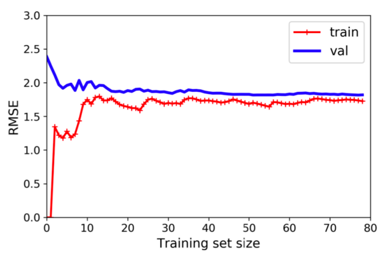


y 轴 recall 值，x 轴 false positive rate$FPR = \frac{FN}{FN+TN} = \frac{FN}{1-specificity}$

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。

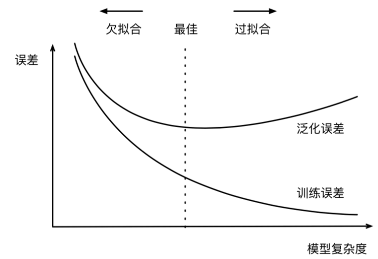
分析：

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

13 数学系笔记

Spectral Factorization Theorem

Thoeorem：对 Symmetric matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

存在 orthogonal matrix $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$，对角矩阵 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 使得 $U^T AU = D$

Rayleigh quotient：对 symmetric matric A，$R_A(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^T A\vec{x}}{\|\vec{x}\|}, \forall \vec{x} \neq \vec{0}$

由 Spectral Factorization Theorem：令 $\lambda_{min}, \lambda_{max}$ 为 A 的最大最小 eigenvalue

则 $\lambda_{min} \leq R_A(\vec{x}) \leq \lambda_{max}$ open ball：$B(\vec{c}, r) = \{x|\|\vec{x} - \vec{c}\| < r\}$

closed ball：$B[\vec{c}, r] = \{x|\|\vec{x} - \vec{c}\| \leq r\}$

interior point：对集合 $U \subseteq \mathbb{R}^n$, $c \in U$

U 的 interior point 集合 $interior(U) = \{\vec{x} \in U|B(\vec{x}, r) \subseteq U, r > 0\}$

Closed Set

集合 $U \subseteq \mathbb{R}^n$ 为 closed：对所有 converge 的子集 $\{\vec{x}_i\} \subseteq U$，$\lim_{i\to\infty} \vec{x}_i = \vec{x}^*$)，则 $\vec{x}^* \in U$

Closure

对集合 $U \subseteq \mathbb{R}^n$ 的 closure$cl(U) = \bigcap\{T|U \subseteq T, Tclosed\}$

即最小的 close 集合 T 使得 $U \subseteq T$

求导

Directional derivative：对定义在 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 上的函数 f，

令 $\vec{x} \in interior(S), \vec{d} \in \mathbb{R}^n$

若存在 $\lim_{x\to 0} \frac{f(\vec{x}+t\vec{d})}{t}$，则称此为 f 在 $\vec{x}$ 沿 $\vec{d}$ 方向的 directional derivative

Partial derivative：当 Directional derivative 中 $\vec{d}$ 为仅有 i 位置为 1，其余为 0 的向量 $\vec{e}_i$。

写作 $\frac{df}{d\vec{x}_i}|\vec{x}$

在点 $\vec{x}$，对每一 $\vec{x}_i$ 位置求 partial derivative：$\nabla f(\vec{x}) = [..., \frac{df}{d\vec{x}_i}|\vec{x}, ...]^T$

Continuous Differentiability：当定义在 open set $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 上的函数 f 所有的 partial derivative 都存在

写作 $(\nabla f(\vec{x}))^T d, \vec{x} \in U, \vec{d} \in \mathbb{R}^n$

Linear Approximation Theorem：令函数 f 定义在 open set $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 上

取 $\vec{x} \in U, r > 0$ 使得 $B(\vec{x}, r) \subseteq U$, 则对任意 $\vec{y} \in U$ 存在 $\xi \in [\vec{x}, \vec{y}]$ 使得

$f(\vec{y}) = f(\vec{x}) + (\nabla f(\vec{x}))^T(\vec{y} - \vec{x}) + \frac{1}{2}(\vec{y} - \vec{x})^T \nabla^2 f(\xi)(\vec{y} - \vec{x})$

Quadratic Approximation Theorem：

同 Linear Approximation Theorem，无需取 ξ，有

$f(\vec{y}) = f(\vec{x}) + (\nabla f(\vec{x}))^T(\vec{y} - \vec{x}) + \frac{1}{2}(\vec{y} - \vec{x})^T \nabla^2 f(\vec{x})(\vec{y} - \vec{x}) + o(\|\vec{y} - \vec{x}\|^2)$

o 为 complexity bonud

stationary point：对集合 $U \subseteq \mathbb{R}^n$，函数 f 定义在 U 上

saddle point：非 maximum 和 minimum 的 stationary point

若 f 在 $\vec{x}$ 的 hessian matrix$\frac{d^2 f(\vec{x})}{d\vec{x}^2}$ 为 indefinite，则点 $\vec{x}$ 为 saddle point

coerciveness：令 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 为 continuous function

若 $\lim_{\|\vec{x}\| \to \infty} f(\vec{x}) = \infty$，则 f 为 coercive

Global Optimality Condition Theorem：

令函数 f 定义在 $\mathbb{R}^n$ 上，2 次 continuous differentiable，对任意 $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ 有 $\nabla^2 f(\vec{x})$semi positive definite。

令 $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^n$ 为任意 f 上 stationary point，则 $\vec{x}^*$ 为 $f$global minimum point

证明：

任取 $\vec{y} \in \mathbb{R}^n$。

由于 $\vec{x}$ 为 stationary point，$\nabla f(\vec{x}) = \vec{0}$

由 Linear Approximation theorem，有 $f(\vec{y}) = f(\vec{x}) + \vec{0}^T(\vec{y} - \vec{x}) + \frac{1}{2}(\vec{y} - \vec{x})^T \nabla^2 f(\xi)(\vec{y} - \vec{x})$

由于 $\nabla^2 f(\vec{x})$semi positive definite，有 $(\vec{y} - \vec{x})^T \nabla^2 f(\xi)(\vec{y} - \vec{x}) \geq 0$

则 $f(\vec{y}) \geq f(\vec{x}^*)$，$\vec{x}$ 为最小值点

quatratic function：函数 f 定义在 $\mathbb{R}^n$ 上。

定义：$f(\vec{x}) = \vec{x}^T A x + 2\vec{b}^T \vec{x} + c$，其中 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$symmetric，$b \in \mathbb{R}^n$，$c \in \mathbb{R}$

$\nabla f(\vec{x}) = 2A\vec{x} + 2\vec{b}$

$\nabla f(\vec{x}) = 2A$

当 $A = S^T S$，A semi positive definite

lemma：A positive definite iff $f$coercive

Theorem：$\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^n, f(\vec{x}) \geq 0$ iff 矩阵 $\begin{bmatrix} A & b \\ b^T & c \end{bmatrix}$ semi positive definite

decent direction

令 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 为 continuous differentiable

定义 $\vec{d} \in \mathbb{R} \neq \vec{0}$ 为 $\vec{x}$ 点的 decent direction：$\nabla f(\vec{x})^T \vec{d} < 0$

Lipschitz Gradient：令函数 fContinuous differentiable，定义在 $\mathbb{R}^n$

定义 f 有 Lipschitz Gradient：存在 $L > 0$，使得对任意 $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n$，$\|\nabla f(\vec{x}) - \nabla f(\vec{y})\| \leq L\|\vec{x} - \vec{y}\|$

L 称有 Lipschitz Constant

$C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$：定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的，有 Lipschitz Const 为 L 的函数集合

linear function 属于 $C_0^{1,1}$

quadratic function$f(\vec{x}) = \vec{x}^T A\vec{x} + 2\vec{b}^T \vec{x} + c$，最小 L 为 $2\|A\|_2$

Theorem：

令 f 定义在 $\mathbb{R}^n$ 上，二次 Continuous Differentiable。则 $f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$ iff $\forall \vec{x} \in \mathbb{R}^n, \|\nabla^2 f(\vec{x})\| \leq L$

stepsize selection(learning rate)α 每次迭代中选择学习率

每次更新中 $\vec{x}' = \vec{x} + \alpha\vec{d}$

constant：α 为常数

Exact stepsize：$\alpha = argmin_\alpha f(\vec{x} + \alpha\vec{d})$

Backtracking (Armijo rule)：

使用参数 $s > 0, a \in (0,1), b \in (0,1)$

初始化 $\alpha = s$，从较大 α 值开始，即初始时

每次迭代 $\alpha = b\alpha$，直至代价函数减少量 $f(\vec{x}) - f(\vec{x} + \alpha\vec{d}) \geq -a\alpha\nabla f(\vec{x})^T\vec{d}$

减小量不等式称 Sufficient Decrease Property

Sufficient decrease of gradient method Lemma：

令 $f \in C_L^{1,1}$，$\{\vec{x}\}$ 为由 gradient method 产生的 $\vec{x}$ 数列

有 $f(\vec{x}_i) - f(\vec{x}_{i+1}) \geq M\|\nabla f(\vec{x}_i)\|^2$

$$\mathrm{M} = \begin{cases} \alpha(1-\frac{\alpha L}{2}) & const\alpha \\ \frac{1}{2L} & exactstepsize \\ \alpha\min(s, \frac{2(1-\alpha)\beta}{L}) & backtracking \end{cases}$$

Converge of Gradient method Theorem：

令 $f \in C_L^{1,1}(\mathbb{R}^n)$。存在 $m \in \mathbb{R}$，对任意 $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$，$f(\vec{x}) > m$

则：1. $f(\vec{x}_{i+1}) < f(\vec{x}_i)$，除非 $\nabla f(\vec{x}_i) = 0$

2. $\lim_{i\to\infty} \nabla f(\vec{x}_i) = 0$

令矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ positive definite，令 $\lambda_{max}, \lambda_{min}$ 为 A 最大 最小 eigenvalue

Kantorovich inequality：$\vec{x} \in \mathbb{R}^n, \vec{x} \neq \vec{0}$，有 $\frac{(xTx)^2}{(x^TAx)(x^TA^{-1}x)} \geq \frac{4\lambda_{max}\lambda_{min}}{(\lambda_{max}+\lambda_{min})^2}$

Theorem：$\{\vec{x}\}$ 为 gradient method 解 $\min \vec{x}^T Ax$ 产生的 $\vec{x}$ 数列，则 $f(\vec{x}_{k+1}) \leq (\frac{\lambda_{max}-\lambda_{min}}{\lambda_{max}-\lambda_{min}})^2 f(\vec{x}_i)$

由 Kantorovich inequality 证得，可得出 cond(A) 较高时 converge 缓慢

scaled gradient method：解决 converge 较慢问题

Lemma：将代价函数 $f(\vec{x})$ 转为 $g(\vec{y}) = f(S\vec{y})$，其中 $\vec{x} = S\vec{y}$，$\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^n$，$S$ 为 nonsingular 矩阵

则有 $\nabla g(\vec{y}) = S^T\nabla f(Sy) = S^T\nabla f(\vec{x})$。带入 $g(\vec{y})$ 的迭代中，$\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i - \alpha_i S^T\nabla f(S\vec{y}_i)$

$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i - \alpha_i SS^T\nabla f(\vec{x}_i)$

由于 SS^Tpositive definite，$-SS^T\nabla f(\vec{x}_i)$ 为一新 decent gradient

选择 SS^T：

$\nabla^2 g(\vec{y}) = S\nabla^2 f(Sy)S = S\nabla^2 f(\vec{x})S$

目标为选择 S 使得 $S\nabla^2 f(\vec{x})S$ cond 值较小

方法 1. Newton's method：$SS^T = \nabla^2 f(\vec{x})^{-1}$

方法 2. $SS^T = diag((\frac{d^2 f(\vec{x})}{d\vec{x}_i^2})^{-1})$