

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

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: $\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T y$

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 $X^T X$ 无逆矩阵时, 用 pseudo 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

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

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:

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

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 $X = [x_1, \dots, x_n]$, 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

Multi-label 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

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

前向计算:

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

$$2. \hat{y} = 1(\text{if } \hat{p} \geq 0.5) \\ = 0(\text{if } \hat{p} < 0.5)$$

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: $\hat{p} = f(x_1, x_2, \dots)$, 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 , $1 \cdot y^{(i)} \hat{p}^{(i)} \geq 1$, 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 $2.W = \sum_{i=1}^m \vec{\alpha}_i y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)}$, $3. \sum_{i=1}^m \vec{\alpha}_i y^{(i)} = 0$

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

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, $\vec{\alpha}^{(i)} \geq 0$ 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 $J(W, b) = \frac{1}{2} W^T W + \text{const} \sum_i \text{HingeLoss}(y^{(i)}, \hat{p}^{(i)})$

软性分类:

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

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

- 使用 **similarity function**:

选择多个 landmark $\mathcal{L} = l_1, l_2, \dots, l_n$, 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 $x'_i = \begin{bmatrix} \phi_\gamma(x_i, l_1) \\ \phi_\gamma(x_i, l_2) \\ \dots \\ \phi_\gamma(x_i, l_n) \end{bmatrix}$ 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 $\sum_{i=1}^m \tilde{\alpha}_i y^{(i)} = 0$, 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 $\tilde{\alpha}$ 包含负值, 对应的样本在计算权重 偏差时被忽略, 即需 clamp 使 $\tilde{\alpha} \geq 0$

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 $\tilde{\alpha}$ 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 $\text{diag}(\epsilon)$ 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 $\tilde{\alpha}$ 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

5 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：

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

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

$d(x^{(i)}, x)$ 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 dimensionality 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 $= \sum_i w_i \cdot d(x^{(i)}, x)$

6 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 $V_i = v_{i1}, \dots, v_{in}$ ： 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 ，一特征阈值 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

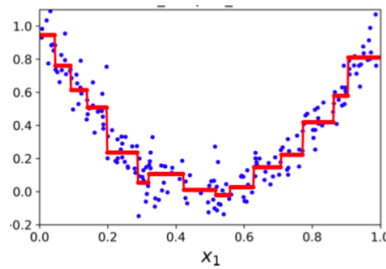
所有特征为类别参数：

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

7 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 $s_1, s_2, \dots, s_n \in S$ ，训练 n 个决策树 t_1, \dots, 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

kfeature 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 $\sum_i (S_i \text{imprity 降低百分比})$

(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

8 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 $V' = [v_1, \dots, v_d]$, 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 $[W_{i1}, \dots, W_{i|S|}]$ 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 $(z^{(i)} - \sum_{j=1}^{|B|} w_{ij}z^{(j)})^2$

9 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

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

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

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

silhouette score: 所有样本的 silhouette coefficient 的均值

一样本 $x^{(i)}$ 的 silhouette 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

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

silhouette 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-parametric 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:

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

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

H 称 Parzen Window/kernel function

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

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

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

parametric 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

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

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

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

即 multivariate Normal dis 中 $D = 1$ 情况

2.multivariate Normal distribution: 有多个特征

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

$|\Sigma|$ 项为 Σ determinant

D 为特征数

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

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

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

Gaussian Mixtures: 一种 PDE

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

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

GM Model(GMM): 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 $\sim N(\mu_k, \Sigma_k)$

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

更新 $\pi_k = \frac{N_k}{|B|}$

4. 当 θ 不再大幅改变则停止, 否则回到 2.

调参: 选择子分部个数 K

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

$\mathcal{L}(K)$ 为 K 类别的 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 $n \times n$ 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 $S_{i\epsilon}$, 称 ϵ -neighbourhood, 包含所有距离在 ϵ 内的其他样本
 $|S_{i\epsilon}| >$ 超参数 s_{min} 的样本称 core instance
2. 所有属于同一 $S_{i\epsilon}$ 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 ϵ -neighbourhood 中时, 合并 $S_{i\epsilon}, S_{j\epsilon}$ 。
3. 没有被分配进任何 $S_{i\epsilon}$ 的样本判为异常值

10 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 从数据集得到一批真实数据和一批伪数据。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

11 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 $\langle A, S, R, P \rangle$

Action space A

State space S

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

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

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, γ 为 discount factor

计算:

第 $l-1$ 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, $\mathbf{y_hat}$ 为 1. 中可能性, \mathbf{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 Decision 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_{ij} 。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

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

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

Temporal Difference Learning TD learning

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

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

$N(s_j, a_{jk})$ 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 $Q_{target}(s_i, a_{ij}) = r + \gamma \cdot \max_{a_{jk}} Q_{\theta}(s_j, a_{jk})$ 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 $Q_{\theta}(s_j, a_{jk})$, 元素数为行为数

对 $Q_{\theta}(s_j, a_{jk})$ 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

Prioritized Experience Relay

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 $\vec{x} = [x_1, x_2, \dots]$ 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 $\frac{f(\vec{x}_i)}{\sum_i f(\vec{x}_i)}$ 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 $1 - (1 \text{ 到 } m-1 \text{ 参数可能性之和})$

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 $\vec{x} = [x_1, x_2, \dots]$, $\vec{y} = [y_1, y_2, \dots]$ 交换结果为 $\vec{x}' = [x_1, y_2, \dots]$, $\vec{y}' = [y_1, x_2, \dots]$

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 $\vec{x} = [x_1, x_2, \dots]$, 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

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 $F = \{f_1, \dots, f_N\}$

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, \dots, 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, \dots, 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, \dots, p_M 时使用

算法：

f_1, \dots, 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，得到多个训练结束后的模型。

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：

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

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

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

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

$$\text{specificity} = \frac{TN}{TN+FP}$$

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

precision 和 recall 的调和平均值

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

β ：当 precision 为 recall β 倍重要

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

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

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

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

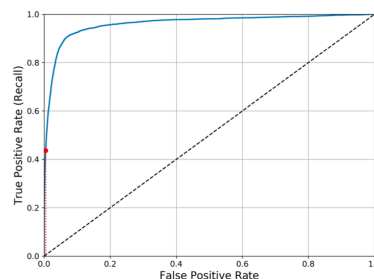
解决:

对 M 组特征的 p 值排序, 得到 $p_i < \dots < p_M$

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

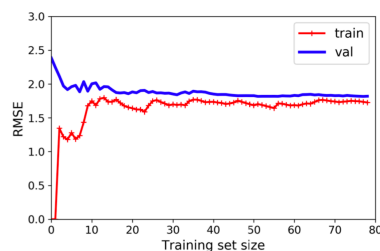


y 轴 recall 值, x 轴 false positive rate $FPR = \frac{FN}{FN+TN} = \frac{FN}{1-specificity}$

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。

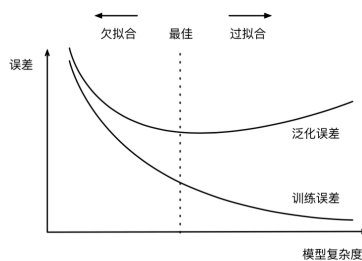
分析:

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