

# 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

## 2 数学计算

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

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

降低所有权重值

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

降低不重要的权重值

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

**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  $X = U S V^T$ , pseudo inverse  $X^+ = V S^+ U^T$ 。  $S^+$  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,  $y \in \{0, 1\}$ ,  $\hat{y} \in \mathbb{R}$

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  $\phi_\gamma$  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  $\mathcal{L}(W, \alpha) = f(W) - \alpha(g(W))$

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

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  $\log \text{loss}$

### 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  $\frac{1}{2}W^TW$ , 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  $\mathcal{L} = \frac{1}{2}W^TW - \sum_{i=1}^{|B|} \vec{\alpha}^{(i)}(y^{(i)}\hat{p}^{(i)} - 1)$

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

其中  $(\mathbf{x} * \mathbf{y})$  为广播乘法 将训练集矩阵每一样本乘以对应标签值,  $\mathbf{y}$  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  $J(W, b) = \frac{1}{2}W^TW + \text{const} \sum_i \text{HingeLoss}(y^{(i)}, \hat{p}^{(i)})$

**软性分类:**

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

$\zeta_i$  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  $\mathcal{L} = l_1, l_2, \dots, l_n$ , 对每一样本  $x_i$  计算其和每一  $l_j$  的  $\phi_\gamma$  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  $(\mathbf{x} * \mathbf{y})(\mathbf{x} * \mathbf{y})^T$  为 positive definite, 计算时加上对角矩阵  $\text{diag}(\epsilon)$  即可,  $\epsilon$  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  $\epsilon$  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:

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

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

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

## 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  $V_i = v_{i1}, \dots, v_{in}$ ：  $S_i$  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 阈值  $(k, t_k)$ ，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

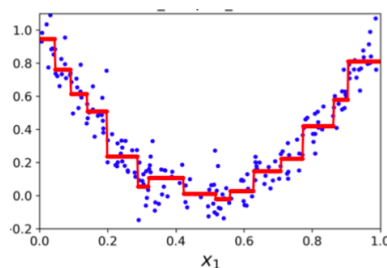
所有特征为类别参数：

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  $s_1, s_2, \dots, s_n \in S$ , 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-of-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  $t_k$  '

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

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

## 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

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

$C_x$  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

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

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-parametric approach: 不对数据的部分做任何假设

根据整个训练集  $S$  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

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

$H(\frac{x - \hat{x}^{(i)}}{h})$  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

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

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

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

即 multivariate Normal dis 中  $D = 1$  情况

2. multivariate Normal distribution: 有多个特征

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

$|\Sigma|$  项为  $\Sigma$  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,  $\mu$  和  $\sigma$  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  $\sigma$  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,  $p(x) = \sum_{k=1}^K \pi_k N(x|\mu_k, \Sigma_k)$

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

此时称多元混合高斯分布

$0 \leq \pi_k \leq 1, \sum_{k=1}^K \pi_k = 1$ , 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  $\mu$

更新  $\pi_k = \frac{N_k}{|B|}$

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

$p$  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  $\mu$  个数

$\frac{(n+1)n}{2}$  covariance 参数个数, 由于  $\Sigma$  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  $S_{i\epsilon}$ , 称  $\epsilon$ -neighbourhood, 包含所有距离在  $\epsilon$  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  $\epsilon$ -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

## 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  $J_G = -y \log(D(G(\mathbf{z})))$

$= -\log(D(G(\mathbf{z})))$  ( $y$  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  $D : \mathcal{P} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$

有  $D(P, Q) \geq 0$ ,  $D(P, P) = 0$

### Jensen's inequality

有函数  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , 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:  $KL(P \| Q) = \int p(\mathbf{x}) \ln\left(\frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})}\right) d\mathbf{x}$

令真实数据集分部  $X_{data}$ , GAN 根据参数  $\theta$  生成的数据集分部  $X_\theta$

$\theta$  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  $\theta$  为最小化  $E_{p_{data}(\mathbf{x})}(\ln(p_\theta(\mathbf{x})))$

Variational Inference:

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

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

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

$\geq \int q(\mathbf{z}) \log\left(\frac{p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})}{q(\mathbf{z})}\right) d\mathbf{z}$  (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  $\mathcal{N}(\vec{\mu}_\phi(\mathbf{x}), \text{diag}(\vec{\sigma}_\phi^2(\mathbf{x})))$  VAE 目标即得到  $\phi, \theta$  使得  $L(\phi, \theta)$  最大

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

Theorem:  $KL(q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p(\mathbf{z})) = \frac{1}{2}(\|\vec{\mu}(\mathbf{x})\|^2 + \|\vec{\sigma}(\mathbf{x})\|^2) - 2(\log(\vec{\sigma}(\mathbf{x})) \cdot \vec{1} - d)$ ,  $d$  为  $\mathbf{z}$  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  $\theta$  求导:  $\frac{dL(x, \phi, \theta)}{d\theta} = \frac{d \log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))}{d\theta}$ , 其中  $\mathbf{z} \sim q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$

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

$$\begin{aligned} \text{则 } \frac{E_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}(\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})))}{d\phi} &= E_{\vec{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I)}\left(\frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi \odot \vec{\epsilon}))}{d\phi}\right) \\ &= E_{\vec{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I)}\left(\frac{d\phi}{d\phi} \frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))}{d\mathbf{z}} \Big|_{\mathbf{z}=\vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi \odot \vec{\epsilon}}\right) \\ &= \frac{d\mathbf{z}}{d\phi} \frac{\log(p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z}))}{d\mathbf{z}} \Big|_{\mathbf{z}=\vec{\mu}_\phi + \vec{\sigma}_\phi \odot \vec{\epsilon}}, \text{ 其中 } \vec{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\vec{0}, I) \end{aligned}$$

应用:

$p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  中  $\mathbf{y}$  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  $\langle A, S, R, P \rangle$

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

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,  $\gamma$  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  $a_j$ 。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

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

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

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

$s'$  为状态  $s$  能达到的下一状态

$\alpha$  为学习率,  $\gamma$  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

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

$\alpha$  为学习率,  $\gamma$  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  $\epsilon$  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  $Q_{target}$ ,  $Q_\theta$

两网络初始参数一致, 每  $n$  次循环后将计算  $Q_\theta$  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  $Q_\theta$

### Prioritized 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  $\vec{x} = [x_1, x_2, \dots]$  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  $\frac{f(\vec{x}_i)}{\sum_i f(\vec{x}_i)}$  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

tournament 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  $\vec{x} = [x_1, x_2, \dots]$ ,  $\vec{y} = [y_1, y_2, \dots]$  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

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

Genotype: 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 Genotype 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

$\mu, \lambda$  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  $\mu$  个参数向量

生成下一代参数：

1. 使用超参数  $\sigma$ ：随机选择  $\lambda$  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  
 $\sigma$  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  $\sigma$ ，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  $\sigma_i$ ，选择  $\lambda$  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：

$\text{Novelty}(x, A) = \frac{1}{N} \sum_i^N d(x, x_i)$ ，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  $\text{Novelty}(x)$ ，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  $\text{LC}(x)$ ：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  $\hat{s} = [\hat{s}_1, \hat{s}_2, \dots]$ , 计算和给定目标翻译  $s$  的相似度

$$\text{BLEU-n} = BP * (\prod_i^n (i \cdot \text{precision}(i)))^{\frac{1}{n}}$$

$\text{precision}(i)$ :

使用  $i$  词长度的窗口, 选取  $\hat{s}$  的子字符串  $\{[\hat{s}_1, \dots, \hat{s}_i], [\hat{s}_2, \hat{s}_{i+1}], \dots\}$

$\text{precision}(i)$  = 子字符串中同时为目标翻译 substring 的个数 / 子字符串个数

$\text{BrevityPenaltyBP}$ : 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  $\langle s \rangle$  代表句子开始产生词序, 直至输出为  $\langle /s \rangle$  作为句末结束

## 12 A Gental Introduction to Graph Neural Network

目标:

使用其他深度学习得到目标的向量做输入, 输出目标间关系

定义:

V: 节点集合, 每一节点使用向量  $v \in \mathbb{R}^{h_v}$

E: edge 集合, 每一 edge 连接两节点代表节点关系 使用向量  $e \in \mathbb{R}^{h_e}$

G: 代指整个 graph, 整个图使用唯一向量  $g \in \mathbb{R}^{h_g}$

图的连接性质对每一样本固定

模型:

模型包含多个 GNN layer, 每一层输入输出都为整个 graph

GNN layer:

对每一 V 中向量使用同一 mlp, 输出向量  $v'$  长度同  $v$  不变

对 EG 同理, 共 3 个 mlp

GNN layer 不改变 graph 的连接性质,

message passing: 使得 VEG 间向量值能够互相影响, 交换信息

vertex message passing:

1. 对每一节点, 求相邻 edge 向量和。经过全连接层转为  $\mathbb{R}^{h_v}$  向量
2. 1. 中结果和此节点原向量相加, 做 mlp 输入

edge message passing

同 vertex message pass, 将连接的节点向量求和做 mlp 输入

使用 graph 向量优化 message passing

1. 每一节点/边向量求和, 经过全连接层转为  $\mathbb{R}^{h_g}$  向量
2. 和  $g$  相加, 做 mlp 输入

由  $g$  向 EV message pass 时, 每一节点/边有各自全连接层将  $g$  转为  $\mathbb{R}^{h_v}$  向量, 和 vertex/edge message pass 相加做 mlp 输入

GNN 即为多层 GNN layer 叠加

\*\* 最终输出时使用节点/边向量经过全连接层实现输出特定结果 \*\*

## 13 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  $\text{fold } F = \{f_1, \dots, f_N\}$

#### 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  $P$  (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

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

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

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

$\beta$ : 当 precision 为 recall $\beta$  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

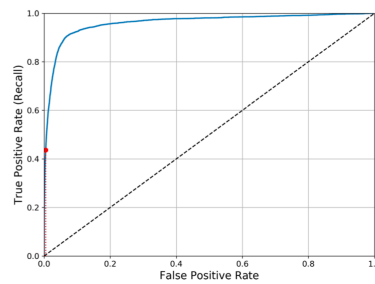
解决:

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  $z_i = \text{sig.level} * \frac{i}{M}$

实际存在的特征对  $i$  为  $p_i < z_i$

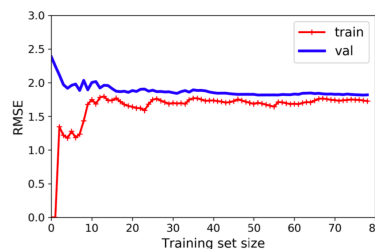
**ROC curve:** 分析二元/多元分类



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。

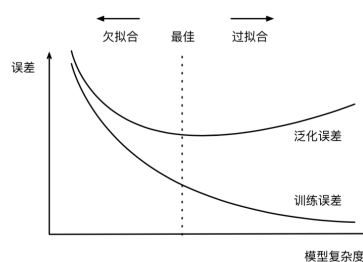
分析:

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

## 14 数学系笔记

**Spectral Factorization Theorem**

Theorem: 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  $U^T A U = D$

Rayleigh quotient: 对 symmetric matrix  $A$ ,  $R_A(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^T A \vec{x}}{\|\vec{x}\|^2}, \forall \vec{x} \neq \vec{0}$

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:  $B(\vec{c}, r) = \{\vec{x} | \|\vec{x} - \vec{c}\| < r\}$

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

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

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

### Closed Set

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

### Closure

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

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

若存在  $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(\vec{x} + t\vec{d}) - f(\vec{x})}{t}$ , 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:  $\nabla f(\vec{x}) = [\dots, \frac{df}{d\vec{x}_i} | \vec{x}, \dots]^T$

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  $\xi$ , 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 bound

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  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  为 continuous function

若  $\lim_{\|\vec{x}\| \rightarrow \infty} f(\vec{x}) = \infty$ , 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

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

定义:  $f(\vec{x}) = \vec{x}^T A \vec{x} + 2\vec{b}^T \vec{x} + c$ , 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  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  为 continuous differentiable

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

Lipschitz Gradient: 令函数  $f$  Continuous 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)  $\alpha$  每次迭代中选择学习率

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

constant:  $\alpha$  为常数

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

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

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

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  $\nabla f(\vec{x}_i) = 0$

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

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  $\frac{(x^T x)^2}{(x^T A x)(x^T A^{-1} x)} \geq \frac{4\lambda_{max}\lambda_{min}}{(\lambda_{max} + \lambda_{min})^2}$

Theorem:  $\{\vec{x}\}$  为 gradient method 解  $\min \vec{x}^T A x$  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  $\text{cond}(A)$  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  $\nabla g(\vec{y}) = S^T \nabla f(S\vec{y}) = S^T \nabla f(\vec{x})$ 。带入  $g(\vec{y})$  的迭代中,  $\vec{y}_{i+1} = \vec{y}_i - \alpha_i S^T \nabla f(S\vec{y}_i)$

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

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

选择  $S S^T$ :

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

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:  $S S^T = \nabla^2 f(\vec{x})^{-1}$

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