

machine learning 笔记

徐世桐

1 基础定义

二元分类: 输出分类个数为 2

多元分类: 输出分类个数不限

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

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

multilabel 多标签分类: 目标检测, 对一图像中的物体加 label

multioutput 多类分类: 多标签分类, 每一标签可包含多种信息

learning schedule: 根据迭代次数更新学习率

early stopping: 提早结束训练

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

即在 epoch-error 图中泛化误差最低时停止训练

在训练中使用正则化代价函数, 训练结束后测试中代价函数不使用正则化项

2 数学计算

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

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 $X = USV^T$, 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:

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

3 分类模型

logistic regression:

判断输入符合每一输出类别的可能性,

前向计算:

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

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

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

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. $\sum_{i=1}^m \vec{\alpha}_i y^{(i)} = 0$

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

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

- 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 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_i 个属于第 i 分类

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

子节点仅有 2 个, 对应节点条件为 true/false 的情况

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

CART algorithm 创建决策树:

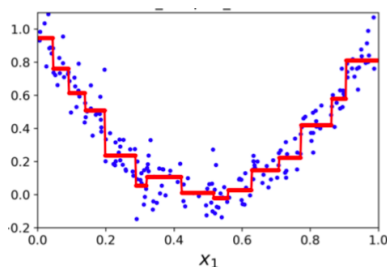
根节点初始化为叶节点, 没有节点条件

对每一叶节点 S_i 选取一特征 k , 一特征阈值 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

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

使用决策树进行 regression



输入样本，分类进不同值域

更改：

每一节点 value 值为一常数，为 S_i 样本的平均值。

输出值为叶节点的 value，非最大 value 对应的类别

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

5 ensemble learning & 随机森林

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

random forest 随机森林:

训练方法：随机选择 n 个训练子集 $s_1, s_2, \dots, s_n \in S$ ，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

6 维度下降

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

principle component analysis PCA:

对训练集参数矩阵取 $SVDUSV^T$

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

7 无监督学习

clustering

K-mean:

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

算法:

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

重复第 2.3. 步, 直至 centroid 不再移动

优化:

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

(在尝试多种 cluster 训练后) 选择 cluster 数量 k:

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

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
 $|S_{i\epsilon}| > \text{超参数 } s_{min}$ 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

Gaussian Mixtures

GM Model: 假设所有样本都由多个正态分部产生

8 GAN 对抗网络

基本结构:

generator: 得到正则噪声, 生成伪数据。

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

一次训练:

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

目标为: 对伪数据输出 0 真数据 1

2.generator 生成图像

目标为生成 discriminator 输出为 1 的数据

Deep Convolutional GAN

9 RL 强化学习

基本定义

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

模型整体符号定义 $\langle A, S, R, P \rangle$

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

计算:

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

第 i 决策有 discounted reward: $dr_i = r_i + \gamma dr_{i+1}$

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
迭代：

定义：一次决策

1. 从 policy 得到行为可能性
2. 代价函数根据 采取的行为 和 **采取**的行为可能性 计算代价值
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

3. 对每一参数，斜率为 n 次训练中所有决策 对此参数的斜率 的加权平均值。权重为 discounted reward

4. 使用权重更新参数值

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 1. 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 $V(s_i)$

Q-Learning

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

$$Q_{n+1}(s_i, a_{ij}) = r'_i + \gamma \cdot \max_k (Q_n(s_i, a_{jk}))$$

deep Q-networks DQNs

10 分析结果

confusion matrix 困惑矩阵：分析二元/多元分类

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

一行对应同一期望输出，一列对应同一计算输出

T/F : 此位置的计算输出是否和预计输出一致

P/N : 此位置的预计输出是否为真

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

即 P (计算结果匹配 | 计算结果为正)

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

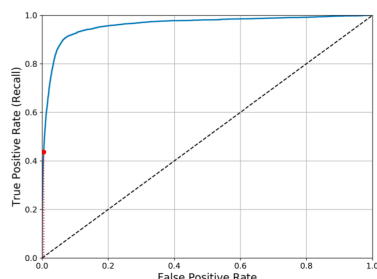
即 $P(\text{计算结果匹配} | \text{预计结果为正})$

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

precision 和 recall 的调和平均值

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

ROC curve: 分析二元/多元分类

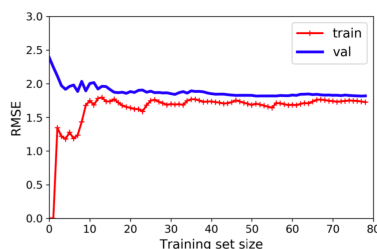


y 轴 recall 值, x 轴 false positive rate $FPR = \frac{FN}{FN+TN} = \frac{FN}{1-\text{specificity}}$

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。

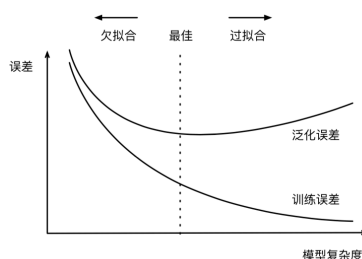
分析:

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