

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

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

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

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:

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

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

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:

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

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

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

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 , $1.y^{(i)} \hat{p}^{(i)} \geq 1$, 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 $\frac{1}{2}W^TW + C \sum_{i=1}^{|B|} \zeta_i$

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 $\mathcal{L} = l_1, l_2, \dots, l_n$, 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 $\sum_{i=1}^m \vec{\alpha}_i y^{(i)} = 0$, 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:

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

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

$d(x^{(i)}, x)$ 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

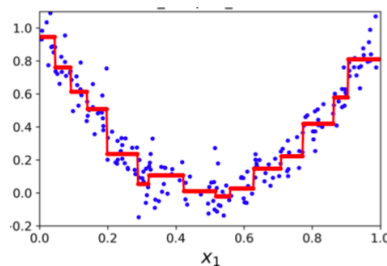
所有特征为类别参数：

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

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

$H(\frac{x-\hat{x}^{(i)}}{h})$ 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 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 $\frac{d\mathcal{L}}{d\sigma^2} = 0$, μ 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, $p(x) = \sum_{k=1}^K \pi_k N(x|\mu_k, \Sigma_k)$

\mathbf{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

$0 \leq \pi_k \leq 1, \sum_{k=1}^K \pi_k = 1$, 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 $r_{ik} = \frac{\pi_k N(\mathbf{x}^{(i)}|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j N(\mathbf{x}^{(i)}|\mu_j, \Sigma_j)}$

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 $S_{i\epsilon}$, 称 $\epsilon - neighbourhood$, 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 $\epsilon - neighbourhood$ 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:

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

取一批真实数据 \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: $KL(P||Q) = \int p(\mathbf{x}) \ln(\frac{p(\mathbf{x})}{q(\mathbf{x})}) d\mathbf{x}$

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

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

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

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

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

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

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

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, 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_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

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

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

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 $Q_{\theta}(s_j, \vec{a}_{jk})$, 元素数为行为数

对 $Q_{\theta}(s_j, \vec{a}_{jk})$ 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 $Q_{\theta}(s_i, \vec{a}_{ij})$ 。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

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 $1 - (1 - p)^m$ (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

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

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:

$\text{Novelty}(x, A) = \frac{1}{N} \sum_i^N d(x, x_i)$, 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 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 $\hat{s} = [\hat{s}_1, \hat{s}_2, \dots]$, 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 $\{[\hat{s}_1, \dots, \hat{s}_i], [\hat{s}_2, \hat{s}_{i+1}], \dots\}$

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

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 $\langle s \rangle$ 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 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 (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

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

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

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

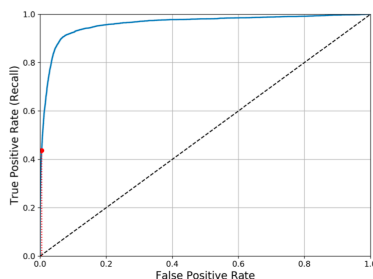
解决:

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

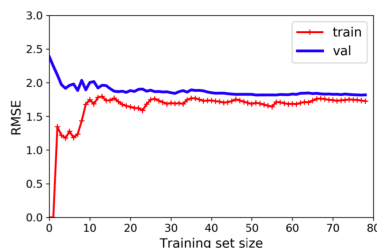


y 轴 recall 值, x 轴 false positive rate $FPR = \frac{FN}{FN+TN} = \frac{FN}{1-specificity}$

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。

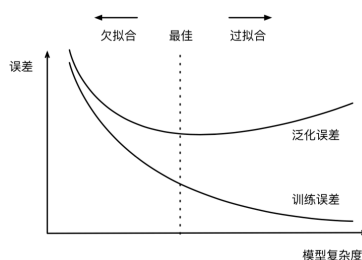
分析:

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

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

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 $\{\vec{x}_i\} \subseteq U, \lim_{i \rightarrow \infty} \vec{x}_i = \vec{x}^*$, 则 $\vec{x}^* \in U$

Closure

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

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

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

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 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 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 $\vec{d} \in \mathbb{R} \neq \vec{0}$ 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) 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: $\alpha = \operatorname{argmin}_{\alpha} f(\vec{x} + \alpha \vec{d})$

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

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

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