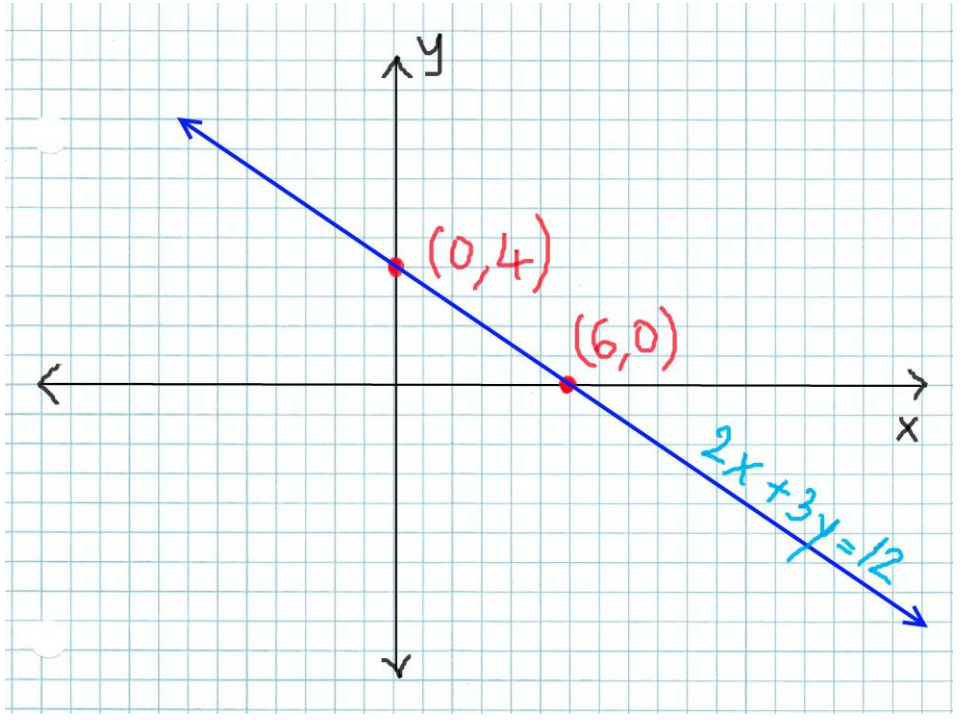
4 线性方法、基础优化和softmax回归

概要

- 线性方法
  - 神经科学的灵感
- 基础优化
- softmax 回归
  - 回归与分类
  - Kaggle上的分类任务

线性方法



房价预测 101

- 挑选一间别墅，逛一逛，了解卖点
- 估计竞拍价



代理商的
市场价格

$5,498,000 Price | **7** Beds | **5** Baths | **4,865** Sq. Ft. $1130 / Sq. Ft.

Redfin Estimate: $5,390,037 On Redfin: 15 days

估计
销售价格

Virtual Tour
- Branded Virtual Tour
- Virtual Tour (External Link)

Parking Information
- Garage (Minimum): 2
- Garage (Maximum): 2
- Parking Description: Attached Garage, On Street
- Garage Spaces: 2

Multi-Unit Information
- # of Stories: 2

School Information
- Elementary School: El Carmelo Elementa
- Elementary School District: Palo Alto Uni
- Middle School: Jane Lathrop Stanford Mi
- High School: Palo Alto High
- High School District: Palo Alto Unified

Interior Features

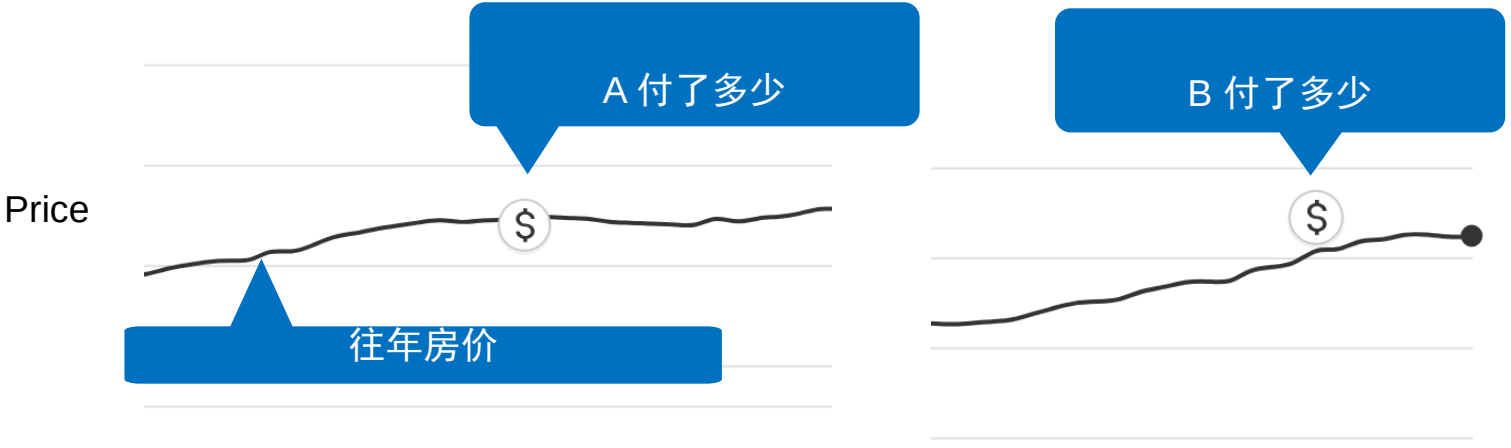
Bedroom Information
- # of Bedrooms (Minimum): 7
- # of Bedrooms (Maximum): 7

- Kitchen Description: Countertop (Granite Dishwasher, Garbage Disposal, Hood Ove Island with Sink, Microwave, Oven Range

房价预测

非常重要，因为这是真钱……

$100K+ 差距



Redfin 高估房价，B 相信它

一个简易模型

- 假设 1

  影响房价的关键因素：

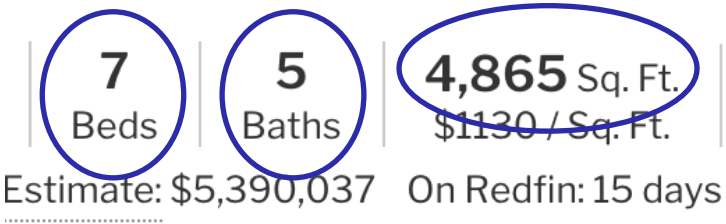
  卧室数目，卫浴数目和房子大小，分别用x_1, x_2, x_3 表示

- 假设 2

  销售价格是关键因素的加权总和：

$$y = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + b$$

  权重和偏差稍后确定。



线性方法

- 给予 n 维输入，$\mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$
- 线性方法有 n 个权重和偏差：

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \ldots, w_n]^T, b$$

- 输出是输入的加权总和：

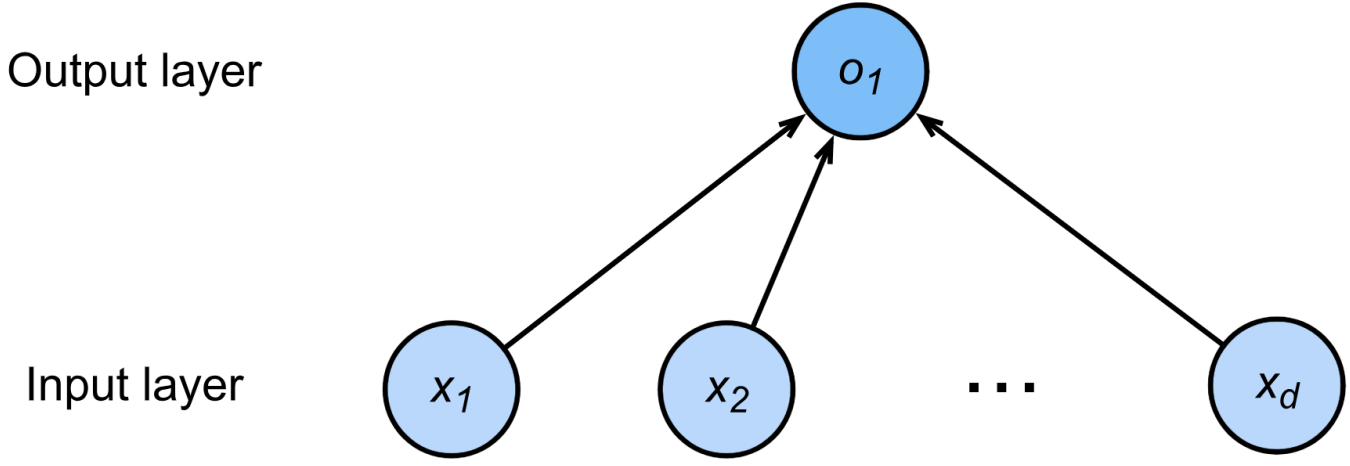
$$y = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n + b$$

- 矢量化版本：

$$y = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + b$$

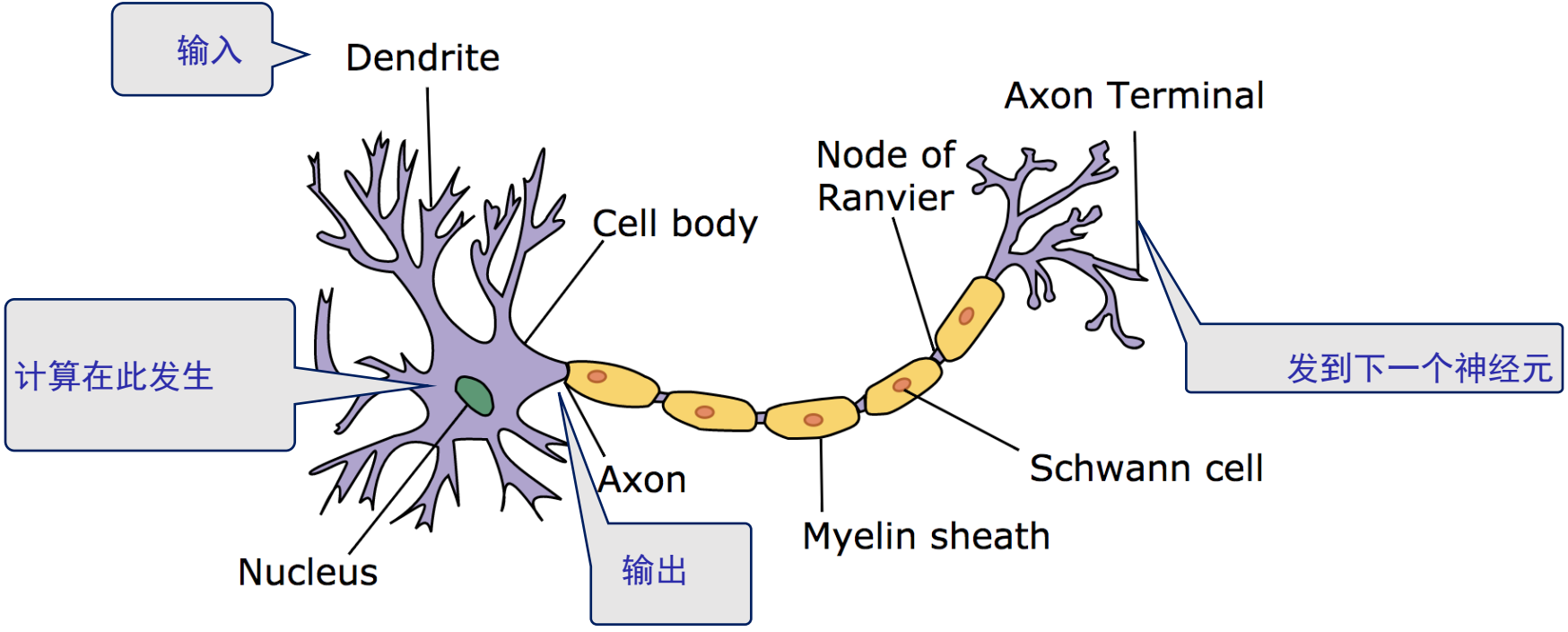
线性方法是一个单层神经网络

我们可以堆叠多个层来获得深层神经网络。



神经科学的灵感

- 真实的神经元



测量估计质量

- 比较真实值与估计值 （实际销售价格与估计的房价）
- 以 y 作为真实值， $\hat{y}$ 作为估计值，我们可以比较损失

平方损失：$\ell(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$

训练数据集

- 收集多个数据点以训练参数（如 在过去6个月内出售的房屋）

- 训练数据集
  - 训练数据集越大越好
- 假设有n个房屋

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n]^T, \mathbf{y} = [y_0, y_1, \dots, y_n]^T$$

学习参数

- 训练损失

$$\ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}, b) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{w}\rangle - b)^2 = \frac{1}{n} \| \mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w} - b \|^2$$

- 最小化学习参数的损失

$$\mathbf{w}^*, \mathbf{b}^* = \arg\min_{\mathbf{w},b} \ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}, b)$$

封闭解

- 将偏差添加到权重中$\mathbf{w}^*, \mathbf{b}^* = \underset{\mathbf{w},b}{\operatorname{argmin}} \ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}, b)$

$$\ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}) = \frac{1}{n} \| \mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w} \|^2$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}) = \frac{2}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^T \mathbf{X}$$

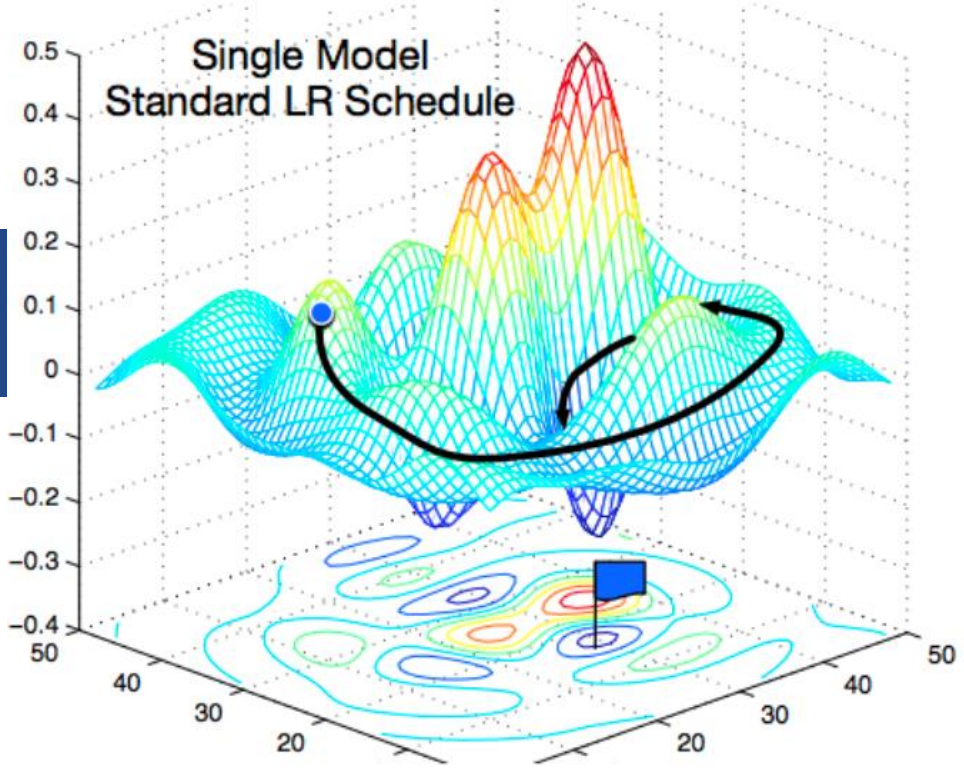
- 损失是凸性的，因此最优解满足：

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \ell(\mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{w}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^T \mathbf{X} = 0$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}\mathbf{y}$$

基础优化

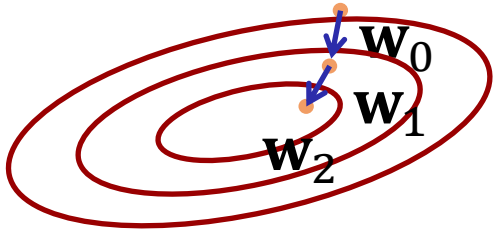

Single Model
Standard LR Schedule
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
−0.1
−0.2
−0.3
−0.4
50
40
30
20
20
30
40
50

梯度下降

- 选择一个起点 w_0
- 重复更新权重t=1,2,3

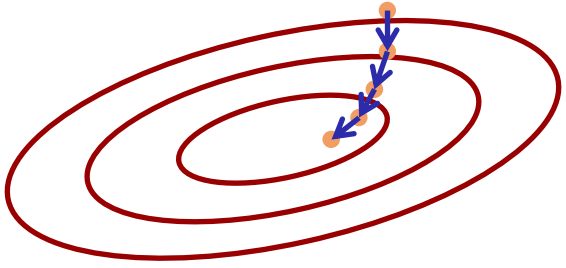
$$w_t = w_{t-1} - \eta \frac{\partial \ell}{\partial w_{t-1}}$$

  - 梯度： 更新权重的方向
  - 学习率： 一个超参数指定 每梯度的步长

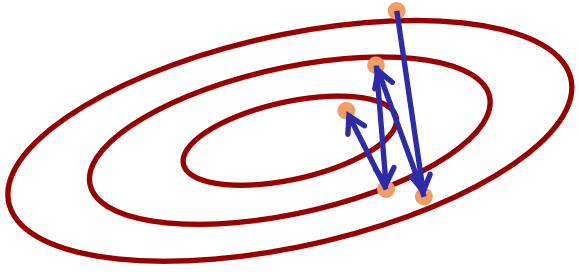


选择学习率

不要太小



不要太大



小批量随机梯度下降（SGD）

- 计算整个训练数据的梯度太昂贵了
  - DNN模型需要几分钟到几小时

- 解决方案： 随机抽样b个样本$i_1, i_2, \ldots, i_b$来估算损失

$$\frac{1}{b} \sum_{i \in I_b} \ell(\mathbf{x}_i, y_i, \mathbf{w})$$

  - b是批量大小，另一个重要的超参数

选择批量值

不要太小

批量值太小，难以充分利用计算资源

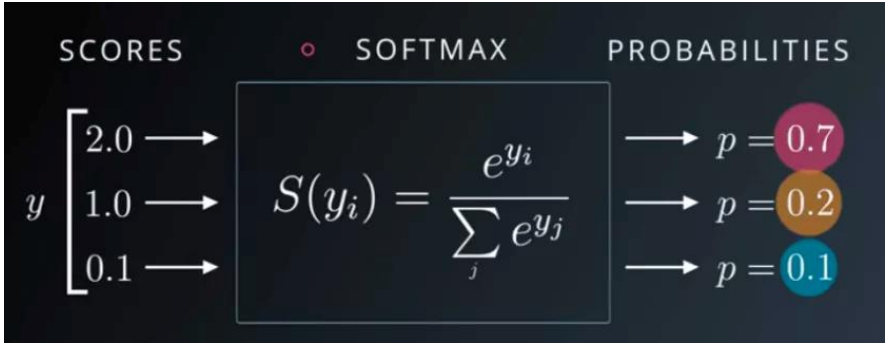
不要太大

批量值太大，浪费计算资源；例如当x_i都相同时

总结

- 问题：
  - 估计一个真正的值
- 模型：
  - $y = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + b$
- 损失：
  - 平方损失$\ell(y, \hat{y}) = (y - \hat{y})^2$
- 小批量随机梯度（mini-batch SGD）学习
  - 选择一个起点
  - 重复
    - 计算梯度
    - 更新参数

softmax回归


SCORES
SOFTMAX
PROBABILITIES
y
2.0
1.0
0.1
$S(y_i) = \frac{e^{y_i}}{\sum_j e^{y_j}}$
$p = 0.7$
$p = 0.2$
$p = 0.1$

回归与分类

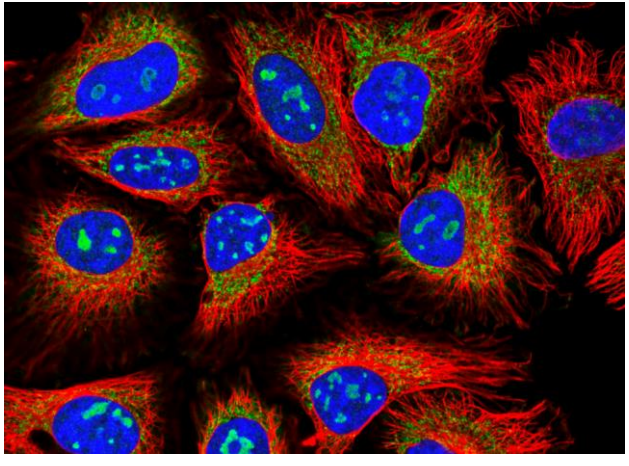
- 回归估计连续值
- 分类预测离散类别

MNIST：对手写数字进行分类
（10 类）

ImageNet：对自然对象进行分类
（1000 类）

Kaggle上的各种分类任务

- 将人类蛋白质显微镜图像分为28类



```
0.  Nucleoplasm
1.  Nuclear membrane
2.  Nucleoli
3.  Nucleoli fibrillar
4.  Nuclear speckles
5.  Nuclear bodies
6.  Endoplasmic reticu
7.  Golgi apparatus
8.  Peroxisomes
9.  Endosomes
10.  Lysosomes
11.  Intermediate fila
12.  Actin filaments
13.  Focal adhesion si
14.  Microtubules
15.  Microtubule ends
16.  Cytokinetic bridg
```

https://www.kaggle.com/c/human-protein-atlas-image-classification

Kaggle上的各种分类任务

- 将恶意软件分为9类

https://www.kaggle.com/c/malware-classification

Kaggle上的各种分类任务

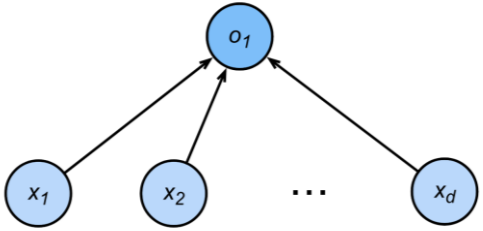
- 将维基百科上的恶语评论分为7类

comment_text	toxic	severe_toxic	obsc
Explanation\nWhy the edits made under my usern...	0	0	0
D'aww! He matches this background colour I'm s...	0	0	0
Hey man, I'm really not trying to edit war. It...	0	0	0
"\nMore\nI can't make any real suggestions on ...	0	0	0
You, sir, are my hero. Any chance you remember...	0	0	0

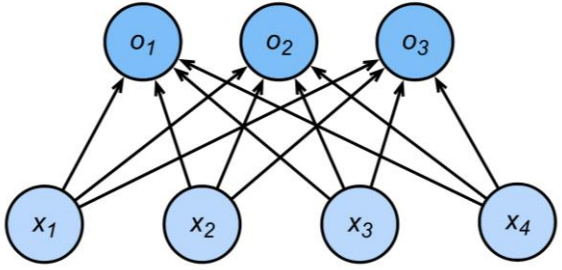
https://www.kaggle.com/c/jigsaw-toxic-comment-classification-challenge

从回归到多类分类

- 单个连续数值输出



- 输出每个类别的置信度分数



softmax函数

- softmax$([x_1, x_2, \ldots, x_n]^T) = \left[\frac{e^{x_1}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}, \frac{e^{x_2}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}, \ldots, \frac{e^{x_n}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}\right]$
- 用 exp 获得
  - 大于0的值
- 除以总和以获得
  - 概率分布
  - 例: [1, -1, 2] 的 softmax 为 [0.26, 0.04, 0.7]

softmax梯度

- $\text{softmax}([x_1, x_2, \ldots, x_n]^T) = \left[\frac{e^{x_1}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}, \frac{e^{x_2}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}, \cdots, \frac{e^{x_n}}{\sum_{i=1}^{n} e^{x_i}}\right]$

- $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \text{softmax}(\mathbf{x}) = xx$

是否用平方损失？

- 对$\mathbf{y}$进行一位有效编码（One-hot encoding）

$$\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T, y_i = \begin{cases} 1 & \text{if} i = y \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- 需要 softmax 结果接近$\mathbf{y}$
- 用平方损失：$\mathbf{y} = [0, 0, 1]$

softmax 结果	损失
[0.3, 0, 0.7]	0.18
[0.17, 0.17, 0.66]	0.173

对数似然

- softmax函数给出了一个向量$\hat{\mathbf{y}}$，可以将其视为“对给定任意输入$\mathbf{x}$的每个类的条件概率”
- 假设整个数据集$\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}\}$具有$n$个样本, 其中索引|的样本由特征向量$\mathbf{x}^{(i)}$和独热标签向量$\mathbf{y}^{(i)}$组成。可以将估计值与实际值进行比较:

$$P(\mathbf{Y} \mid \mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{n} P\left(\mathbf{y}^{(i)} \mid \mathbf{x}^{(i)}\right).$$

- 根据最大似然估计，我们最大化$P(\mathbf{Y} \mid \mathbf{X})$，相当于最小化负对数似然：

$$-\log P(\mathbf{Y} \mid \mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{n} -\log P\left(\mathbf{y}^{(i)} \mid \mathbf{x}^{(i)}\right) = \sum_{i=1}^{n} l\left(\mathbf{y}^{(i)}, \hat{\mathbf{y}}^{(i)}\right),$$

- 其中, 对于任何标签和模型预测$\hat{y}$, 损失函数为:

$$l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = -\sum_{j=1}^{q} y_j \log \hat{y}_j$$

- 交叉熵损失（cross-entropy loss）

交叉熵损失

- 交叉熵损失（cross-entropy loss）

$$l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = -\sum_{j=1}^{q} y_j \log \hat{y}_j$$

- 由于 $\mathbf{y}$ 是一个长度为q的独热编码向量, 除了一个项以外的所有项j都消失了
  - 由于所有$\hat{y}_j$都是预测的概率, 它们的对数永远不会大于 0
- 如果正确地预测实际标签, 即 $P(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}) = 1$, 损失函数不能进一步最小化
  - 但往往不可能。例如, 数据集中可能存在标签噪声（比如某些样本可能被误标）, 或输入特征没有足够的信息来完美地对每一个样本分类

softmax及其导数

- 利用softmax的定义, 得到

$$
\begin{aligned}
l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) &= -\sum_{j=1}^{q} y_j \log \frac{\exp(o_j)}{\sum_{k=1}^{q} \exp(o_k)} \\
&= \sum_{j=1}^{q} y_j \log \sum_{k=1}^{q} \exp(o_k) - \sum_{j=1}^{q} y_j o_j \\
&= \log \sum_{k=1}^{q} \exp(o_k) - \sum_{j=1}^{q} y_j o_j.
\end{aligned}
$$

- 考虑相对于任何未规范化的预测 o_j 的导数，我们得到:

$$
\partial_{o_j} l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \frac{\exp(o_j)}{\sum_{k=1}^{q} \exp(o_k)} - y_j = \mathrm{softmax}(\mathbf{o})_j - y_j.
$$

- 换句话说, 导数是softmax模型分配的概率与实际发生的情况（由独热标签向量表示）之间的差异
  - 从这个意义上讲, 这与我们在回归中看到似然的梯度正是由此得出的。

信息论基础

- 信息论的核心思想是量化数据中的信息内容。信息论中 该数值被称为分布P的熵（entropy）：

$$H[P] = \sum_j - P(j)\log P(j)$$

  - 信息论的基本定理之一指出，为了对从分布 p 中随机抽取的数据进行编码，至少需要 $H[P]$ “纳特（nat）"对其进行编码。“纳特”相当于比特 (bit)，一个纳特≈ 1.44 比特。
- 如果我们不能完全预测每一个事件，那么我们有时可能会感到”惊异”。克劳德·香农用信息量量化 $\log\frac{1}{P(j)} = -\log P(j)$
  - 在观察一个事件 j 时，并赋予它（主观）概率 $P(j)$ 。当我们赋予一个事件较低的概率时，我们的惊异会更大，该事件的信息量也就更大。熵 是当分配的概率真正匹配数据生成过程时的信息量的期望
- 交叉熵
  - 如果把熵 $H(P)$ 想象为 “知道真实概率的人所经历的惊异程度”，交叉熵从 P 到 Q，记为 $H(P,Q)$ 。把交叉熵想象为“主观概率为 Q 的观察者在看到根据概率 P 生成的数据时的预期惊异”
  - 当 $P = Q$ 时，交叉熵达到最低。在这种情况下，从 P 到 Q 的交叉熵是 $H(P,P) = H(P)$ 。
- 简而言之，我们可以从两方面来考虑交叉熵分类目标：
  - 最大化观测数据的似然
  - 最小化传达标签所需的惊异

线性回归与softmax回归

- 数值大小上的意义
  - 回归问题的数值有，分类问题的数值没有

问题	线性回归 （回归问题）	softmax回归 （分类问题）
模型	$\langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + b$ $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$	$softmax(\mathbf{W}\mathbf{x} + \mathbf{b})$ $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{k \times n}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^k$
损失	平方损失	交叉熵

总结

- 线性方法
  - 神经科学的灵感
- 基础优化
- softmax 回归
  - 回归与分类
  - Kaggle上的分类任务