机器学习与数学基础知识

七月在线 龙老师

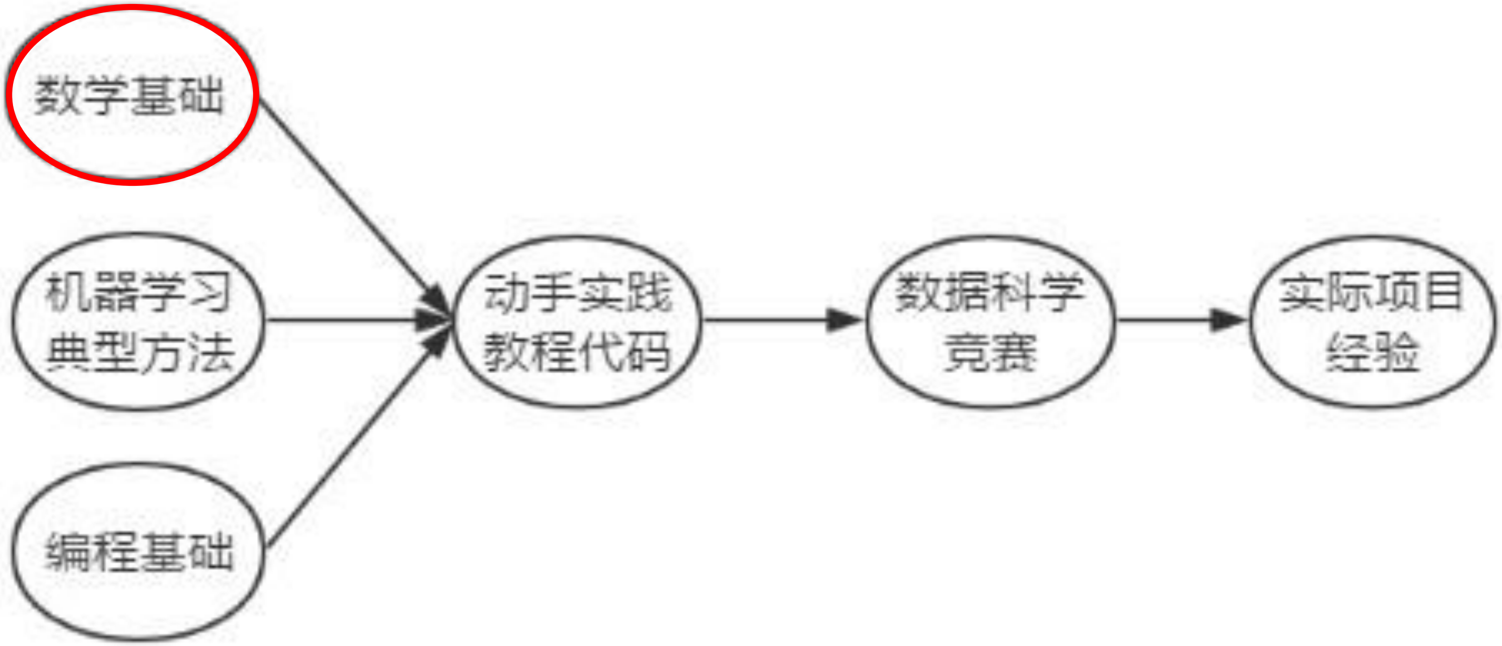
2016年7月9日

自我介绍

- 龙老师
  - 数年互联网经验，专注ML/DM，博客：CSDN
  - 现在某厂负责海量数据下的用户画像和智能营销相关项目

- 项目经验：
  - 用户画像、智能营销策略
  - 网络安全机器学习
  - 自然语言处理相关项目

机器学习路线图

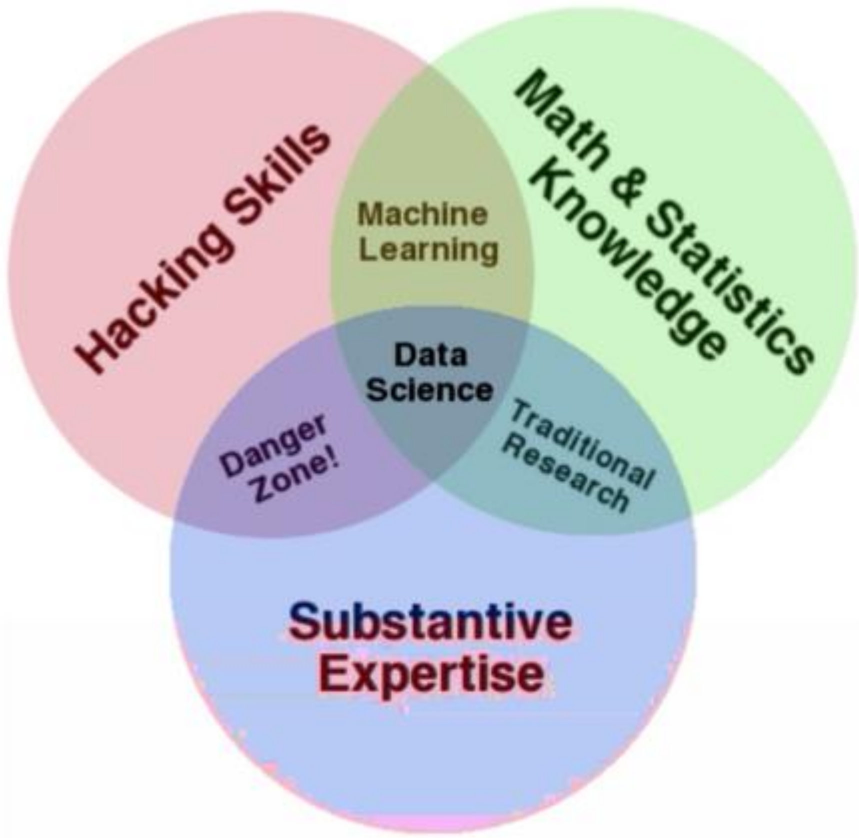


主要内容

- 机器学习基础
  - 机器学习的分类与一般思路
- 微积分基础
  - 泰勒公式、导数与梯度
- 概率与统计基础
  - 概率公式、常见分布、常见统计量
- 线性代数基础
  - 矩阵乘法的几何意义

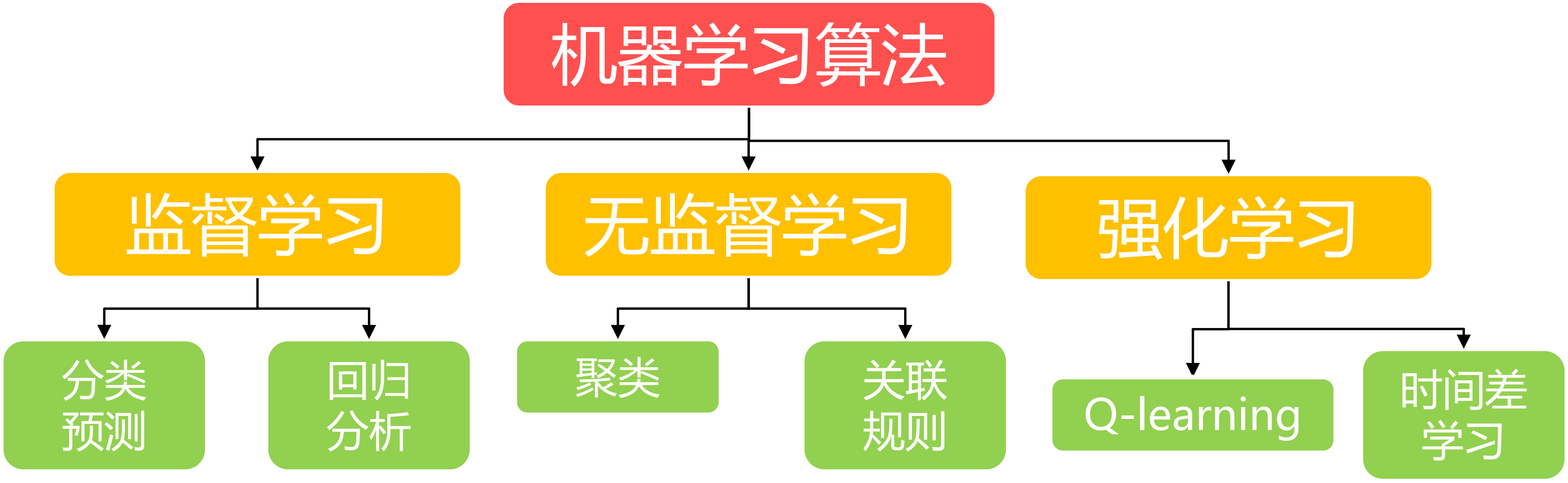
机器学习

机器学习

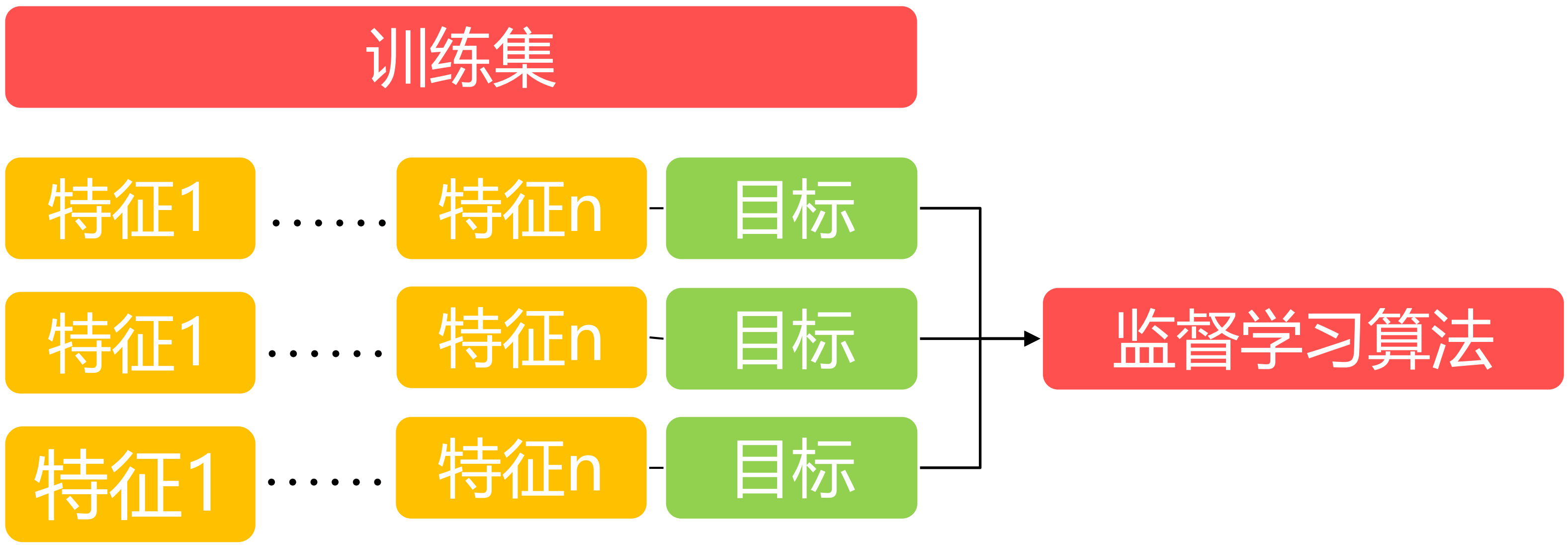

Hacking Skills
Math & Statistics Knowledge
Machine Learning
Data Science
Danger Zone!
Traditional Research
Substantive Expertise

机器学习分类

- 监督学习：例如用户点击/购买预测、房价预测
- 无监督学习：例如邮件/新闻聚类
- 强化学习：例如动态系统以及机器人控制



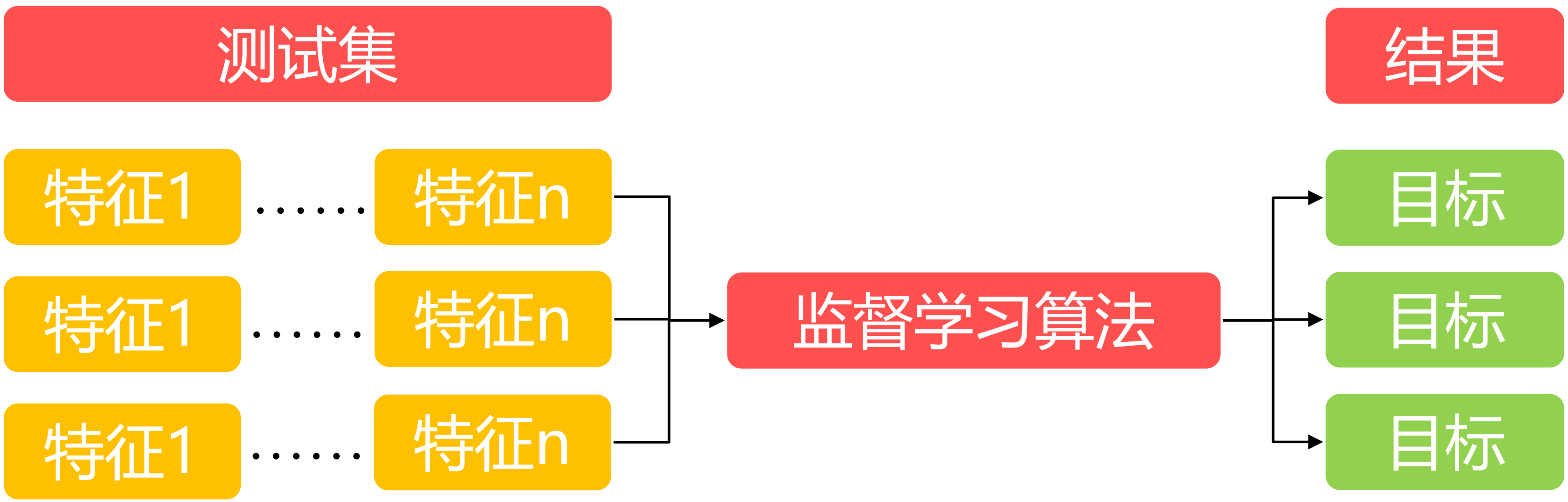
监督学习



身高	发长	抽烟	性别
1.88	1.4cm	是	男
1.66	15.3cm	否	女
1.78	22.6cm	否	女

监督学习算法：训练/学习

监督学习

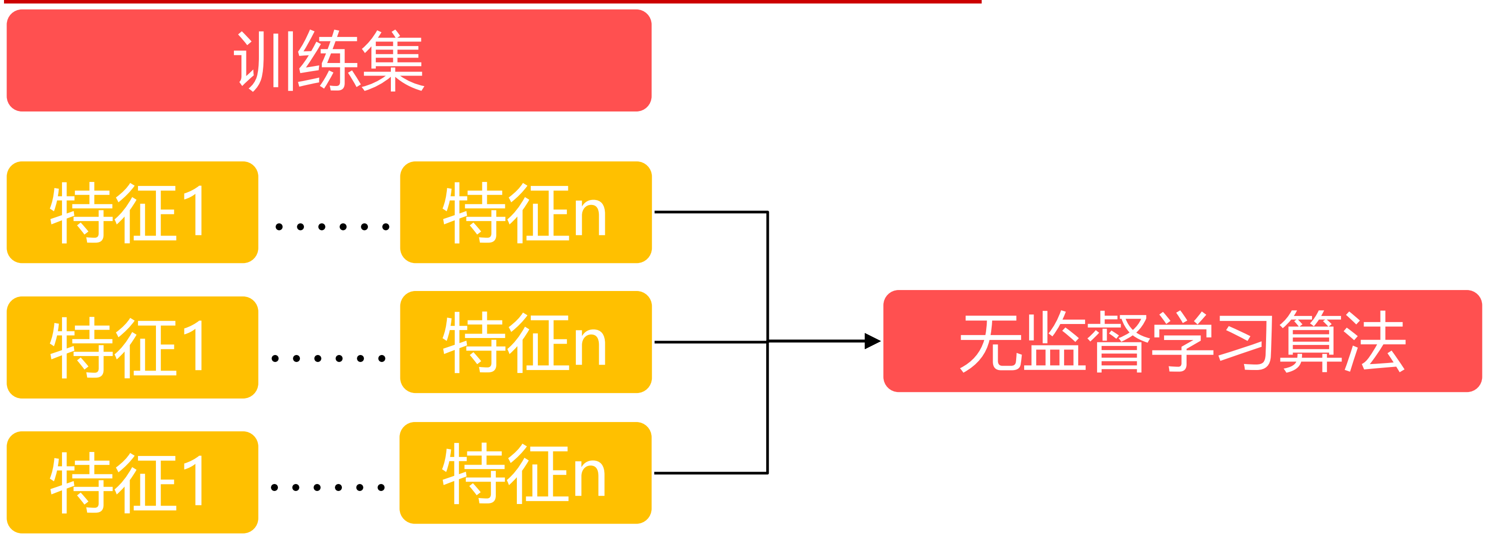


身高	发长	抽烟
1.66	0cm	是
1.76	5.1cm	否
1.55	14.4cm	否

性别
男
男
女

监督学习算法：预测

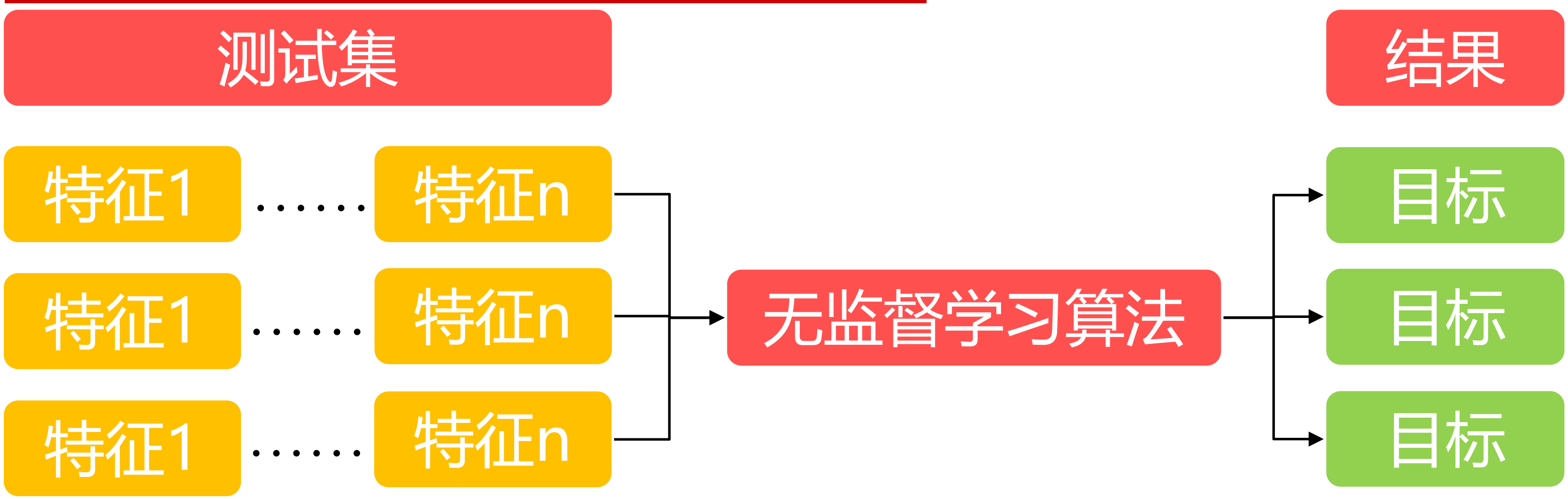
无监督学习



领型	袖长	材质
圆领	长袖	全棉
圆领	短袖	全棉
V领	短袖	纤维
立领	短袖	%60棉…

无监督学习算法：训练/学习

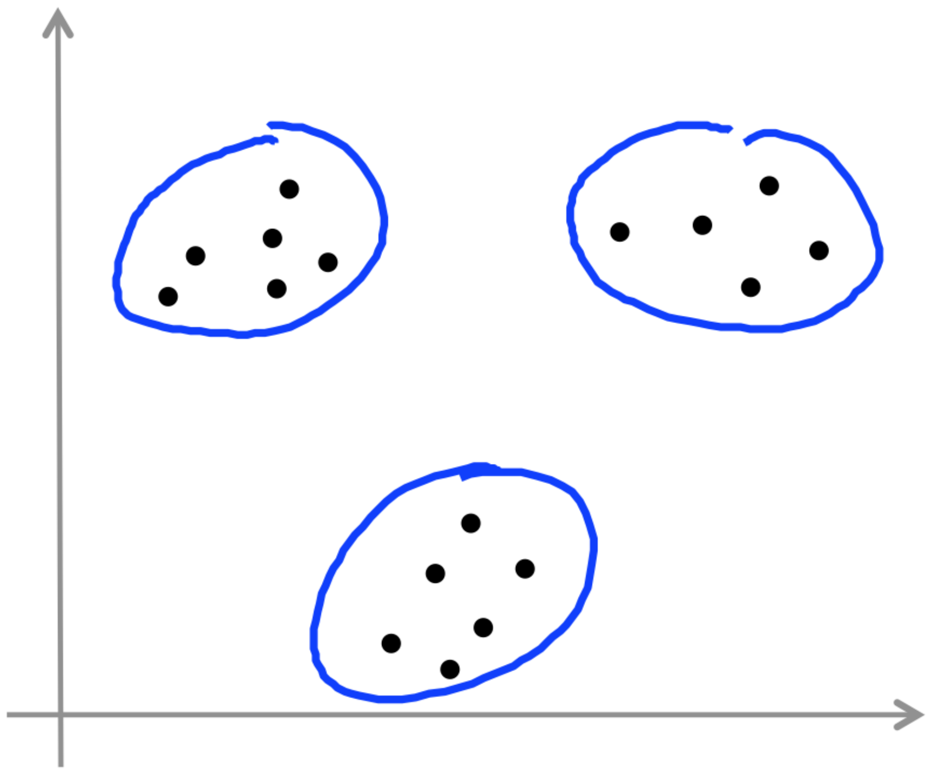
无监督学习



领型	袖长	材质	聚类类别
圆领	长袖	全棉	聚类1
圆领	短袖	全棉	聚类1
V领	短袖	纤维	聚类2
立领	短袖	%60棉…	聚类3

无监督学习算法：预测

无监督学习



机器学习的分类


特征1 …… 特征n 标签
特征1 …… 特征n 标签
特征1 …… 特征n 标签
特征1 …… 特征n 未知
特征1 …… 特征n 未知
训练
监督学习算法
预测

机器学习的分类

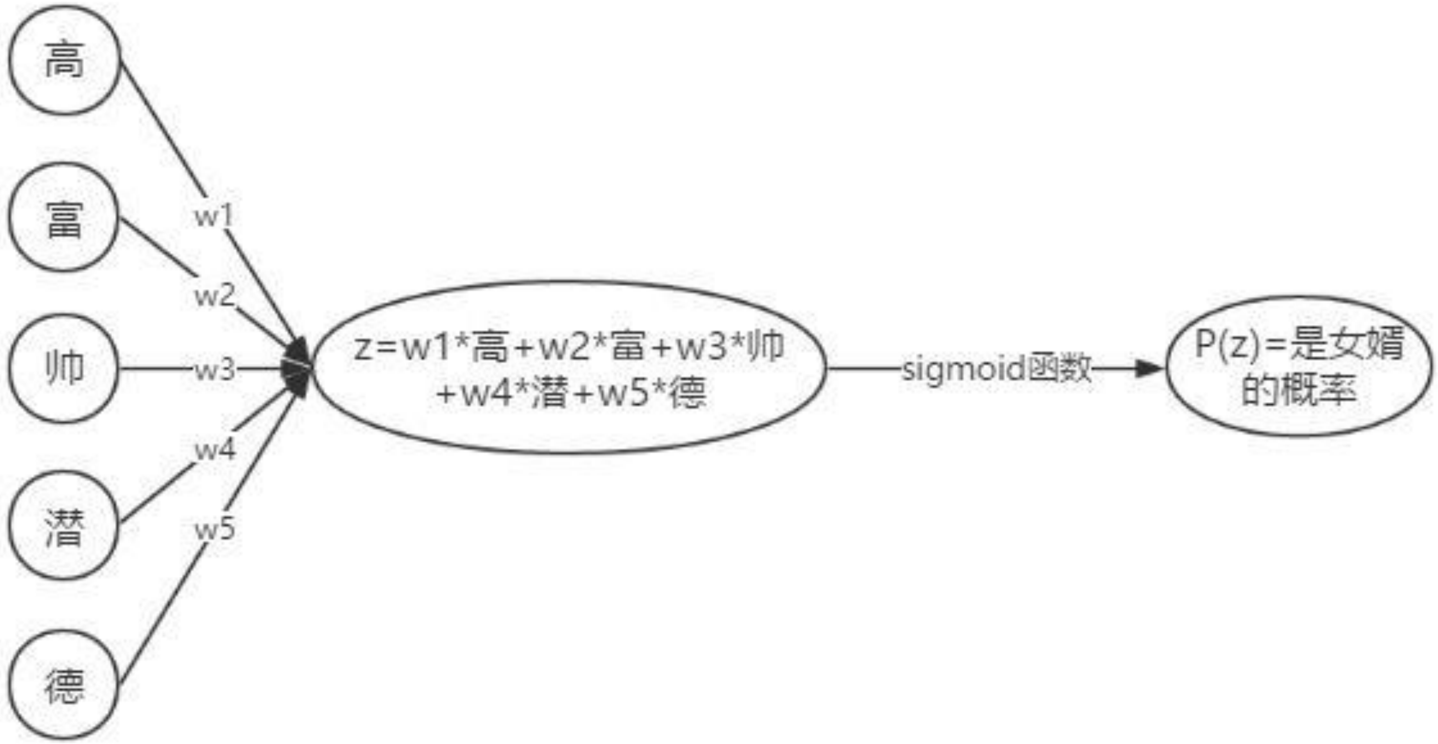

特征1 …… 特征n 未知
特征1 …… 特征n 未知
特征1 …… 特征n 未知
特征1 …… 特征n 未知
特征1 …… 特征n 未知
训练
无监督学习算法
预测

机器学习的分类


特征1
……
特征n
标签
特征1
……
特征n
未知
特征1
……
特征n
未知
特征1
……
特征n
未知
特征1
……
特征n
未知
训练
半监督学习算法
预测

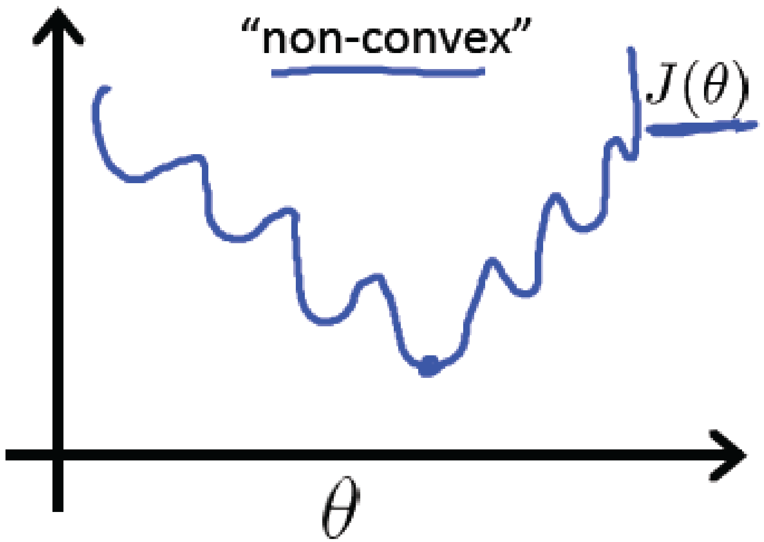
机器学习的一般思路

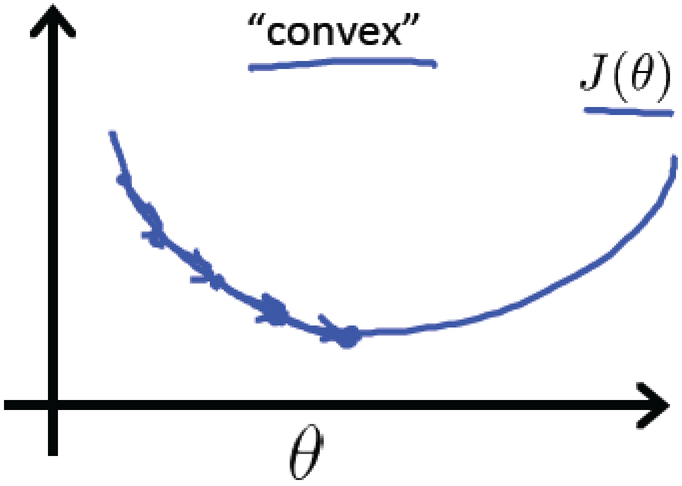
得分函数



机器学习的一般思路

- 损失函数的最优化问题





算法一览

Machine Learning Algorithms *(sample)*

Unsupervised

Continuous

- Clustering & Dimensionality Reduction
  - SVD
  - PCA
  - K-means

Categorical

- Association Analysis
  - Apriori
  - FP-Growth
- Hidden Markov Model

Supervised

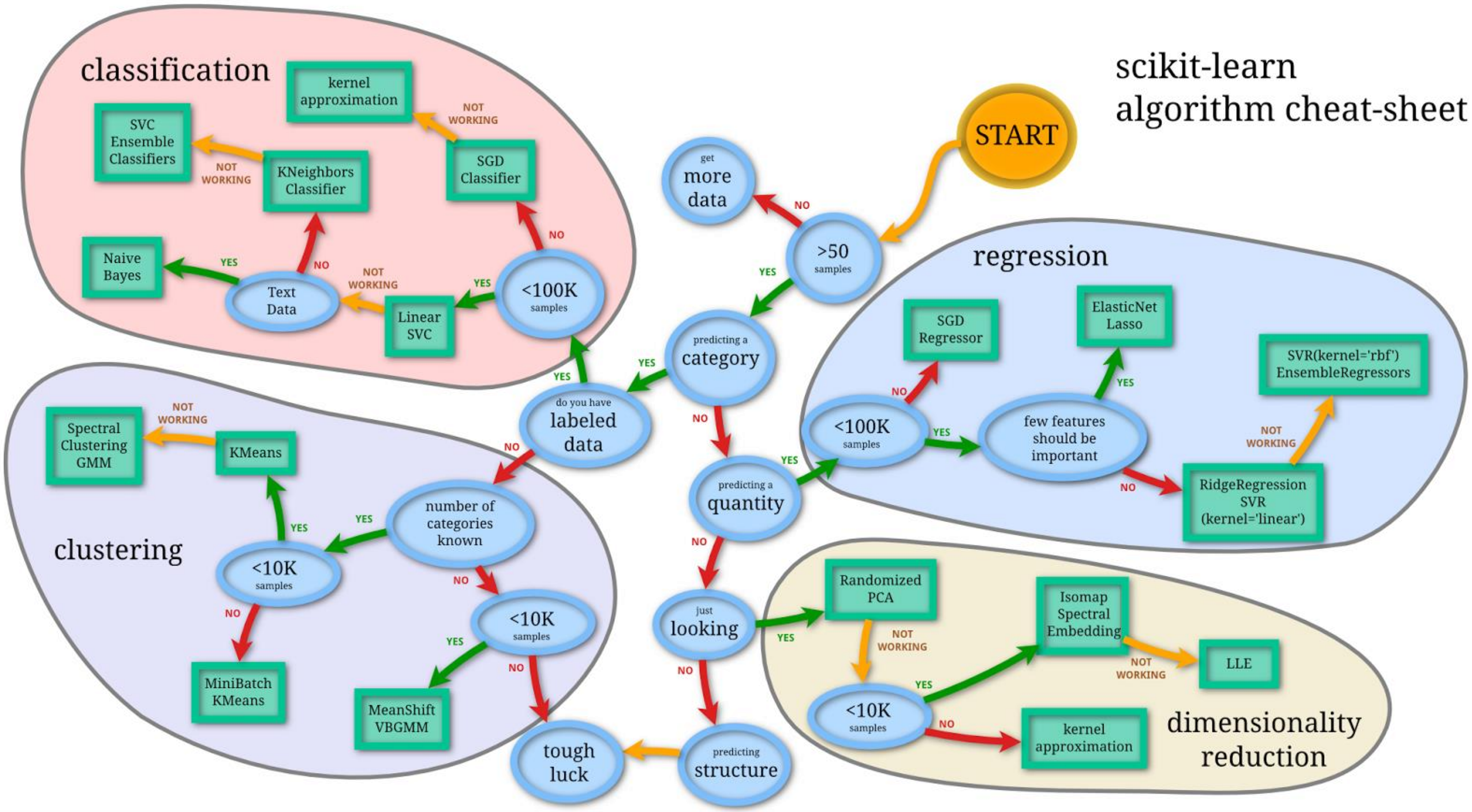
Continuous

- Regression
  - Linear
  - Polynomial
- Decision Trees
- Random Forests

Categorical

- Classification
  - KNN
  - Trees
  - Logistic Regression
  - Naive-Bayes
  - SVM

算法一览



scikit-learn
algorithm cheat-sheet
START
classification
kernel approximation
NOT WORKING
SVC Ensemble Classifiers
KNeighbors Classifier
SGD Classifier
Naive Bayes
Text Data
Linear SVC
<100K samples
get more data
>50 samples
predicting a category
do you have labeled data
regression
SGD Regressor
ElasticNet Lasso
SVR(kernel='rbf') EnsembleRegressors
few features should be important
RidgeRegression SVR (kernel='linear')
predicting a quantity
clustering
Spectral Clustering GMM
KMeans
number of categories known
<10K samples
MiniBatch KMeans
MeanShift VBGMM
tough luck
predicting structure
just looking
dimensionality reduction
Randomized PCA
Isomap Spectral Embedding
LLE
kernel approximation
YES
NO

相关资料

- Christopher M. Bishop, Pattern Recognition and Machine Learning, Springer-Verlag, 2006
- Kevin P. Murphy, Machine Learning:A Probabilistic Perspective, The MIT Press, 2012
- 李航，统计学习方法，清华大学出版社，2012
- 周志华，机器学习，清华大学出版社，2016
- Machine Learning，Andrew Ng，coursera
- 机器学习基石/技术，林轩田，coursera

高等数学回顾

- 微积分之：两边夹定理/夹逼定理

- 当 $x \in U(x_0,r)$ 时，有 $g(x) \leqslant f(x) \leqslant h(x)$ 成立，并且 $\lim_{x\to x_0} g(x) = A$，$\lim_{x\to x_0} h(x) = A$，那么

$$\lim_{x\to x_0} f(x) = A$$

导数

- 简单的说，导数就是曲线的斜率，是曲线变化快慢的反应
- 二阶导数是斜率变化快慢的反应，表征曲线的凸凹性
  - 在GIS中，往往一条二阶导数连续的曲线，我们称之为“光顺”的。
  - 还记得高中物理老师时常念叨的吗：加速度的方向总是指向轨迹曲线凹的一侧

常用函数的导数

$$C' = 0 \qquad (x^n)' = nx^{n-1}$$

$$(\sin x)' = \cos x \qquad (\cos x)' = -\sin x$$

$$(a^x)' = a^x \ln a \qquad (e^x)' = e^x$$

$$(\log_a x)' = \frac{1}{x}\log_a e \qquad (\ln x)' = \frac{1}{x}$$

$$(u+v)' = u' + v' \qquad (uv)' = u'v + uv'$$

Taylor公式 – Maclaurin公式

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n+R_n(x)$$

$$f(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{f''(0)}{2!}x^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n+o(x^n)$$

方向导数

- 如果函数z=f(x,y)在点P(x,y)是可微分的，那么，函数在该点沿任一方向L的方向导数都存在，且有：

$$\frac{\partial f}{\partial l} = \frac{\partial f}{\partial x}\cos\varphi + \frac{\partial f}{\partial y}\sin\varphi$$

- 其中，ψ为x轴到方向L的转角。

梯度

- 设函数z=f(x,y)在平面区域D内具有一阶连续偏导数，则对于每一个点P(x,y)∈D，向量

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

为函数z=f(x,y)在点P的梯度，记做**grad**f(x,y)

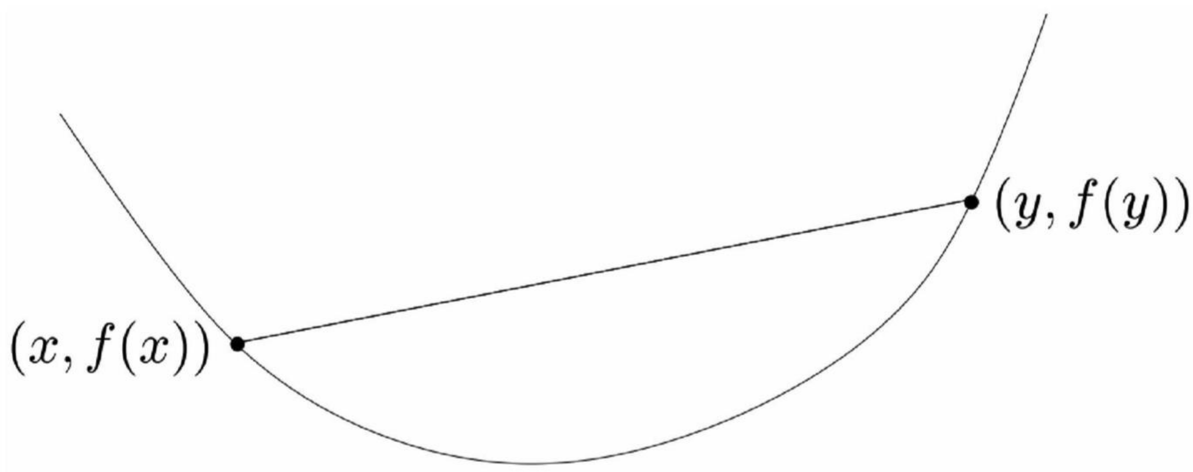
- 梯度的方向是函数在该点变化最快的方向
  - 考虑一座解析式为z=H(x,y)的山，在(x_0,y_0)的梯度是在该点坡度变化最快的方向。
- 梯度下降法
  - 思考：若下山方向和梯度呈θ夹角，下降速度是多少？

凸函数

- 若函数f的定义域domf为凸集，且满足

$$\forall x, y \in \operatorname{dom} f, 0 \le \theta \le 1, \text{有}$$

$$f(\theta x + (1-\theta) y) \le \theta f(x) + (1-\theta) f(y)$$



凸函数的判定

- 定理：f(x)在区间[a,b]上连续，在(a,b)内二阶可导，那么：
  - 若$f''(x)>0$，则f(x)是凸的；
  - 若$f''(x)<0$，则f(x)是凹的

- 即：一元二阶可微的函数在区间上是凸的，当且仅当它的二阶导数是非负的

凸函数

- 凸函数的表述

$$f\left(\lambda x_1+(1-\lambda)x_2\right)\le\lambda f\left(x_1\right)+(1-\lambda)f\left(x_2\right)$$

f 为凸函数，则有：

$$f(\theta_1 x_1+\ldots+\theta_n x_n)\le\theta_1 f(x_1)+\ldots+\theta_n f(x_n)$$

其中$0\le\theta_i\le1,\theta_1+\ldots+\theta_n=1.$

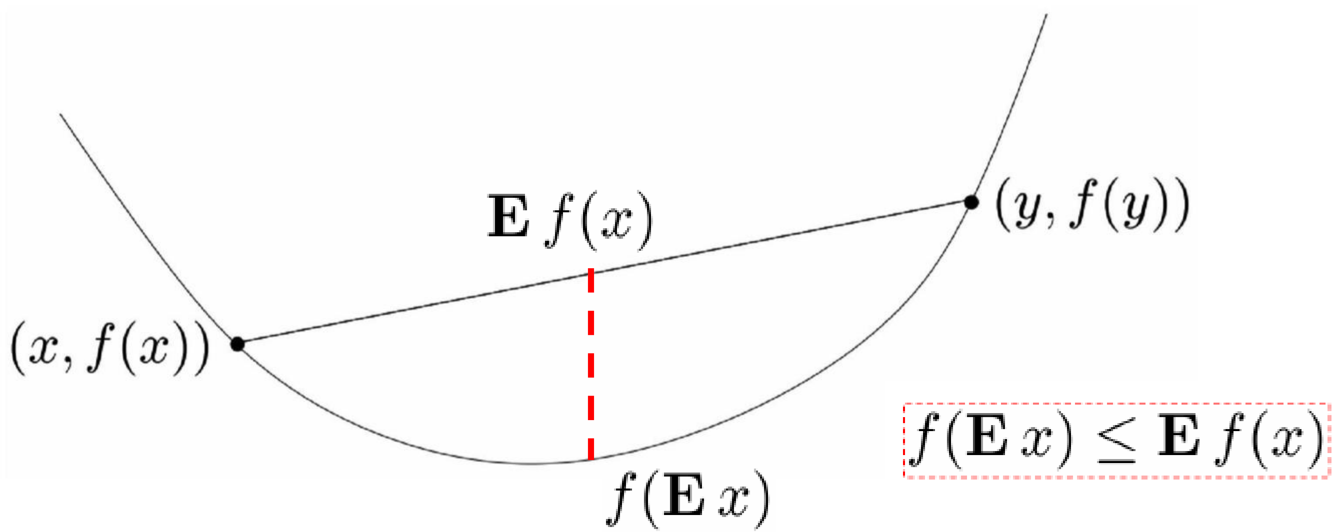
- 意义：可以在确定函数的凸凹性之后，对函数进行不等式替换。

凸函数

- 若函数f的定义域domf为凸集，且满足

$$\forall x, y \in \operatorname{dom} f, 0 \le \theta \le 1, \text{有}$$

$$f(\theta x + (1-\theta) y) \le \theta f(x) + (1-\theta) f(y)$$



概率公式

- 条件概率：

$$P(A|B)=\frac{P(AB)}{P(B)}$$

- 全概率公式：

$$P(A)=\sum_i P(A|B_i)P(B_i)$$

- 贝叶斯(Bayes)公式：

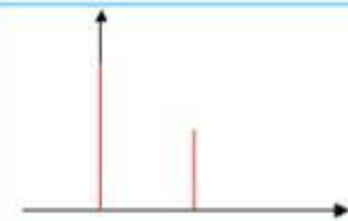
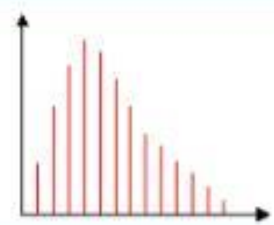
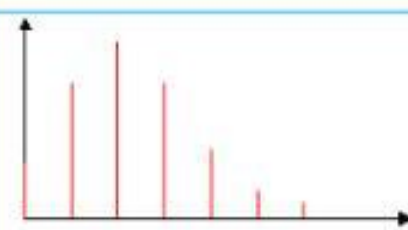
$$P(B_i|A)=\frac{P(A|B_i)P(B_i)}{\sum_j P(A|B_j)P(B_j)}$$

常见的概率分布

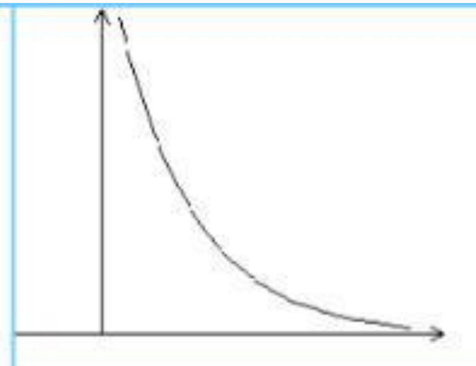
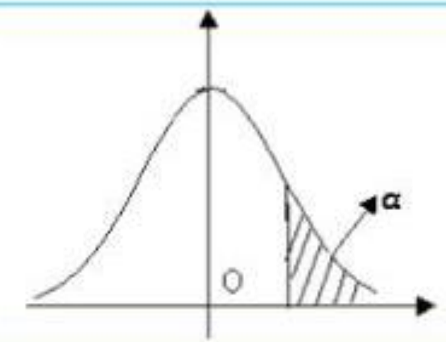
分　　布	参数	数学期望	方差
两点分布	$0<p<1$	p	$p(1-p)$
二项分布	$n\geq 1,$ $0<p<1$	np	$np(1-p)$
泊松分布	$\lambda>0$	λ	λ
均匀分布	$a<b$	$(a+b)/2$	$(b-a)^2/12$
指数分布	$\theta>0$	θ	θ^2
正态分布	$\mu,\sigma>0$	μ	σ^2

常见的概率分布

概率分布表

分布名称	概率与密度函数 $p(x)$	数学期望	方差	图形
贝努里分布 两点分布	$p_k=\begin{cases} q, & k=0 \\ p, & k=1 \end{cases}$ $0<p<1,\ q=1-p$	p	pq	
二项分布 $b(k;n,p)$	$b(k;n,p)=\binom{n}{k}p^k q^{n-k}$ $k=0,1,\cdots,n$ $0<p<1,\ q=1-p$	np	npq	
泊松分布 $p(k;\lambda)$	$p(k,\lambda)=\dfrac{\lambda^k}{k!}e^{-\lambda},\quad \lambda>0$ $k=0,1,2,\cdots,n$	λ	λ	

常见的概率分布

指数分布	$p(x)=\begin{cases}\lambda e^{-\lambda x}, & x\ge 0\\ 0, & x<0\end{cases}$ $\lambda>0$，常数	$\frac{1}{\lambda}$	$\frac{1}{\lambda^2}$	
正态分布 高斯分布 $N(a,\sigma^2)$	$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-(x-a)^2/2\sigma^2}$ $-\infty<x<\infty, a, \sigma>0$，常数	a	σ^2	
均匀分布 $U[a,b]$	$p(x)=\begin{cases}\frac{1}{b-a}, & a\le x\le b\\ 0, & 其他\end{cases}$ $a<b$，常数	$\frac{a+b}{2}$	$\frac{(b-a)^2}{12}$	

概率与统计的关注点

- 概率论问问题的方式：

装箱问题

- 将12件正品和3件次品随机装在3个箱子中，每箱装5件，则每箱中恰有1件次品的概率是多少？

- 数理统计问问题的方式：

例：正态分布的矩估计

- 在正态分布的总体中采样得到n个样本：$X_1,X_2\ldots X_n$，估计该总体的均值和方差。

概率与统计的关注点

- 根据是否已知整体进行区分：

装箱问题

- 将12件正品和3件次品随机装在3个箱子中，每箱装5件，则每箱中恰有1件次品的概率是多少？

- 统计问题是概率问题的逆向工程：

例：正态分布的矩估计

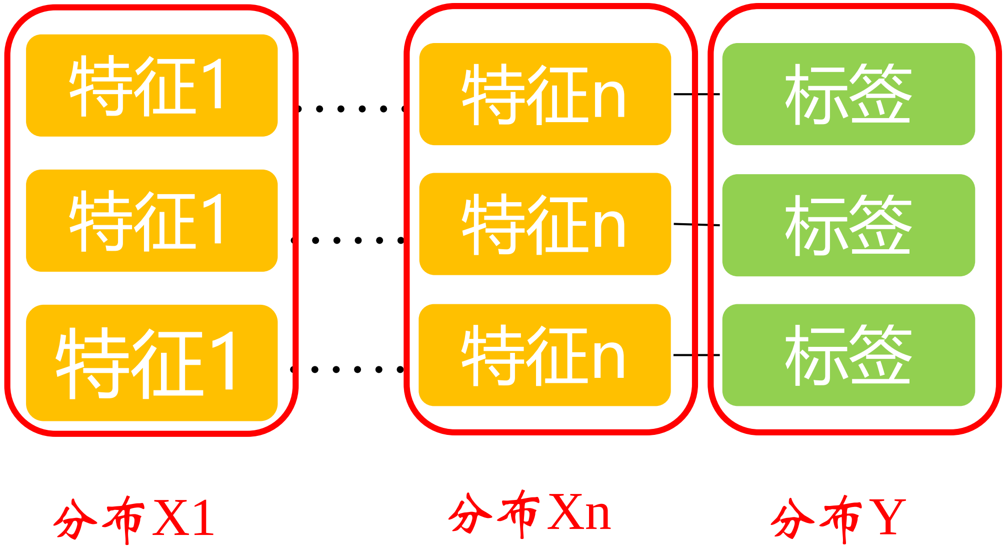
- 在正态分布的总体中采样得到n个样本：$X_1,X_2\ldots X_n$，估计该总体的均值和方差。

概率统计与机器学习的关系

特征1	……	特征n	标签
特征1	……	特征n	标签
特征1	……	特征n	标签
特征1	……	特征n	未知
特征1	……	特征n	未知

监督学习算法

概率统计与机器学习的关系



- 可基于各个分布的特性来评估模型和样本

概率统计与机器学习的关系

- 统计估计的是分布，机器学习训练出来的是模型，模型可能包含了很多分布。
- 训练与预测过程的一个核心评价指标就是模型的误差。
- 误差本身就可以是概率的形式，与概率紧密相关。
- 对误差的不同定义方式就演化成了不同损失函数的定义方式。
- 机器学习是概率与统计的进阶版本。（不严谨的说法）

重要统计量

- 都是描述全局（整体）统计量
  - 期望
  - 方差
  - 协方差

期望

- 离散型 $$E(X)=\sum_i x_i p_i$$
- 连续型 $$E(X)=\int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx$$
- 即：概率加权下的“平均值”

方差

- 定义

$$Var(X)=E\left\{[X-E(X)]^2\right\}=E\left(X^2\right)-E^2(X)$$

- 无条件成立 $Var(c)=0$

$$Var(X+c)=Var(X)$$

$$Var(kX)=k^2Var(X)$$

- X和Y独立

$$Var(X+Y)=Var(X)+Var(Y)$$

  - 此外，方差的平方根，称为标准差

协方差

- 定义 $Cov(X,Y)=E\{[X-E(X)][Y-E(Y)]\}$
- 性质：

$$Cov(X,Y)=Cov(Y,X)$$

$$Cov(aX+b,cY+d)=acCov(X,Y)$$

$$Cov(X_1+X_2,Y)=Cov(X_1,Y)+Cov(X_2,Y)$$

$$Cov(X,Y)=E(XY)-E(X)E(Y)$$

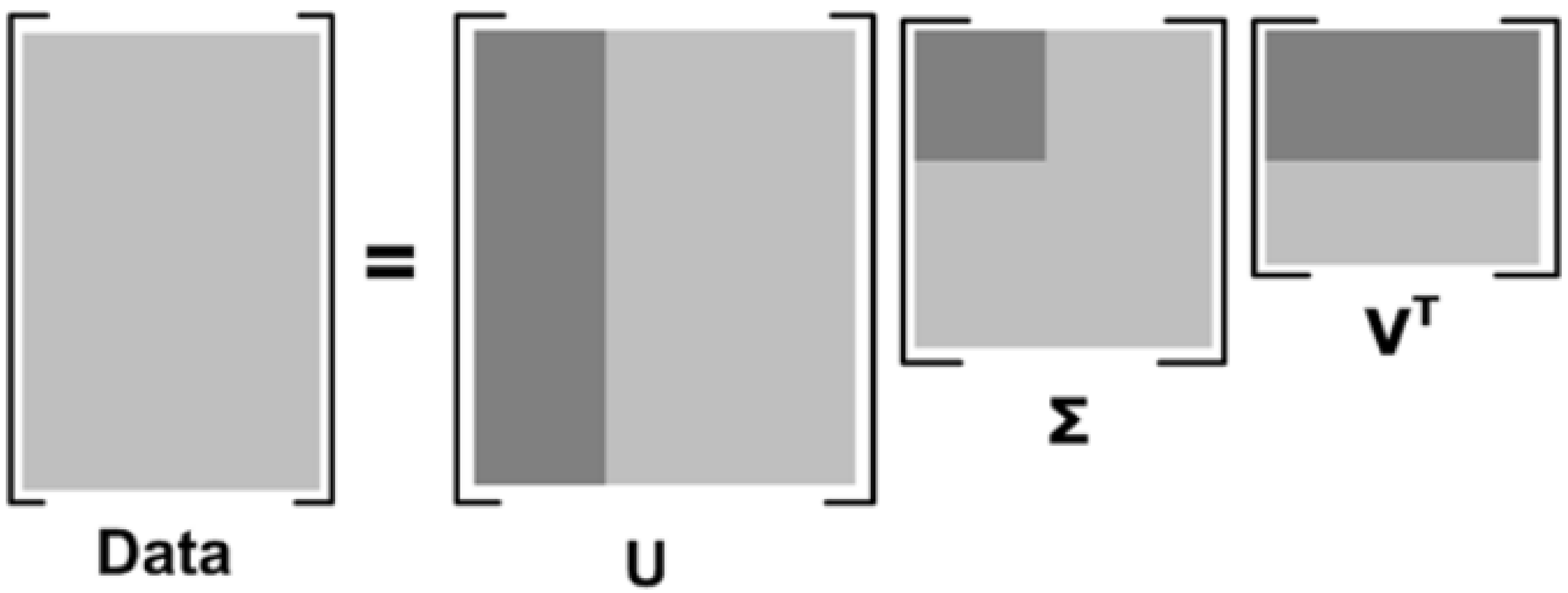
A•x的几何意义

- 矩阵绝不是把一堆数用括号括起来！本课件中，假设$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$。

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{2\times 2}} \underbrace{\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^{2}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 5 \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}\in\mathbb{R}^{2}} \tag{1}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & -6 & 0 \\ -2 & 7 & 2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{3\times 3}} \underbrace{\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^{3}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 5 \\ -2 \\ 9 \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}\in\mathbb{R}^{3}} \tag{2}$$

SVD的几何意义



矩阵乘法在计算中的优势

- 将很多for循环写成矩阵或者向量乘法的方式。
- 矩阵计算模块在底层有优化。
- Numpy进行矩阵运算很快

感谢大家！

恳请大家批评指正！