机器学习概念：梯度下降

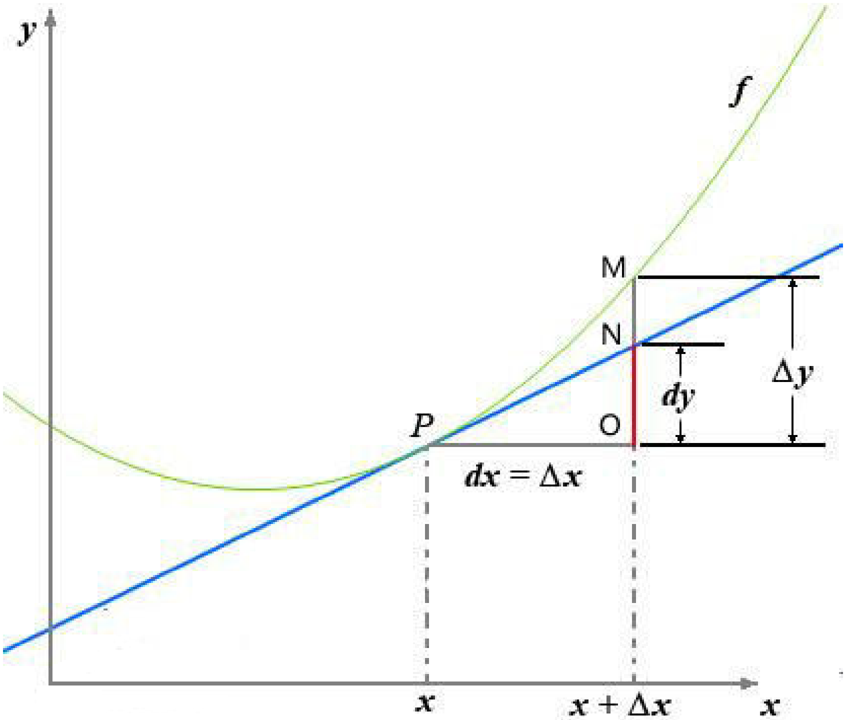
0. 前言

机器学习中大部分都是**优化问题**，大多数的优化问题都可以使用梯度下降/上升法处理，所以，搞清楚梯度算法就非常重要

学习梯度，需要一定的数学知识：导数（Derivative）、偏导数（Partial derivative）和方向导数（Directional derivative）。

1. 导数

一张图看懂，导数与微分：



导数的定义如下：

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}$$

反应的是函数$y=f(x)$在某一点处沿x轴正方向的**变化率**

函数$f(x)$在x轴上沿着x轴正方向的变化趋势，**导数的绝对值越大，变化趋势越明显**

- 如果导数值为正的话，说明$f(x)$在x点沿着x轴正方向是趋于增加的
- 如果导数值为负的话，说明$f(x)$在x点沿着x轴正方向是趋于减少的

对于上式子

符号	意义
Δx	x的变化量
dx	x的变化量Δx趋于0时，记作微元dx
Δy	$\Delta y=f(x_0+\Delta x)-f(x_0)$指函数的改变量
dy	$dy=f'(x_0)dx$是切线的改变量

当$\Delta x\rightarrow 0$时，dy与Δy都是无穷小，dy是Δy的主部，即：
$\Delta y=dy+o(\Delta x)$ $o()$：低阶无穷小

2. 偏导数

偏导数的定义如下：

$$\frac{\partial}{\partial x_j}f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\lim_{\Delta x\rightarrow 0}\frac{\Delta y}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\rightarrow 0}\frac{f(x_0,x_1,\cdots,x_n)-f(x_0,x_1,\cdots,x_n)}{\Delta x}$$

可以看到，导数与偏导数的本质都是一样的，当自变量的变化量趋于0时，函数值的变化量与自变量变化量比值的极限。直观的说，偏导数也就是函数在某一点上沿坐标轴正方向的变化率。

导数与偏导数的区别

导数：指的是一元函数中，函数$y=f(x)$在某一点处沿x轴正方向的变化率

偏导数：指的是多元函数中，函数$y=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$在某一点处沿某一坐标轴$(x_1,x_2,\cdots,x_n)$正方向的变化率

3. 方向导数

方向导数的定义如下：

$$\frac{\partial}{\partial l}f(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\lim_{\rho\to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x}=\lim_{\rho\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x_0,\cdots,x_j+\Delta x_j,\cdots,x_n+\Delta x_n)-f(x_0,\cdots,x_j,\cdots}{\rho}$$

其中: $\rho=\sqrt{(\Delta x_0)^2+\cdots+(\Delta x_j)^2+\cdots+(\Delta x_n)^2}$

导数与偏导数均为沿坐标轴正方向讨论函数的变化率，而方向导数，顾名思义，讨论函数在任意方向的变化率。即：**某一点在某一趋近方向上的导数值**

通俗的解释是：

我们不仅要知道函数在坐标轴正方向上的变化率（即偏导数），而且还要设法求得函数在其它特定方向上的变化率，而方向导数就是函数在其它特定方向上的变化率。

4. 梯度

梯度的定义如下：

$$gradf(x_0,x_1,\cdots,x_n)=(\frac{\partial f}{\partial x_0},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_j},\cdots,\frac{\partial f}{\partial x_n})$$

梯度的存在，为了回答一个问题：

函数在变量空间的某一点处，沿着哪一个方向有着最大的变化率

梯度的文字定义如下：

函数在某一点的梯度是这样一个向量，它的方向与取得最大方向导数的方向一致，它的模为方向导数的最大值。

注意：

- 梯度是一个**向量**，有方向有大小
- 梯度的方向是**最大方向导数**的方向
- 梯度的值的最大方向导数的值

梯度即函数在某一点最大的方向导数，函数沿梯度方向，函数的变化率最大。

5. 梯度下降法

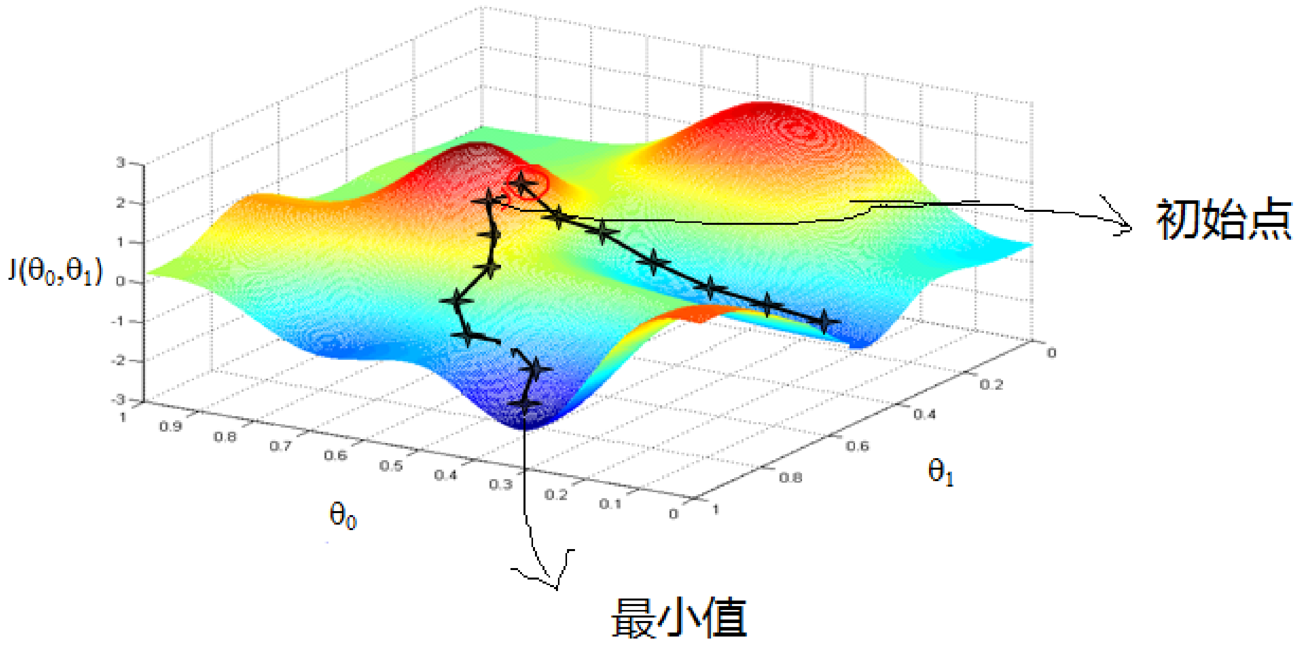
既然在变量空间的某一点处，函数沿梯度方向具有最大的变化率，那么在优化目标函数的时候，自然是沿着**负梯度方向**去减小函数值，来达到我们的优化目标

如何沿着负梯度方向减小函数值呢？因为梯度是偏导数的集合，如下：

$$grad f(x_0, x_1, \cdots, x_n) = (\frac{\partial f}{\partial x_0}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_j}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n})$$

由于梯度和偏导数均为向量，由向量的运算法则可知，我们在每个变量轴上减小对应的变量值即可，梯度下降算法可描述为：

> Repeat {
>
> $x_0 := x_0 - \alpha \frac{\partial f}{\partial x_0}$
>
> $\cdots$
>
> $x_j := x_j - \alpha \frac{\partial f}{\partial x_j}$
>
> $\cdots$
>
> $x_n := x_n - \alpha \frac{\partial f}{\partial xn}$
>
> $\cdots$
>
> }



由这个可以很清楚的了解梯度下降的过程，**类似人在高山上，如何快速下山**

1. 寻找下降速度最快的方向
2. 向下走
3. 循环步骤1和步骤2， 直到到达最小值（山底）

在这里，我们还需要了解几个概念：

5.1. 步长(learning rate)(学习速度)

步长决定了在梯度下降过程中，每一步沿梯度负方向前进的长度。

5.2. 特征(feature)

特征值的是样本输入部分，比如两个**单特征**样本$(x^{(0)}, y^{(0)}), (x^{(1)}, y^{(1)})$则第一个样本的特征为$x^{(0)}$,第一个样本的输出为$y^{(0)}$

5.3. 假设函数(hypothesis function)

在监督学习中，为了拟合输入样本，而使用假设函数，记作$h_\theta(x)$.比如对于单个特征的m个样本$(x^{(i)}, y^{(i)})(i = 1, 2, \cdots, m)$可以采用拟合函数如下：
$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$

5.4. 损失函数(loss function)

为了评估模型拟合的好坏，通常损失函数来度量拟合的程度。损失函数极小化，意味着拟合程度最好，对应的模型参数即为最优参数。在线性回归中，损失函数通常为样本输出和假设函数的差取平方，比如对于m个样本$(x_i, y_i)(i = 1, 2, \cdots, m)$采用线性回归，损失函数为：

$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x_i) - y_i)^2$ 这里的$\frac{1}{2}$是为了方便求导

其中x_i表示第i个样本特征，y_i表示第i个样本对于的输出,$h_\theta(x_i)$为假设函数。

梯度下降算法与线性回归算法比较

Gradient descent algorithm	Linear Regression Model

repeat until convergence {
 $\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1)$
 $(\text{for } j = 1 \text{ and } j = 0)$
 }
	$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$
	 $J(\theta) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2$

6. 梯度下降算法详细

梯度下降算法可以有代数法和矩阵法（也称向量法）

相比于代数法，矩阵法更加简洁，这里就不介绍代数法了，感兴趣的读者可以阅读：

[梯度下降（Gradient Descent）小结]

梯度下降算法的矩阵法

这里需要一定的矩阵 求导 知识

首先我们需要确定优化模型的假设函数和损失函数，对于线性回归来说：

假设函数：

$h_\theta(x_1, x_2, x \cdots, x_n) = \theta_o + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n$

矩阵表达方式为:$h_\theta(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X}\theta$

其中：$\boldsymbol{X}$是大小为mxn的矩阵。m代表样本个数, n代表样本的特征数

$h_\theta(\boldsymbol{X})$为mx1的向量、θ为nx1的向量

损失函数：

$J(\theta) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{X}\theta - \boldsymbol{Y})^T(\boldsymbol{X}\theta - Y)$

其中：$\frac{1}{2}$是为了方便求导，$\boldsymbol{Y}$是样本的输出向量，维度为mx1

算法过程：

> 1. 确定当前位置的损失函数的梯度，对于θ向量，其梯度表达式如下：
>
> $\frac{\partial}{\partial\theta}J(\theta)$
>
> 2. 用步长乘以损失函数的梯度，得到当前位置下降的距离
>
> $\alpha\frac{\partial}{\partial\theta}J(\theta)$ 这里设置α为步长
>
> 3. 确定θ向量里的每个值，梯度下降的距离都小于ε，如果梯度下降的距离小于ε则算法终止，当前θ向量即为最终结果。否则进行下一步
>
> 4. 更新θ向量，更新表达式如下： 更新结束后，将表达式传回步骤1
>
> $\theta = \theta - \alpha\frac{\partial}{\partial}J(\theta)$

其中，损失函数对于θ向量的偏导数计算如下：

$\frac{\partial}{\partial\theta}J(\theta) = \boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\theta - \boldsymbol{Y})$

步骤4中θ向量的更新表达式如下：

$\theta = \theta - \alpha \mathbf{X}^T(\mathbf{X}\theta - \mathbf{Y})$

7. 梯度下降法大家族（BGD，SGD，MBGD）

7.1. 批量梯度下降法（Batch Gradient Descent）

批量梯度下降法，是梯度下降法最常用的形式，具体做法也就是在更新参数时使用所有的样本来进行更新。

$$\theta_i = \theta_i - \alpha\sum_{j=0}^{m}(h_\theta(x_0^{(j)}, x_1^{(j)}, \ldots x_n^{(j)}) - y_j)x_i^{(j)}$$

由于我们有m个样本，这里求梯度的时候就用了所有m个样本的梯度数据。

7.2. 随机梯度下降法（Stochastic Gradient Descent）

随机梯度下降法，其实和批量梯度下降法原理类似，区别在与求梯度时没有用所有的m个样本的数据，而是仅仅选取一个样本j来求梯度。对应的更新公式是：

$$\theta_i = \theta_i - \alpha(h_\theta(x_0^{(j)}, x_1^{(j)}, \ldots x_n^{(j)}) - y_j)x_i^{(j)}$$

7.3. 小批量梯度下降法（Mini-batch Gradient Descent）

小批量梯度下降法是批量梯度下降法和随机梯度下降法的折衷，也就是对于m个样本，我们采用x个样子来迭代，$1 < x < m$。一般可以取x=10，当然根据样本的数据，可以调整这个x的值。对应的更新公式是：

$$\theta_i = \theta_i - \alpha\sum_{j=t}^{t+x-1}(h_\theta(x_0^{(j)}, x_1^{(j)}, \ldots x_n^{(j)}) - y_j)x_i^{(j)}$$

8. 梯度下降法和其他无约束优化算法的比较

在机器学习中的无约束优化算法，除了梯度下降以外，还有前面提到的最小二乘法，此外还有牛顿法和拟牛顿法。

梯度下降法和最小二乘法相比，梯度下降法需要选择步长，而最小二乘法不需要。梯度下降法是迭代求解，最小二乘法是计算解析解。如果样本量不算很大，且存在解析解，最小二乘法比起梯度下降法要有优势，计算速度很快。但是如果样本量很大，用最小二乘法由于需要求一个超级大的逆矩阵，这时就很难或者很慢才能求解解析解了，使用迭代的梯度下降法比较有优势。

梯度下降法和牛顿法/拟牛顿法相比，两者都是迭代求解，不过梯度下降法是梯度求解，而牛顿法/拟牛顿法是用二阶的海森矩阵的逆矩阵或伪逆矩阵求解。相对而言，使用牛顿法/拟牛顿法收敛更快。但是每次迭代的时间比梯度下降法长。

参考: https://www.cnblogs.com/pinard/p/5970503.html