哈尔滨工业大学计算机科学与技术学院

实验报告

课程名称： 机器学习

课程类型： 必修

实验题目： 多项式拟合正弦曲线

学号：

姓名：

一、实验目的

掌握最小二乘法求解（无惩罚项的损失函数）、掌握加惩罚项（2 范数）的损失函数优化、梯度下降法、共轭梯度法、理解过拟合、克服过拟合的方法(如加惩罚项、增加样本)

二、实验要求及实验环境

实验要求：

1. 生成数据，加入噪声；
2. 用高阶多项式函数拟合曲线；
3. 用解析解求解两种 loss 的最优解（无正则项和有正则项）
4. 优化方法求解最优解（梯度下降，共轭梯度）；
5. 用你得到的实验数据，解释过拟合。
6. 用不同数据量，不同超参数，不同的多项式阶数，比较实验效果。
7. 语言不限，可以用 matlab，python。求解解析解时可以利用现成的矩阵求逆。梯度下降，共轭梯度要求自己求梯度，迭代优化自己写。不许用现成的平台，例如 pytorch，tensorflow 的自动微分工具。

实验环境：

PyCharm 2020.3.2 x64
Python 3.8　numpy1.20.3　matplotlib 3.4.2

三、设计思想（本程序中的用到的主要算法及数据结构）

1.生成数据

使用 np.linspace 函数生成 X 的样本点，并用$y = \sin(2\pi x)$生成数据，样本点 x 均匀分布在[0,1]之间。对生成的样本点添加方差为 Sigma，均值为 0 的高斯噪声。

2. 用高阶多项式函数拟合曲线

采用多项式函数拟合生成数据的样本点的曲线，以预测每个x̂对应的值。

$$y(x, w) = w_0 + w_1 x + \cdots + w_n x^n = \sum_{i=0}^{n} w_i x^i$$

采用最小二乘法计算每个样本点目标值及预测函数预测值的误差。

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 \quad (1)$$

假设$X_{(i)}$、W为下式：

$$X_{(i)} = \begin{vmatrix} x_{(i)}^0 \\ \cdots \\ x_{(i)}^n \end{vmatrix}$$

$$\mathrm{W} = \begin{vmatrix} \theta_0 \\ \cdots \\ \theta_n \end{vmatrix}$$

$$h_\theta\left(x^{(i)}\right) = X_{(i)}^T W$$

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)})^2$$

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} h_\theta\left(x^{(0)}\right) - y^{(0)} \\ \cdots \\ h_\theta\left(x^{(m-1)}\right) - y^{(m-1)} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} h_\theta\left(x^{(0)}\right) - y^{(0)} \\ \cdots \\ h_\theta\left(x^{(m-1)}\right) - y^{(m-1)} \end{pmatrix}$$

将$X_{(i)}$、W带入可得：

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} X_0^T W - y^{(0)} \\ \cdots \\ X_{m-1}^T W - y^{(m-1)} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} X_0^T W - y^{(0)} \\ \cdots \\ X_{m-1}^T W - y^{(m-1)} \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}(\begin{pmatrix} X_0^T W \\ \cdots \\ X_{m-1}^T W \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y^{(0)} \\ \cdots \\ y^{(m-1)} \end{pmatrix})^T (\begin{pmatrix} X_0^T W \\ \cdots \\ X_{m-1}^T W \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y^{(0)} \\ \cdots \\ y^{(m-1)} \end{pmatrix})$$

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

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

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}(W^T X^T XW - W^T X^T Y - Y^T XW + Y^T Y) \tag{2}$$

至此，得到公式 2.

$$\text{方程 1：}\ \frac{\partial X^{\mathrm{T}}\mathrm{A}}{\partial \mathrm{X}} = \frac{\partial A^{\mathrm{T}}\mathrm{X}}{\partial \mathrm{X}} = A$$

$$\text{方程 2：}\ \frac{\partial X^{\mathrm{T}}\mathrm{BX}}{\partial \mathrm{X}} = (\mathrm{B} + B^T)\mathrm{X}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{W}}\mathrm{J}(\theta) = X^{\mathrm{T}}XW - X^{\mathrm{T}}Y \tag{3}$$

通过将方程 1 和方程 2 代入，我们可以得到公式 4，

$$\mathrm{W} = (X^{\mathrm{T}}X)^{-1}X^{\mathrm{T}}Y \tag{4}$$

3. 用带惩罚项的高阶多项式函数拟合曲线

使用不带惩罚项的高阶多项式函数拟合曲线易使W偏大，发生过拟合。因此

可以使用正则项，保留所有特征的同时，调整W的大小。

对公式 1 引入正则项，可以得到带惩罚项的高阶多项式函数：

$$\mathrm{J}(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2+\frac{\lambda}{2}\|W\| \tag{5}$$

根据公式 2，可以得到以矩阵形式展开的代价函数：

$$\mathrm{J}(\theta)=\frac{1}{2}(W^TX^TXW-W^TX^TY-Y^TXW+Y^TY)+\frac{\lambda}{2}W^TW \tag{6}$$

对公式 6 求导，我们可以得到：

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{W}}\mathrm{J}(\theta)=X^{\mathrm{T}}XW-X^{\mathrm{T}}Y+\lambda W \tag{7}$$

进一步，令公式 7 为 0，我们可以得到：

$$X^{\mathrm{T}}XW-X^{\mathrm{T}}Y+\lambda W=0 \tag{8}$$

因此有：

$$(X^{\mathrm{T}}X+\lambda I)W-X^{\mathrm{T}}Y=0$$

$$(X^{\mathrm{T}}X+\lambda I)W=X^{\mathrm{T}}Y$$

$$W=(X^{\mathrm{T}}X+\lambda I)^{-1}X^{\mathrm{T}}Y \tag{9}$$

需要选取合适的 lambda 作为惩罚系数。

岭回归一般采用均方误差 MSE 来衡量 lambda：

$$\mathrm{MSE}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

4. 优化方法求解最优解（梯度下降法）

梯度下降法是求解无约束优化问题最简单、经典的方法。当 n 非常大的时候，计算$(X^{\mathrm{T}}X)^{-1}$时间过长，此时使用梯度下降法，效率往往更高。考虑一个无约束优化问题$\min_{\mathrm{x}}\mathrm{f(x)}$，其中 f(x) 为连续可微函数，如果我们能够构造一个序列$x^0,x^1,x^2,\ldots$，并能够满足$\mathrm{f}(x^{t+1})<\mathrm{f}(x^t),\mathrm{t}=0,1,2,\ldots$，则可以收敛到最小值。

我们实现带惩罚项的高阶多项式进行梯度下降法，由公式 7 可得：

$$\frac{\partial}{\partial \mathrm{W}}\mathrm{J}(\theta)=(X^{\mathrm{T}}X+\lambda)W-X^{\mathrm{T}}Y \tag{10}$$

梯度下降法：

$$\mathrm{W}=\mathrm{W}-\alpha\frac{\partial}{\partial \mathrm{W}}\mathrm{J}(\theta) \tag{11}$$

对于公式 11，选择合适的α，使$\mathrm{J}(\theta_{k+1})<\mathrm{J}(\theta_k)$。

因此：

$$\mathrm{W}=\mathrm{W}-\alpha\frac{\partial}{\partial \mathrm{W}}\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

$$\mathrm{W} = \mathrm{W} - \alpha \frac{\partial}{\partial \mathrm{W}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (X_{(i)}^{T} W - y^{(i)})^{2}$$

$$\mathrm{W} = \mathrm{W} - \alpha \frac{\partial}{\partial \mathrm{W}} \sum_{i=1}^{m} (X_{(i)}^{T} W - y^{(i)}) X_{(i)}^{T} \tag{12}$$

通过此时得出的 W 计算代价函数，即 loss 的值。

$$\mathrm{J}(\theta) = \frac{1}{2}(W^{T} X^{T} X W - W^{T} X^{T} Y - Y^{T} X W + Y^{T} Y) + \frac{\lambda}{2} W^{T} W$$

若$\mathrm{J}(\theta_{k+1}) < \mathrm{J}(\theta_{k})$，则继续迭代，当$\mathrm{abs}\left(\mathrm{J}(\theta_{k+1}) - \mathrm{J}(\theta_{k})\right) < \delta$时，停止迭代。

若出现$\mathrm{J}(\theta_{k+1}) > \mathrm{J}(\theta_{k})$的情况，则可能学习率选择过大，此时令$\alpha = \alpha/2$. 可使其正常迭代。

5. 优化方法求解最优解（共轭梯度）

由公式 10，我们可以得到需要解决的任务如下：

$$(X^{\mathrm{T}} X + \lambda I) W - X^{\mathrm{T}} Y = 0 \tag{13}$$

由共轭梯度下降法的方法表述：

即对线性系统求解：

$$\mathrm{Ax} = \mathrm{b} \tag{14}$$

由公式 13、公式 14 有：

$$\mathrm{A} = X^{\mathrm{T}} X + \lambda I$$
$$\mathrm{b} = X^{\mathrm{T}} Y$$

共轭梯度下降法的算法描述：

$$r_0 \coloneqq b - A x_0$$
$$p_0 \coloneqq r_0$$
$$\mathrm{k} \coloneqq 0$$
repeat

$$\alpha_k \coloneqq \frac{r_k^{T} r_k}{P_k^{T} A P_K}$$

$$x_{k+1} \coloneqq x_k + \alpha_k P_K$$
$$r_{k+1} \coloneqq r_k - \alpha_k A P_K$$
if r_{k+1} $is\ sufficiently\ small, then\ exit\ loop$

$$\beta_k \coloneqq \frac{r_{k+1}^{T} r_{k+1}}{r_k^{T} r_k}$$

$$P_{K+1} \coloneqq r_{k+1} + \beta_k P_K$$
$$\mathrm{k} \coloneqq \mathrm{k} + 1$$
end repeat

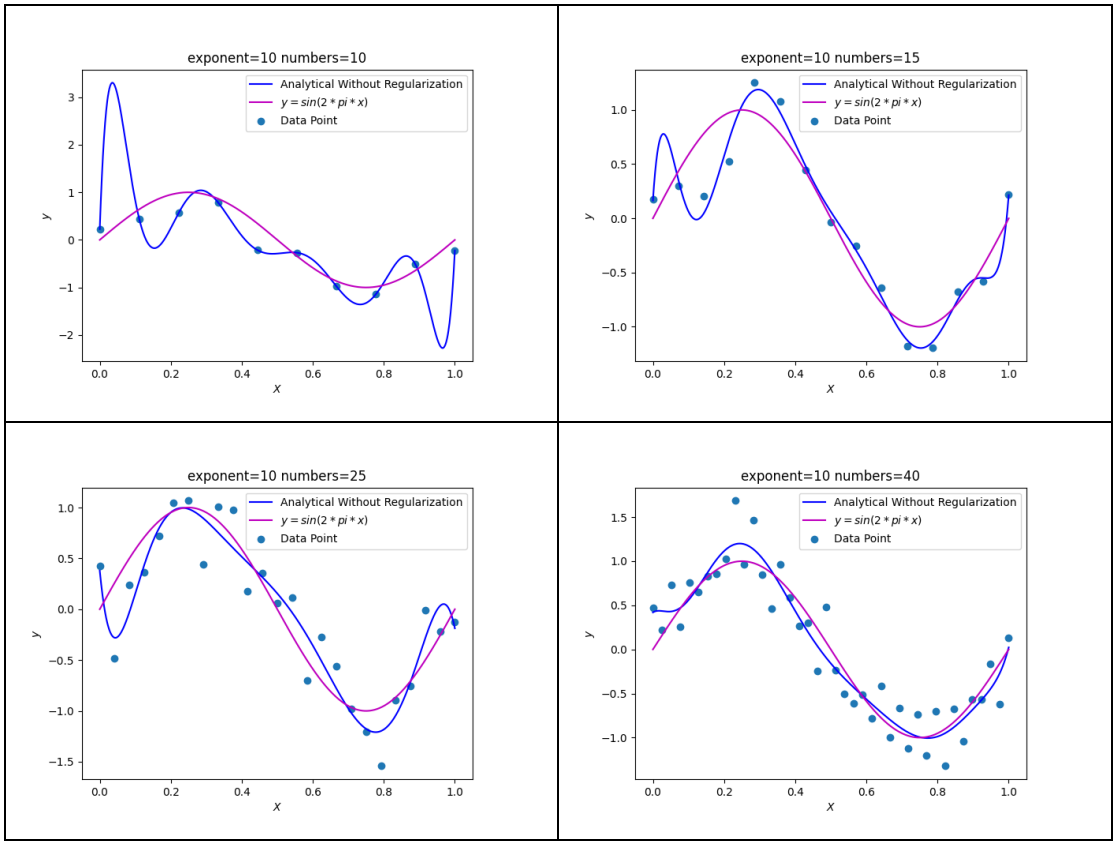
结果为x_{k+1}，即$\mathrm{W} = x_{k+1}$。

四、实验结果与分析

注：exponent 指多项式的系数的矩阵的规模为 exponent*1，即多项式的最高次为 exponent-1.

(一) 不带正则项的高阶多项式拟合

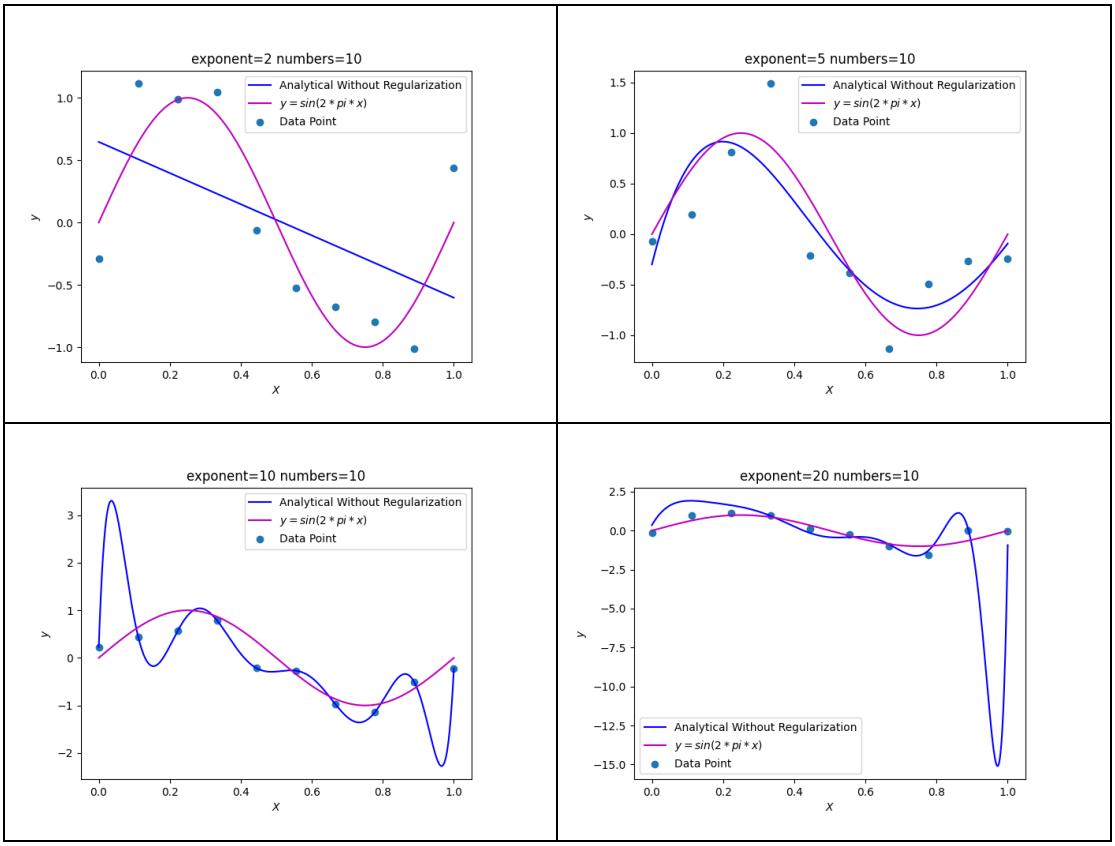
1. 固定多项式阶数，使用不同训练样本数量，样本的噪声的方差为 0.3.



实验分别取训练样本点数量为 10、15、25、40.

通过实验，我们可以很明显的看到，在训练样本数量过少的时候，可能存在拟合的多项式经过所有的点，但很容易发生过拟合。如图 1，其经过完美的经过所有的点，但发生了剧烈的震荡，不能够很好的拟合$y = \sin(2\pi x)$. 因此，图 1 拟合的函数出现了过拟合的现象，不适用于预测其他样本点。如图 2、图 3、图 4，随着训练样本点的逐渐增多，过拟合的现象得到改善，说明样本点的数量对于过拟合问题有较大影响。图 4 已经可以较好的拟合$y = \sin(2\pi x)$函数。

2. 固定训练样本数量，使用不同的多项式阶数拟合，样本的噪声的方差为 0.3.



实验取 exponent 分别为 2、5、10、20，所对应的多项式的阶数分别为 1、4、9、19.

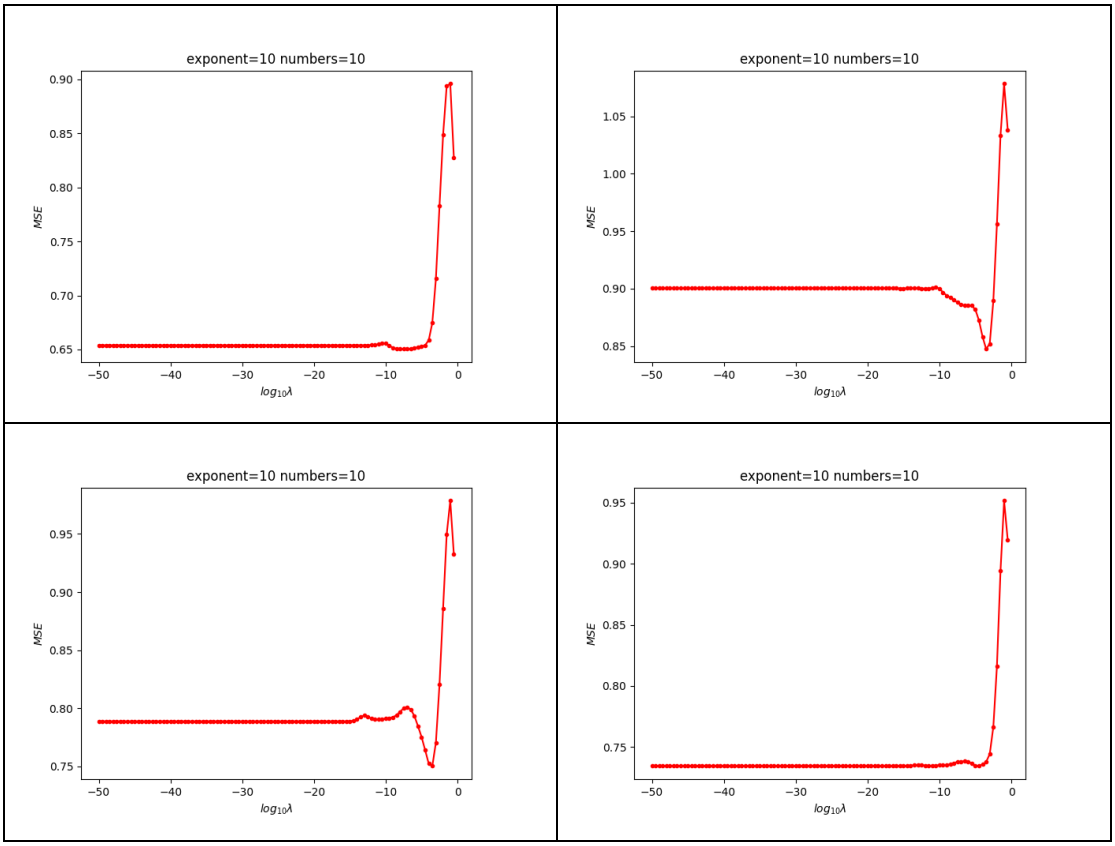
随着多项式的阶数的提高，多项式的拟合能力逐渐增强，如图 1，当 exponent=2，阶数为 1 的时候，拟合效果很差。但当 exponent=5，即阶数为 4 的时候，如图 2，函数已经较好的拟合了$y = \sin(2\pi x)$，此时继续增长多项式的阶数，可能会造成过拟合，即多项式函数可能接近每一个点，但其预测效果很差，容易发生剧烈抖动。如图 3 函数发生了剧烈的抖动，不能很好的预测$y = \sin(2\pi x)$.当 exponent=20，阶数为 19 时，函数发生了非常剧烈的抖动，在第九个和第十个样本点之间，出现了远低于$y = \sin(2\pi x)$预测的数，因此拟合效果很差。因此多项式函数的阶数会很大程度上影响函数的拟合效果。

(二) 带正则项的高阶多项式拟合

1. 首先选取合适的 lambda 参数。

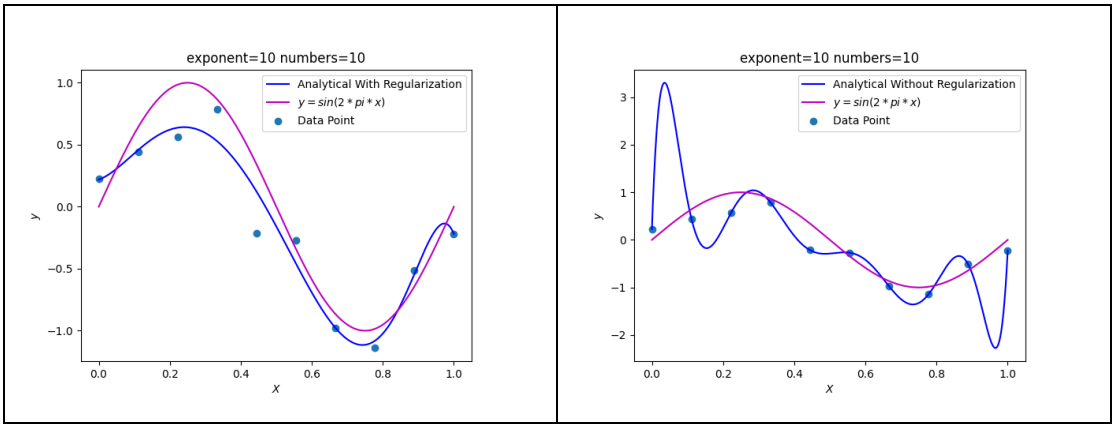
计算不同 lambda 对应的 MSE 的值，若 lambda 过小则可能导致函数过拟合，若 lambda 过大，则可能导致多项式函数出现欠拟合现象，因此选取合适的 lambda 非常重要。

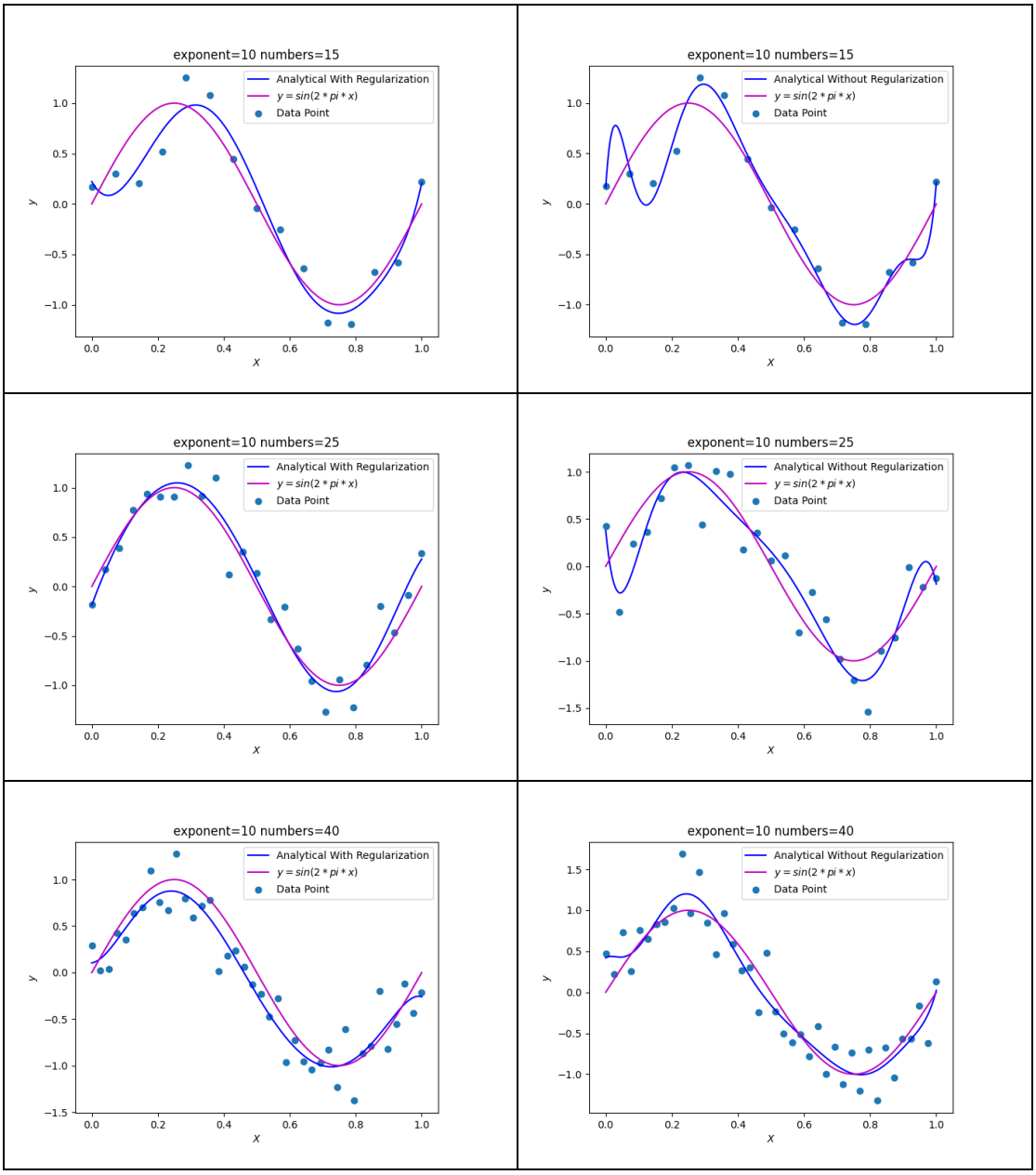
通过计算 MSE 选取合适的 lambda 的值。固定样本的阶数为 10 阶，样本的数量为 10.



通过上述实验过程，可以观察到，MSE 在处于$(10^{-10}, 10^{-5})$会出现最小值，但由于在最低点之后，MSE 增长速度过快，因此通过大量实验，选取较为合适的 lambda 的值为10^{-7}.

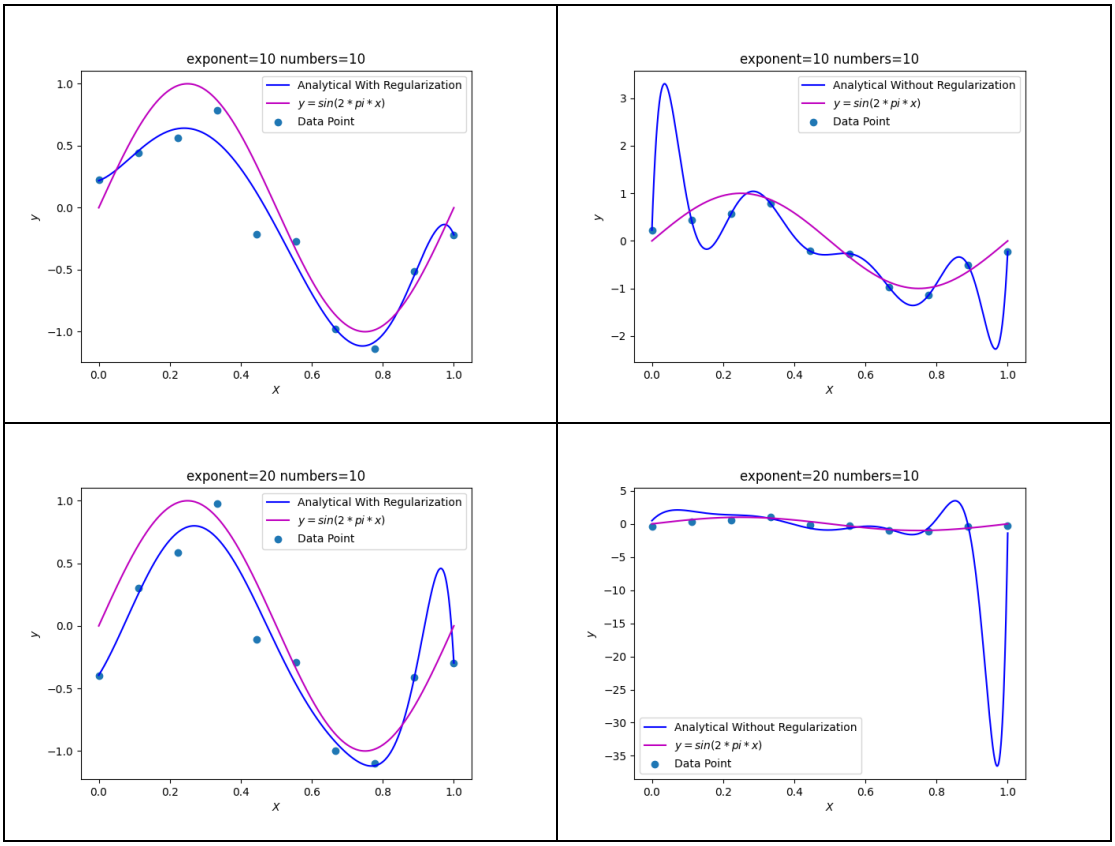
2. 固定多项式阶数，固定惩罚项系数为10^{-7}使用不同训练样本数量，样本的噪声的方差为 0.3。展开有正则项和无正则项的对比实验





上图左侧为带正则项的高阶多项式，右侧为不带正则项的高阶多项式，可以看到，在选择合适的超参数λ后，函数过拟合的情况大大缓和。实验验证正则项可以大大缓和过拟合的情况。

3. 固定训练样本数量，使用不同的多项式阶数拟合，样本的噪声的方差为 0.3.

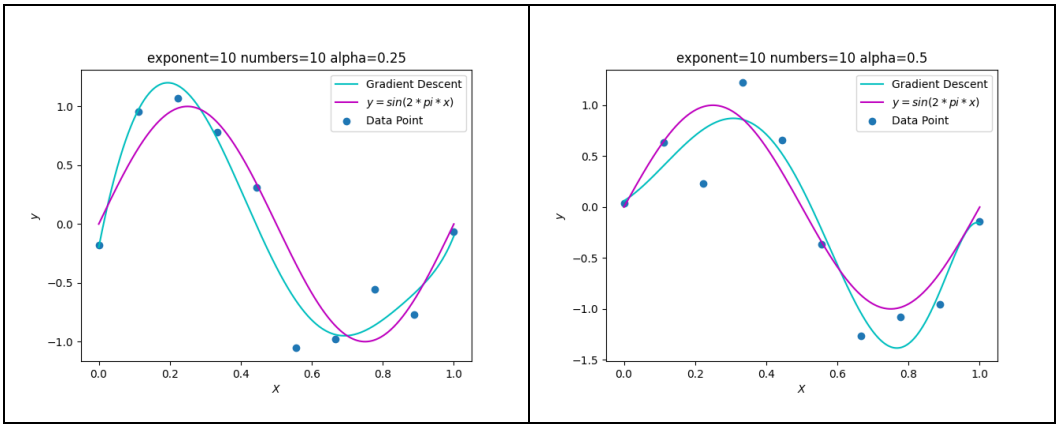


实验取 exponent 分别为 10、20，所对应的多项式的阶数分别为 9、19. 右侧不带正则项函数拟合曲线明显过拟合，左侧带正则项函数过拟合程度大大减缓，实验验证正则项可以大大缓和过拟合的情况。

(三) 优化方法梯度下降法

此处设置的停止的精度要求为10^{-8}.

1. 固定训练样本数量、多项式阶数，使用不同的学习率。



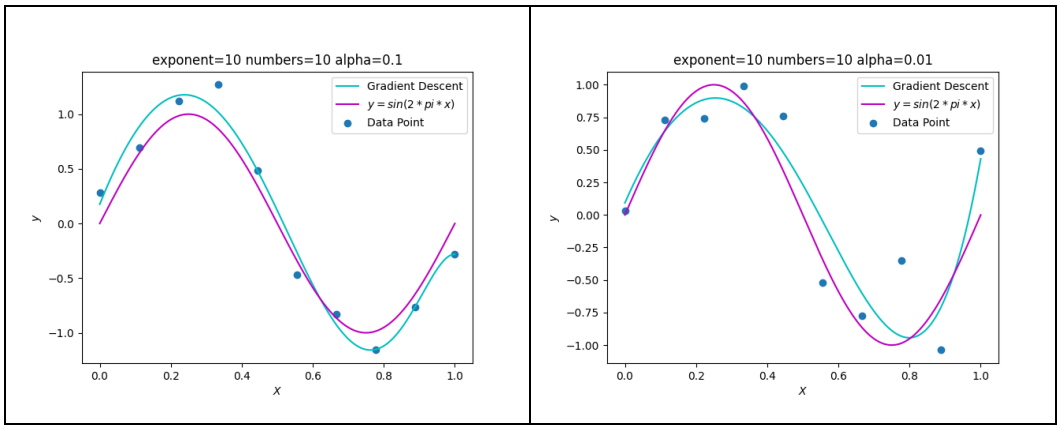
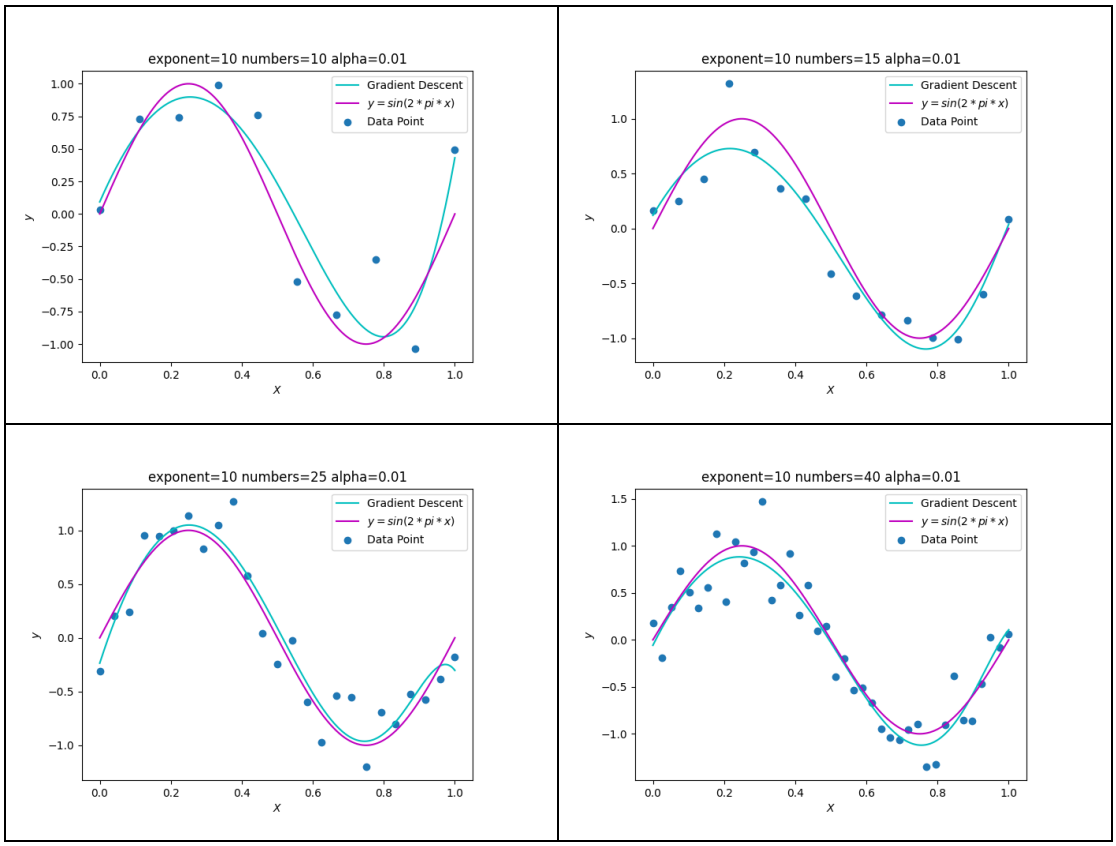


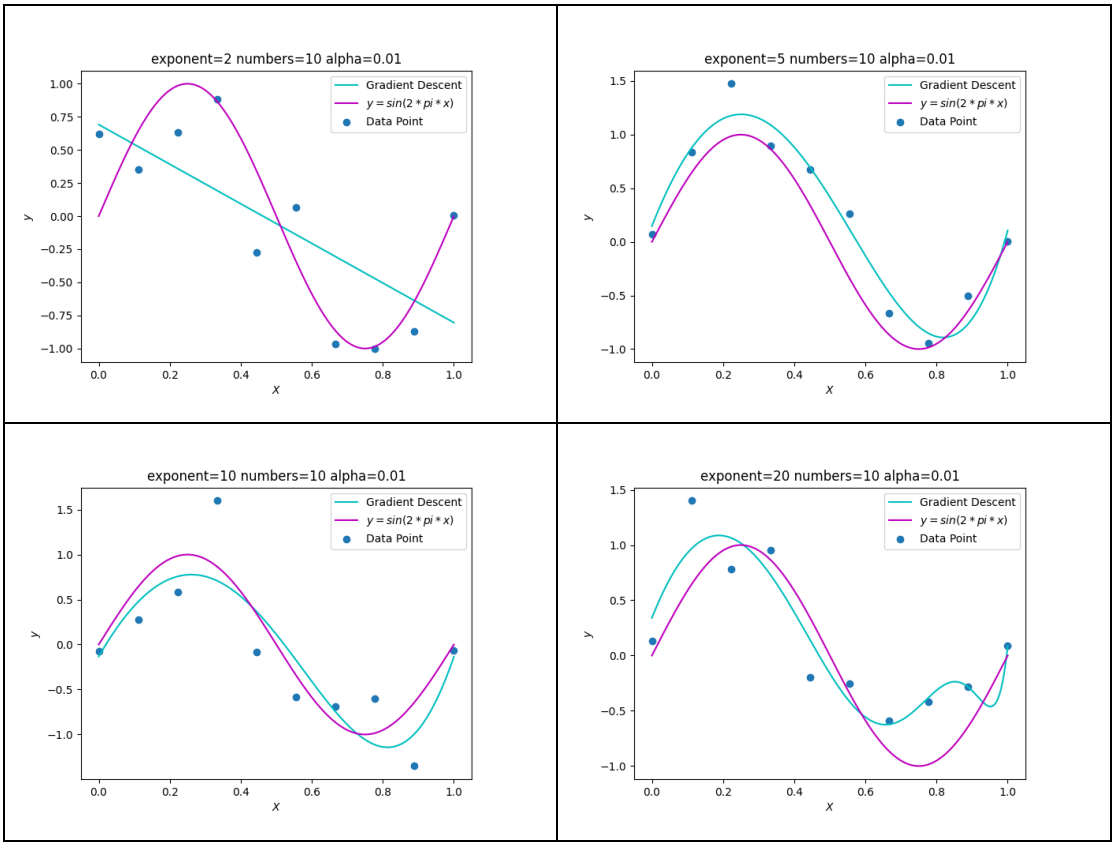
图 1 设置的学习率为 1，但由于当学习率为 1 的时候，梯度下降无法收敛，因此在迭代的过程中，自动将学习率下调，当下调到 0.25 的时候，梯度下降可以收敛。图 2 为使用 0.5 的学习率迭代，图 3 使用 0.1 的学习率迭代，图 4 使用 0.01 的学习率迭代。由于精度的要求较高，并且函数有正则项，因此拟合效果较好。

2. 固定学习率为 0.01、多项式阶数为 9，调整训练样本个数。



分别设置训练样本数量为 10、15、25、40. 在不同训练数量的情况下，都有比较好的结果。

3. 固定学习率为 0.01、训练样本个数为 10，调整多项式阶数。

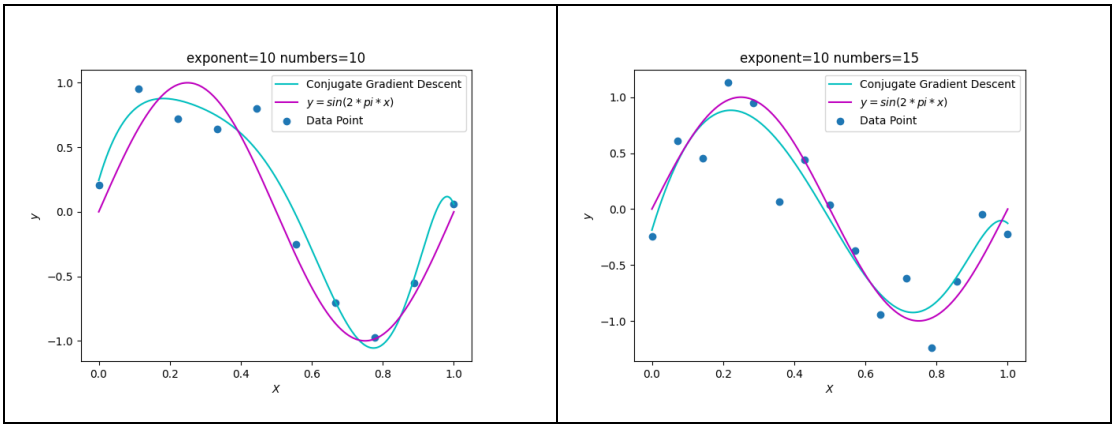


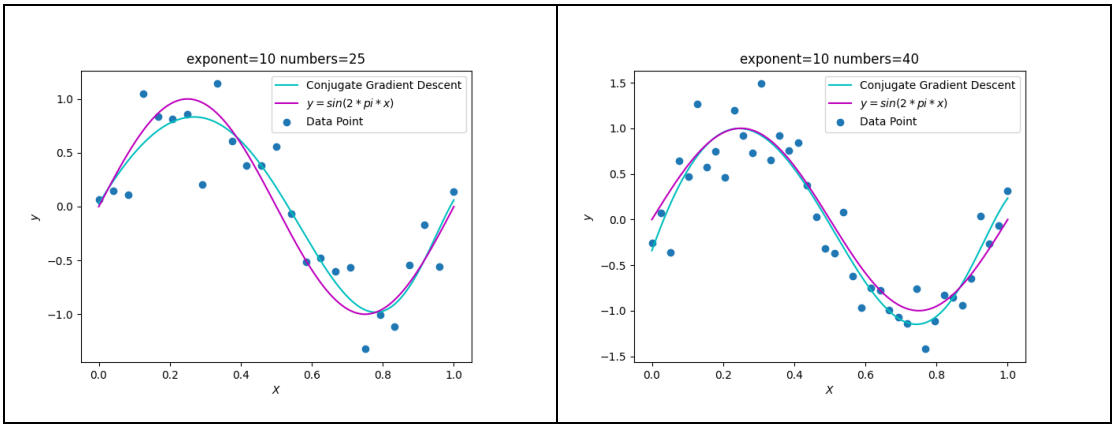
分别将 exponent 设为 2、5、10、20，如图 2，在阶数为 4 的时候，拟合曲线逐渐符合$y = \sin(2\pi x)$。如图 4，在多项式阶数过高的时候发生了过拟合。

(四)优化方法共轭梯度法

此处设置的停止的精度要求为10^{-8}.

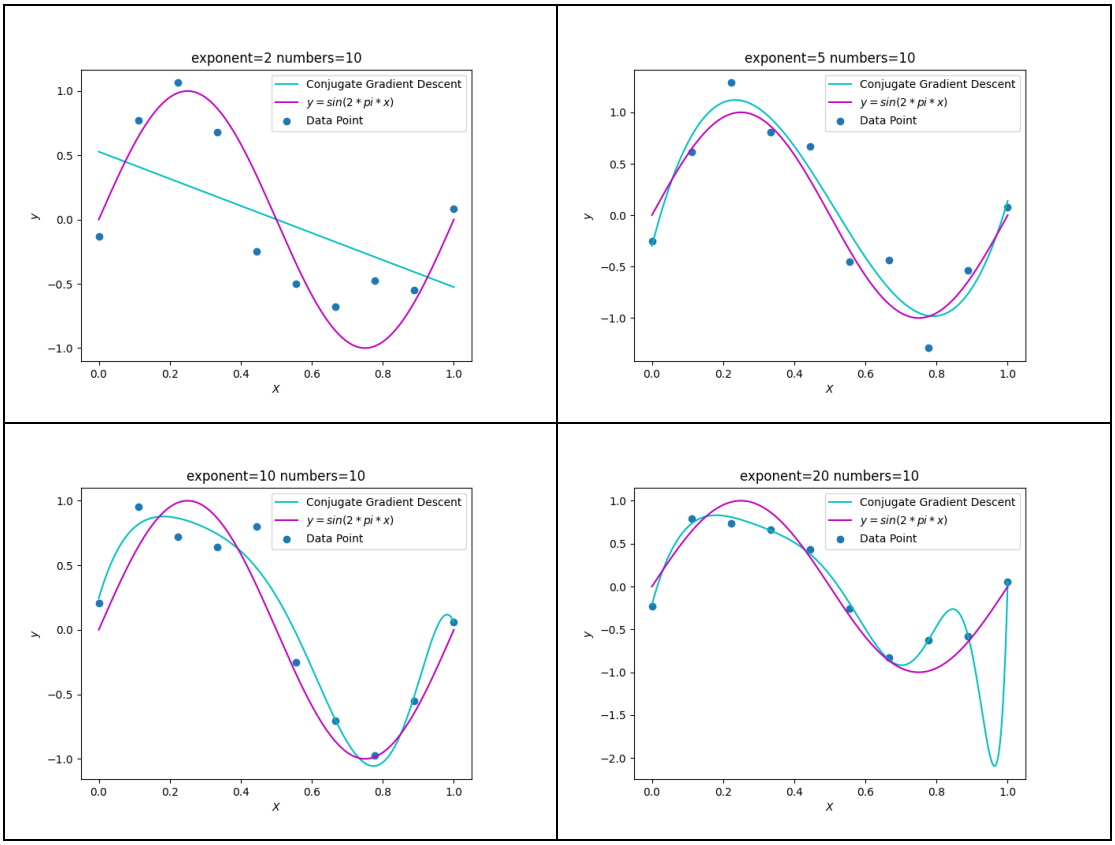
1. 多项式阶数为 9，调整训练样本个数。





分别设置训练样本数量为 10、15、25、40. 随着训练样本数量的增多，拟合曲线逐渐贴近$y = \sin(2\pi x)$。拟合效果较好。

2. 训练样本个数为 10，调整多项式阶数。



分别将 exponent 设为 2、5、10、20，如图 2，在阶数为 4 的时候，拟合曲线逐渐符合$y = \sin(2\pi x)$。如图 4，在多项式阶数过高的时候发生了过拟合。

(五)梯度下降法和共轭梯度法比较

迭代次数比较：

1. 当训练样本个数固定时

	n=10 exponent=2	n=10 exponent=5	n=10 exponent=10	n=10 exponent=20
梯度下降法	7095	785681	1289810	2855686
共轭梯度法	1	4	10	11

2. 当多项式阶数固定时

	n=10 exponent=10	n=15 exponent=10	n=25 exponent=10	n=40 exponent=10
梯度下降法	1289810	1580094	1668467	2042393
共轭梯度法	10	14	14	18

从表中可以看出，梯度下降法的迭代次数远远大于共轭梯度法，由于梯度下降法，在靠近极值点的时候收敛速度降低，可能会造成速度较慢，实际实验中，共轭梯度法的速度也远远高于梯度下降法。

(六)训练样本为 100，多项式的阶数为 50

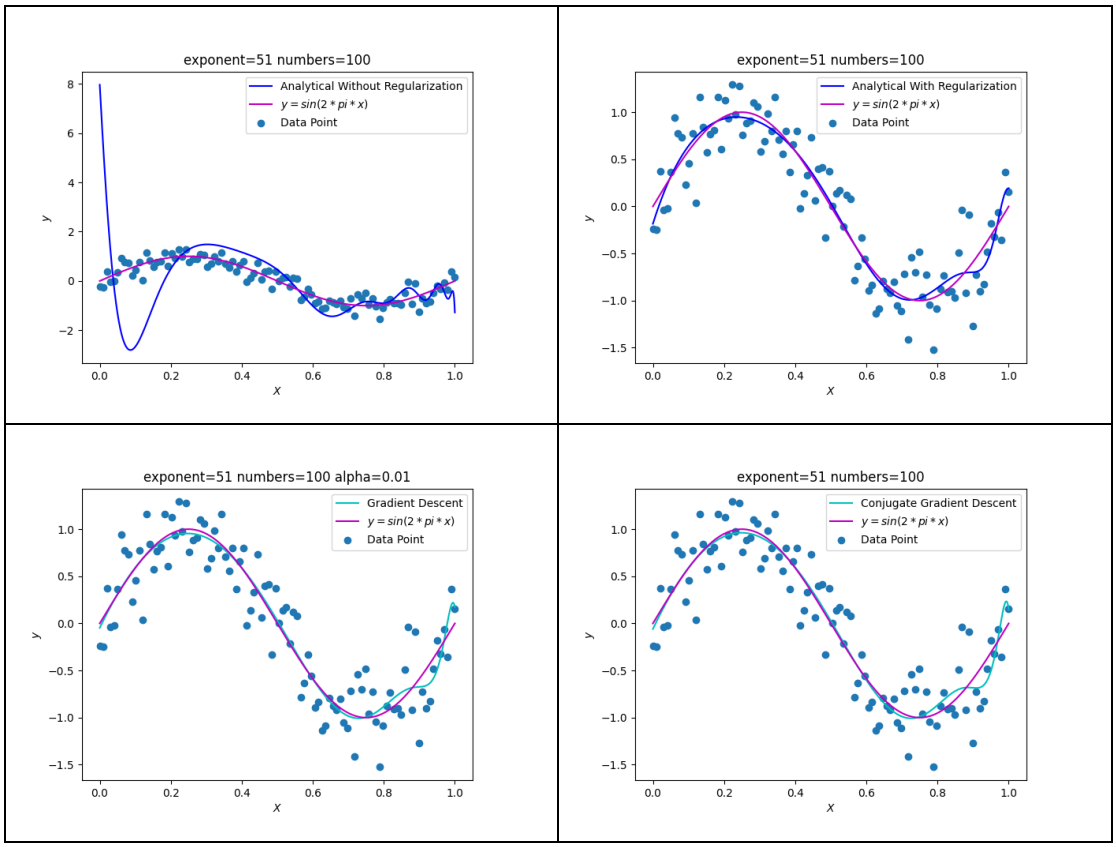


图 1 为不带正则项的高阶多项式拟合结果，图 2 为带正则项的高阶多项式拟合结果，图 3 为梯度下降法的拟合曲线，图 4 为共轭梯度法的拟合曲线，可以看到图 1 存在过拟合情况较为严重，其他三种情况拟合效果都比较好。

五、结论

1. 拟合函数阶数过高容易导致过拟合；
2. 训练样本数量太少容易导致过拟合；
3. 解析解易过拟合时，可以添加正则项，减缓过拟合的情况。
4. 对于 n 过大的情况，求逆运算会很慢，可以使用梯度下降法或共轭梯度法，

梯度下降法的迭代次数较多，远远慢于共轭梯度法，但二者都有较好的拟合能力。

5. 学习率的选择不宜过大，易发生不收敛的情况。

六、参考文献

[1] Pattern Recognition and Machine Learning

[2] 机器学习 周志华著 北京：清华大学出版社，2016 年 1 月.

[3] https://zhuanlan.zhihu.com/p/36564434

七、附录：源代码（带注释）

主函数 main.py

```
from generateData import *
from gradientDescent import *
from conjugateGradientDescent import *
from leastSquareMethod import *

if __name__ == '__main__':
    # 训练样本个数
    numbers = 25
    # 噪声 Sigma
    Sigma = 0.3
    # 多项式的阶数
    exponent = 10
    # 惩罚系数 Lambda
    Lambda = 1e-7
    # 梯度下降学习率
```

```
    alpha = 0.01
    # 梯度下降迭代次数
    GDiterNum = 800000000
    # 共轭梯度下降迭代次数
    CGiterNum = 100
    # 迭代精度
    precision = 1e-8
    # 生成数据
    X, X_train, y, y_noise = addNoise(numbers, exponent, Sigma)

    # fittingNoRegular(X, X_train, y_noise, exponent)
    # fittingRegular(X, X_train, y_noise, exponent, Lambda)
    # Drawlambda(X, X_train, y_noise, exponent)
    ConjugateGradientDescent(X, X_train, y_noise, exponent, CGiterNum, Lambda, precision)
    GradientDescent(X, X_train, y_noise, exponent, alpha, GDiterNum, Lambda, precision)
```

生成数据 generateData.py

```
import numpy as np
def generateNoise(Sigma, Size):
    Noise = np.random.normal(0, scale=Sigma, size=Size)
    return Noise

def addNoise(numbers,exponent,Sigma):
    X = np.linspace(start=0, stop=1, num=numbers)
    GuassNoise = np.random.normal(0, scale=Sigma, size=X.shape)
    y = np.sin(2 * np.pi * X)
    y_noise = y + GuassNoise
    # plt.scatter(X, y_noise)
    # plt.show()
    row = np.ones(numbers, dtype=np.float64) * X
    X_train = row ** 0
    # 计算不同阶对应 X 值
    for i in range(1, exponent):
        row = np.ones(numbers, dtype=np.float64) * X
        row = row ** i
        X_train = np.dstack((X_train, row))
    X_train = np.reshape(X_train, (numbers, exponent))
    return X,X_train,y, y_noise


def generatePlotdata(numbers,exponent):
```

```
    X = np.linspace(start=0, stop=1, num=numbers)
    row = np.ones(numbers, dtype=np.float64) * X
    X_train = row ** 0
    # 计算不同阶对应 X 值
    for i in range(1, exponent):
        row = np.ones(numbers, dtype=np.float64) * X
        row = row ** i
        X_train = np.dstack((X_train, row))
    X_train = np.reshape(X_train, (numbers, exponent))
    return X,X_train
```

绘制sin(2πx)曲线 drawSin2pix.py

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
def drawSin2pix(numbers):
    X = np.linspace(start=0, stop=1, num=numbers)
    y = np.sin(2 * np.pi * X)
    plt.plot(X,y,"m",label = "$y=sin(2*pi*x)$")
```

使用解析解求拟合函数 leastSquareMethod.py

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from generateData import generatePlotdata
from drawSin2pix import drawSin2pix
from calculateLambda import *
def fittingNoRegular(X,X_train,y_noise,exponent):
    W = np.matmul(np.matmul(np.linalg.inv(np.matmul(X_train.T, X_train)), X_train.T), y_noise)
    W = np.reshape(W, (exponent, 1))
    Y_predict = np.matmul(X_train, W)
    # plt.plot(X, Y_predict,format('b.-'))


    title = 'exponent={} numbers={}'.format(exponent,X.shape[0])
    plt.title(title)
    plt.xlabel('$X$', fontsize=10)
    plt.ylabel('$y$', fontsize=10)
    plt.scatter(X, y_noise, marker='o', label='Data Point')
    # numbers 为绘图的点数
    X,X_train = generatePlotdata(numbers=1000,exponent=exponent)
    Y_predict = np.matmul(X_train, W)
```

```
    plt.plot(X,Y_predict,format('b'),label='Analytical Without Regularization')
    drawSin2pix(1000)
    plt.legend()
    plt.savefig("./" + "picture/LS/NoRegular/" + title)
    plt.show()


def fittingRegular(X,X_train,y_noise,exponent,Lambda):
    W = np.matmul(np.matmul(np.linalg.inv((np.matmul(X_train.T, X_train) + np.eye(exponent) * Lambda)), X_train.T),y_noise)
    # W = np.reshape(W, (exponent, 1))
    Y_predict = np.matmul(X_train, W)
    # plt.plot(X, Y_predict)

    title = 'exponent={} numbers={}'.format(exponent,X.shape[0])
    plt.title(title)
    plt.xlabel('$X$', fontsize=10)
    plt.ylabel('$y$', fontsize=10)
    plt.scatter(X, y_noise, marker='o', label='Data Point')
    # numbers 为绘图的点数
    X, X_train = generatePlotdata(numbers=1000, exponent=exponent)
    Y_predict = np.matmul(X_train, W)
    plt.plot(X, Y_predict, format('b'), label='Analytical With Regularization')
    drawSin2pix(1000)
    plt.legend()
    plt.savefig("./" + "picture/LS/Regular/" + title)
    plt.show()
```

计算代价函数的值 computeCost.py

```
import numpy as np
# 计算代价函数
def ComputeCost(X, y, theta,Lambda):
    hypthesis = np.dot(X, np.transpose(theta))
    # 先转置再做矩阵乘法
    cost = np.dot(np.transpose(hypthesis - y), (hypthesis - y))
    cost = cost / 2 + Lambda*np.dot(theta,np.transpose(theta))/2
    return cost
```

求梯度下降法的系数 gradientDescent.py

```
import numpy as np
```

```
from computeCost import ComputeCost
import matplotlib.pyplot as plt
from generateData import generatePlotdata
from drawSin2pix import drawSin2pix
def GradientDescent(X,X_train,y,exponent,alpha,iterNum,Lambda,precision):
    # 用于存储代价值
    costStore = np.zeros(iterNum)
    # 定义 X 数据的大小
    Xsize = X_train.shape[0]
    # 设置 theta 初始值
    theta = np.zeros(exponent)
    costStore[0] = ComputeCost(X_train, y, theta, Lambda)
    predict = np.matmul(X_train, theta.T)
    theta = theta - alpha * np.dot(X_train.T, (predict - y).T) / Xsize
    print("当前迭代的 alpha={}".format(alpha))
    for num in range(1,iterNum):
        # 计算当前代价值并保存
        costStore[num] = ComputeCost(X_train,y,theta,Lambda)
        predict = np.matmul(X_train,theta.T)
        theta = theta - alpha *np.dot(X_train.T,(predict-y).T)/Xsize
        if abs(costStore[num]-costStore[num-1]) <= precision :
            print("迭代次数：{}".format(num))
            print("当前迭代的 alpha={}".format(alpha))
            break
        if costStore[num]-costStore[num-1] >0:
            alpha = alpha/2
            print("当前迭代的 alpha={}".format(alpha))
    Y_predict = np.matmul(X_train, theta)
    # plt.plot(X, Y_predict,format('y'))

    # # numbers 为绘图的点数
    # X,X_train = generatePlotdata(numbers=100,exponent=exponent)
    # Y_predict = np.matmul(X_train, theta)
    # plt.plot(X, Y_predict, format('y'),label = 'Gradient Descent')

    title = 'exponent={} numbers={} alpha={}'.format(exponent,X.shape[0],alp
ha)
    plt.title(title)
    plt.xlabel('$X$', fontsize=10)
    plt.ylabel('$y$', fontsize=10)
    plt.scatter(X, y, marker='o', label='Data Point')
    # numbers 为绘图的点数
    X, X_train = generatePlotdata(numbers=1000, exponent=exponent)
    Y_predict = np.matmul(X_train, theta)
```

```
    plt.plot(X, Y_predict,format('c'),label='Gradient Descent')
    drawSin2pix(1000)
    plt.legend()
    # plt.savefig("./" + "picture/GradientDescent/" + title+".png")
    plt.show()
```

计算合适的 lambda 的值 caculateLambda.py

```
import numpy as np
import math
import matplotlib.pyplot as plt

from computeCost import ComputeCost
def CalculateLambda(X, y, theta,Lambda):
    hypthesis = np.matmul(X, theta)
    y = np.reshape(y,(X.shape[0],-1))
    # 先转置再做矩阵乘法
    cost = np.dot(np.transpose(hypthesis - y), (hypthesis - y))
    cost = (cost / 2 + Lambda*np.dot(np.transpose(theta),theta)/2)[0][0]
    # cost = (cost / 2)[0][0]
    MSE = math.sqrt(cost*2/X.shape[0])
    return MSE


def Drawlambda(X,X_train, y,exponent):

    # 迭代次数
    RangeLeft = -100
    RangeRight = 0
    ErmsStore = np.zeros(RangeRight-RangeLeft)
    LambdaStore = np.zeros(RangeRight-RangeLeft)
    for num in range(RangeLeft,RangeRight):

        LambdaStore[num-RangeLeft] = num/2
        Lambda = 10**(num/2)
        W = np.matmul(np.matmul(np.linalg.inv((np.matmul(X_train.T, X_train)
    + np.eye(exponent) * Lambda)), X_train.T),y)
        MSE = CalculateLambda(X_train,y,W,Lambda)

        # Cost = ComputeCost(X_train,y,theta,Lambda)

        ErmsStore[num-RangeLeft] = MSE
    title = 'exponent={} numbers={}'.format(exponent, X.shape[0])
    plt.title(title)
```

```
    plt.xlabel('$log_{10}\lambda$', fontsize=10)
    plt.ylabel('$MSE$', fontsize=10)
    plt.plot(LambdaStore, ErmsStore,'r.-')
    print(LambdaStore)
    print(LambdaStore.shape)
    print(ErmsStore)
    # plt.legend()
    plt.savefig("./" + "picture/MSE/LS/" + title)
    plt.show()
```

共轭梯度下降法 conjugateGradientDescent.py

```
import numpy as np
from generateData import generatePlotdata
import matplotlib.pyplot as plt
from drawSin2pix import drawSin2pix
def ConjugateGradientDescent(X, X_train, y, exponent, CGiterNum, Lambda, precision):
    A = np.dot(np.transpose(X_train), X_train) + np.eye(exponent) * Lambda
    b = np.dot(np.transpose(X_train), y)
    b = np.reshape(b,(exponent,-1))
    Wk = np.ones(exponent)*0
    Wk = np.reshape(Wk,(exponent,-1))

    test = np.dot(A, Wk)

    rk = b - np.dot(A, Wk)
    rk = np.reshape(rk,(exponent,-1))
    Pk = rk
    precisionMatrix = np.ones(exponent)*precision
    for num in range(0, CGiterNum):

        alpha = ((np.dot(np.transpose(rk),rk))/(np.dot((np.dot(np.transpose(Pk),A)),Pk)))[0][0]
        Wk = Wk + alpha*Pk
        rkadd1 = rk - alpha*np.dot(A,Pk)
        if np.all(rkadd1 <= precisionMatrix):
            print("第{}次迭代收敛".format(num))
            break
        beta = (np.dot(np.transpose(rkadd1),rkadd1)/np.dot(np.transpose(rk),rk))[0][0]
        Pk = rkadd1+beta*Pk
        rk = rkadd1

```

```
    title = 'exponent={} numbers={}'.format(exponent,X.shape[0])
    plt.title(title)
    plt.xlabel('$X$', fontsize=10)
    plt.ylabel('$y$', fontsize=10)
    plt.scatter(X, y, marker='o', label='Data Point')
    # numbers 为绘图的点数
    X, X_train = generatePlotdata(numbers=1000, exponent=exponent)
    Y_predict = np.matmul(X_train, Wk)
    plt.plot(X, Y_predict, format('c'), label='Conjugate Gradient Descent')

    drawSin2pix(1000)
    plt.legend()
    # plt.savefig("./" + "picture/ConjugateGradientDescent/" + title)
    plt.show()
```