

# 回归

线性回归方程  $h(x) = X \cdot w$

即找到回归系数  $w$ , 使预测值  $h(x)$  和真实值  $y$  之间的误差最小, 通常使用平方误差.

$$\begin{aligned} \text{Err}(w) &= \sum_{i=1}^n [y_i - h(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - x_i w]^2 \\ &= [Y - X \cdot w]^T [Y - X \cdot w] = Y^T Y - Y^T X W - W^T X^T Y + W^T X^T X W \end{aligned}$$

对其求导, 并令为 0, 得

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial w} \text{Err}(w) &= \frac{\partial}{\partial w} Y^T Y - \frac{\partial}{\partial w} Y^T X W - \frac{\partial}{\partial w} W^T X^T Y + \frac{\partial}{\partial w} W^T X^T X W \\ &= 0 - X^T Y - \frac{\partial}{\partial w} (Y^T X W)^T + 2 X^T X W \\ &= -X^T Y - X^T Y + 2 X^T X W = -2 X^T Y + 2 X^T X W = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore w = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

上式即  $w$  的最优解, 最后即可得到

一条预测直线  $h(x) = X \cdot w$

可利用相关系数来求预测值与真实值的匹配程度

线性回归的一个问题是, 会出现欠拟合现象, 因为求的是最小均方误差的无偏估计.

基于此, 提出局部加权线性回归, 给待预测点附近的每个点赋予一定的权重.

$$\therefore \hat{w} = (X^T W X)^{-1} X^T W Y$$

其中  $W$  常用的是高斯核.

$$W(i, i) = \exp\left[\frac{|x^{(i)} - x|^2}{-2k^2}\right]$$

可见,  $W$  是只含对角元素的权重矩阵, 并且点  $x$  与  $x^{(i)}$  越近,  $W(i, i)$  会越大.

给出测试点  $x$  与每行  $x^{(i)}$  作运算, 将结果放置在对角线上.

$k$  是决定了对附近点赋予多大权重.

另外还介绍了两种缩减系数的方法.

## ① 岭回归

当  $X$  的特征比样本多时 ( $n > m$ ), 会导致  $X^T X$  为奇异矩阵, 所以引入  $\lambda I$  来使其变成非奇异, 从而对  $X^T X + \lambda I$  求逆.

$$\hat{w} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y$$

其中  $I$  为单位矩阵,  $\lambda$  为惩罚项, 能够缩减不重要的系数.

为了使用岭回归和缩减技术, 首先需要对特征做标准化处理

## ② 前向逐步回归

只是比岭回归更加高效.

是一个贪心算法, 每一步所做的决策是对某个权重增加或减少一个很小的值, 通过比较其最小误差来记录每次变动的情况.

当应用缩减技术时, 模型会增加偏差, 与此同时却减少了方差

偏差是预测值与真实值的偏离程度, 反映了拟合程度.

方差是同等大小的不同测试集对学习器的干扰, 即数据干扰, 也可以理解为模型复杂度.