线性回归

因为多元线性回归涉及到矩阵运算，很多人（包括我）不是很熟练，所以我们先从一元线性回归开始，先弄清楚线性回归的基本逻辑之后，再推广到多元的情况。一元线性回归实际上是多元线性回归的一个特例，最后将在多元线性回归的视角给出统一的python实现，**从代码的角度更深刻的理解线性回归。**

一元线性回归

现在有一堆自变量$(x_1, x_2, ..., x_n)$和对应的应变量$y_1, y_2, ..., y_n$。线性回归的目的就是找到和样本拟合程度最佳的直线方程。

第一步，假设直线方程为

$$y' = xw + b$$

需要求解其中的两个变量w和b，从而得到这个方程。

该直线要和样本拟合，即将自变量x输入该方程得到的值y'要和y尽可能接近，用均方差（MSE）来衡量整个数据集上的误差（接近程度）：

$$Loss = \frac{1}{n}\sum_i (y' - y)^2$$

最小化这个Loss就能得到和样本拟合程度最佳的直线方程。很显然，这是个凸函数，能够通过求导直接得到最小的均方差，使Loss最小的w和b就能确定该直线方程。

$$\frac{\partial Loss}{\partial w} = \frac{2}{n}\sum_i x_i(x_i w + b - y_i)$$

$$\frac{\partial Loss}{\partial b} = \frac{2}{n}\sum_i (x_i w + b - y_i)$$

使w和b的偏导同时等于0，可以直接得到W和b的解析解：

$$w = \frac{\sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_i y_i}{\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}$$

$$b = \frac{1}{n}(\sum_i y_i - w\sum_i x_i)$$

至此，一元线性回归到此结束。（这一小结暂时不讲梯度下降的解法，因为完全没有必要，直接能得到解析解的情况下何必用梯度下降得到一个近似解呢？下一节在多元的情况下我们可能无法求解解析解，所以很自然的引入梯度下降来快速得到近似解）

多元线性回归

现在还是有一堆自变量$(x_1, x_2, ..., x_n)$和对应的应变量$y_1, y_2, ..., y_n$，但是每个$x_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3, ...x_i^c)$是一个$c$维向量。

直线方程变为以下形式

$$y' = x^1w^1 + x^2w^2 + ... + x^cw^c + b$$

改写成向量乘法的形式（公式写起来短，更清晰）：

$$y' = xw$$

现在自变量$x = (x^1, x^2, x^3, ...x^c, 1)$是一个$(c+1)$维的行向量, 参数$w = (w^1, w^2, ..., w^c, w^{c+1})^T$是一个$(c+1)$维的列向量。这里的一个小技巧就是通过在自变量的末尾添加常数项1把偏置项（截距）融入到w向量中，因此整个式子变成只有一项，后续的运算和分析更加简洁。

同样的，用均方差（MSE）来衡量整个数据集上的误差（接近程度）：

$$Loss = \frac{1}{n}\sum_i (y' - y)^2$$

把这个式子改写成矩阵的形式：

$$Loss = \frac{1}{n}(Y' - Y)^T(Y' - Y)$$

求Loss函数对w的偏导：

$$\frac{\partial Loss}{\partial w} = \frac{2}{n}X^T(Y' - Y)$$

多元线性方程的解析解

尝试使偏导等于0，求w的解析解：

$$w = (X^TX)^{-1}X^TY$$

现在问题出现了，不是每个矩阵都能求逆的，只有满秩矩阵才能求逆，而(X^TX)无法保证是一个满秩矩阵，因此无法通过跟一元线性回归一样直接得到w了，只能另觅他法。

梯度下降法

虽然不能直接得到w的解析解了，但是w的偏导在上面已经求出来了，我们知道梯度的方向是函数上升最快的方向，那么梯度的反方向即是函数下降最快的地方，因此可以每次向w梯度的反方向前进一定的距离lr，不断的使Loss函数变小，最终得到局部最优解（对于凸函数来说，也是全局最优解）。

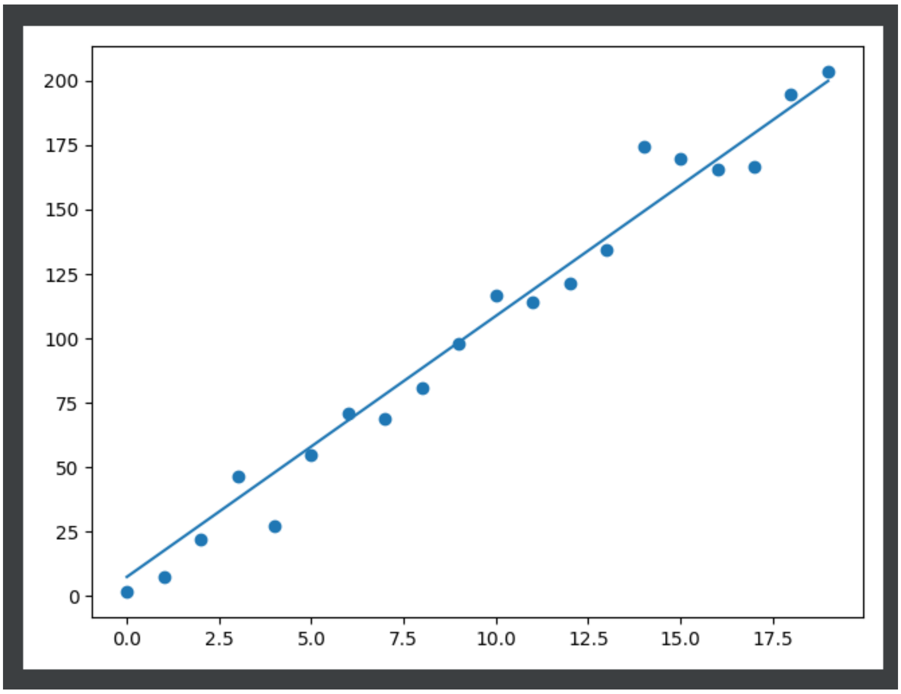
$$w = w - lr * \frac{\partial Loss}{\partial w} = w - lr * \frac{2}{n}X^T(Y' - Y)$$

python 实现

Talk is cheap, show me the code, 会coding才是真的会。

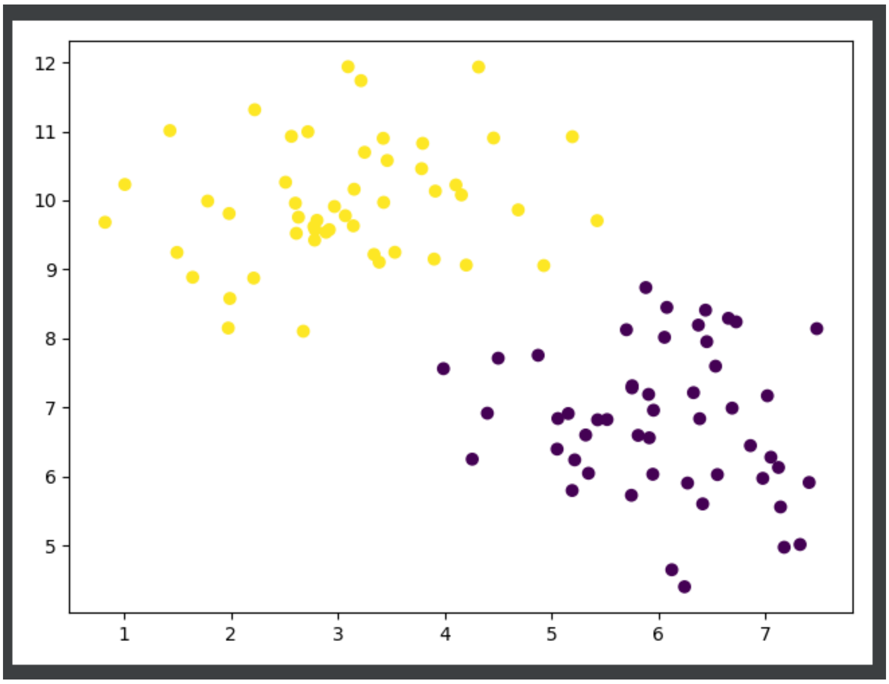
```python
import numpy as np

class Linear_Regression(object):
    def __init__(self, feat_dim=1):
        self.W = np.random.randn(feat_dim + 1, 1)
        self.W[-1] *= 0

    def train(self, X, y, epoch=100, lr=0.001):
        """
        :param X: shape:(N,C)
        :param y: shape:(N,1)
        :param epoch: int
        :param lr: learning rate
        """
        X_bias = np.concatenate([X, np.ones((X.shape[0], 1))], axis=1)
        for i in range(epoch):
            y_ = np.dot(X_bias, self.W)  # (N,1)
            loss = np.mean(np.square(y_ - y))
            dW = np.dot(X_bias.T, y_ - y) / X.shape[0]
            self.W[:-1] -= lr * dW[:-1]
            self.W[-1] -= 10 * lr * dW[-1]
            # self.show(X, y)
            if i == int(epoch * 0.5) or i == int(epoch * 0.8):
                lr /= 10

    def predict(self, X):
        X_bias = np.concatenate([X, np.ones((X.shape[0], 1))], axis=1)
        return np.dot(X_bias, self.W)

    def show(self, X, y):
        """
        only for X shape=(N,1)
        """
        import matplotlib.pyplot as plt
        plt.scatter(X[:, 0], y)
        plt.plot(X[:, 0], self.predict(X))
        plt.show()

if __name__ == '__main__':
    LR = Linear_Regression(1)
    X = np.arange(20).reshape(20, 1)
    y = 10 * X + np.ones_like(X) *7 + np.random.randn(20).reshape(20, 1) * 10
    LR.train(X, y)
    LR.show(X, y)
```

拟合结果如下:



逻辑回归

线性回归解决的是回归问题，还有一类常见的问题就是分类问题，如下图，有一堆黄色的点和紫色的点，可以明显的看出，能用一条直线将两种不同颜色的点大致分隔开来，所以二元逻辑回归也是求解一条直线方程，这也是逻辑回归往往都放在线性回归后面一起讲的原因。



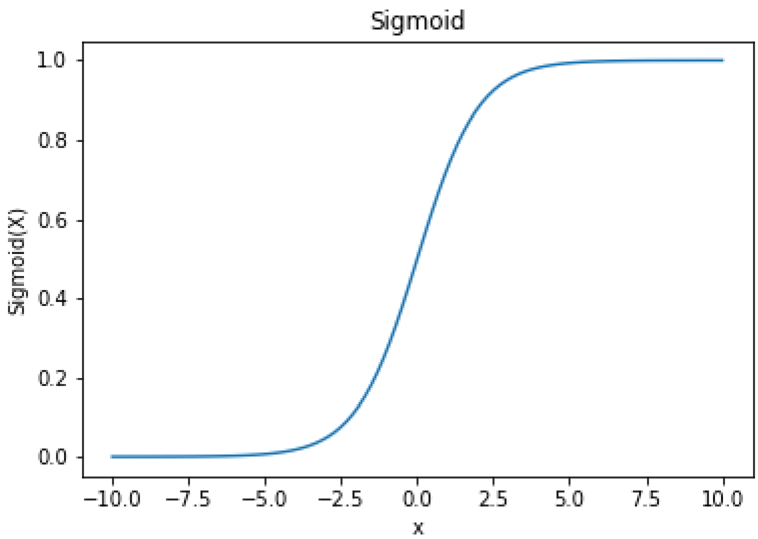
同样的，假设该直线方程的向量乘法的形式为：

$$l(x) = xw$$

现在的问题是如何衡量预测值跟真实值之间的差距？预测值的范围是实数集$\mathbb{R}$，但是真实值的范围是离散集合$\{0, 1\}$, 取值都不在一个范围内，根本没有可比性。显然我们需要对预测值进一步进行处理，一个比较直观的方案就是把预测值的范围压缩到[0,1]，这样最终的目标就变成了真实值为1的预测值要接近1，真实值为0的预测值要接近0。sigmoid正好就是满足这样要求的函数，函数表达式如下：

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

函数图像如下：



当然选择不止sigmoid这一个函数，理论上只要满足定义域为全体实数，值域是[0,1]的所有可导函数都是满足要求的，但是目前大家还是默认选择sigmoid函数。

现在预测值y'变成了

$$y' = \sigma(l(x)) = \frac{1}{1+e^{-xw}}$$

为什么不选择MSE作为分类问题的Loss函数

现在使预测值与真实值之间有了可比性，那Loss函数应该如何构建了？自然的想法当然是跟线性回归一样不就行了吗，但是可惜，答案是不行。

假设$Loss = \frac{1}{n}(y'-y)^2$,来对参数$w$求偏导：

$$\frac{\partial Loss}{\partial w} = \frac{2}{n}(y'-y)y'(1-y')x$$

当$y' = \{0,1\}$时，不管是不是跟真实值y一致，w的梯度都是0，导致无法优化，当然因为sigmoid函数的性质，y'不可能会取到$\{0,1\}$，因为sigmoid的值域是$(0,1)$,但是只要在0和1的附近，梯度值就会非常小，同样导致无法优化，这就是常说的梯度消失问题。但是这里的梯度消失跟神经网络的梯度消失出现的原因完全不一样，这里是sigmoid函数在极值附近出现饱和区，导数非常小导致的，而神经网络是因为小于1的梯度连乘导致的。

极大似然估计

因为预测值和真实值的取值范围是$[0,1]$,可以把sigmoid的输出值理解成真实值为1的概率，那么就可以用极大似然估计去得到参数w, 当$y=0$时，事件x的后验概率为y'^{y}，当$y=1$时，事件x的后验概率为$(1-y')^{1-y}$，合并这两种情况，事件x的后验概率为$y'^{y}+(1-y')^{1-y}$，那么极大似然函数为：

$$F(y') = \prod_i [y_i'^{y_i} + (1-y_i')^{1-y_i}]$$

为了让目标函数与样本数量无关，把似然函数除以样本数，并对两边同时取对数，

$$ln[F(y')] = \frac{1}{n}\sum_i [y_i ln y_i + (1-y_i)ln(1-y_i')]$$

为了和前面的梯度下降保持一致，把最大化$ln[F(y')]$改成最小化$-ln[F(y')]$,同样对w求偏导：

$$\frac{\partial{-ln[F(y')]}}{\partial w} = \frac{1}{n}(y'-y)x$$

求出来的梯度除了常数项，跟线性分类一模一样。细心的话可以发现用极大似然估计推导出来的Loss函数跟交叉熵一模一样，而交叉熵也是分类的标准损失函数，由此可见，从信息熵的角度和从概率的角度，得出来的优化目标都是一致的。

python实现

```
import numpy as np

class Logistic_Regression(object):
    def __init__(self, feat_dim=1):
        self.w = np.random.randn(feat_dim + 1, 1)
        self.w[-1] *= 0

    def train(self, X, y, epoch=1000, lr=0.01):
        """
        :param X: shape:(N,C)
        :param y: shape:(N,1)
        :param epoch: int
        :param lr: learning rate
        """
        X_bias = np.concatenate([X, np.ones((X.shape[0], 1))], axis=1)
        for i in range(epoch):
            y_ = self._sigmoid(np.dot(X_bias, self.w))  # (N,1)
            loss = -np.mean(y * np.log(y_) + (1 - y) * np.log(1 - y_))
            dw = np.dot(X_bias.T, y_ - y) / X.shape[0]
            self.w[:-1] -= lr * dw[:-1]
            self.w[-1] -= 10 * lr * dw[-1]
            # self.show(X, y)
            if i == int(epoch * 0.5) or i == int(epoch * 0.8):
                lr /= 10

    def predict(self, X):
        X_bias = np.concatenate([X, np.ones(X.shape[0], 1)], axis=1)
        return self._sigmoid(np.dot(X_bias, self.w))

    def _sigmoid(self, x):
        return 1 / (1 + np.exp(-x))

    def show(self, X, y):
        """
        only for X shape=(N,2)
        """
        import matplotlib.pyplot as plt
        plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], c=y)
        x_range = np.linspace(start=np.min(X[:, 0]), stop=np.max(X[:, 0]),
num=100).reshape(100, 1)
        X_bias = np.concatenate([x_range, np.ones((100, 1))], axis=1)
        y_ = -np.dot(X_bias, np.concatenate([self.w[0:1, ], self.w[2:, ]],
axis=0)) / self.w[1]
        plt.plot(x_range, y_)
        plt.show()


if __name__ == '__main__':
```

```
    LogR = Logistic_Regression(2)
    X1 = np.concatenate([np.random.randn(50).reshape(50, 1) + 3,
np.random.randn(50).reshape(50, 1) + 10], axis=1)
    X2 = np.concatenate([np.random.randn(50).reshape(50, 1) + 6,
np.random.randn(50).reshape(50, 1) + 7], axis=1)
    X = np.concatenate([X1, X2], axis=0)
    y = np.array([1] * 50 + [0] * 50).reshape(100, 1)
    LogR.train(X, y)
    LogR.show(X, y)
```

拟合结果如下