机器学习

第二讲 回归

授 课： 魏凤凤 助理教授

Email: fengfeng_scut@163.com

学 院：计算机科学与工程学院

课程内容

- 线性回归
- 梯度下降
- 正则化
- 回归的评价指标

什么是回归

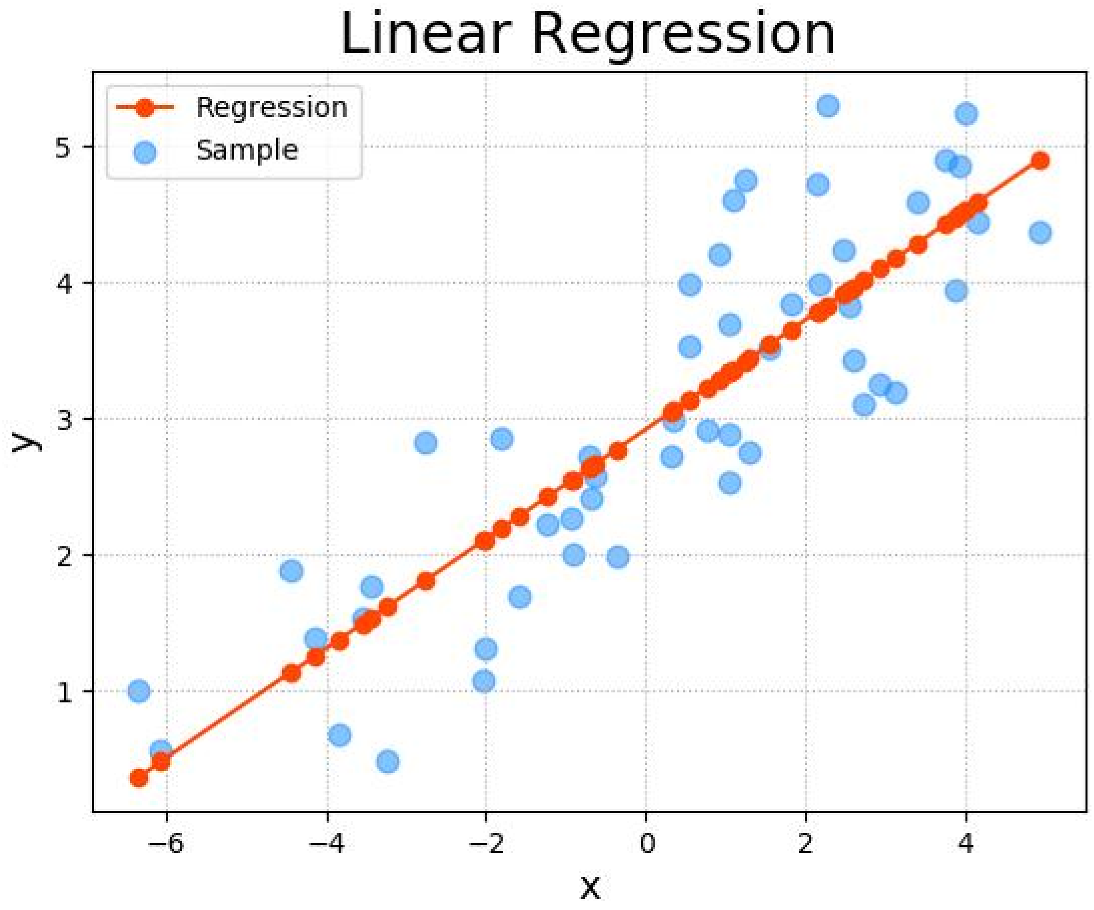
监督学习分为回归和分类

- ✓ **分类（Classification）** 标签离散
  - ✓ 身高1.80m，体重100kg的男人肥胖吗?
  - ✓ 如何根据肿瘤的体积、患者的年龄来判断良性或恶性?
- ✓ **回归（Regression）** 标签连续
  - ✓ 如何预测广州大学城的房价?
  - ✓ 如何预测未来的股票市场走向?

线性回归

概念

线性回归(Linear Regression)是一种通过属性的线性组合来进行预测的**线性模型**，其目的是找到一条直线或者一个平面或者更高维的超平面，**使得预测值与真实值之间的误差最小化。**



线性回归

m 代表训练集中样本的数量

n 代表特征的数量

x 代表特征/输入变量

y 代表目标变量/输出变量

(x, y) 代表训练集中的样本

$(x^{(i)}, y^{(i)})$ 代表第i个观察样本

h 代表学习算法的解决方案或函数也称为假设（**hypothesis**）

$\hat{y} = h(x)$,代表预测的值

建筑面积	总层数	楼层	实用面积	房价
143.7	31	10	105	**36200**
162.2	31	8	118	**37000**
199.5	10	10	170	**42500**
96.5	31	13	74	**31200**
……	……	……	……	……

$x^{(i)}$是特征矩阵中的第i行，是一个**向量（加粗表示）**。

上图的：

$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} 162.2 \\ 31 \\ 8 \\ 118 \end{bmatrix} \qquad y^{(2)} = 37000$$

$x_j^{(i)}$代表特征矩阵中第 i 行的第 j 个特征

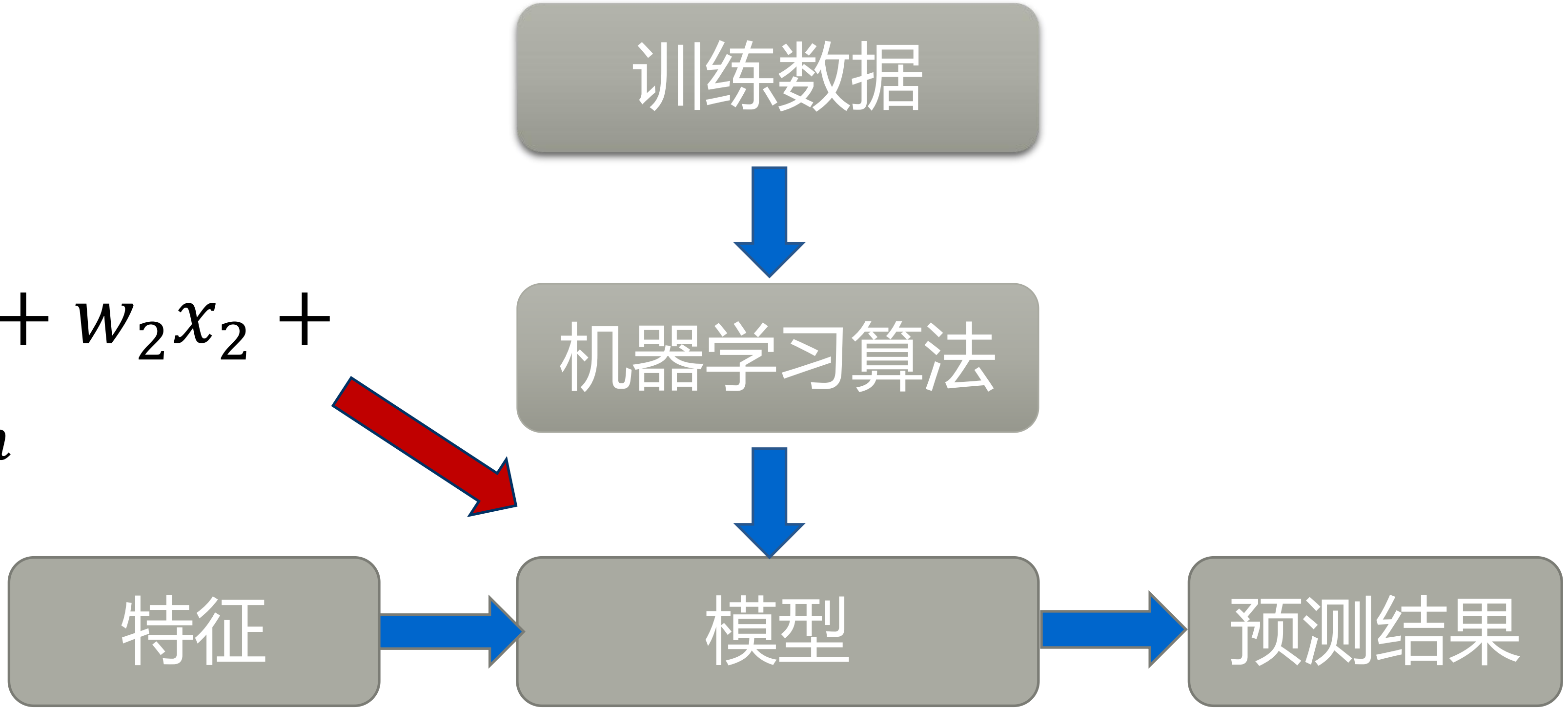
上图的$x_2^{(2)} = 31, x_3^{(2)} = 8$

线性回归

算法流程

x 和 y 的关系

$$h(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_nx_n$$



可以设$x_0 = 1$

则：$h(x) = w_0x_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_nx_n = w^{\mathrm{T}}X$

注意：若表达式 $h(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_nx_n + b$， 则$b$可以融入到$w_0$

线性回归

算法流程

$$h(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_nx_n$$

损失函数采用平方和损失：

$$l(x^{(i)}) = \frac{1}{2}(h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

要找到一组 $w(w_0, w_1, w_2, \ldots, w_n)$ ，使得

$J(w) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$ (残差平方和) 最小

损失函数(Loss Function)度量单样本预测的错误程度，损失函数值越小，模型就越好。常用的损失函数包括：0-1损失函数、平方损失函数、绝对损失函数、对数损失函数等。

代价函数(Cost Function)度量全部样本集的平均误差。常用的代价函数包括均方误差、均方根误差、平均绝对误差等。

目标函数(Object Function)代价函数和正则化函数，最终要优化的函数。

备注：损失函数的系数1/2是为了便于计算，使对平方项求导后的常数系数为1，这样在形式上稍微简单一些。有些教科书把系数设为1/2，有些设置为1，这些都不影响结果。

线性回归

最小二乘法(Least Sqaure Method, LSM)

要找到一组 $w(w_0, w_1, w_2, \ldots, w_n)$，使得$J(w) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2$ (残差平方和) 最小，即最小化：$\frac{\partial J(w)}{\partial w}$

将**向量表达形式转为矩阵表达形式**，则有$J(w) = \frac{1}{2}(Xw - Y)^2$，其中$X$为$m$行$n+1$列的矩阵（$m$为样本个数，$n$为特征个数），$w$为$n+1$行1列的矩阵(包含了$w_0$)，$Y$为$m$行1列的矩阵，则:

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

需要用到向量平方的性质:

$$\sum_i z_i^2 = z^{\mathrm{T}} z$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & x_3^{(1)} & \ldots & x_n^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & x_3^{(2)} & \ldots & x_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_1^{(m)} & x_2^{(m)} & x_3^{(m)} & \ldots & x_n^{(m)} \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \ldots \\ y^{(m)} \end{bmatrix}$$

线性回归

最小二乘法(Least Sqaure Method, LSM)

为最小化，接下来对$J(w)$偏导，

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial w}(Xw-Y)^{\mathrm{T}}(Xw-Y)=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial w}(w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xw-Y^{\mathrm{T}}Xw-w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Y+Y^{\mathrm{T}}Y)$$

由于中间两项互为转置:

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial w}(w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xw-2w^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Y+Y^{\mathrm{T}}Y)\quad=\frac{1}{2}(2X^{\mathrm{T}}Xw-2X^{\mathrm{T}}Y+0)=X^{\mathrm{T}}Xw-X^{\mathrm{T}}Y$$

需要用到以下几个矩阵的求导法则:

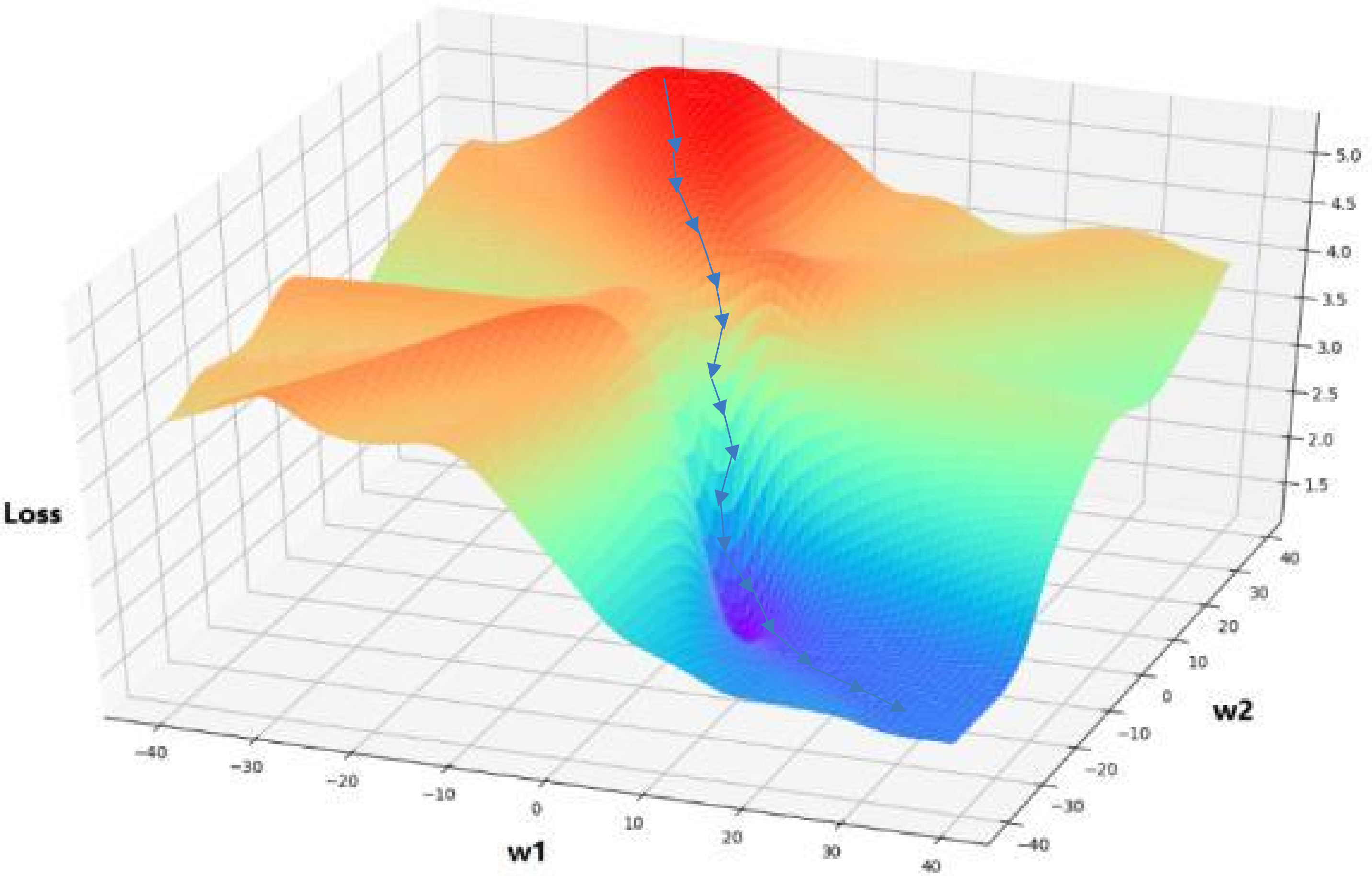
$$\frac{\partial x^{\mathrm{T}}X}{\partial X}=2X\qquad\frac{\partial AX}{\partial X}=A^{\mathrm{T}}$$

$$\frac{\partial x^{\mathrm{T}}AX}{\partial X}=(A+A^{\mathrm{T}})X$$,若A为对称阵，$$\frac{\partial x^{\mathrm{T}}AX}{\partial X}=2AX$$

令$\frac{\partial J(w)}{\partial w}=0$,

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

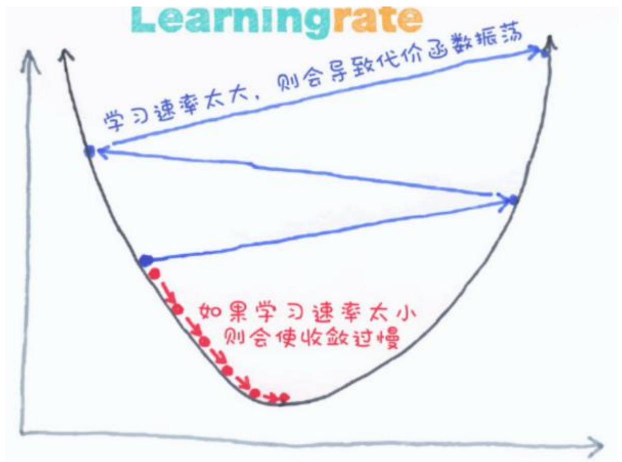
梯度下降



学习率

α

步长



梯度下降

梯度下降的三种形式

- 批量梯度下降（Batch Gradient Descent,BGD）
  - 梯度下降的每一步中，都用到了**所有**的训练样本
- 随机梯度下降（Stochastic Gradient Descent,SGD）
  - 梯度下降的每一步中，用到**一个**样本，在每一次计算之后便更新参数，而不需要首先将所有的训练集求和
- 小批量梯度下降（Mini-Batch Gradient Descent,SGD）
  - 梯度下降的每一步中，用到了**一定批量**的训练样本

梯度下降

批量梯度下降（Batch Gradient Descent,BGD）

梯度下降的每一步中，都用到了所有的训练样本

学习率

参数更新

$$w_j := w_j - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \underbrace{\left(\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot x_j^{(i)}\right)}_{\text{梯度}}$$

(同步更新w_j，（j=0,1,...,n))

梯度下降

批量梯度下降（Batch Gradient Descent,BGD)

推导： $w = w - \alpha \cdot \frac{\partial J(w)}{\partial w}$ $h(x) = w^{\mathrm{T}} X = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_n x_n$

$$J(w) = \frac{1}{2}\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2$$

$$\frac{\partial}{\partial w_j} J(w) = \frac{\partial}{\partial w_j} \frac{1}{2}\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 = 2 \cdot \frac{1}{2}\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial w_j}\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)$$

$$= \left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial w_j}\left(\sum_{i=0}^{n} w_i x_i^{(i)} - y^{(i)}\right)$$

$$= \left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) {x_j}^{(i)}$$

梯度下降

随机梯度下降（Stochastic Gradient Descent,BGD)

梯度下降的每一步中，用到一个样本，在每一次计算之后便更新参数，而不需要首先将所有的训练集求和

参数更新

$$w_j := w_j - \alpha\left(h\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)x_j^{(i)}$$

(同步更新w_j，(j=0,1,...,n))

梯度下降

小批量梯度下降（Mini-Batch Gradient Descent,BGD)

梯度下降的每一步中，用到了一定批量的训练样本

每计算常数b次训练实例，便更新一次参数 w

参数更新

$$w_j := w_j - \alpha \frac{1}{b} \sum_{k=i}^{i+b-1} \left(h\left(x^{(k)}\right) - y^{(k)} \right) x_j^{(k)}$$

(同步更新w_j，(j=0,1,...,n))

b=1（随机梯度下降,SGD）

b=m（批量梯度下降,BGD）

b=*batch_size*，通常是2的指数倍，常见有32,64,128等。（小批量梯度下降,MBGD）

梯度下降与最小二乘法

梯度下降：需要选择学习率α，需要多次迭代，当特征数量n大时也能较好适用，适用于各种类型的模型。

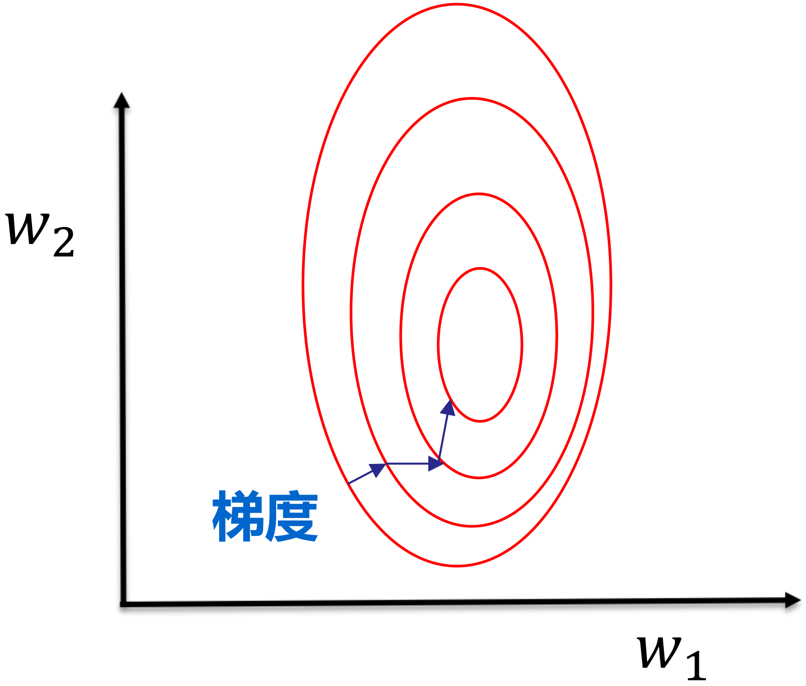
最小二乘法：不需要选择学习率α，一次计算得出，需要计算$(X^TX)^{-1}$，如果特征数量n较大则运算代价大，因为矩阵逆的计算时间复杂度为$O(n^3)$，通常来说当n小于10000 时还是可以接受的，只适用于线性模型，不适合逻辑回归模型等其他模型。

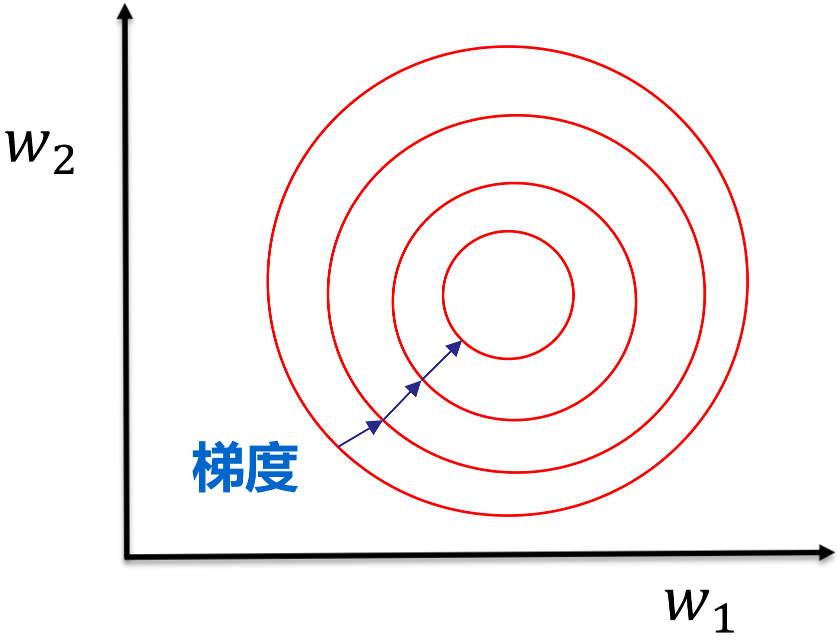
数据归一化/标准化

为什么要归一化/标准化?

提升模型精度：不同维度之间的特征在数值上有一定比较性，可以大大提高分类器的准确性。

加速模型收敛：最优解的寻优过程明显会变得平缓，更容易正确的收敛到最优解。





数据归一化/标准化

归一化（最大—最小规范化）

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

将数据映射到[0,1]区间

Z-Score标准化

$$x^* = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x^{(i)} - \mu)^2$$

$$\mu = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x^{(i)}$$

处理后的数据均值为0，方差为1

数据归一化的目的是使得各特征对目标变量的影响一致，会将特征数据进行伸缩变化，所以数据归一化是会改变特征数据分布的。

数据标准化的目的是为了不同特征之间具备可比性，经过标准化变换之后的特征数据分布没有发生改变。就是当数据特征取值范围或单位差异较大时，最好是做一下标准化处理。

数据归一化/标准化

需要做数据归一化/标准化

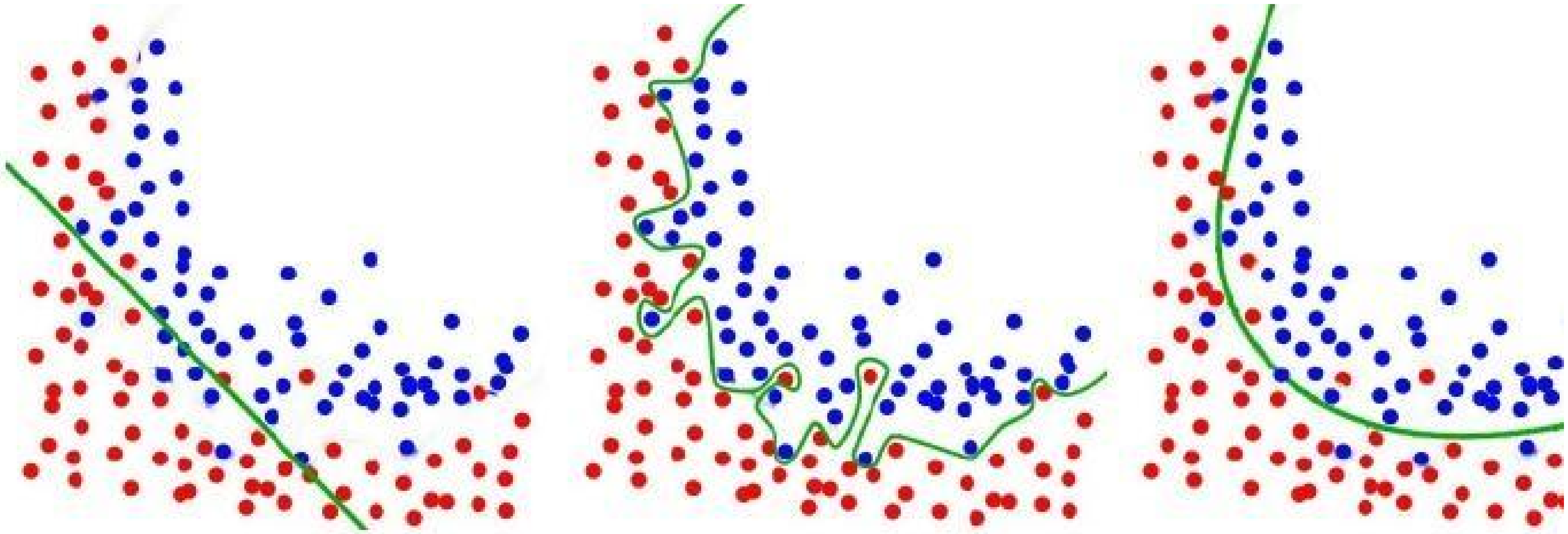
- 线性模型，如基于距离度量的模型包括KNN(K近邻)、K-means聚类、感知机和SVM。
- 另外，线性回归类的几个模型一般情况下也是需要做数据归一化/标准化处理的。

不需要做数据归一化/标准化

- 决策树、基于决策树的Boosting和Bagging等集成学习模型对于特征取值大小并不敏感，如随机森林、XGBoost、LightGBM等树模型，以及朴素贝叶斯，以上这些模型一般不需要做数据归一化/标准化处理。

正则化

过拟合和欠拟合



欠拟合　　过拟合　　正合适

正则化

过拟合的处理

1.获得更多的训练数据

- 使用更多的训练数据是解决过拟合问题最有效的手段，因为更多的样本能够让模型学习到更多更有效的特征，减小噪声的影响。

2.降维

- 即丢弃一些不能帮助我们正确预测的特征。可以是手工选择保留哪些特征，或者使用一些模型选择的算法来帮忙（例如PCA）。

3.正则化

- 正则化(regularization)的技术，保留所有的特征，但是减少参数的大小（magnitude），它可以改善或者减少过拟合问题。

4.集成学习方法

- 集成学习是把多个模型集成在一起，来降低单一模型的过拟合风险。

正则化

欠拟合的处理

1.添加新特征

- 当特征不足或者现有特征与样本标签的相关性不强时，模型容易出现欠拟合。通过挖掘组合特征等新的特征，往往能够取得更好的效果。

2.增加模型复杂度

- 简单模型的学习能力较差，通过增加模型的复杂度可以使模型拥有更强的拟合能力。例如，在线性模型中添加高次项，在神经网络模型中增加网络层数或神经元个数等。

3.减小正则化系数

- 正则化是用来防止过拟合的，但当模型出现欠拟合现象时，则需要有针对性地减小正则化系。

正则化

L1正则化：$J(w)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h(x^{(i)})-y^{(i)})^2+\lambda\sum_{j=1}^{n}|w_j|$，Lasso Regression （Lasso回归）

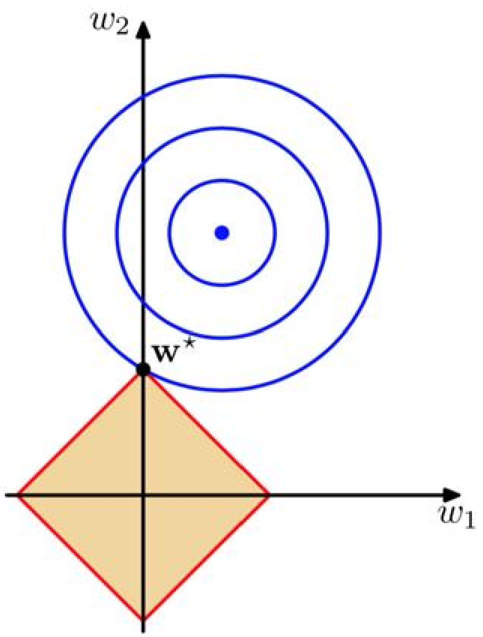
L2正则化：$J(w)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h(x^{(i)})-y^{(i)})^2+\lambda\sum_{j=1}^{n}w_j^2$，Ridge Regression （岭回归）

Elastic Net：$J(w)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(h(x^{(i)})-y^{(i)})^2+\lambda(\rho\cdot\sum_{j=1}^{n}|w_j|+(1-\rho)\cdot\sum_{j=1}^{n}w_j^2)$
(弹性网络)

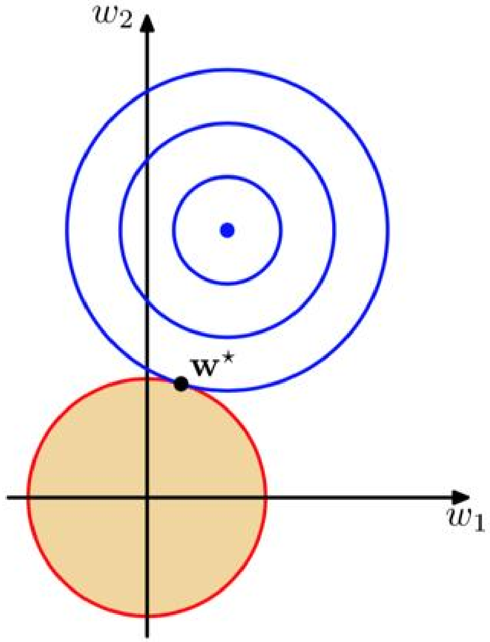
其中：

- λ为正则化系数，调整正则化项与训练误差的比例，λ>0。
- 1≥ρ≥0为比例系数，调整L1正则化与L2正则化的比例。

正则化



L1正则化是指在损失函数中加入权值向量w的绝对值之和，L1的功能是使权重稀疏



L2正则化是指在损失函数中加入权值向量w的平方和，L2的功能是使权重平滑。

L1正则化可以产生稀疏模型

L2正则化可以防止过拟合

图上面中的蓝色轮廓线是没有正则化损失函数的等高线，中心的蓝色点为最优解，左图、右图分别为L1、L2正则化给出的限制。

可以看到在正则化的限制之下,**L2**正则化给出的最优解*w**是使解更加靠近原点,也就是说**L2**正则化能降低参数范数的总和。

L1正则化给出的最优解w*是使解更加靠近某些轴,而其它的轴则为0,所以**L1**正则化能使得到的参数稀疏化。

回归的评价指标

均方误差（Mean Square Error, MSE）

$$\mathrm{MSE}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)}-\hat{y}^{(i)})^2$$

均方根误差 RMSE(Root Mean Square Error, RMSE)

$$\mathrm{RMSE}(y,\hat{y})=\sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)}-\hat{y}^{(i)})^2}$$

平均绝对误差（Mean Absolute Error, MAE）

$$\mathrm{MAE}(y,\hat{y})=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left|y^{(i)}-\hat{y}^{(i)}\right|$$

其中，$y^{(i)}$ 和$\hat{y}^{(i)}$分别表示第i个样本的真实值和预测值，m 为样本个数。

回归的评价指标

R方 [$RSquared(r2score)$]

$$R^2(y,\hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2}{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \bar{y})^2} = \frac{\mathrm{SSR}}{\mathrm{SST}} = 1 - \frac{\mathrm{SSE}}{\mathrm{SST}}$$

$$R^2(y,\hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2/m}{\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \bar{y})^2/m} = 1 - \frac{\mathrm{MSE}}{\mathrm{Var}}$$

$$\mathrm{SSR} = \sum_{i=1}^{m}(\hat{y}^{(i)} - \bar{y})^2$$ 回归平方和

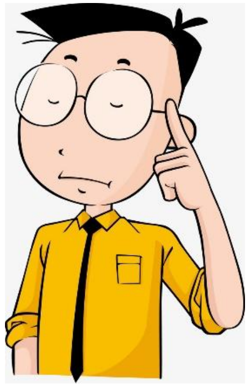
$$\mathrm{SSE} = \sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$ 误差平方和

$$\mathrm{SST} = \sum_{i=1}^{m}(y^{(i)} - \bar{y})^2$$ 总平方和

越接近于1,说明模型拟合得越好

其中，$y^{(i)}$ 和$\hat{y}^{(i)}$分别表示第i个样本的真实值和预测值，m 为样本个数。

参考文献



[1] Andrew Ng. Machine Learning[EB/OL]. StanfordUniversity,2014.https://www.coursera.org/course/ml

[2] 李航. 统计学习方法[M]. 北京: 清华大学出版社,2019.

[3] 周志华. 机器学习[M]. 北京: 清华大学出版社,2016.

[4] WEINBERGER K. Distance metric learning for large margin nearest neighbor classification[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2006, 18.

[5] HOERL A E, KENNARD R W. Ridge regression: applications to nonorthogonal problems[J]. Technometrics, 1970, 12(1): 69–82.

[6] TIBSHIRANI R. Regression selection and shrinkage via the lasso[J]. Journal of the Royal Statistical Society Series B, 1996, 58(1): 267–288.

[7] TIBSHIRANI R, BICKEL P, RITOV Y, et al. Least absolute shrinkage and selection operator[J]. Software: http://www.stat.stanford.edu/ tibs/lasso.html, 1996.

谢谢

授 课： 魏凤凤 助理教授

Email: fengfeng_scut@163.com

学 院：计算机科学与工程学院