

1 线性回归

1.1 单变量线性拟合

1.1.1 简单多项式拟合与误差函数

实际的数据集通常没有明显的规律, 或者内含的规律被随机分布的噪声所隐藏. 对于回归问题, 最简单的方式就是通过多项式进行拟合.

假定训练集为包含 N 组数据的集合 $\{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}$, 其中各 x_i 为自变量, 各 y_i 为真实值. 我们考虑形式如下的多项式函数以预测自变量 x 对应的值 (其中 \hat{y} 表示 y 的预测值):

$$\hat{y} = f(x; \mathbf{w}) = w_0 + w_1x + \dots + w_Mx^M = \sum_{j=0}^M w_jx^j$$

定义 1.1 拟合多项式的阶数 上述拟合多项式中最高次项的次数 M 被称作拟合多项式的阶数.

定义 1.2 权重矢量 权重矢量 \mathbf{w} 是拟合多项式的参数构成的矢量. 例如, 上述多项式的权重矢量即为

$$\mathbf{w} = (w_0, w_1, \dots, w_M)$$

给定多项式的阶数, 我们能写出很多可能的拟合多项式. 为了得出与数据集相差最小的多项式, 我们需要定义**误差函数**以衡量预测值与实际值之间的差距.

定义 1.3 误差函数 误差函数 (Error Function)(或称代价函数 (Cost Function)) 是衡量模型预测值 \hat{y} 与实际值 y 之间的差距的函数.

机器学习中常用的误差函数为平方和误差函数 (Sum-of-Square Error Function), 即二乘¹误差函数:

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (f(x_i; \mathbf{w}) - y_i)^2$$

定义 1.4 最小二乘多项式拟合 使用二乘误差函数的多项式拟合称作最小二乘多项式拟合.

容易看出这与统计学中最小二乘法的关系. 显然, 误差函数越小, 模型给出的预测值 \hat{y} 整体而言与目标值 y 越接近.

1.1.2 拟合多项式的求法: 以线性回归为例

线性拟合是最简单的多项式拟合的方法. 使用一次函数模型

$$f(x) = ax + b$$

¹这里的二乘即平方. 另外, 函数前的系数 $1/2$ 是为了方便计算而采取的取法.

进行拟合, 那么权重矢量 $\mathbf{w} = (a, b)$. 我们有如下结论:

定理 1.5 简单线性回归的参数 假定训练集为包含 N 组数据的集合 $\{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}$, 采取模型 $f(x) = ax + b$ 进行拟合, 误差函数为二乘误差函数, 那么得到的结果应为

$$a = \frac{\overline{xy} - \bar{x}\bar{y}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2} \quad b = \frac{\overline{x^2y} - \bar{x} \cdot \overline{xy}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

其中 $\bar{*}$ 代表基于训练集数据得到的平均值.

证明. 误差函数 $E(\mathbf{w})$ 的自变量为 \mathbf{w} , 具有两个独立的参数 a, b . 为了让 $E(\mathbf{w})$ 最小, 我们不妨对 a, b 分别求偏导, 并令偏导数为 0.

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a} = \sum_{i=1}^N (ax_i + b - y_i) x_i = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial b} = \sum_{i=1}^N (ax_i + b - y_i) = 0 \end{cases}$$

整理可得

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^N x_i^2 + b \sum_{i=1}^N x_i - \sum_{i=1}^N x_i y_i = 0 \\ a \sum_{i=1}^N x_i + bN - \sum_{i=1}^N y_i = 0 \end{cases}$$

解这个方程组即可得到定理中的结论. □

对于一般的简单多项式拟合问题, 都可以用求偏导数的方法进行求解.

1.1.3 过拟合与正则化

我们用一组简单的数据说明过拟合这一现象. 考虑由 $\sin(2\pi x)$ 附加正态分布的噪声所构成的数据, 由下面的程序给出:

```
1 import numpy as np
2 x = np.arange(-0.5, 0.5, 0.1) # 生成 x 值, 步长 0.1
3 y = np.sin(2 * np.pi * x)
4 y_noisy = y + np.random.normal(loc=0, scale=np.sqrt(0.3), size=x.shape) # 添加方差为 0.3 的正态分布噪声
```

现在我们把拟合的结果呈现如下:

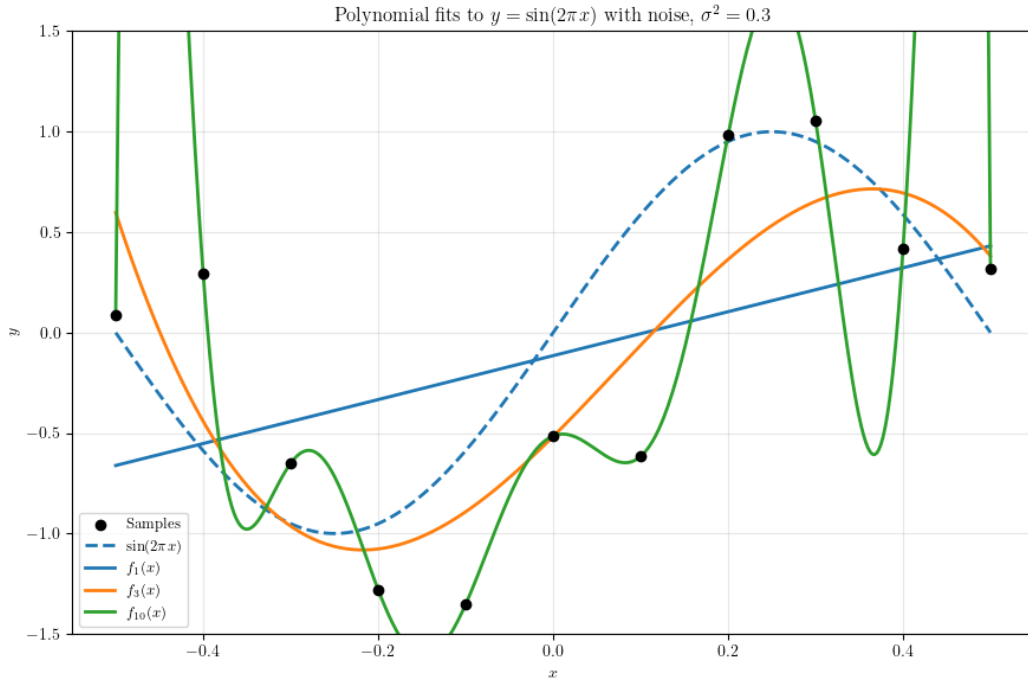


图 1: 不同阶数的多项式拟合

如图所示, 我们用不同阶数的多项式对数据进行拟合. 可以看到, 线性拟合的效果并不好, 而阶数为 3 的多项式拟合则相对而言比较接近实际值. 随着阶数的增加, 拟合效果变得越来越好. 然而, 当阶数过高时 (例如这里采取的阶数为 10), 拟合曲线开始出现剧烈的振荡, 并且在数据点之间的区域偏离了真实函数. 可以想见, 在一般的测试集上, 高阶多项式的拟合效果会变得很差.

定义 1.6 过拟合 当模型在训练数据上表现良好, 但在未见过的数据上表现较差时, 我们称模型发生了**过拟合 (Overfitting)** 现象.

过拟合的原因在于, 复杂的函数具有更强的表达能力, 能够更好地拟合训练数据 (上面的 f_{10} 对每个数据点都没有偏差), 但同时也会受到数据中的噪声影响, 导致模型在训练数据之外的表现变差.

除了在测试集中较差的表现之外, 过拟合的另一个特征是模型的参数值变得非常大. 这和曲线的明显振荡是对应的.

解决过拟合问题的一个简单办法是增加测试集的规模, 或减小模型的复杂度. 另一种常用的方法是**正则化 (Regularization)**.

定义 1.7 正则化 正则化 (Regularization) 是通过在误差函数中加入对模型复杂度的惩罚项, 以防止模型过拟合的方法.

例如, 我们可以使用如下的正则化误差函数:

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

代替原来的误差函数进行拟合. 其中 λ 为正则化参数, 控制正则化项的权重. 如果 $\lambda = 0$, 那么没有惩罚; λ 越大, 惩罚越强, 此时模型倾向于用更小的参数进行拟合. λ 极大时, \mathbf{w} 的各参数接近 0, 是一条接近横轴的平坦的线. 通过调整 λ , 我们可以在拟合训练数据和符合测试数据之间找到一个平衡点.

1.1.4 维度灾难

当输入数据 \mathbf{x} 的分量较多时, 我们称其为高维数据. 例如, 一张 28×28 的灰度图像可以看作是一个 784 维的向量.

高维数据的一个重要问题是**维度灾难 (Curse of Dimensionality)**.

定义 1.8 维度灾难 维度灾难是指随着数据维度的增加, 数据量需求呈指数级增长, 从而导致计算和存储的巨大开销, 以及模型难以捕捉数据的真实分布等问题.

前面所举的例子中的 \mathbf{x} 是一维的, 这是很容易用多项式拟合的. 但是, 如果类似的方法用到高维数据上就有很大的问题了. 对于一张分辨率为 640×480 的图像, 每个像素采用 RGB 表示, 那么一张图像就可以看作是一个 $640 \times 480 \times 3 = 921600$ 维的向量. 如果仍然采用多项式拟合, 那么需要的各阶参数数量为

$$N_0 = 1 \quad N_1 = 921600 \quad N_2 = C_{921600}^2 = 424354112000 \quad N_3 = C_{921600}^3 = 1.303 \times 10^{17} \dots$$

很难找到足够的训练数据来拟合这些参数.

简单而言, 维度的增加对数据量的要求是指数增长的, 而数据量本身却是有限的. 这就导致了维度灾难. 此外, 高维空间中的点往往是稀疏分布的; 高维空间的球绝大部分分布于球面附近, 这些反直觉的性质使得模型难以捕捉数据的真实分布.

例如, 采用监督学习的方式让程序分辨猫和狗, 很有可能程序采用与猫和狗无关的特征来进行分类, 例如图像的亮度, 特定像素点的数目等, 从而导致模型在测试集上表现不佳.

1.2 从概率论的角度看待线性回归

1.2.1 正态分布与最小二乘法

通常, 我们假定观测值 y 可以写成下面的形式:

$$y = g(\mathbf{x}; \mathbf{w}) + \epsilon$$

其中 $g(\mathbf{x}; \mathbf{w})$ 是一个确定的函数, 显示了数据的内在规律; ϵ 为噪声. 大部分时候, 我们都假设噪声满足均值为 0, 方差为 σ 的正态分布.

定义 1.9 正态分布 随机变量 X 服从均值为 μ , 方差为 σ^2 的正态分布 (**Normal Distribution**) (或称高斯分布 (**Gaussian Distribution**)), 如果它的概率密度函数为

$$p(X = x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \equiv \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2)$$

这样, 对于给定的自变量 x_i 和观测值 t_i , 其概率为

$$P(t_i|x_i) = P(\varepsilon = t_i - g(x_i; \mathbf{w})) = \mathcal{N}(t_i - g(x_i; \mathbf{w}) | 0, \sigma^2) = \mathcal{N}(t_i | g(x_i; \mathbf{w}), \sigma^2)$$

假定各组数据是相互独立的, 并且各处的噪声满足同一分布 (即方差 σ^2 在处处相同) 那么整个数据集的概率函数为

$$P(\{t_i\}|\{x_i\}) = \prod_{i=1}^N P(t_i|x_i) = \prod_{i=1}^N \mathcal{N}(t_i | g(x_i; \mathbf{w}), \sigma^2)$$

在不引起混淆的情况下, 数据集也可以用粗体字母表示, 例如 $\mathbf{t} = \{t_i\}$, $\mathbf{x} = \{x_i\}$. 另外按机器学习领域的惯例, 记 $\beta = \frac{1}{\sigma^2}$, 于是上述概率函数可以写成

$$P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}; \beta) = \prod_{i=1}^N \mathcal{N}(t_i | g(x_i, \mathbf{w}), \beta^{-1})$$

在训练过程中, 我们只知道训练集 \mathbf{x} 与 \mathbf{t} , 不知道参数 \mathbf{w} 与 β . 直观而言², 我们希望选择一组参数 \mathbf{w}, β , 使得在这组参数下, 观测到训练集的概率最大. 这就是极大似然估计 (**Maximum Likelihood Estimation**) 的思想.

对于连乘函数的最值估计, 通常先取对数后再考虑. 于是上述概率函数取对数后得到

$$\ln P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = \sum_{i=1}^N \ln \mathcal{N}(t_i | g(x_i; \mathbf{w}), \beta^{-1}) = -\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N (g(x_i; \mathbf{w}) - t_i)^2 + \frac{N}{2} \ln \beta - \frac{N}{2} \ln(2\pi)$$

与训练集有关的项即前面的求和项. 回顾二乘误差函数的定义:

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (g(x_i; \mathbf{w}) - t_i)^2$$

仍然采用偏导等于 0 的办法, 即

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \ln P(\mathbf{t}|\mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = -\beta \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{0}$$

我们就可以得到与最小二乘法相同的结果, 即拟合函数为

$$f(x; \mathbf{w}_{\text{ML}}) = g(x; \mathbf{w}_{\text{ML}})$$

这里的 \mathbf{w}_{ML} 表示极大似然估计得到的参数, 与前面推导中的一般权重矢量 \mathbf{w} 不同.

这说明在噪声服从正态分布的假设下, 最小二乘法实际上是极大似然估计的一种实现方式. 另外, 我们还可以根据前面的推导出噪声的表达形式:

$$\frac{1}{\beta} = \sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f(x_i; \mathbf{w}_{\text{ML}}) - t_i)^2$$

²我们将在后面详细讨论贝叶斯公式以完善对这种直观的严谨叙述.

1.2.2 Bayes 定理

定理 1.10 Bayes 定理 设 A, B 为两个事件, 且 $P(B) > 0$, 那么

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$$

其中 $P(A)$ 与 $P(B)$ 分别为事件 A 与事件 B 的概率, 又称为**先验概率**; $P(A|B)$ 与 $P(B|A)$ 分别为在事件 B 发生的条件下事件 A 发生的概率, 又称为**后验概率**与**似然函数**.

证明. 由条件概率的定义, 我们有

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)}$$

整理可得 Bayes 定理. □

例题 1.1 如果你的邻居购买了 n 张彩票, 并且其中有 m 张是中奖的, 请估计你购买一张彩票中奖的概率.

注意: 在你没有购买彩票之前, 你对中奖概率一无所知, 因此只能假定中奖概率是均匀分布的, 即它是 $[0, 1]$ 上等概率取的一个数.

解. 由于本题涉及的中奖概率是连续变量, 因此下面的概率均为概率密度函数. 设中奖概率为 x , 那么买 n 张彩票而中 m 张的概率密度函数为

$$P(m, n|x) = C_n^m x^m (1-x)^{n-m}$$

根据 Bayes 定理, 我们有

$$P(x|m, n) = \frac{P(m, n|x)P(x)}{P(m, n)}$$

而

$$P(m, n) = \int_0^1 P(m, n|x)P(x)dx$$

由于 x 在 $[0, 1]$ 上均匀分布, 因此 $P(x) = 1$. 于是

$$P(x|m, n) = \frac{P(m, n|x)}{\int_0^1 P(m, n|x)dx} = \frac{C_n^m x^m (1-x)^{n-m}}{\int_0^1 C_n^m x^m (1-x)^{n-m}dx} = \frac{x^m (1-x)^{n-m}}{\int_0^1 x^m (1-x)^{n-m}dx} = \frac{x^m (1-x)^{n-m}}{B(m+1, n-m+1)}$$

这里的 B 表示 Beta 函数. 对于连续变量 x 而言, 我们最好用期望来表示 x 的估计值. 因此

$$\hat{x} = \int_0^1 x P(x|m, n)dx = \frac{\int_0^1 x^{m+1} (1-x)^{n-m}dx}{B(m+1, n-m+1)} = \frac{B(m+2, n-m+1)}{B(m+1, n-m+1)} = \frac{m+1}{n+2}$$

也即, 我们估计买彩票中奖的概率为 $\frac{m+1}{n+2}$. 这是符合直觉的, 因为当 $m = 0$ 时, 我们也不应估计中奖概率为 0; 同理, 当 $m = n$ 时, 我们也不应估计中奖概率为 1. 买的越多, 估计的结果就越接近 m/n , 也就越准确.

1.2.3 Bayes 定理在机器学习中的应用

现在, 我们把目光重新放回机器学习上. 把 Bayes 定理写成如下形式:

$$p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathcal{D})}$$

这里的 \mathcal{D} 表示训练集, 而 \mathbf{w} 表示模型参数.

定义 1.11 先验分布, 后验分布和似然函数 在上述 Bayes 定理中, $p(\mathbf{w})$ 称为先验分布 (Prior Distribution), 表示在给定训练集之前对参数 \mathbf{w} 的认识; $p(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ 称为后验分布 (Posterior Distribution), 表示在给定训练集之后对参数 \mathbf{w} 的认识; $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$ 称为似然函数 (Likelihood Function), 表示在给定参数 \mathbf{w} 的条件下观测到训练集的概率.

公式中的 $p(\mathcal{D})$ 是一个归一化常数, 与参数 \mathbf{w} 无关, 通常就不去特意考虑. 因此, 为了获取后验分布, 我们只需要计算似然函数与先验分布的乘积.

频率学派的处理方法 频率学派认为 \mathbf{w} 是固定不变的, 不随数据变化, 因此拟合的目的是求出最优的 \mathbf{w} .

最简单的处理方法, 就是假定先验分布是均匀分布, 即对所有可能的参数 \mathbf{w} 都一视同仁. 此时, 后验分布与似然函数成正比, 如果我们取概率最大的 \mathbf{w} 作为拟合问题的解, 这时的似然函数就最大. 这就是极大似然估计.

定义 1.12 极大似然估计 通过选择使似然函数 $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$ 最大的参数 \mathbf{w} 来拟合数据的方式, 称为极大似然估计 (Maximum Likelihood Estimation).

有时, 我们已经对先验分布 $p(\mathbf{w})$ 有一定的估计. 综合考虑 $p(\mathcal{D}|\mathbf{w})$ 与 $p(\mathbf{w})$ 的乘积, 选择使得后验分布最大的参数 \mathbf{w} 作为拟合问题的解, 这就是极大后验估计.

定义 1.13 极大后验估计 通过选择使后验分布 $p(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ 最大的参数 \mathbf{w} 来拟合数据的方式, 称为极大后验估计 (Maximum A Posteriori Estimation).

下面给出了极大后验估计的一个例子.

例题 1.2 在过拟合一节中, 我们讲到参数越大越容易过拟合的情形, 即认为 $\|\mathbf{w}\|$ 越大越不可能, 这是与 \mathcal{D} 无关的先验知识.

现在, 假定 \mathbf{w} 的范数满足正态分布:

$$p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}\left(\|\mathbf{w}\| \left| 0, \frac{1}{\alpha} \right.\right) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{M+1}{2}} \exp\left(-\frac{\alpha\|\mathbf{w}\|^2}{2}\right)$$

求极大后验估计的结果.

解. 由 Bayes 定理, 我们有

$$p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w})p(\mathbf{w}|\alpha)}{p(\mathcal{D})}$$

由于 $p(\mathcal{D})$ 与 \mathbf{w} 无关, 因此我们只需考虑分子部分. 取对数后得到

$$\ln p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \ln p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) + \ln p(\mathbf{w}|\alpha) + \text{const}$$

假定似然函数仍然为

$$P(\mathcal{D}|\mathbf{w}, \beta) = \prod_{i=1}^N \mathcal{N}(t_i | g(x_i, \mathbf{w}), \beta^{-1})$$

忽略与 \mathbf{w} 无关的项可得

$$\ln p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = -\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N (g(x_i; \mathbf{w}) - t_i)^2 - \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + \text{const}$$

这与前述正则化误差函数

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (g(x_i; \mathbf{w}) - t_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

在形式上一致. 事实上, 如果取 $\lambda = \frac{\alpha}{\beta}$, 那么极大后验估计与正则化误差函数的结果是一样的.

同样不难想到, 对 $p(\mathbf{w})$ 的不同估计对应不同的正则化误差函数.

Bayes 学派的处理方法 Bayes 学派与频率学派观点相左. 他们认为数据才是固定的, 模型的参数则是随机的, 并且服从某种分布³. 我们只能对模型的参数有一个最初的估计⁴, 这一估计会随着数据的增加而改变, 最终得到比较准确的结论.

定理 1.14 Bayes 回归 设训练集为 \mathcal{D} , 根据 Bayes 回归可以得到任意输入 x 的预测值 t 的概率密度函数

$$p(t|x, \mathcal{D}) = \int p(t|x, \mathbf{w})p(\mathbf{w}|\mathcal{D})d\mathbf{w} = \mathcal{N}(t|m(x), s^2(x))$$

其中

$$\begin{aligned}\phi(x) &= (1, x, \dots, x^M)^t \\ m(x) &= \beta \phi(x)^t \mathbf{S} \sum_{i=1}^N t_i \phi(x_i) \\ s^2(x) &= \beta^{-1} + \phi(x)^t \mathbf{S} \phi(x) \\ \mathbf{S}^{-1} &= \alpha \mathbf{I} + \beta \sum_{i=1}^N \phi(x_i) \phi(x_i)^t\end{aligned}$$

这里的 α, β 为先验分布与似然函数的参数, \mathbf{I} 为单位矩阵.

³例如, 抛一枚硬币, 如果已经抛出了连续 100 次正面, 那么我们就有理由怀疑这枚硬币不是均匀的, 而是正面朝上的概率更大.

⁴这和极大后验估计是一样的, 但 Bayes 回归会

证明. 同样地, 对于给定的 x_i , 其对应的 y_i 由带噪声的函数给出:

$$y_i = g(x_i|\mathbf{w}) + \varepsilon = \mathbf{w}^t \boldsymbol{\phi}(x_i) + \varepsilon$$

其中 $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \beta^{-1})$. 我们假定 \mathbf{w} 的先验分布为高斯分布:

$$p(\mathbf{w}|\alpha) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \alpha^{-1}\mathbf{I})$$

于是 \mathbf{w} 的后验分布为

$$p(\mathbf{w}|\mathcal{D}, \alpha, \beta) = \frac{p(\mathcal{D}|\mathbf{w}, \beta)p(\mathbf{w}|\alpha)}{p(\mathcal{D}|\alpha, \beta)}$$

这里的分母仍然是归一化常数, 因此考虑分子即可.

□