贪心学院推荐系统

机器学习基础

逻辑回归

简单的事情往往异乎寻常。——保罗·柯艾略

线性模型

线性模型是一个通过**属性的线性组合**来进行预测的函数，即

$$f(\boldsymbol{x}) = w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_dx_d + b$$

一般用向量形式写成：

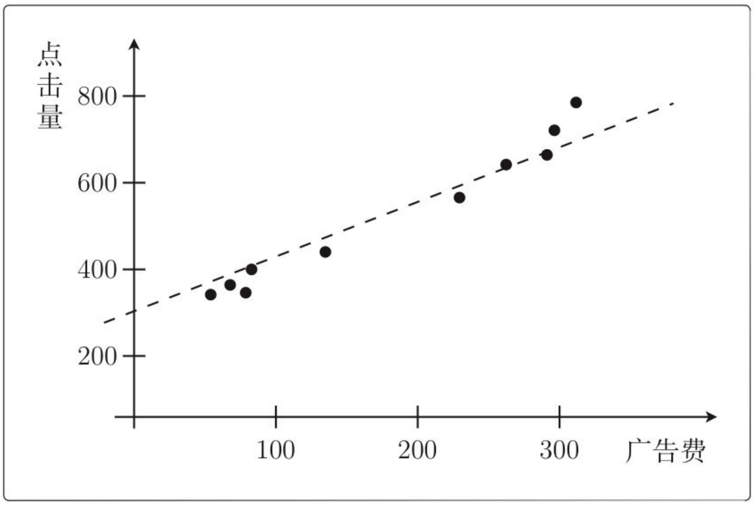
$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$$

其中的$\boldsymbol{w}$和b学得之后，模型就得以确定。

线性回归

回归：$regression$，倒推的意思，意即由现有的数据**倒推得（回归到）**原来真实的函数。

给定数据集$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$，其中$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}; x_{i2}, \ldots, x_{id}), y_i \in \mathbb{R}$。"线性回归"试图学得一个**线性模型**尽可能准确地预测实值输出标记。



线性回归是**利用最小二乘函数对一个或多个自变量之间关系进行建模**的方法。

均方误差有非常好的几何意义，它对应了欧氏距离。基于均方误差最小化进行模型求解的方法成为“最小二乘法“。在线性回中，最小二乘法就是试图找到一条直线，使所有样本到直线上的欧氏距离之和最小。

最小二乘法

二乘其实是指**平方**的意思，为什么用平方呢？因为平方可以消除误差正负方向上的差异，单纯的只比较**长度。**

另一种通俗的说法叫**距离**（学术一点叫**欧氏距离**），距离不分上下、左右，只有大小，所以可以用来衡量**目标**与**估计**的所有方向偏差累积。

假设我们定义，**估计**在**目标**正方向上为正，负方向上为负。计算时只要加一个$if-else$判断就行了，并不一定非要用**平方**来代表**距离**，还可以用绝对值、三次方等。但是平方是一种很好用的**数学技巧**，从一个方面说来：比起绝对值，平方的微分更加简单。**负负得正**这个简单的计算规则让**二乘法**（即两个数相乘）这个名字得以发扬光大，成为一切**拟和法**的鼻祖。

数学表达形式

$$E(\boldsymbol{\theta})=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y^{(i)}-f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}^{(i)}))^2$$

其中$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})$就是我们假设的以$\boldsymbol{\theta}$为参数的线性模型。

- 举例：
  假设$f_{\boldsymbol{\theta}}(x)=\theta_0+\theta_1 x$

广告费 x	点击量 y	θ_0= 1、θ_1= 2 时的$f_{\boldsymbol{\theta}}(x)$
58	374	117
70	385	141
81	375	163
84	401	169

$$\begin{aligned}E(\boldsymbol{\theta})&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}\left(y^{(i)}-f_{\boldsymbol{\theta}}(x^{(i)})\right)^2\\&=\frac{1}{2}\times\left((374-117)^2+(385-141)^2+(375-163)^2+(401-169)^2\right)\\&=\frac{1}{2}\times(66049+59536+44944+53824)\\&=112176.5\end{aligned}$$

  这个值本身没什么意义，我们用它来指导改变参数$\boldsymbol{\theta}$，使这个值变得越来越小，即让误差变小。这种做法就叫做最小二乘法。

通用数学公式解

误差方程为：

$$E(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{X},\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})$$

其最优解为：

$$\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

其中X为$m\times n$的样本输入矩阵：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_{11}&\boldsymbol{x}_{12}&\dots&\boldsymbol{x}_{1n}\\\boldsymbol{x}_{21}&\boldsymbol{x}_{22}&\dots&\boldsymbol{x}_{2n}\\\dots&\dots&\dots&\dots\\\boldsymbol{x}_{m1}&\boldsymbol{x}_{m2}&\dots&\boldsymbol{x}_{mn}\end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{y}$为$m\times 1$ 的列向量，一般称为$labels$:

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}_1\\\boldsymbol{y}_2\\\dots\\\boldsymbol{y}_m\end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{w}$为$n\times 1$列向量，就是待求的拟和权重参数:

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{w}_1\\\boldsymbol{w}_2\\\dots\\\boldsymbol{w}_m\end{bmatrix}$$

推导过程

误差方程展开：

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y})^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}) &= \big((\boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T-\boldsymbol{y}^T\big)(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{y}) \\ &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}+\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-2(\boldsymbol{X}\boldsymbol{w})^T\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

其中用到了$\boldsymbol{\alpha}^T\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{\alpha}$这一等式。

化简的最后结果的极值（小）在对$\boldsymbol{w}$求导为零处，所以有

$$2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}-2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}=0$$

整理得：

$$\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

线性回归

一元线性回归

我们将求解w和b使得$E(w,b)$（下边提到）最小化的过程称为线性回归模型的最小二乘参数估计。

- **求解偏置b的公式推导**
  - **由最小二乘法导出损失函数$E(w,b)$：**

$$\begin{aligned}E(w,b) &= \sum_{i=1}^{m}(y_i-f(x_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^{m}(y_i-(wx_i+b))^2 \\ &= \sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i-b)^2\end{aligned}$$

  - **求解：**
    - **定理一：二元函数判断凹凸性：**

      设$f(x,y)$在区域D上具有二阶连续偏导数，记$A=f''_{xx}(x,y), B=f''_{xy}(x,y), C=f''_{yy}(x,y)$则：

      （1）在D上恒有$A>0$，且$AC-B^2\geqslant 0$时，$f(x,y)$在区域D上是凸函数；

      （2）在D上恒有$A<0$，且$AC-B^2\geqslant 0$时，$f(x,y)$在区域D上是凹函数。
    - **定理二：二元凹凸函数求最值：**

      设$f(x,y)$是在开区域D内具有连续偏导数的凸（凹）函数，$(x_0,y_0)\in D$且$f'_x(x_0,y_0)=0, f'_y(x_0,y_0)=0$，则$f(x_0,y_0)$必为$f(x,y)$在$D$内的最小值（或最大值）。

  接下来用以上两个定理来求解：

    - 证明损失函数$E(w,b)$是关于w和b的凸函数：
      - 求$A=f''_{xx}(x,y)$：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w} &= \frac{\partial\left[\sum\limits_{i=1}^{m}(y_i-wx_i-b)^2\right]}{\partial w} \\ &= \sum_{i=1}^{m}\frac{\partial(y_i-wx_i-b)^2}{\partial w} \\ &= \sum_{i=1}^{m}2\cdot(y_i-wx_i-b)\cdot(-x_i) \\ &= 2\left(w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}(y_i-b)x_i\right)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 E_(w,b)}{\partial w^2} &= \frac{\partial(\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w})}{\partial w} \\
&= \frac{\partial\left[2\left(w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}(y_i-b)x_i\right)\right]}{\partial w} \\
&= 2\sum_{i=1}^{m}x_i^2
\end{aligned}
$$

- 求$B=f''_{xy}(x,y)$:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 E(w,b)}{\partial w\partial b} &= \frac{\partial(\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w})}{\partial b} \\
&= \frac{\partial\left[2\left(w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}(y_i-b)x_i\right)\right]}{\partial b} \\
&= 2\sum_{i=1}^{m}x_i
\end{aligned}
$$

- 求$C=f''_{yy}(x,y)$:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b} &= \frac{\partial\left[\sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i-b)^2\right]}{\partial b} \\
&= \sum_{i=1}^{m}\frac{\partial(y_i-wx_i-b)^2}{\partial b} \\
&= \sum_{i=1}^{m}2\cdot(y_i-wx_i-b)\cdot(-1) \\
&= 2\left(mb-\sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i)\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 E_{(w,b)}}{\partial b^2} &= \frac{\partial(\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b})}{\partial b} \\
&= \frac{\partial\left[2\left(mb-\sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i)\right)\right]}{\partial b} \\
&= 2m
\end{aligned}
$$

- 以上：$A=2\sum_{i=1}^{m}x_i^2$，$B=2\sum_{i=1}^{m}x_i$，$C=2m$。

$$
\begin{aligned}
AC-B^2 &= 2m\cdot 2\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\left(2\sum_{i=1}^{m}x_i\right)^2 \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}x_i^2-4\left(\sum_{i=1}^{m}x_i\right)^2 \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}x_i^2-4\cdot m\cdot\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m}x_i\right)^2 \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}x_i^2-4m\cdot\overline{x}\cdot\sum_{i=1}^{m}x_i \\
&= 4m\left(\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}x_i\overline{x}\right) \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}(x_i^2-x_i\overline{x}-x_i\overline{x}+x_i\overline{x}) \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}(x_i^2-x_i\overline{x}-x_i\overline{x}+\overline{x}^2) \\
&= 4m\sum_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})^2
\end{aligned}
$$

我们可知$AC-B^2=4m\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})^2\geqslant 0$，也即损失函数$E(w,b)$是关于$w$和$b$的凸函数。

- 补充：$\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\overline{x}=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\overline{x}\cdot m\cdot\dfrac{1}{m}\cdot\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=m\overline{x}^2=\sum\limits_{i=1}^{m}\overline{x}^2.$

令一阶偏导数等于0解出b：

$$
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b}=2\left(mb-\sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i)\right)=0
$$

$$
mb-\sum_{i=1}^{m}(y_i-wx_i)=0
$$

$$
b=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(y_i-wx_i)}{m}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}y_i-w\cdot\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}x_i=\overline{y}-w\overline{x}.
$$

令一阶偏导数为0解出w：

$$
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w}=2\left(w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}(y_i-b)x_i\right)=0
$$

$$
w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\sum_{i=1}^{m}(y_i-b)x_i=0
$$

$$
w\sum_{i=1}^{m}x_i^2=\sum_{i=1}^{m}y_ix_i-\sum_{i=1}^{m}bx_i
$$

将$b=\overline{y}-w\overline{x}$代入上式可得：

$$w\sum_{i=1}^{m}x_i^2=\sum_{i=1}^{m}y_ix_i-\sum_{i=1}^{m}(\overline{y}-w\overline{x})x_i$$

$$w\sum_{i=1}^{m}x_i^2=\sum_{i=1}^{m}y_ix_i-\overline{y}\sum_{i=1}^{m}x_i+w\overline{x}\sum_{i=1}^{m}x_i$$

$$w\sum_{i=1}^{m}x_i^2-w\overline{x}\sum_{i=1}^{m}x_i=\sum_{i=1}^{m}y_ix_i-\overline{y}\sum_{i=1}^{m}x_i$$

$$w\left(\sum_{i=1}^{m}x_i^2-\overline{x}\sum_{i=1}^{m}x_i\right)=\sum_{i=1}^{m}y_ix_i-\overline{y}\sum_{i=1}^{m}x_i$$

$$w=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}y_ix_i-\overline{y}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i}{\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2-\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}y_ix_i-\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i}{\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2-\frac{1}{m}(\sum\limits_{i=1}^{m}x_i)^2}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}y_i(x_i-\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2-\frac{1}{m}(\sum\limits_{i=1}^{m}x_i)^2}$$

其中:

- $\overline{y}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i$
- $\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\frac{1}{m}(\sum\limits_{i=1}^{m}x_i)^2$

为提高运算速度，将求解w的过程向量化可得（**核心：将累加的形式抽象成向量的点乘**）：

$$w=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}y_i(x_i-\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2-\frac{1}{m}(\sum\limits_{i=1}^{m}x_i)^2}$$

将$\frac{1}{m}(\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2)=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\overline{x}$代入分母可得:

$$w=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}y_i(x_i-\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}x_i^2-\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\overline{x}}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(y_ix_i-y_i\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i^2-x_i\overline{x})}$$

由于:

$$\begin{cases}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i\overline{x}=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i=\frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\sum\limits_{i=1}^{m}y_i=\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\cdot\frac{1}{m}\cdot\sum\limits_{i=1}^{m}y_i=\sum\limits_{i=1}^{m}x_i\overline{y}\\ \sum\limits_{i=1}^{m}y_i\overline{x}=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i=\overline{x}\cdot m\cdot\frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m}y_i=m\overline{x}\,\overline{y}=\sum\limits_{i=1}^{m}\overline{x}\,\overline{y}\\ \sum\limits_{i=1}^{m}x_i\overline{x}=\overline{x}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=\overline{x}\cdot m\cdot\frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m}x_i=m\overline{x}^2=\sum\limits_{i=1}^{m}\overline{x}^2\end{cases}$$

所以:

$$w=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(y_ix_i-y_i\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i^2-x_i\overline{x})}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(y_ix_i-y_i\overline{x}-y_i\overline{x}+y_i\overline{x})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i^2-x_i\overline{x}-x_i\overline{x}+x_i\overline{x})}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(y_ix_i-y_i\overline{x}-x_i\overline{y}+\overline{x}\,\overline{y})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i^2-2x_i\overline{x}+\overline{x}^2)}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})^2}$$

令$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\ldots,x_m)^T$，$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\ldots,y_m)^T$

$\boldsymbol{x}_d=(x_1-\overline{x},x_2-\overline{x},\ldots,x_m-\overline{x})^T,\boldsymbol{y}_d=(y_1-\overline{y},y_2-\overline{y},\ldots,y_m-\overline{y})^T$。

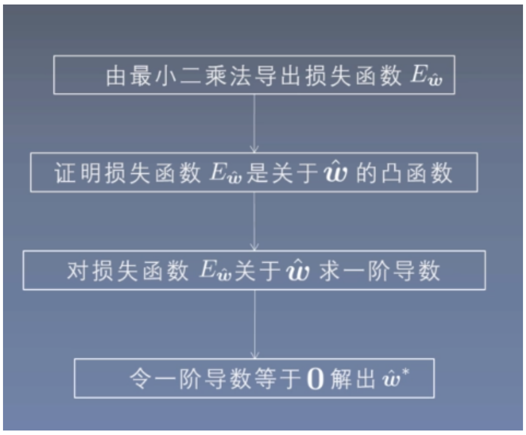
则

$$w=\frac{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\sum\limits_{i=1}^{m}(x_i-\overline{x})^2}=\frac{\boldsymbol{x}_d^T\boldsymbol{y}_d}{\boldsymbol{x}_d^T\boldsymbol{x}_d}$$

- 值得注意的是：上述求w的式子在高中选修$1-2$出现过。后续求b的式子只用到了一个性质：$(\overline{x}, \overline{y})$一定在回归方程上。（我们上述求解是先求$b$后求的$w$，与课本相反）。

多元线性回归

多元线性回归的求解思路同一元线性回归的求解思路基本相同：



- 将$\boldsymbol{w}$和b组合成$\hat{\boldsymbol{w}}$：

$$f(\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i + b = \hat{\boldsymbol{w}}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i$$

- 由最小二乘法导出损失函数$E_{\hat{\boldsymbol{w}}}$：

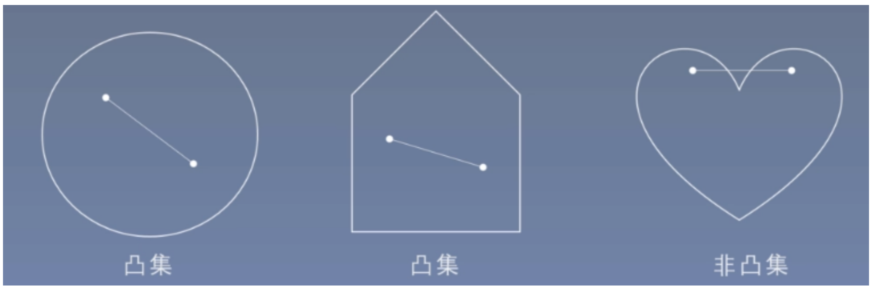
$$E_{\hat{\boldsymbol{w}}} = \sum_{i=1}^{m}(y_i - f(\hat{\boldsymbol{x}}_i))^2 = \sum_{i=1}^{m}(y_i - \hat{\boldsymbol{w}}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i)^2$$

- 进行向量化：
  令$X = (\hat{\boldsymbol{x}}_1^T, \hat{\boldsymbol{x}}_2^T, \cdots, \hat{\boldsymbol{x}}_m^T)^T, \boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$
  得：

$$E_{\hat{\boldsymbol{w}}} = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}})^T(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}})$$

求解：

- 证明损失函数是关于$\hat{\boldsymbol{w}}$的凸函数：
  - **凸集**：设集合$D \in R^n$，如果对任意的点$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in D$与任意的$a \in [0,1]$，有$a\boldsymbol{x} + (1-a)\boldsymbol{y} \in D$，则称集合$D$是凸集。



  - **梯度（多元实值函数的一阶导数）**：设n元函数$f(\boldsymbol{x})$对自变量$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$的各分量$x_i$的一阶偏导数$\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$都存在，则称函数$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}$处一阶可导，并称向量

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

  为函数$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}$处的一阶导数或梯度，记为$\nabla f(\boldsymbol{x})$（列向量）。

- $Hessian$（海塞）矩阵：设n元函数$f(\boldsymbol{x})$对自变量$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)^T$的各分量$x_i$的二阶偏导数 $\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i \partial x_j}\quad(i=1,2,\ldots,n;j=1,2,\ldots,n)$都存在，则称函数$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}$处二阶可导，并称矩阵

$$\nabla^2 f(x)=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n}\\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n}\\ \vdots & \vdots \quad \ddots & \vdots\\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2}\end{bmatrix}$$

  为$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}$处的二阶导数或$Hessian$矩阵，记为$\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$，若$f(\boldsymbol{x})$对$\boldsymbol{x}$各变元的所有二阶偏导数都连续，则 $\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i \partial x_j}=\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j \partial x_i}$，此时易知$\nabla^2 f(x)$为对称矩阵。

- **定理一：多元实值函数凹凸性判定定理：**

  设$D\subset R^n$是非空开凸集。$f:D\subset R^n\rightarrow R$.且$f(\boldsymbol{x})$在$D$上二阶连续可微。如果$f(x)$的$Hessian$矩阵 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$在$D$上是**正定**的，则$f(\boldsymbol{x})$是$D$上的严格凸函数。

- **定理二：凸充分性定理：**

  若$f:R^n\rightarrow R$是凸函数，且$f(\boldsymbol{x})$一阶连续可微，则x^*是全局解的充分必要条件是$\nabla f(\boldsymbol{x}^*)=\mathbf{0}$，其中$\nabla f(\boldsymbol{x})$为$f(\boldsymbol{x})$关于$\boldsymbol{x}$的一阶导数（也称梯度）。

接下来用以上两个定理来求解：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{\hat{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}&=\frac{\partial\left[(\boldsymbol{y}-X\hat{\boldsymbol{w}})^T(\boldsymbol{y}-X\hat{\boldsymbol{w}})\right]}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\\&=\frac{\partial\left[(\boldsymbol{y}^T-\hat{\boldsymbol{w}}^T\boldsymbol{X}^T)(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}})\right]}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\\&=\frac{\partial\left[\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\hat{\boldsymbol{w}}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}+\hat{\boldsymbol{w}}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right]}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\\&=\frac{\partial\left[-\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\hat{\boldsymbol{w}}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}+\hat{\boldsymbol{w}}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right]}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\\&=\frac{\partial \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}-\frac{\partial \hat{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\end{aligned}$$

由矩阵微分公式$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}}=\dfrac{\partial \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{a}$，$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^T)\boldsymbol{x}$可得：

$$\frac{\partial E_{\hat{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}=-\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}+(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}+\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})\hat{\boldsymbol{w}}=2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\boldsymbol{y})$$

则$Hessian$矩阵为：

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 E_{\hat{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}\partial \hat{\boldsymbol{w}}^T}&=\frac{\partial}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\left(\frac{\partial E_{\hat{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}\right)\\&=\frac{\partial}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}[2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\boldsymbol{y})]\\&=\frac{\partial}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}(2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y})\\&=2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\end{aligned}$$

当X^TX是正定矩阵时，损失函数$E_{\hat{w}}$是关于$\hat{\boldsymbol{w}}$的凸函数。

令$\dfrac{\partial E_{\hat{w}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}}=2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\boldsymbol{y})=\mathbf{0}$

解出：$\hat{\boldsymbol{w}}=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$

有时**分类问题也可以转化为回归问题**，例如肺癌预测，我们可以用回归模型先预测出患肺癌的概率，然后再**给定一个阈值**，例如50%，概率值在50%以下的人划为没有肺癌，50%以上则认为患有肺癌。这种分类型问题的回归算法预测，最常用的就是**逻辑回归**。

逻辑回归

如果面试官问你熟悉哪个机器学习模型，可以说 SVM，但千万别说 LR，因为细节真的太多了。

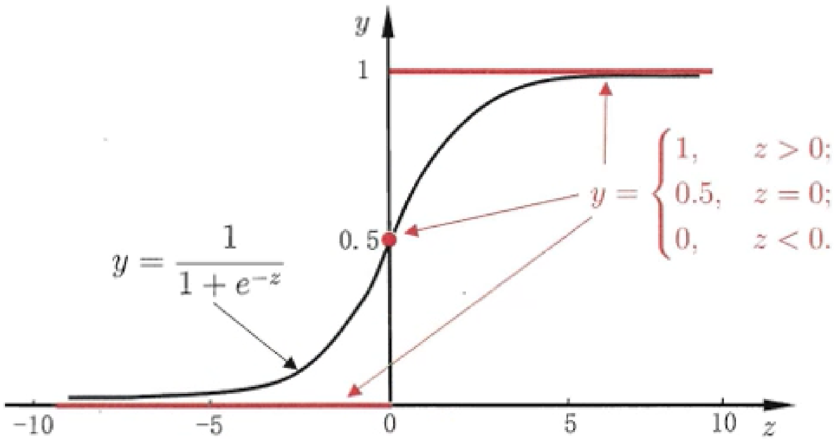
——阿泽

$Logistic$**回归的本质是：假设数据服从这个分布，然后使用极大似然估计做参数的估计。**

$Logistic$**回归=线性回归+**$sigmoid$**函数**

$logistic$**函数**

$logistic$函数中文名叫对数几率函数，因其形状像S，是$Sigmoid$函数最重要的代表，故又称$Sigmoid$**函数**：



$Sigmoid$**函数的性质**：

- 将$input$压缩到$(0,1)$之间（可以由此联想到概率的取值）
- $\frac{1}{2}$处导数值最大
- $y(x)$的导数为$y(x)(1-y(x))$
- 两边梯度趋于饱和（作为激活函数在神经网络的弊端）
- 不以原点为中心（作为激活函数在神经网络的弊端）
- 单调递增

逻辑回归为何不叫逻辑分类？

回归来源于"线性回归"，使用线性回归去拟合逼近一个“界”（对数几率），使得按照这个"界"进行数据分类后得到的$cost$最小。以概率0.5为分界线，将数据分为正例和反例。使得$z>0$对应于正例，$z<0$对应于反例。因此是使用的**回归思想**去解决**分类问题**。

广义线性模型

指数族分布

看似无关的事物背后往往有着不可思议的联系。

——佚名

指数族分布是一类分布的总称，该类分布的分布律（或者概率密度）的一般形式如下：

$$p(y;\eta)=b(y)e^{\eta^TT(y)-a(\eta)}$$

其中，η称为该分布的自然参数；$T(y)$为充分统计量，视具体的分布而定，通常是等于随机变量y本身；$a(\eta)$为配分函数；$b(y)$为关于随机变量y的函数。（$e^{-a(\eta)}$本质上是一个归一化常数，保证$\sum p(y;\eta)=1$）。也就是说T,a,b确定了一种分布，η是该分布的参数。

常见的伽玛分布、泊松分布、二项分布和正态分布均属于指数族分布。

举例说明**二项分布是指数族分布：**

已知二项分布的分布律为：

$$p(y)=\phi^y(1-\phi)^{1-y}$$

其中$y\in\{0,1\}$，ϕ为$y=1$的概率。对上式恒等变形可得：

$$\begin{aligned}
p(y)&=\phi^y(1-\phi)^{1-y}\\
&=e^{(ln(\phi^y(1-\phi)^{1-y}))}\\
&=e^{(ln(\phi^y)+ln(1-\phi)^{1-y})}\\
&=e^{(yln\phi+(1-y)ln(1-\phi))}\\
&=e^{(yln\phi+ln(1-\phi)-yln(1-\phi))}\\
&=e^{(y(ln\phi-ln(1-\phi))+ln(1-\phi))}\\
&=e^{yln(\frac{\phi}{1-\phi})+ln(1-\phi)}
\end{aligned}$$

对比指数族分布的一般形式$p(y;\eta)=b(y)e^{\eta^TT(y)-a(\eta)}$可知：

$$\begin{gathered}
b(y)=1\\
\eta=ln(\frac{\phi}{1-\phi})\\
T(y)=y\\
a(\eta)=-ln(1-\phi)=ln(1+e^\eta)
\end{gathered}$$

故得证。

考虑一个分类或者回归问题，我们就是想预测某个随机变量y，y是某些特征$\boldsymbol{x}$的函数。为了推导出广义线性模型，我们必须做出如下三条假设：

广义线性模型的三条假设

- 在给定$\boldsymbol{x}$的条件下，假设随机变量y服从某个**指数族分布**；
- 在给定$\boldsymbol{x}$的条件下，我们的目标是得到一个模型$h(\boldsymbol{x})$能预测出$T(y)$**的期望值**；
- 假设该指数族分布中的自然参数η和$\boldsymbol{x}$是线性相关的，即$\eta=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$。

对数几率回归

已知y服从二项分布，而二项分布属于指数族分布，所以满足广义线性模型的**第一条假设**，根据**第二条假设**我们可以推得模型$h(\boldsymbol{x})$的表达式应该为：

$$h(\boldsymbol{x})=E[T(y|\boldsymbol{x})]$$

由于二项分布的$T(y|\boldsymbol{x})=y|\boldsymbol{x}$，所以：

$$h(\boldsymbol{x})=E[y|\boldsymbol{x}]$$

又因为$E[y|\boldsymbol{x}]=1\times p(y=1|\boldsymbol{x})+0\times p(y=0|\boldsymbol{x})=\phi$，所以$h(\boldsymbol{x})=\phi$。

而由$\eta=ln(\dfrac{\phi}{1-\phi})$可推出$\phi=\dfrac{1}{1+e^{-\eta}}$。

所以可得：

$$h(\boldsymbol{x})=\phi=\frac{1}{1+e^{-\eta}}$$

再根据广义模型的**第三条假设**：$\eta=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$，$h(\boldsymbol{x})$最终可化为：

$$h(\boldsymbol{x}) = \phi = \frac{1}{1+e^{-\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}}} = p(y=1|\boldsymbol{x})$$

对数几率回归的极大似然估计

似然和概率是不同的。$likelihood$不是$probability$。

当把$\boldsymbol{x}$固定而把$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})$看做$\boldsymbol{\theta}$的函数时，它称为"似然函数"。 这个名称的意义，可根据分析得到理解：这个函数对于不同的$\boldsymbol{\theta}$的取值，反映了在观察结果$\boldsymbol{x}$已知的条件下，$\boldsymbol{\theta}$的各种值的"似然程度"。 注意，这里有些像贝叶斯公式中的推理：把观察值$\boldsymbol{x}$看成结果，而把参数值θ看成是导致这个结果的原因。 现已有了结果，要反过来推算各种原因的概率。 这里**参数$\boldsymbol{\theta}$**是确定的值（虽然未知），**并非随机变量，无概率可言**，于是就改用"似然"这个词。——陈希孺《概率论与数理统计》

在统计学上，基于某些模型的参数（粗略地说，我们可以认为参数决定了模型），观测到某数据的概率称为概率；而已经观测到某数据，模型的参数取特定值的概率称为似然。

已知随机变量y取1和0的概率分别为

$$p(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}}{1+e^{\boldsymbol{w}^Tx+b}}$$
$$p(y=0|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}}$$

将b考虑进$\boldsymbol{w}$，令$\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{w};b), \hat{\boldsymbol{x}}=(\boldsymbol{x};1)$，则$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b$可以简写为$\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}$，于是上式可化简为：

$$p(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}}$$
$$p(y=0|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}}$$

为了简单表示，记：

$$p(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}} = p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})$$
$$p(y=0|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}}} = p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})$$

使用一个简单的技巧可得到随机变量y的分布律表达式

$$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{w},b) = y\cdot p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta}) + (1-y)\cdot p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})$$

或者

$$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{w},b) = [p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})]^y \times [p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})]^{1-y}$$

根据**对数似然函数**的定义可得：

$$\ell_{(w,b)} = ln\, L(w,b) = \sum_{i=1}^{m} ln\, p(y_i|x_i;w,b)$$

将$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{w},b) = y\cdot p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta}) + (1-y)\cdot p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})$代入可得：

$$\ell(\beta) = \sum_{i=1}^{m} ln\left(y_i p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}) + (1-y_i)\cdot p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\right)$$

将

$$\frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}_i}} = p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})$$
$$\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}} = p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})$$

代入上式可得：

$$
\begin{aligned}
\ell(\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{i=1}^{m} ln\left(\frac{y_i e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i}} + \frac{1-y_i}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i}}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{m}\left(ln(y_i e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i}+1-y_i) - ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i})\right)
\end{aligned}
$$

由于$y_i \in \{0,1\}$，所以可以用一个小技巧继续化简为：

$$
\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{m}\left(y_i\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i - ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i})\right)
$$

损失函数一般转化为最小化问题，加个负号即可：

$$
\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{m}\left(-y_i\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i + ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i})\right)
$$

- **补充：** 也可以用$p(y|\boldsymbol{x};\boldsymbol{w},b) = [p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})]^y \times [p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})]^{1-y}$来推导。

$$
\begin{aligned}
\ell(\beta) &= \sum_{i=1}^{m} ln\left([p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]^{y_i} \times [p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]^{1-y_i}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{m} ln\left([p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]^{y_i}\right) + ln\left([p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]^{1-y_i}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{m}\left[y_i ln\left([p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]\right) + (1-y_i) ln\left(p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\right)\right] \\
&= \sum_{i=1}^{m}\{y_i[ln(p_1(\hat{x}_i;\beta)) - ln(p_0(\hat{x}_i))] + ln(p_0(\hat{x}_i;\beta))\} \\
&= \sum_{i=1}^{m}\left[y_i ln\left(\frac{p_1(\hat{x}_i;\beta)}{p_0(\hat{x}_i;\beta)}\right) + ln(p_0(\hat{x}_i;\beta))\right]
\end{aligned}
$$

同样将

$$
\begin{aligned}
\frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}_i}} &= p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}) \\
\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}} &= p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
$$

代入可得：

$$
\ell(\beta) = \sum_{i=1}^{m}\left[y_i ln\left(e^{\beta^T\hat{x}_i}\right) + ln\left(\frac{1}{1+e^{\beta^T\hat{x}_i}}\right)\right] = \sum_{i=1}^{m}\left(y_i\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i - ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i})\right)
$$

但是$\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{m}\left(-y_i\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i + ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i})\right)$并不能像线性回归函数一样得到关于$\beta$的解析解。我们可以用经典的比如梯度下降法，牛顿法来解。下面介绍梯度下降法求解。

梯度下降法求解

取逻辑回归的损失函数为：

$$
\ell(\boldsymbol{\beta}) = -\sum_{i=1}^{m}\left[y_i ln\left([p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]\right) + (1-y_i) ln\left(p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\right)\right]
$$

我们对其中的$p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})$对$\beta_j$求导得到：

$$
\frac{\partial p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} = p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}) \cdot \left(1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\right) \cdot \hat{x}_{ij}
$$

其中$\boldsymbol{x}_i$实际指的是第i个样本的特征向量，即$(x_{i1},x_{i2},\ldots,x_{im},1)$，我们注意到只有$x_{ij}$会和$\beta_j$相乘，因此一眼可看出求导结果。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} &= -\sum_{i=1}^{m}\left(y_i \frac{1}{p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}\frac{\partial p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} + (1-y_i)\frac{1}{1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}\frac{\partial p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j}\right) \\
&= -\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{y_i}{p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})} - \frac{1-y_i}{1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}\right)\cdot\frac{\partial p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} \\
&= -\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{y_i}{p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})} - \frac{1-y_i}{1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})}\right)\cdot p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\cdot\big(1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})\big)\cdot\hat{x}_{ij} \\
&= -\sum_{i=1}^{m}[y_i(1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})) - (1-y_i)p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})]\cdot x_{ij} \\
&= -\sum_{i=1}^{m}(y_i - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}))\cdot x_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^{m}(\frac{e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}}{1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{x}_i}} - y_i)\cdot x_{ij}
\end{aligned}
$$

有了偏导，也就有了梯度$\boldsymbol{G}$(即偏导数组成的向量)。则梯度下降算法过程如下：

- 初始化向量β的值为$\boldsymbol{\theta}_0$，将其代入G得到当前位置的梯度；
- 用步长α乘以当前梯度，得到从当前位置下降的距离；
- 更新$\boldsymbol{\theta}_1$，其更新表达式为$\boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_0 - \alpha\boldsymbol{G}$;
- 重复以上步骤，直到更新至$\boldsymbol{\theta}_k$达到停止条件，此时$\boldsymbol{\theta}_k$就是我们所求的参数向量$\boldsymbol{\beta}$。

神经网络

正则化

常用优化算法

推荐系统基础