

所使用的模型：多元线性回归：

$$f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{x} + b \quad \text{对于输入}\mathbf{x}\text{的利用}f(\mathbf{x})\text{来估计输出}y$$

参数确定：

利用最小二乘法来对  $\boldsymbol{\omega}$  和  $b$  进行估计，为了方便计算和讨论，将  $\boldsymbol{\omega}$  和  $b$  变成一个向量形式： $\hat{\boldsymbol{\omega}} = (\boldsymbol{\omega}; b)$ ，相应的把原来的数据集扩充为  $\mathbf{x}$ ，即：

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^T & 1 \\ \mathbf{x}_2^T & 1 \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

把标记也写成向量形式  $\mathbf{y} = (y_1; y_2; \dots)$ ，故可得出均方误差为：

$$E_{\hat{\boldsymbol{\omega}}} = (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}})$$

我们试图让均方误差最小，即：

$$\hat{\boldsymbol{\omega}}^* = \arg \min_{\hat{\boldsymbol{\omega}}} (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}})$$

让  $E_{\hat{\boldsymbol{\omega}}}$  对  $\hat{\boldsymbol{\omega}}$  求偏导使之为零：

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\hat{\boldsymbol{\omega}}}}{\partial \hat{\boldsymbol{\omega}}} &= \frac{\partial (\mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\omega}}^T \mathbf{x}^T \mathbf{y} + \mathbf{x} \hat{\boldsymbol{\omega}} \mathbf{y}^T + \hat{\boldsymbol{\omega}}^T \mathbf{x}^T \mathbf{x} \hat{\boldsymbol{\omega}})}{\partial \hat{\boldsymbol{\omega}}} \\ &= \mathbf{0} - \mathbf{x}^T \mathbf{y} - \mathbf{x}^T \mathbf{y} + (\mathbf{x}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{x}) \hat{\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{0} \end{aligned}$$

$$\hat{\boldsymbol{\omega}}^* = (\mathbf{x}^T \mathbf{x})^{-1} \mathbf{x}^T \mathbf{y}$$

而  $\mathbf{x}^T \mathbf{x}$  可能不是满秩矩阵，故采用正则化或梯度下降处理

正则化：

$$E_{\hat{\boldsymbol{\omega}}} = (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\boldsymbol{\omega}}) + \lambda \|\hat{\boldsymbol{\omega}}\|^2$$

$$\hat{\omega}^* = \arg \min_{\hat{\omega}} (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\omega})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\omega}) + \lambda \|\hat{\omega}\|^2$$

$$\frac{\partial E_{\hat{\omega}}}{\partial \hat{\omega}} = \mathbf{0}$$

$$\hat{\omega}^* = (\mathbf{x}^T \mathbf{x} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{x}^T \mathbf{y}$$

而  $\mathbf{x}^T \mathbf{x} + \lambda \mathbf{I}$  一定是可逆的，故可以解出解析解。

梯度下降算法：

(1) 取初值  $\hat{\omega}^{(0)} = [0.1; 0.1; 0.1; 0.1]$ ，置  $k=0$ ；

(2) 计算  $E_{\hat{\omega}}^{(k)} = (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\omega}^{(k)})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}\hat{\omega}^{(k)})$ ；

(3) 计算梯度  $\nabla E(\hat{\omega}^{(k)})$ ，并且一维搜索确定  $\eta_k$  得到

$$\min_{\eta_k \geq 0} E(\hat{\omega}^{(k)} + \eta_k \times (-\nabla E(\hat{\omega}^{(k)})))$$

(4)  $\hat{\omega}^{(k+1)} = \hat{\omega}^{(k)} + \eta_k \times (-\nabla E(\hat{\omega}^{(k)}))$ ，并计算  $E(\hat{\omega}^{(k+1)})$ ，当

$\|E(\hat{\omega}^{(k)}) - E(\hat{\omega}^{(k+1)})\| < \varepsilon$  时，令  $\hat{\omega}^* = \hat{\omega}^{(k)}$ ，停止迭代

(5) 否则置  $k=k+1$ , 返回 (2)