

这份PDF是关于**线性模型：回归 (Linear Models: Regression)** 的机器学习课程讲义。它涵盖了从基础的单变量线性回归到复杂的贝叶斯线性回归的内容。

以下是根据PDF内容整理的详细复习笔记，按逻辑板块划分，方便你记忆和理解：

一、基础概念 (Slides 1-13)

1. 监督学习 (Supervised Learning):

- 核心：给定每个训练样本的“正确答案”（标签）。

2. 回归 (Regression):

- 目标：预测**连续型 (Real-valued)** 的输出。
- 案例：智能手机价格预测（根据屏幕尺寸预测价格）。

3. 符号定义 (Notations):

- m ：训练样本的数量。
- x ：输入变量/特征 (Input variable/features) 。
- y ：输出变量/目标值 (Output variable) 。
- $(x^{(i)}, y^{(i)})$ ：第 i 个训练样本。

4. 模型表示 (Hypothesis):

- 单变量线性回归 (Univariate Linear Regression):**

$$h_w(x) = w_0 + w_1 x$$

- w_0, w_1 是模型参数。

二、代价函数与目标 (Slides 14-20)

1. 代价函数 (Cost Function): 使用**均方误差 (Mean Squared Error, MSE)**。

$$J(w_0, w_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

- 注意：分母中的 2 是为了在求导时抵消平方项，方便计算。

2. 优化目标 (Goal): 找到使 $J(w_0, w_1)$ 最小的参数。

$$\arg \min_{w_0, w_1} J(w_0, w_1)$$

3. 直观理解:

- 固定参数时, $h_w(x)$ 是关于 x 的函数（一条直线）。
 - $J(w_0, w_1)$ 是关于参数的函数（在 3D 空间是一个碗状的**凸函数**，在 2D 空间是等高线图）。
-

三、梯度下降法 (Gradient Descent) (Slides 21-40)

1. **核心思想**：从某个初始参数出发，沿着代价函数减小最快的方向（负梯度方向）迭代更新参数。
 2. **算法公式**：
重复直至收敛 {
 $w_j := w_j - \alpha \frac{\partial}{\partial w_j} J(w_0, w_1)$ (for $j = 0$ and $j = 1$)
}
 - α : **学习率 (Learning rate)**, 控制步长。
 3. **关键点：同时更新 (Simultaneous Update)**:
 - 必须先计算出所有参数的偏导数，再一起更新。如果在计算 w_1 前就更新了 w_0 , 则不再是标准的梯度下降。
 4. **学习率 α 的特性**:
 - 即使 α 固定，随着接近局部最小值，梯度会变小，梯度下降会自动采取更小的步长。因此，通常不需要随时间减小 α 。
 5. **线性回归的具体更新规则**:
 - $w_0 := w_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)})$
 - $w_1 := w_1 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h_w(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot x^{(i)}$
-

四、多变量线性回归 (Multivariate Linear Regression) (Slides 41-58)

1. **多特征表示**:
 - n : 特征数量。
 - $x_j^{(i)}$: 第 i 个样本的第 j 个特征。
2. **向量化表示 (Vectorized Notation)**:
 - 定义 $x_0 = 1$ 。
 - 特征向量 $\mathbf{x} = [x_0, x_1, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^{n+1}$ 。
 - 参数向量 $\mathbf{w} = [w_0, w_1, \dots, w_n]^T \in \mathbb{R}^{n+1}$ 。
 - **假设函数**: $h_w(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x}$ 。
3. **正规方程 (Normal Equation)**: 一种直接求出最优参数的解析方法（不需要迭代）。
$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

- \mathbf{X} 是所有输入特征组成的矩阵 (包含 $x_0 = 1$ 列)。

五、特征选择与广义线性回归 (Slides 59-65)

1. **特征变换**: 可以通过组合现有特征生成新特征 (例如: 面积 = 长 \times 宽)。
2. **多项式回归 (Polynomial Regression)**:
 - 将模型变为非线性曲线: $h_w(x) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + w_3x^3$ 。
 - 令 $x_1 = x, x_2 = x^2, x_3 = x^3$, 它依然可以看作是一个线性回归问题。
3. **基函数 (Basis Functions)**:
 - 通用形式: $\Phi(\mathbf{x}) = [\phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \dots, \phi_n(\mathbf{x})]^T$ 。

六、正则化 (Regularization) (Slides 66-72)

1. **过拟合 (Overfitting)**:
 - **欠拟合 (Underfit)**: 高偏差 (High Bias), 模型太简单。
 - **过拟合 (Overfit)**: 高方差 (High Variance), 模型太复杂, 完美拟合训练数据但泛化能力差。
2. **正则化代价函数 (L2 Regularization)**:
 - 在代价函数后添加惩罚项, 抑制参数 w 过大。
$$J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2m} \left[\sum_{i=1}^m (h_w(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda \sum_{j=1}^n w_j^2 \right]$$
 - 注意: 通常不惩罚 w_0 。
3. **正则化下的参数更新**:
 - 梯度下降: $w_j := w_j(1 - \alpha \frac{\lambda}{m}) - \alpha \dots$ (每次更新前先对 w_j 进行一定的衰减)。
 - 正规方程: $\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{L})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$, 其中 \mathbf{L} 是除了第一个元素为0外, 其余对角线为1的单位阵。

七、概率视角与贝叶斯线性回归 (Slides 73-97)

1. **最大似然估计 (MLE) 与 最小二乘法 (Least Squares)**:
 - 假设噪声服从高斯分布 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \beta^{-1})$ 。
 - 结论: 最小化平方和误差等价于最大化高斯噪声下的似然函数。
2. **偏差-方差分解 (Bias-Variance Decomposition)**:

- 期望损失 = 偏置² + 方差 + 噪声。

- 目标是找到三者之和最小的平衡点。

3. 贝叶斯处理 (Bayesian Treatment):

- 先验 (Prior): $p(\mathbf{w}) = \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{m}_0, \mathbf{S}_0)$ 。

- 后验 (Posterior): $p(\mathbf{w}|\mathbf{t}) \propto p(\mathbf{t}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})$ 。

- 最大后验估计 (MAP): 等价于带正则化的最小二乘法, 其中正则化系数 $\lambda = \alpha/\beta$ 。

4. 预测分布 (Predictive Distribution):

- 贝叶斯不只给出一个 w 的点估计, 而是给出一个分布。

- 随着观测数据 N 增加:

- 后验分布变窄 (不确定性减小)。

- 预测分布的方差趋向于数据本身的固有噪声 β^{-1} 。

复习重点建议:

- 掌握梯度下降的**更新公式** (尤其是多变量和正则化版本)。
- 理解**正规方程**的适用场景。
- 深刻理解**过拟合**的原因及**正则化**的原理 (惩罚大权重)。
- 贝叶斯部分: 理解**MLE**、**MAP**与**最小二乘法**之间的数学联系。