2.1 Linear and Polynomial Regression

线性回归的问题陈述

对于训练集$D = \{\boldsymbol{x}_i, y_i\}_{i=1}^N$，学习一个模型，根据给定输入得到预测输出

模型学习公式 Hypothesis Function

$$y = f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} = \sum_{j=0}^{N} w_j x_j$$

权重 w 决定了特征 x 在预测标签 y 中的重要程度。

实际应用当中常设$x_0 = 1$, 对应的w_0称为偏差/bias，常用 b 表示。

决定权重 w：使得均方差 mean square error/MSE 最小，物理含义是指让所有的点离最终的预测平面的平均距离最小，即使以下方程有最小值

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x_i})^2$$

要使得以上方程最小，可以令其梯度最小，即令

$$\nabla_{\boldsymbol{w}} J(\boldsymbol{w}) = 0$$

解以上方程，可得

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

其中$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^T \\ \boldsymbol{x}_2^T \\ \dots \\ \boldsymbol{x}_n^T \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix}$

称为普通最小二乘解 ordinary least squares /OLS solution

线性回归的概率解释

将y看做随机变量，因而有

$$y = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + \epsilon = \Sigma_{j=0}^{D} w_j x_j + \epsilon$$

其中ϵ代表由测量或未知特征引起的误差，假设这些误差都是独立同分布 independent and identically distributed/iid 的，则根据中心极限定律，其服从均值为 0，方差为σ^2 的高斯分布

$$\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

因而

$$(y - w^T x) \sim N(0, \sigma^2)$$

令模型参数θ包括 w 以及σ，从而条件概率$p(y|x, \theta)$满足

$$p(y|\boldsymbol{x}, \theta) = N(y|\mu(\boldsymbol{x}), \sigma^2)$$

其中$\mu(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$

因而给定一个输入 x 时， 可以得到一个 y 的高斯分布

为了得到 y 的点估计， 可以使用均值，如

$$\hat{y} = \mu(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$$

所以给定数据集 D 关于参数θ的对数似然函数是

$$\begin{aligned} l(\theta|D) &= \log p(D|\theta) \\ &= \Sigma_{i=1}^{N} \log p(\epsilon_i|\theta) \\ &= \Sigma_{i=1}^{N} \log p(y_i|\boldsymbol{x}_i, \theta) \\ &= \Sigma_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N}} \log\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\theta}\exp\left(-\frac{(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2}{2\sigma^2}\right)\right] \\ &= -\frac{\mathrm{N}}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\Sigma_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2 \end{aligned}$$

因为 log 函数是单调递增函数，因而$p(D|\theta)$和$\log p(D|\theta)$拥有相同的最大值点。所以为了得到最大似然估计 MLE，可以选择最大化l(θ|D)，也可以选择最小化负对数似然函数 Negative Log-likelihood/NLL，又被称为交叉熵 cross-entropy

$$NLL(\theta|D) = -l(\theta|D) = \frac{N}{2}\log(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2}\Sigma_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2$$

因而对于 w 来说，给定σ， 最小化$NLL(\theta|D)$等同于最小化$\Sigma_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2$，即等同于最小化

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\Sigma_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i)^2$$

从而不论从最小化均方差 MSE 或者是最小化负对数似然函数 NLL 都会得到一样的最终结果

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

多项式回归

对于简化的线性回归

$$y = f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} = \sum_{j=0}^{N} w_j x_j$$

可以使用一个非线性函数ϕ(x)来代替 x，从而使得原方程可以用来拟合非线性的模型

$$y = f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})$$

这一过程被称为基础函数扩展 basis function expansion，函数$\boldsymbol{\phi}$被称为特征映射

如果采用以下的多项式特征映射 polynomial feature mapping

$$\phi(x) = [1, x_1, x_2, \dots, x_n, x_1^2, x_1x_2, \dots, x_n^d]$$

可以得到多项式回归。例如当$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2), d = 2$时，有

$$y = f(x) = w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_1^2 + w_4x_1x_2 + w_5x_2^2$$

因为基本特征$\boldsymbol{x}$是固定个数的，问题在于如何选择d

概念：假设空间 Hypothesis Space：一个机器学习算法的解空间

容量 Capacity：假设空间的 size

对于多项式回归，d越大，模型容量越大；模型容量越大，证明模型对训练样本的拟合程度越好。

过拟合 Overfitting 和欠拟合 Underfitting

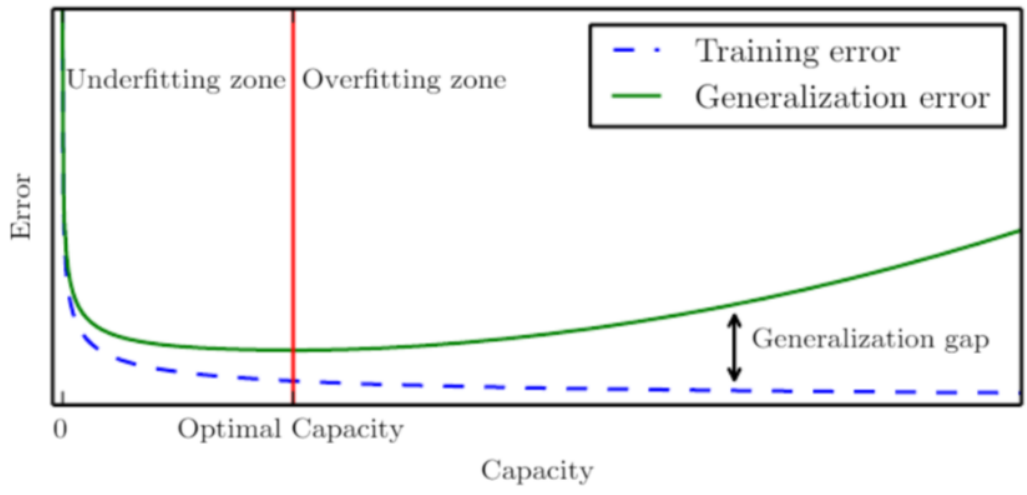
泛化误差 Generalization Error：模型训练目标是让其在训练样本中尽可能的表现优异，但模型最终需要在未经训练的测试样本上也能成功运作，这个过程称为泛化 Generalization，这个过程产生的误差称之为 Test Error/Generalization Error，定义为

$$J^{(test)}(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N^{(test)}} \left|\left|\boldsymbol{y}^{(test)} - \boldsymbol{X}^{(test)}\boldsymbol{w}\right|\right|_2^2$$

与此相对的，训练误差 Training Error 定义为

$$J^{(train)}(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N^{(train)}} \left|\left|\boldsymbol{y}^{(train)} - \boldsymbol{X}^{(train)}\boldsymbol{w}\right|\right|_2^2$$

Test Error 和 Training Error 是紧密相关的，因为训练集和测试集都是总数据集独立同分布的样本。一般情况下，泛化误差常大于训练误差，因为训练过程是为了使训练误差最小化。因而为了解决该问题，在训练过程当中除了让训练误差尽可能小外，还要使训练误差以及泛化误差的 gap 尽可能小。



红线代表最佳容量；
红线左边的区域 capacity 过小，训练和泛化误差均太大，是欠拟合；
红线右边的区域 capacity 过大，虽然训练误差越来越小，但 gap 越来越大，是过拟合。

如上文所述，多项式回归的模型容量 capacity 常由 d 决定，而 d 是一种超参数 Hyperparameter。实际上各种模型的容量经常由超参数决定。
验证 Validation 是一种常用的确定超参数的方法，它将训练集随机分为两个不相交的子集，一个子集仍然称为训练集，另外一个子集称为验证集 Validation set.
例如在多项式回归模型当中，为了确定参数 d：

1. 给出一个 d 可能的值的集合{d}；
2. 对于集合当中的每个 d，在相同的训练集上做训练，之后测试不同的 d 在相同的验证集上的误差，称为 Validation error；
3. 选择具有最小验证误差的 d。

关于如何将原训练集分为新的训练集和一个验证集：

1. 一般而言，训练集越大，假设越好；验证集越大，误差估计越精确；
2. 一般选择 20%的原训练数据作为验证集，剩余的作为新的训练集。

交叉验证 Cross Validation：当数据有限时，若仍继续保留一部分数据作为验证集将会使训练样本更少，误差估计将会有较大的方差，因而此时要采用交叉验证的方法：

1. N 个可用的训练样本将被分为 k 个不相交的子集，每个子集大小为 N/k；
2. 学习过程将会 run 上 k 次，每一次采用其中一个子集作为验证集，剩下的 k-1 个子集作为训练集；
3. 将 k 次学习过程的结果作为模型的误差估计和准确率；
4. 通常情况下 k = 10。

除了使用 Validation 来从一堆可能的 d 中挑出一个外，还可以采用另外一种办法：使用正则化方法 Regularization，从一个较大的 d 开始，从其中较大的假设空间当中选取一个合适的解：
对于线性回归而言，其误差函数为

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x_i})^2$$

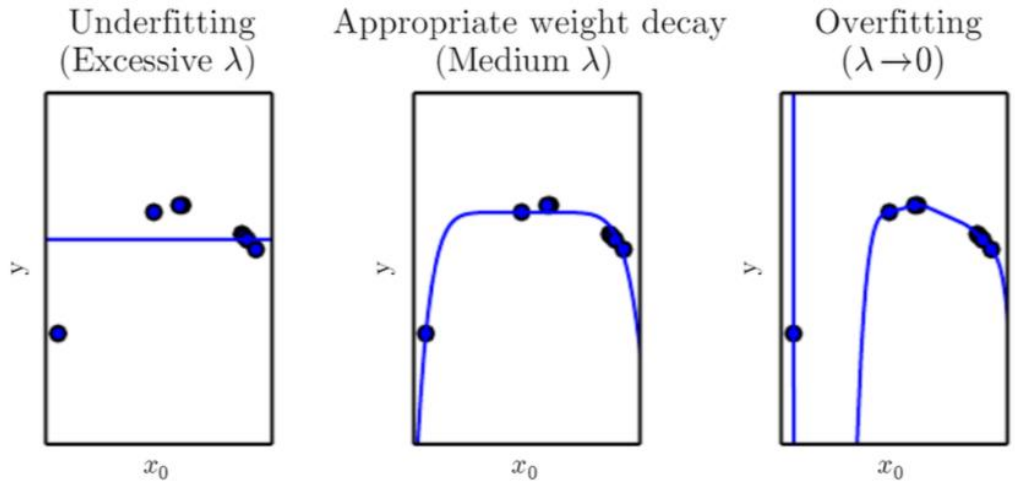
多项式回归中为了匹配 x 的 0 次项，加上一个w_0：

$$J(\boldsymbol{w}, w_0) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x_i})))^2$$

加上正则化的误差函数为：

$$J(\boldsymbol{w}, w_0) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x_i})))^2 + \lambda||\boldsymbol{w}||_2^2$$

其中$\lambda \geq 0$是一个提前选择好的值，用于控制我们对较小权重偏爱的强度。最小化以上的误差函数会使我们得到依赖较少特征的解，这个过程称之为权重衰退 weight decay。不同的λ影响如下：



使用以上正则化后的误差函数的模型称之为脊回归 Ridge Regression，同样使该误差函数的梯度为 0，可以得到

$$\hat{\boldsymbol{w}}_{ridge} = (\lambda \boldsymbol{I}_k + \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

这个解称为惩罚最小二乘解 penalized least squares solution

其中$\boldsymbol{I}_k$是 k 维单位矩阵；λ越大，权重 w 越小。脊回归通过收缩回归当中较大的参数来避免过拟合。

补充：least absolute shrinkage and selection operator/LASSO 方法强迫某些参数等于 0，有效的选取一个参与特征较少、较为简单的模型。相比于脊回归使用 L2 正则化，LASSO 采用 L1 正则化，其误差函数为

$$J(\boldsymbol{w}, w_0) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x_i})))^2 + \lambda||\boldsymbol{w}||_1$$