Abstract（摘要）

幂娜桑，空你吉哇，我是生而为弟。

在学习NLP的过程中，我对于公式的推导~~不是很擅长~~完全不会，因此我决定从头学习机器学习的理论推导。

本期主要分为两个部分：

- 第一部分将从矩阵，几何，概率三个视角，对线性回归-最小二乘法的闭式解进行推导，并提供参考代码。
- 第二部分将从矩阵和概率两个视角，对带正则化的最小二乘法的闭式解进行推导，并构造一个完整的线性回归类，同时实现闭式解求法与梯度下降解法。

Introduction（介绍）

线性回归模型是利用线性函数对一个或多个自变量和因变量（y）之间关系进行拟合的模型。

目标变量（y）为连续数值型，如：房价，人数，降雨量 回归模型是寻找一个输入变量到输出变量之间的映射函数。

回归问题的学习等价于函数拟合：使用一条函数曲线使其很好的拟合已知数据且能够预测未知数据。

回归问题分为模型的学习和预测两个过程。基于给定的训练数据集构建一个模型，根据新的输入数据预测相应的输出。

1.Algorithm（算法）

不带正则化

A.矩阵视角

注：一般情况下，我们讨论的向量都是列向量，因此推导过程中为保证矩阵的形状，会大量使用转置符

已知数据集$D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2)\ldots(x_n,y_n)\}$

其中$x_i\in R^p$，$y_i\in R$，$i=1,2,\ldots,n$

$$X=(x_1,x_2,\ldots,x_n)^T=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \ldots & X_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \ldots & x_{2p} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ x_{n1} & x_{n2} & \ldots & x_{np} \end{pmatrix}_{n*p} \tag{33}$$

$$Y=(y1,y2,\ldots,y_n)^T_{n*1} \tag{34}$$

这是我们建立的模型：$f(w)=w^T*x+w_0*x_0$。

一般令$x_0=1$,而$b=w_0*x_0$，b是偏置(bias)，w为权重weight，下面为了推导的方便，我们将w_0并入w中，x_0并入X中

因此模型更为$f(w)=w^T*x$

最小二乘法的损失函数为:

$$L(w)=\sum_{i=1}^{i=n}\|y_i-w^T*x_i\|_2^2 \tag{35}$$

$$= \begin{pmatrix} y_1 - w^T * x_1 & y_2 - w^T * x_2 & \dots & y_n - w^T * x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 - w^T * x_1 \\ y_2 - w^T * x_2 \\ . \\ . \\ . \\ y_n - w^T * x_n \end{pmatrix} \tag{36}$$

$$= (Y^T - w^T * X^T)(Y^T - w^T * X^T)^T \tag{37}$$

$$= (Y^T - w^T * X^T)(Y - X * w) \tag{38}$$

$$= Y^T * Y - w^T * X^T * Y - Y^T * X * w + w^T * X^T * X * w \tag{39}$$

仔细观察发现第二三项是互相转置的，而观察它的矩阵形状: $(1,p)*(p,n)*(n,1)=(1,1)$

得知这两项为标量，而标量的转置还是本身，因此可将两项合并，得

$$L(w) = Y^T * Y - 2 * w^T * X^T * Y + w^T * X^T * X * w \tag{40}$$

因此$\widehat{w} = argmin(L(w))$

下面要求出$L(w)$的最小值，对$L(w)$求导

可以看到式子共三项，第一项与w无关，可以去掉。那么剩余两项就要涉及到矩阵求导了

关于矩阵求导，笔者推荐一位博主的三篇文章(比教科书还详细，严谨，每个公式都有证明)

> 矩阵求导的本质与分子布局、分母布局的本质（矩阵求导——本质篇） - Iterator的文章 - 知乎

> 矩阵求导公式的数学推导（矩阵求导——基础篇） - Iterator的文章 - 知乎

> 矩阵求导公式的数学推导（矩阵求导——进阶篇） - Iterator的文章 - 知乎

下面为上述两项的导数求解过程：

因为X, Y为常数矩阵，因此可直接求出导数，但因为是对w求导，因此要对结果进行转置

$$\frac{d(2 * w^T * X^T * Y)}{dw} = 2 * X^T * Y \tag{41}$$

下面求解第三项

$$d(w^T * X^T * X * w) = tr(d(w^T * X^T * X * w)) = tr(X^T * X * d(w^T * w)) \tag{42}$$

$$= tr(X^T * X * (d(w^T) * w + w^T * d(w))) = tr(X^T * X * w * (dw)^T) + tr(X^T * X * w^T * dw) \tag{43}$$

$$= tr(w^T * X^T * X * dw) + tr(X^T * X * w^T * dw) = tr(2 * X^T * X * w^T * dw) \tag{44}$$

所以

$$\frac{d(w^T * X^T * X * w)}{dw} = 2 * w * X^T * X \tag{45}$$

所以$\frac{dL(w)}{dw} = 2 * X^T * X * w - 2 * X^T * Y$

令导数等于0，得出最小二乘的闭式解：

$$\widehat{w} = (X^T * X)^{-1} * X^T * Y \tag{46}$$

B.几何视角

$$X=(x_1,x_2,...,x_n)^T=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & ... & X_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & ... & x_{2p} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ x_{n1} & x_{n2} & ... & x_{np} \end{pmatrix}_{n*p} \tag{47}$$

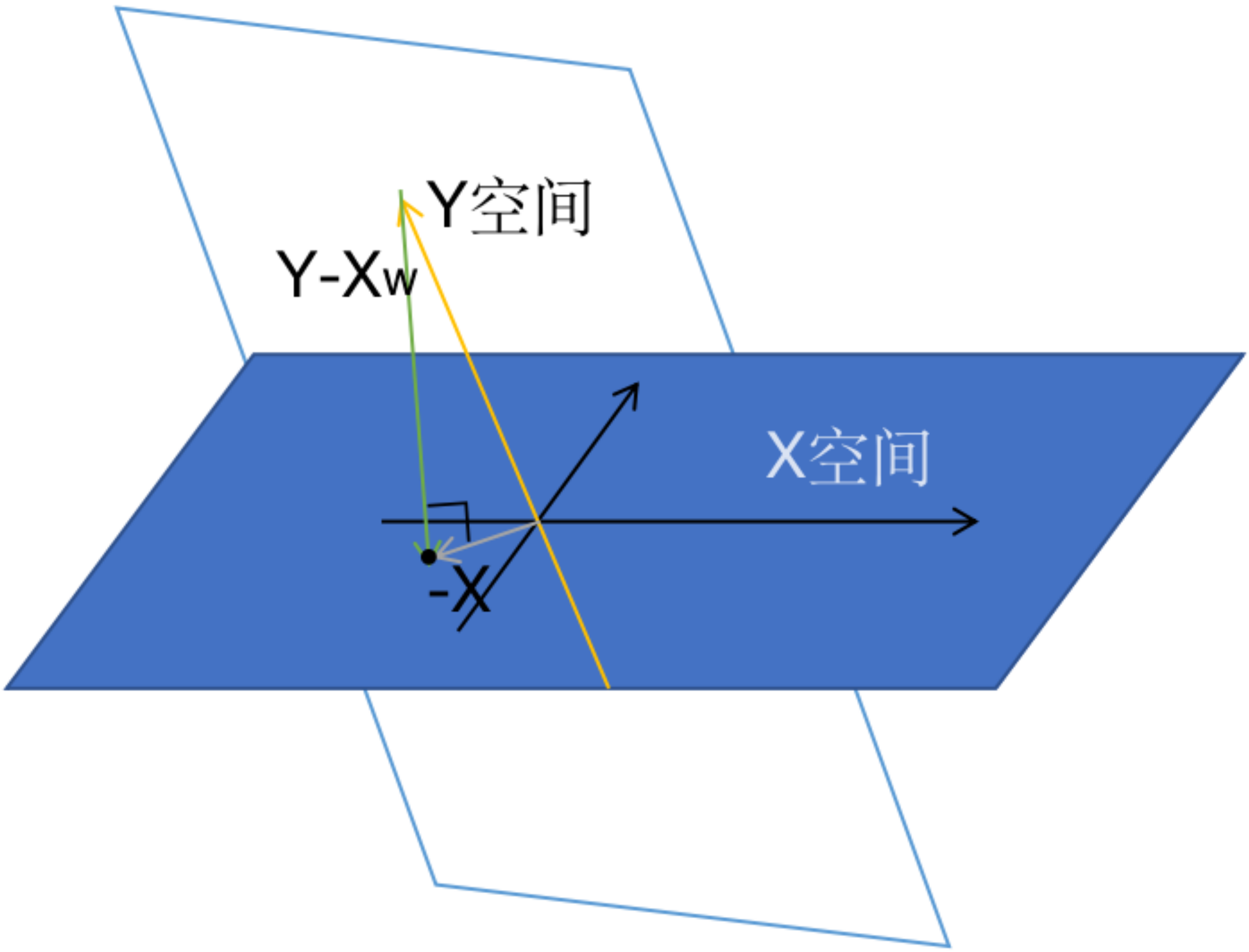
$$Y=(y1,y2,...,y_n)^T_{n*1} \tag{48}$$

在几何视角下，我们将X看作是一个p维的向量

X的第一维是$(x_{11},x_{21},...,x_{n1})$，$X$的第$p$维是$(x_{1p},x_{2p},...,x_{np})$

而这里的Y被看作是一个一维的向量

现在我们假设$p=2$，因为比较好画。示意图如下（俺真的画了好久，观众老爷们给波三连吧～～）



将模型改为$f(w)=Xw$，意为对X向量施以w权重的放缩

而最小二乘的几何意义就是找到一个w，使得$Y-Xw$这个向量到X空间的距离最小，那最小的情况当然就是与X空间垂直

所以我们有式子$X^T*(Y-Xw)=0$

从而求解w:

$$X^T * X * w = X^T * Y \tag{49}$$
$$\widehat{w} = (X^T * X)^{-1} * X^T * Y \tag{50}$$

可以看到求出的w与矩阵视角的结果相同。

C.概率视角

首先明确，现实中是很难用一条直线去拟合分布的。真实的数据必然存在一定的随机性，也就是噪声。

因此我们假设噪声$\epsilon \backsim N(0, \sigma^2)$

所以$y = f(w) + \epsilon = w^T * x + \epsilon$

所以$y|x; w \backsim N(w^T * x, \sigma^2)$

带入高斯分布的概率密度函数:

$$p(y|x; w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} * \sigma} * e^{-\frac{(y - w^T * x)^2}{2\sigma^2}} \tag{51}$$

下面使用MLE(极大似然估计):

注：所谓极大似然估计，即通过大量的采样得到相对频率，去逼近概率

我们设一个函数$\zeta(w) = \log p(Y|X; w)$

因为n个数据之间是独立的，因此可以将概率改为连乘的形式。

$\zeta(w) = \log \Pi_{i=1}^n p(y_i|x_i; w) = \Sigma_{i=1}^n \log p(y_i|x_i; w)$

将高斯分布的概率密度函数带入式子:

$\zeta(w) = \Sigma_{i=1}^n (\log \frac{1}{\sqrt{2\pi} * \sigma} - \frac{(y - w^T * x)^2}{2\sigma^2})$

因为前一项与w无关，所以可以忽略

所以:

$$\widehat{w} = argmax \zeta(w) \tag{52}$$
$$= argmax \Sigma_{i=1}^n - \frac{(y - w^T * x)^2}{2\sigma^2} \tag{53}$$
$$= argmin \Sigma_{i=1}^n (y - w^T * x)^2 \tag{54}$$

而使用极大似然估计得到的结论正是最小二乘法的定义。

这也恰好说明，最小二乘法隐藏着一个噪声为高斯分布的假设。

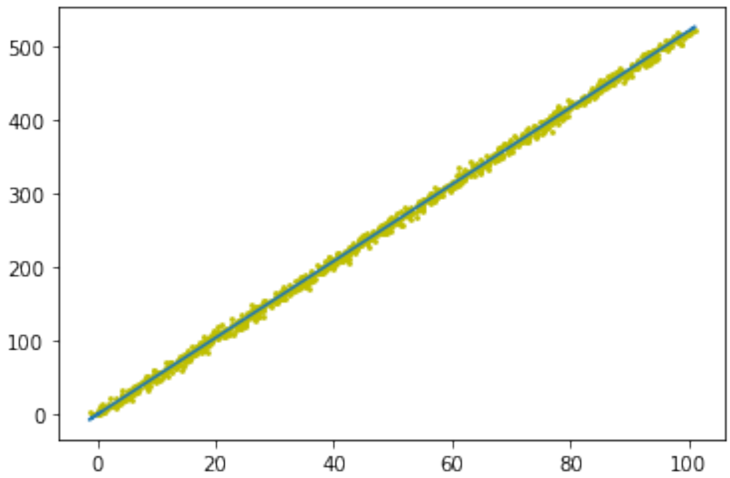
Implement（实作）

```
%matplotlib inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# 样本数
n = 1000
```

```python
# 噪声
epsilon = 1
X = np.expand_dims(np.linspace(0,100,1000), axis=-1)
w = np.asarray([5.2])
Y = X * w
# 增加噪声扰动
X += np.random.normal(scale=epsilon, size=(X.shape))
X_T = X.transpose()
w_hat = np.matmul(np.linalg.pinv((np.matmul(X_T, X))), np.matmul(X_T, Y))
print(w_hat)
plt.scatter(X, Y, s=3, c="y")
Y_hat = X * w_hat
plt.plot(X, Y_hat)
plt.show()
```

```
[[5.1992704]]
```



2.Algorithm（算法）

带正则化

A.矩阵视角

首先给出带正则项的新损失函数：

$$\zeta(w) = \Sigma_{i=1}^{n}||y_i - w^T * x_i||^2 + \lambda * ||w||^2 \tag{55}$$

然后引用不带正则化的矩阵视角的损失函数的推导形式：

$$\zeta(w) = Y^T * Y - 2 * w^T * X^T * Y + w^T * X^T * X * w + \lambda * ||w||^2 \tag{56}$$

所以$\widehat{w} = argmax(\zeta(w))$

对$\zeta(w)$求导，得到：

$$\frac{\partial \zeta(w)}{\partial w} = 2 * X^T * X * w - 2 * X^T * Y + 2\lambda * w \tag{57}$$

令导数为0，得到带正则化的最小二乘法的闭式解：

$$\widehat{w} = (X^T * X + \lambda * I)^{-1} * X^T * Y \tag{58}$$

I为单位矩阵

B.概率视角

假设噪声$\epsilon \backsim N(0,\sigma_1^2)$

$w \backsim N(0,\sigma_2^2)$

因为$y = w^T * x + \epsilon$

所以$y|w \backsim N(w^T * x, \sigma_1^2)$

下面我们使用MAP（最大后验估计）：
由贝叶斯定理得：

$$P(w|Y) = \frac{P(Y|w) * P(w)}{P(Y)} \tag{59}$$

其中$P(w)$为先验概率，$P(Y|w)$为似然概率，$P(Y)$为归一化概率，先验概率乘似然概率并归一化得到后验概率$P(w|Y)$

其中$P(Y)$实际上为常数，因此：

$$\widehat{w} = argmax(P(w|Y)) = argmax(P(Y|w) * P(w)) = argmax(log(P(Y|w) * P(w))) \tag{60}$$

因为每个样本间是独立的，因此可以将概率连乘

$$= argmax(log(\prod_{i=1}^{n} P(y_i|w) * P(w))) = argmax(\sum_{i=1}^{n} log(P(y_i|w) + log(P(w)))) \tag{61}$$

带入高斯分布的概率密度函数，得到:

$$\widehat{w} = argmax(\sum_{i=1}^{n} log(\frac{1}{\sqrt{2\pi} * \sigma_1}) - \frac{(y_i - w^T * x_i)^2}{2\sigma_1^2} + log(\frac{1}{\sqrt{2\pi} * \sigma_2}) - \frac{w^2}{2\sigma_2^2}) \tag{62}$$

因为σ_1, σ_2都为超参数，因此可以省略

所以：

$$\widehat{w} = argmin(\sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - w^T * x_i)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{w^2}{2\sigma_2^2}) \tag{63}$$

$$= argmin(\sum_{i=1}^{n} (y_i - w^T * x_i)^2 + \frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2} * w^2) \tag{64}$$

可以看到，使用MAP推导出的结果正是带正则项的最小二乘的定义

Implement（实现）

带正则项

```
import os
os.chdir("../")
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from models.linear_models import LinearRegression
```

```
X_ = np.expand_dims(np.linspace(0, 10, 1000), axis=-1)
X = np.c_[X_, np.ones(1000)]
w = np.asarray([5.2, 1])
Y = X.dot(w)
X = np.r_[X, np.asarray([[11, 1], [12, 1], [13, 1]])]
Y = np.r_[Y, np.asarray([100, 110, 120])]

model = LinearRegression(l2_ratio=1e1, epoch_num=1000, lr=1e-2, batch_size=100,
if_standard=False)
model.fit(X[:, :-1], Y)
print(model.get_params())
model.draw(X[:, :-1], Y)
```

```
([[5.213677612426203]], [0.9234839073187315])
```