0.1 不带正则项的线性回归

0.1.1 摘要

你好，我是生而为弟。
在学习 NLP 的过程中，我对于公式的推导完全不会，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。

0.1.2 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。

0.1.3 算法

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 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2)...(x_n, y_n)\}$
其中 $x_i \in R^p$ $y_i \in R$ $i = 1, 2, ..., n$

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

$$Y = (y1, y2, ..., y_n)^T_{n1}$$

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 $f(w)=w^Tx$ 最小二乘法的损失函数为:

$$L(w)=\sum_{i=1}^{i=n}\|y_i-w^Tx_i\|_2^2$$

$$=\begin{pmatrix}y_1-w^Tx_1 & y_2-w^Tx_2 & ... & y_n-w^Tx_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1-w^Tx_1\\ y_2-w^Tx_2\\ .\\ .\\ .\\ y_n-w^Tx_n\end{pmatrix}$$

$$=(Y^T-w^TX^T)(Y^T-w^TX^T)^T$$
$$=(Y^T-w^TX^T)(Y-Xw)$$
$$=Y^TY-w^TX^TY-Y^TXw+w^TX^TXw$$

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

$$L(w)=Y^TY-2w^TX^TY+w^TX^TXw$$

因此 $\hat{w}=argmin(L(w))$ 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——本质篇
- 矩阵求导——基础篇
- 矩阵求导——进阶篇

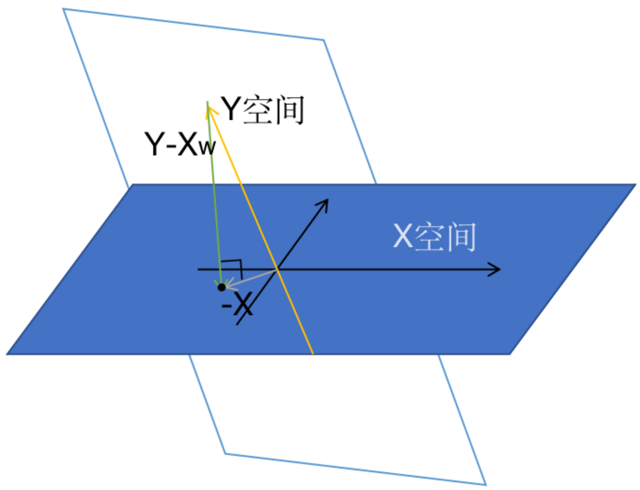
下面为上述两项的导数求解过程:
因为 X,Y 为常数矩阵，因此可直接求出导数，但因为是对 w 求导，因此要对结果进行转置

$$\frac{d(2w^TX^TY)}{dw}=2X^TY$$

下面求解第三项

$$d(w^TX^TXw)=tr(d(w^TX^TXw))=tr(X^TXd(w^Tw))$$

$$=tr(X^TX(d(w^T)w+w^Td(w)))=tr(X^TXw(dw)^T)+tr(X^TXw^Tdw)$$
$$=tr(w^TX^TXdw)+tr(X^TXw^Tdw)=tr(2X^TXw^Tdw)$$



所以

$$\frac{d(w^TX^TXw)}{dw} = 2wX^TX$$

所以 $\frac{dL(w)}{dw} = 2X^TXw - 2X^TY$
令导数等于 0，得出最小二乘的闭式解：

$$\hat{w} = (X^TX)^{-1}X^TY$$

B. 几何视角

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

$$Y = (y1, y2, ..., y_n)^T_{n1}$$

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:

$$X^TXw=X^TY$$
$$\hat{w}=(X^TX)^{-1}X^TY$$

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 $y=f(w)+\epsilon=w^Tx+\epsilon$
所以 $y|x;w \backsim N(w^Tx,\sigma^2)$
带入高斯分布的概率密度函数:

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

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 $\mathcal{L}(w)=\log p(Y|X;w)$
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。
$\mathcal{L}(w)=\log\Pi_{i=1}^n p(y_i|x_i;w)=\Sigma_{i=1}^n\log p(y_i|x_i;w)$
将高斯分布的概率密度函数带入式子:
$\mathcal{L}(w)=\Sigma_{i=1}^n(\log\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}-\frac{(y-w^Tx)^2}{2\sigma^2})$
因为前一项与 w 无关，所以可以忽略
所以:

$$\begin{aligned}\hat{w}&=argmax\mathcal{L}(w)\\&=argmax\Sigma_{i=1}^n-\frac{(y-w^Tx)^2}{2\sigma^2}\\&=argmin\Sigma_{i=1}^n(y-w^Tx)^2\end{aligned}$$

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。

0.1.4 实作

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

# 样本数
n = 1000
# 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()
```

0.2 带正则化的线性回归

0.2.1 矩阵视角

首先给出带正则项的新损失函数:

$$\mathcal{L}(w) = \Sigma_{i=1}^{n}||y_i - w^T x_i||^2 + \lambda||w||^2$$

然后引用不带正则化的矩阵视角的损失函数的推导形式:

$$\mathcal{L}(w) = Y^T Y - 2w^T X^T Y + w^T X^T X w + \lambda||w||^2$$

所以 $\hat{w} = argmax(\mathcal{L}(w))$
对 $\mathcal{L}(w)$ 求导，得到:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(w)}{\partial w} = 2X^T X w - 2X^T Y + 2\lambda w$$

令导数为 0，得到带正则化的最小二乘法的闭式解:

$$\hat{w} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y$$

I 为单位矩阵

0.2.2 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:

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

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:

$$\hat{w} = argmax(P(w|Y)) = argmax(P(Y|w)P(w)) = argmax(log(P(Y|w)P(w)))$$

因为每个样本间是独立的，因此可以将概率连乘

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

带入高斯分布的概率密度函数，得到:

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

因为 σ_1, σ_2 都为超参数，因此可以省略
所以:

$$
\begin{aligned}
\hat{w} &= argmin(\sum_{i=1}^{n}\frac{(y_i - w^T x_i)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{w^2}{2\sigma_2^2}) \\
&= argmin(\sum_{i=1}^{n}(y_i - w^T x_i)^2 + \frac{\sigma_1^2}{\sigma_2^2}w^2)
\end{aligned}
$$

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

0.2.3 实作

```python
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,
model.fit(X[:, :-1], Y)
print(model.get_params())
model.draw(X[:, :-1], Y)
```