1.6 线性回归模型
——优化算法

CSDN学院

线性回归

- 模型
  - 目标函数（损失函数、正则）
    - 概率解释
- 优化求解
- 模型选择

线性回归的目标函数

- 无正则的最小二乘线性回归（Ordinary Least Square，OLS）

$$J(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i\right)^2$$

- L2正则的岭回归（Ridge Regression）模型：

$$J(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i\right)^2+\lambda\|\mathbf{w}\|_2^2$$

- L1正则的Lasso模型：

$$J(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i\right)^2+\lambda|\mathbf{w}|$$

模型训练

- 模型训练：根据训练数据求目标函数取极小值的参数

$$\hat{\mathbf{w}} = \arg\min_{\mathbf{w}} J(\mathbf{w})$$

- 目标函数极小值
  - 一阶的导数为0：$\frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = 0$
  - 二阶导数>0：$\frac{\partial J^2(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}^2} > 0$

OLS的优化求解

- 将OLS的目标函数写成矩阵形式

$$J(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i\right)^2=\left(\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w}\right)^T\left(\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w}\right)$$

- 只取与w有关的项，得到

$$J(\mathbf{w})=\mathbf{w}^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)\mathbf{w}-2\mathbf{w}^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}\left(\mathbf{y}^T\mathbf{A}\mathbf{y}\right)=\left(\mathbf{A}+\mathbf{A}^T\right)\mathbf{y}$$

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{a}}\left(\mathbf{b}^T\mathbf{a}\right)=\mathbf{b}$$

- 求导

$$\frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial\mathbf{w}}=2\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w}-2\mathbf{X}^T\mathbf{y}=0\quad\Rightarrow\quad\mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w}=\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{OLS}=(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

(ordinary least squares, OLS)

通常通过奇异值分解（singular value decomposition，SVD）求解

OLS优化求解——SVD

- SVD：scikit-learn采用的方式 $\min\left(\left(ND^2+D^3\right),\left(DN^2+N^3\right)\right)$

对X进行奇异值分解：$\mathbf{X}=\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T$

$\mathbf{U}^T\mathbf{U}=\mathbf{I}_N$ 列正交

$\mathbf{V}\mathbf{V}^T=\mathbf{V}^T\mathbf{V}=\mathbf{I}_D$ 行、列均正交

从而：

$$\mathbf{X}^T=\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{U}^T$$
$$\mathbf{X}^T\mathbf{X}=\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{U}^T\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T=\boldsymbol{\Sigma}^2$$

OLS解：

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{w}}_{OLS}&=(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}\\&=(\boldsymbol{\Sigma}^2)^{-1}\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{U}^T\mathbf{y}\\&=\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{U}^T\mathbf{y}\end{aligned}$$

OLS优化求解——梯度下降

- 梯度下降的基本步骤
- 1. 确定学习率η，并初始化参数值为$\boldsymbol{\theta}^0$
- 2. 计算目标函数$J(\boldsymbol{\theta})$在当前参数值的梯度：$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial J(\boldsymbol{\theta}^t)}{\partial \boldsymbol{\theta}}$
- 3. 梯度下降更新参数：

$$\boldsymbol{\theta}^{t+1} = \boldsymbol{\theta}^t - \eta \nabla_{\boldsymbol{\theta}}$$

- 重复以上步骤，直到收敛
  - 目标函数的下降量小于某个阈值

- OLS

目标函数：

$$J(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N} \left(f(\mathbf{x}_i) - y_i \right)^2$$

梯度：

$$g(\mathbf{w}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} J(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{N} 2\left(f(\mathbf{x}_i) - y_i \right) \mathbf{x}_i$$

参数更新：

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{t+1} &= \mathbf{w}^t - \eta \nabla_{\mathbf{w}} \\ &= \mathbf{w}^t - 2\eta \mathbf{X}^T (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) \\ &= \mathbf{w}^t + 2\eta \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(\mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i \end{aligned}$$

岭回归的优化求解

- 岭回归的目标函数与OLS只相差一个正则项（也是w的二次函数），所以类似可得：

$$J(\mathbf{w})=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i\right)^2+\lambda\|\mathbf{w}\|_2^2=(\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w})^T(\mathbf{y}-\mathbf{X}\mathbf{w})+\lambda\mathbf{w}^T\mathbf{w}$$

- 求导，得到

$$\frac{\partial J(\mathbf{w})}{\partial\mathbf{w}}=2\mathbf{w}^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}\right)\mathbf{w}-2\mathbf{w}^T\left(\mathbf{X}^T\mathbf{y}\right)+2\lambda\mathbf{w}^T=0$$

$$\hat{\mathbf{w}}_{ridge}=\left(\mathbf{X}^T\mathbf{X}+\lambda\mathbf{I}_D\right)^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Lasso的优化条件

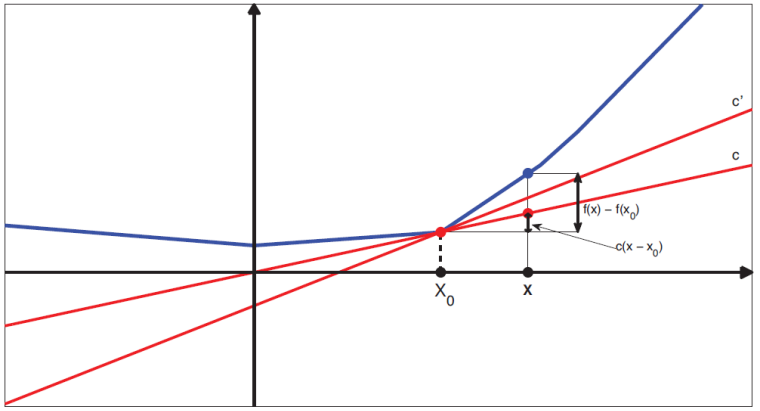
- Lasso的目标函数为$J(\mathbf{w},\lambda)=RSS(\mathbf{w})+\lambda\|\mathbf{w}\|_1$
- 但项 $\|\mathbf{w}\|_1$ 在 $w_j=0$ 处不可微（不平滑优化问题）

- 为了处理不平滑函数，扩展导数的表示，定义一个(凸)函数f在点x_0处的次梯度(subgradient)为一个标量g，使得

$$f(x)-f(x_0)\geq g(x-x_0),\forall x\in\mathcal{I}$$

- 其中$\mathcal{I}$为包含x_0的某个区间。
- 定义区间[a,b]的子梯度集合为

$$a=\lim_{x\to x_0^-}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0},b=\lim_{x\to x_0^+}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$$



Lasso的优化条件

- 所有次梯度的区间称为函数 f 在 x_0 处的次微分(subdifferential)，用 $\partial f(x)|_{x_0}$ 表示
- 例：绝对值函数 $f(x)=|x|$，其次梯度为

$$\partial f(x)=\begin{cases}\{-1\} & if\ x<0\\ [-1,+1] & if\ x=0\\ \{+1\} & if\ x>0\end{cases}$$

- 如果函数处处可微，$\partial f(x)=\left\{\frac{df(x)}{dx}\right\}$
- 同标准的微积分类似，可以证明当且仅当 $0\in\partial f(x)|_{\hat{x}}$ 时，为 f 的局部极值点。

Lasso的优化条件

- 将上述结论带入Lasso问题
- 目标函数为：$J(\mathbf{w},\lambda)=RSS(\mathbf{w})+\lambda\|\mathbf{w}\|_1=\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}_i^T\mathbf{x}_i\right)^2+\lambda\|\mathbf{w}\|_1$
- 可微项的梯度：

$$\frac{\partial}{\partial w_j}RSS(\mathbf{w})=\frac{\partial}{\partial w_j}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\left(\mathbf{w}_{-j}^T\mathbf{x}_{i,-j}+w_jx_{ij}\right)\right)^2$$

$$=-2\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}_{-j}^T\mathbf{x}_{i,-j}-w_jx_{ij}\right)x_{ij}$$

$$=2\sum_{i=1}^{N}x_{ij}^2w_j-2\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\mathbf{w}_{-j}^T\mathbf{x}_{i,-j}\right)x_{ij}$$

$$=a_jw_j-c_j$$

$$a_j=2\sum_{i=1}^{N}x_{ij}^2$$

$$c_j=2\sum_{i=1}^{N}x_{ij}\left(y_i-\mathbf{w}_{-j}^T\mathbf{x}_{i,-j}\right)$$

第*j*维特征与残差的相关性

利用*D-j* 维特征得到的预测的残差

Lasso的优化条件

- 目标函数的次梯度(subgradient)

$$\partial_{w_j} J(\mathbf{w},\lambda) = (a_j w_j - c_j) + \lambda \partial_{w_j} \|\mathbf{w}\|_1$$

$$= \begin{cases} \{a_j w_j - c_j - \lambda\} & if\ w_j < 0 \\ [-c_j - \lambda, -c_j + \lambda] & if\ w_j = 0 \\ \{a_j w_j - c_j + \lambda\} & if\ w_j > 0 \end{cases}$$

Lasso的优化条件

- 当0属于目标函数的子梯度时，目标函数取极小值

目标函数的次梯度

$$\partial_{w_j} J(\mathbf{w},\lambda) = (a_j w_j - c_j) + \lambda \partial_{w_j} \|\mathbf{w}\|_1$$

$$= \begin{cases} \{a_j w_j - c_j - \lambda\} & if\ w_j < 0 \\ [-c_j - \lambda, -c_j + \lambda] & if\ w_j = 0 \\ \{a_j w_j - c_j + \lambda\} & if\ w_j > 0 \end{cases}$$

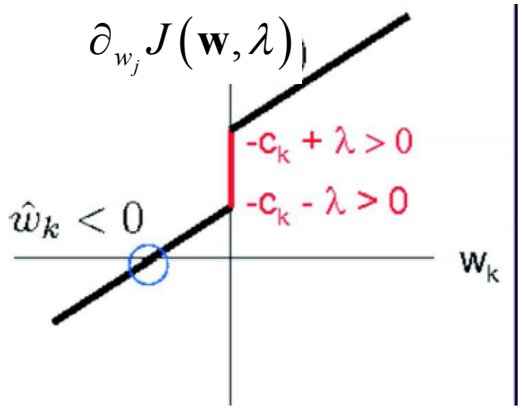
最优解：

$$\hat{w}_j(c_j) = \begin{cases} (c_j + \lambda)/a_j & if\ c_j < -\lambda \\ 0 & if\ c_j \in [-\lambda, \lambda] = \text{soft}\left(\frac{c_j}{a_j}; \frac{\lambda}{a_j}\right) \\ (c_j - \lambda)/a_j & if\ c_j > \lambda \end{cases}$$

$$\text{soft}(a;\delta) = \text{sign}(a)(|a| - \delta)_+$$

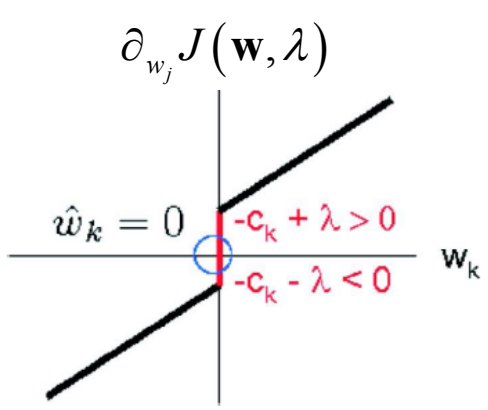
Lasso的优化条件

- 根据c_j的不同，$\partial_{w_j} J(\mathbf{w},\lambda)=0$有三种情况



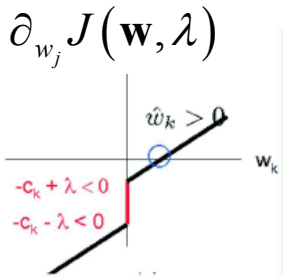
$c_j < -\lambda, \hat{w}_j = \dfrac{c_j + \lambda}{a_j}$

特征与残差强负相关



$\hat{w}_j = 0$

特征与残差弱相关('+/-')



$\hat{w}_j = \dfrac{c_j - \lambda}{a_j}$

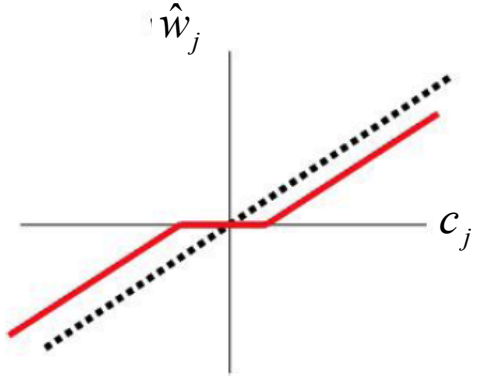
特征与残差强正相关

软 & 硬阈值

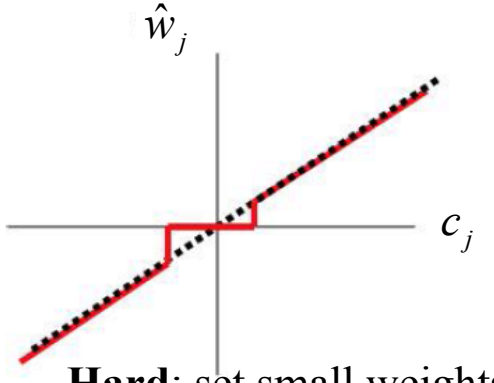
- 软 & 硬阈值

$$\hat{w}_j(c_j) = \begin{cases} (c_j + \lambda)/a_j & if\ c_j < -\lambda \\ 0 & if\ c_j \in [-\lambda, \lambda] = \text{soft}\left(\frac{c_j}{a_j}; \frac{\lambda}{a_j}\right) \\ (c_j - \lambda)/a_j & if\ c_j > \lambda \end{cases}$$

$$\text{soft}(a;\delta) = \text{sign}(a)(|a| - \delta)_+$$



Soft: set small weights to zero and "shrink" all other weights.
Biased estimator



Hard: set small weights to zero without "shrinking" all other weights.
Unbiased estimator

Lasso 优化求解——坐标轴下降法

- 预计算 $a_j = 2\sum_{i=1}^{N} x_j^2$
- 初始化参数**w**（全0或随机）
  循环直到收敛:
  - for $j = 0,1,\ldots D$
    - 计算 $c_j = 2\sum_{i=1}^{N} x_j (y_i - \mathbf{w}_{-j}^T \mathbf{x}_{i,-j})$
    - 更新w_j：$\hat{w}_j(c_j) = \begin{cases} (c_j + \lambda)/a_j & if\ c_j < -\lambda \\ 0 & if\ c_j \in [-\lambda, \lambda] = \text{soft}\left(\frac{c_j}{a_j}; \frac{\lambda}{a_j}\right) \\ (c_j - \lambda)/a_j & f\ c_j > \lambda \end{cases}$
  - 选择变化幅度最大的维度进行更新

坐标轴下降法

- 为了找到一个函数的局部极小值，在每次迭代中可以在当前点处沿一个坐标方向进行一维搜索。
- 整个过程中循环使用不同的坐标方向。一个周期的一维搜索迭代过程相当于一个梯度迭代。

- 注意：
  - 梯度下降方法是利用目标函数的导数（梯度）来确定搜索方向的，而该梯度方向可能不与任何坐标轴平行。
  - 而坐标轴下降法是利用当前坐标系统进行搜索，不需要求目标函数的导数，只按照某一坐标方向进行搜索最小值。（在稀疏矩阵上的计算速度非常快，同时也是Lasso回归最快的解法）

小结

- 线性回归模型比较简单
  - 当数据规模较小时，可直接解析求解
    - scikit learn中的实现采用SVD分解实现
  - 当数据规模较大时，可采用随机梯度下降
    - Scikit learn提供一个SGDRegression类
- 岭回归求解类似OLS，采用SVD分解实现
- Lasso优化求解采用坐标轴下降法