北风网
IBEIFENG.COM

人工智能之机器学习

回归算法

上海育创网络科技股份有限公司

主讲人：刘老师(GerryLiu)

课程要求

- 课上课下“九字”真言
  - 认真听，善摘录，勤思考
  - **多温故，乐实践**，再发散
- 四不原则
  - 不懒散惰性，不迟到早退
  - 不请假旷课，不拖延作业
- 一点注意事项
  - 违反“四不原则”，不推荐就业

课程内容

- 线性回归算法
- 多项式回归算法
- 正则化
- Logistic回归算法
- Softmax回归算法
- 梯度下降
- 特征抽取
- 线性回归案例

什么是回归算法

- 回归算法是一种有监督算法
- 回归算法是一种比较常用的机器学习算法，用来建立“解释”变量(自变量X)和观测值(因变量Y)之间的关系；从机器学习的角度来讲，用于构建一个算法模型(函数)来做属性(X)与标签(Y)之间的映射关系，在算法的学习过程中，试图寻找一个函数 $h: R^d -> R$ 使得参数之间的关系**拟合性**最好。
- 回归算法中算法(函数)的最终结果是一个**连续**的数据值，输入值(属性值)是一个d维度的属性/数值向量

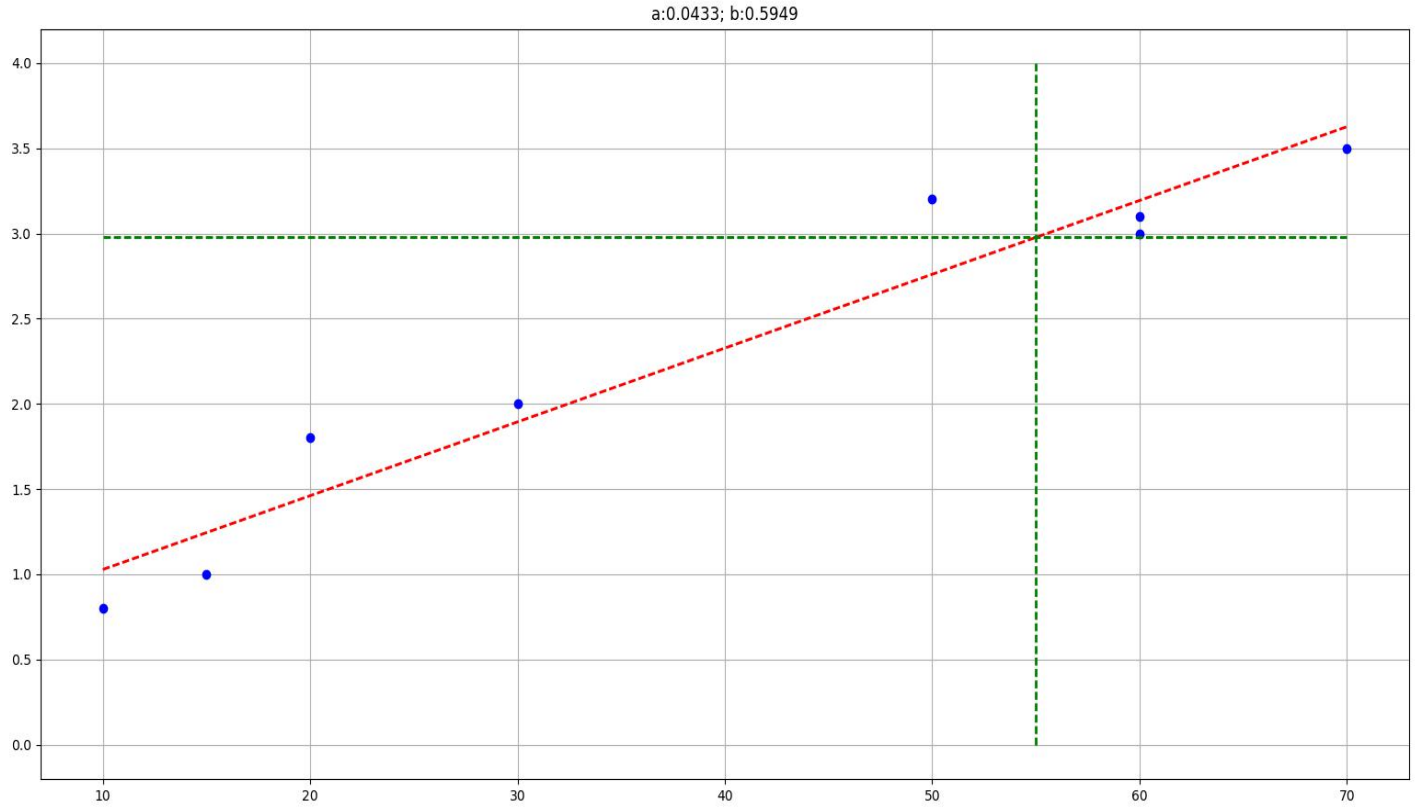
线性回归

- 认为数据中存在线性关系，也就是特征属性X和目标属性Y之间的关系是满足线性关系。
- 在线性回归算法中，找出的模型对象是期望所有训练数据比较均匀的分布在直线或者平面的两侧。
- 在线性回归中，最优模型也就是所有样本(训练数据)离模型的直线或者平面距离最小。

线性回归

- y=ax+b

房屋面积(m^2)	租赁价格(1000￥)
10	0.8
15	1
20	1.8
30	2
50	3.2
60	3
60	3.1
70	3.5



回归算法理性认知

- 房价的预测

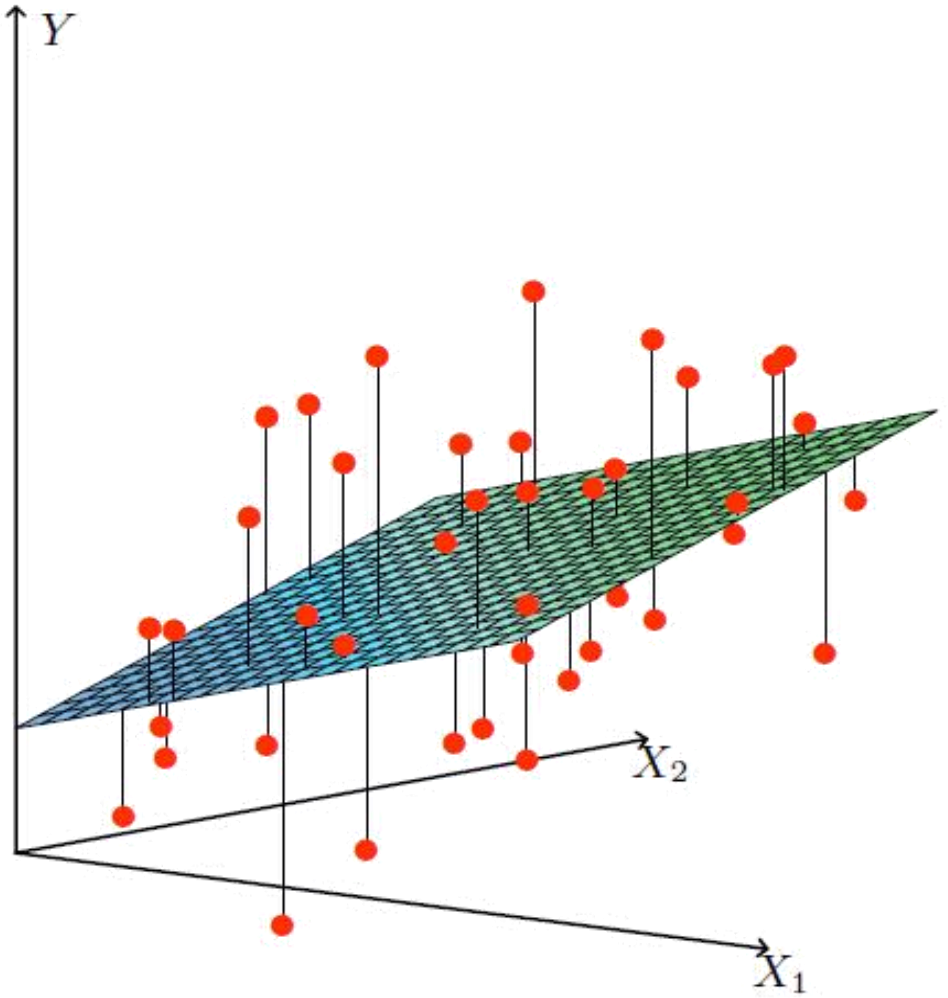
房屋面积(m^2)	租赁价格(1000￥)
10	0.8
15	1
20	1.8
30	2
50	3.2
60	3
60	3.1
70	3.5

- 请问，如果现在有一个房屋面积为55平，请问最终的租赁价格是多少比较合适?

线性回归

$$h(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$

房屋面积	房间数量	租赁价格
10	1	0.8
20	1	1.8
30	1	2.2
30	2	2.5
70	3	5.5
70	2	5.2
.....	.....	.....



线性回归

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n$$

$$= \theta_0 1 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n$$

$$= \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \cdots + \theta_n x_n$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \theta_i x_i = \theta^T x$$

- 最终要求是计算出 θ 的值，并选择最优的 θ 值构成算法公式

线性回归、最大似然估计及二乘法

$$y^{(i)} = \theta^T x^{(i)} + \varepsilon^{(i)}$$

- 误差 $\varepsilon^{(i)}(1 \le i \le n)$ 是独立同分布的，服从均值为0，方差为某定值 σ^2 的**高斯分布**。
  - 原因：**中心极限定理**
- 实际问题中，很多随机现象可以看做**众多因素**的独立影响的综合反应，往往服从正态分布

最小二乘

- 也就是说我们线性回归模型最优的时候是所有样本的预测值和实际值之间的差值最小化，由于预测值和实际值之间的差值存在正负性，所以要求平方后的值最小化。也就是可以得到如下的一个目标函数：

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(\varepsilon^{(i)}\right)^2=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

似然函数

$$y^{(i)} = \theta^T x^{(i)} + \varepsilon^{(i)}$$

$$p\left(\varepsilon^{(i)}\right) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\left(-\frac{\left(\varepsilon^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right)}$$

$$p\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}; \theta\right) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^{m} p\left(y^{(i)} \mid x^{(i)}; \theta\right)$$

$$= \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2}\right)$$

对数似然、目标函数及最小二乘

$$\ell(\theta) = \ln L(\theta)$$

$$= \ln \prod_{i=1}^{m} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2} \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \ln \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2}{2\sigma^2} \right)$$

$$= m \ln \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} - \frac{1}{\sigma^2} \bullet \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - \theta^T x^{(i)}\right)^2$$

$$loss(y_j, \hat{y}_j) = J(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2$$

θ的求解过程

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2=\frac{1}{2}(X\theta-Y)^T(X\theta-Y)\longrightarrow\min_\theta J(\theta)$$

$$\nabla_\theta J(\theta)=\nabla_\theta\left(\frac{1}{2}(X\theta-Y)^T(X\theta-Y)\right)=\nabla_\theta\left(\frac{1}{2}\left(\theta^TX^T-Y^T\right)(X\theta-Y)\right)$$

$$=\nabla_\theta\left(\frac{1}{2}\left(\theta^TX^TX\theta-\theta^TX^TY-Y^TX\theta+Y^TY\right)\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(2X^TX\theta-X^TY-\left(Y^TX\right)^T\right)$$

$$=X^TX\theta-X^TY$$

$$\theta=\left(X^TX\right)^{-1}X^TY$$

最小二乘法的参数最优解

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

- 参数解析式

$$\theta=\left(X^TX\right)^{-1}X^TY$$

- 最小二乘法的使用要求矩阵 X^TX 是可逆的；为了防止不可逆或者过拟合的问题存在，可以增加额外数据影响，导致最终的矩阵是可逆的：

$$\theta=\left(X^TX+\lambda I\right)^{-1}X^Ty$$

- 最小二乘法直接求解的难点：矩阵逆的求解是一个难处

普通最小二乘法线性回归案例

- 现有一批描述家庭用电情况的数据，对数据进行算法模型预测，并最终得到预测模型（每天各个时间段和功率之间的关系、功率与电流之间的关系等）
  - 数据来源: Individual household electric power consumption Data Set
  - 建议：使用python的sklearn库的linear_model中LinearRegression来获取算法

Individual household electric power consumption Data Set

Download: Data Folder, Data Set Description

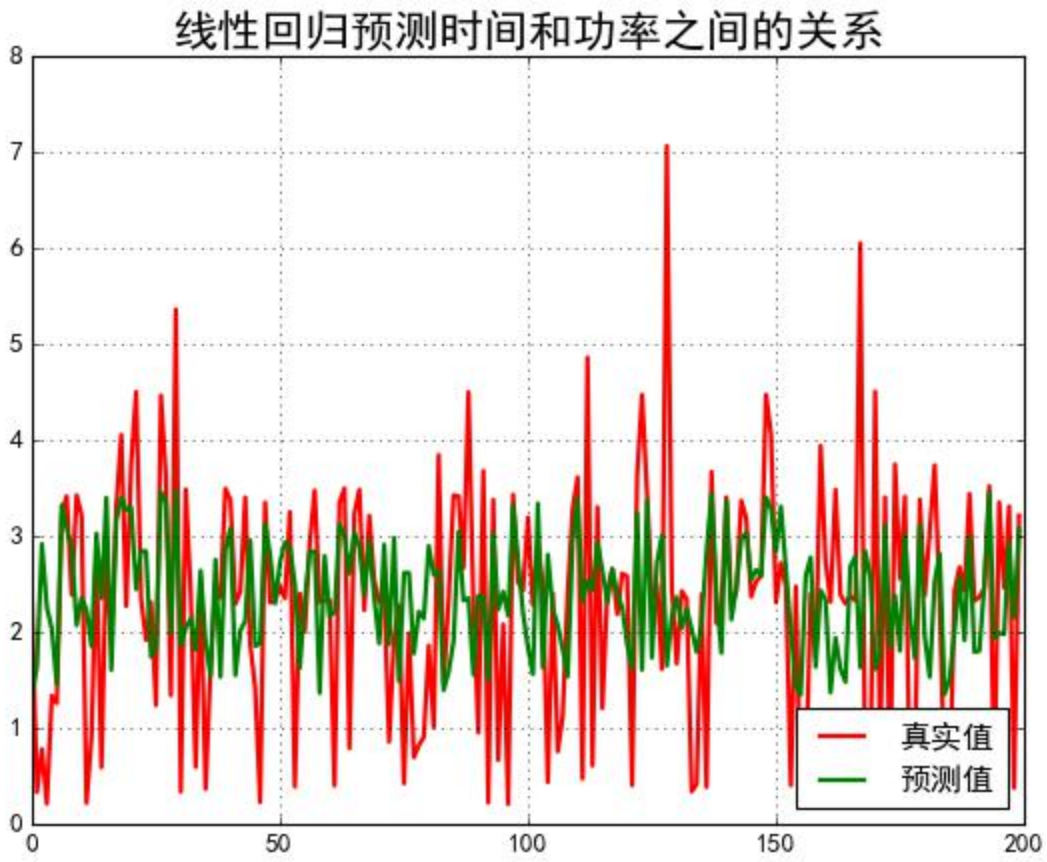
Abstract: Measurements of electric power consumption in one household with a one-minute sampling rate over a period of almost 4 years. Different electrical quantities and some sub-metering values are available.

Data Set Characteristics:	Multivariate, Time-Series	**Number of Instances:**	2075259	**Area:**	Physical
Attribute Characteristics:	Real	**Number of Attributes:**	9	**Date Donated**	2012-08-30
Associated Tasks:	Regression, Clustering	**Missing Values?**	Yes	**Number of Web Hits:**	135342

Attribute Information:

1.date: Date in format dd/mm/yyyy
2.time: time in format hh:mm:ss
3.global_active_power: household global minute-averaged active power (in kilowatt)
4.global_reactive_power: household global minute-averaged reactive power (in kilowatt)
5.voltage: minute-averaged voltage (in volt)
6.global_intensity: household global minute-averaged current intensity (in ampere)
7.sub_metering_1: energy sub-metering No. 1 (in watt-hour of active energy). It corresponds to the kitchen, containing mainly a dishwasher, an oven and a microwave (hot plates are not electric but gas powered).
8.sub_metering_2: energy sub-metering No. 2 (in watt-hour of active energy). It corresponds to the laundry room, containing a washing-machine, a tumble-drier, a refrigerator and a light.
9.sub_metering_3: energy sub-metering No. 3 (in watt-hour of active energy). It corresponds to an electric water-heater and an air-conditioner.

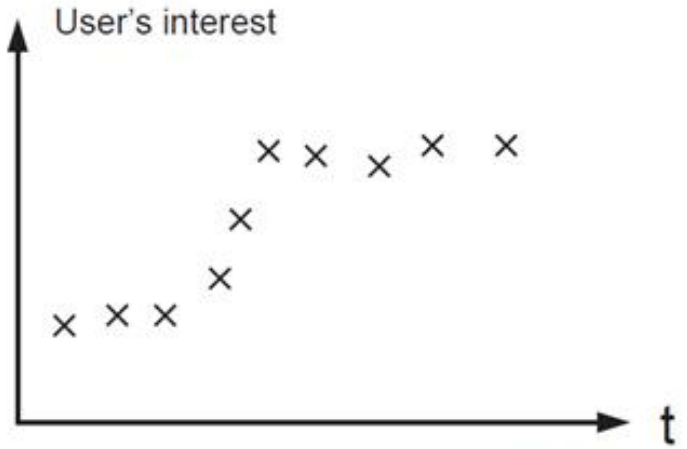
普通最小二乘法线性回归案例



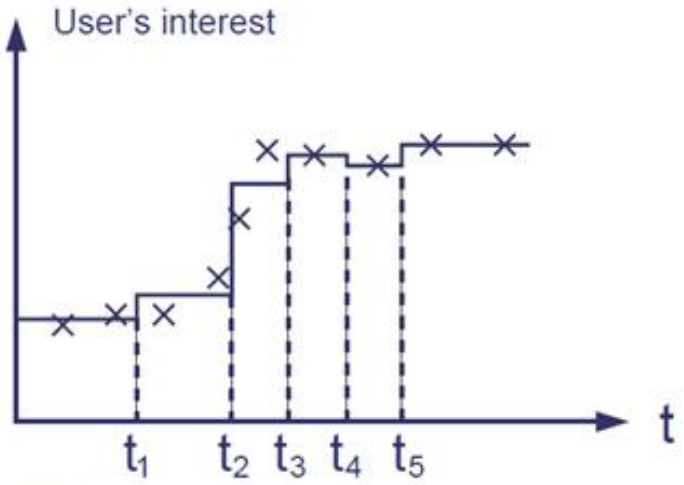
目标函数(loss/cost function)

- 0-1损失函数 $J(\theta)=\begin{cases}1, Y\neq f(X)\\ 0, Y=f(X)\end{cases}$
- 感知器损失函数 $J(\theta)=\begin{cases}1, |Y-f(X)|>t\\ 0, |Y-f(X)|\leq t\end{cases}$
- 平方和损失函数 $J(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$
- 绝对值损失函数 $J(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left|h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right|$
- 对数损失函数 $J(\theta)=-\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}\log h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)$

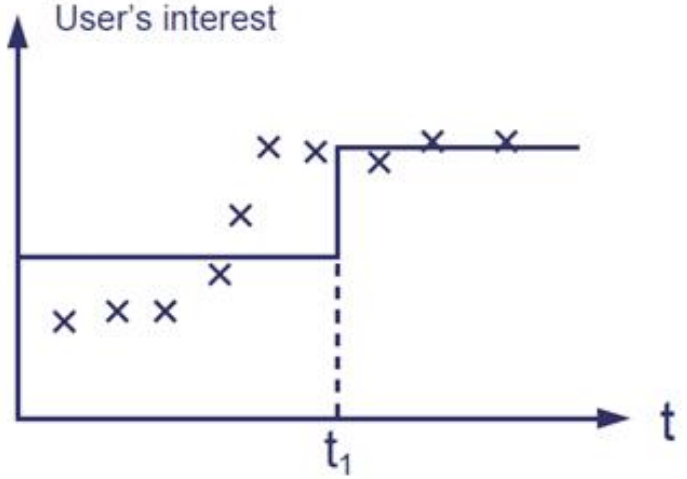
模型



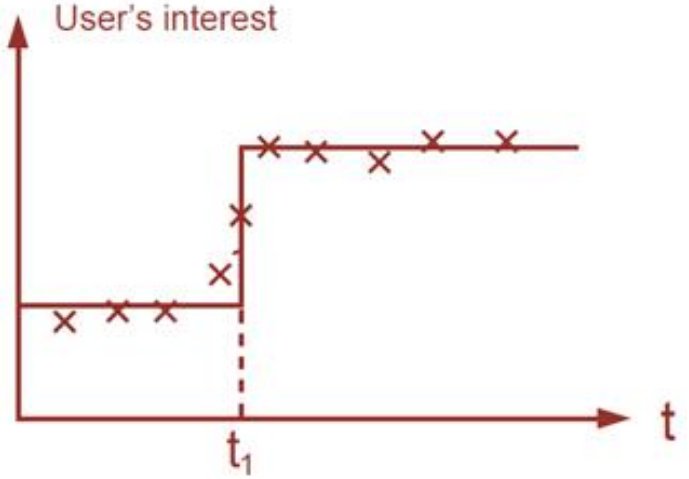
Observed user's interest on topic k against time t



☒ Too many splits, $\Omega(f)$ is high

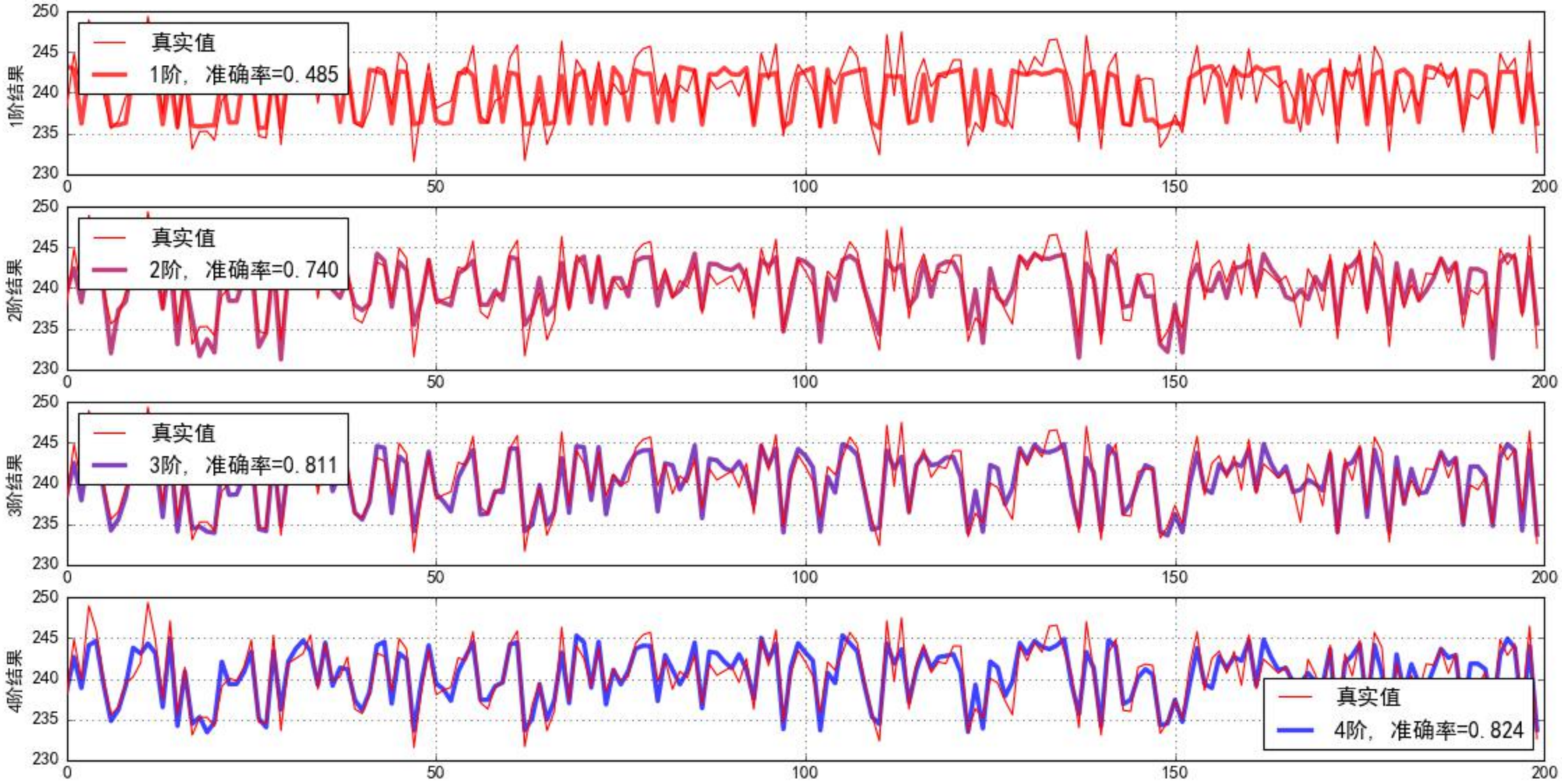


☒ Wrong split point, $L(f)$ is high

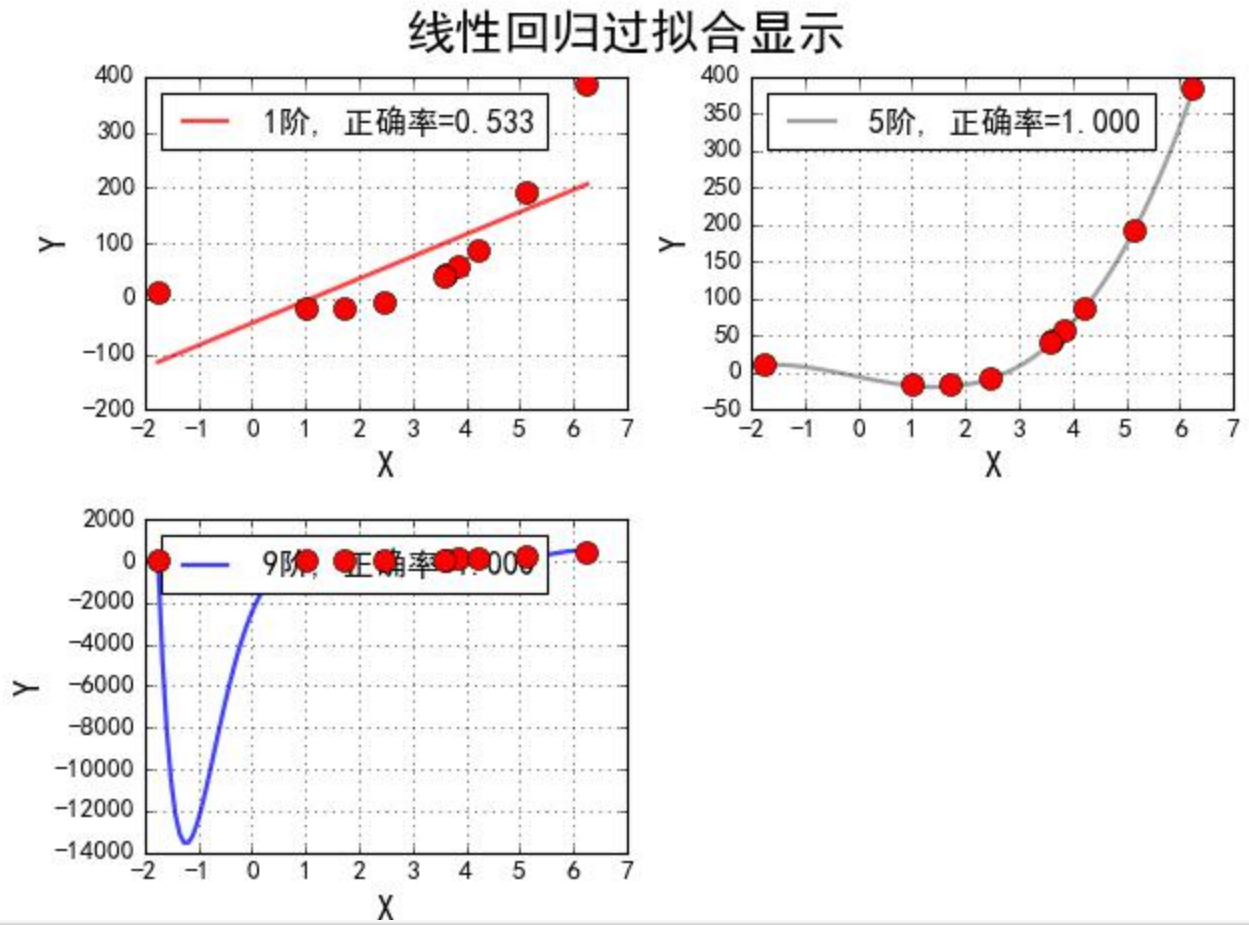


☑ Good balance of $\Omega(f)$ and $L(f)$

多项式线性回归案例


1阶结果
真实值
1阶，准确率=0.485
2阶结果
真实值
2阶，准确率=0.740
3阶结果
真实值
3阶，准确率=0.811
4阶结果
真实值
4阶，准确率=0.824
250
245
240
235
230
0
50
100
150
200

过拟合



结论：不是阶数
越高效果越好

```
1阶，系数为：  [-44.14102611  40.05964256]
5阶，系数为：  [ -5.60899679 -14.80109301   0.75014858   2.11170671  -0.07724668   0.00566633]
9阶，系数为：  [-2465.58378507  6108.6381056  -5111.99327317   974.74973548  1078.89648247  -829.50276827   266.13230319   -45.71741527
  4.11582735    -0.15281063]
```

线性回归的过拟合

- 目标函数：$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$
- 为了防止数据过拟合，也就是的θ值在样本空间中不能过大，可以在目标函数之上增加一个平方和损失：

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2+\lambda\sum_{i=1}^{n}\theta_j^2$$

- **正则项(norm)/惩罚项**：$\lambda\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$；这里这个正则项叫做L2-norm

过拟合和正则项

- L2-norm:

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{i=1}^{n}\theta_j^2 \qquad \lambda > 0$$

- L1-norm:

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\left|\theta_j\right| \qquad \lambda > 0$$

Ridge回归

- 使用L2正则的线性回归模型就称为Ridge回归(岭回归)

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{i=1}^{n}\theta_j^2 \qquad \lambda > 0$$

LASSO回归

- 使用L1正则的线性回归模型就称为LASSO回归(Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\left|\theta_j\right| \qquad \lambda > 0$$

Ridge(L2-norm)和LASSO(L1-norm)比较

- L2-norm中，由于对于各个维度的参数缩放是在一个圆内缩放的，不可能导致有维度参数变为0的情况，那么也就不会产生稀疏解；实际应用中，数据的维度中是存在**噪音**和**冗余**的，稀疏的解可以找到有用的维度并且减少冗余，提高后续算法预测的**准确性**和**鲁棒性**（减少了overfitting）(L1-norm可以达到最终解的**稀疏性**的要求)
- Ridge模型具有较高的准确性、鲁棒性以及稳定性(冗余特征已经被删除了)；LASSO模型具有较高的求解速度。
- 如果既要考虑稳定性也考虑求解的速度，就使用Elasitc Net

Ridge(L2-norm)和LASSO(L1-norm)比较

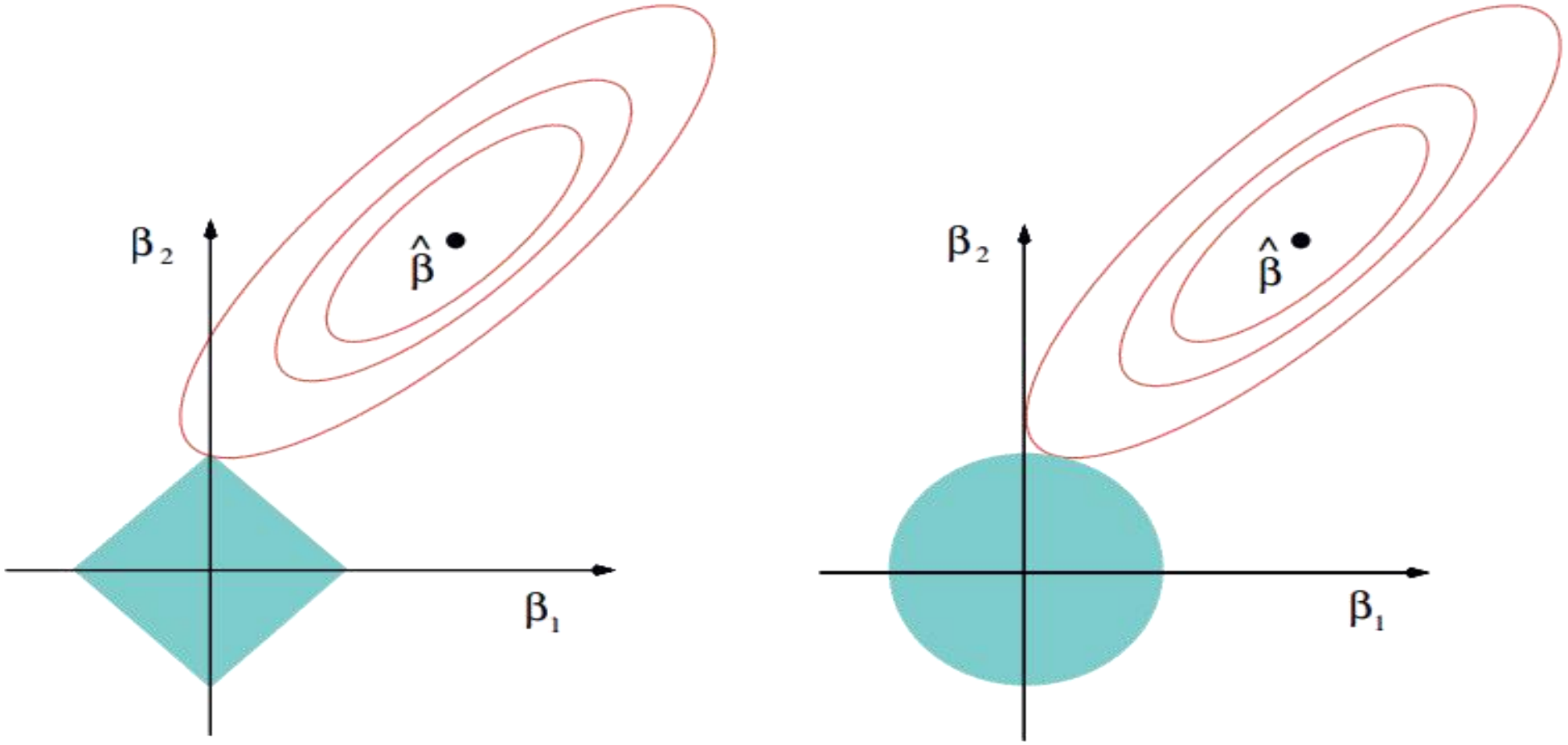


FIGURE 3.11. *Estimation picture for the lasso (left) and ridge regression (right). Shown are contours of the error and constraint functions. The solid blue areas are the constraint regions* $|\beta_1| + |\beta_2| \leq t$ *and* $\beta_1^2 + \beta_2^2 \leq t^2$*, respectively, while the red ellipses are the contours of the least squares error function.*

Elasitc Net

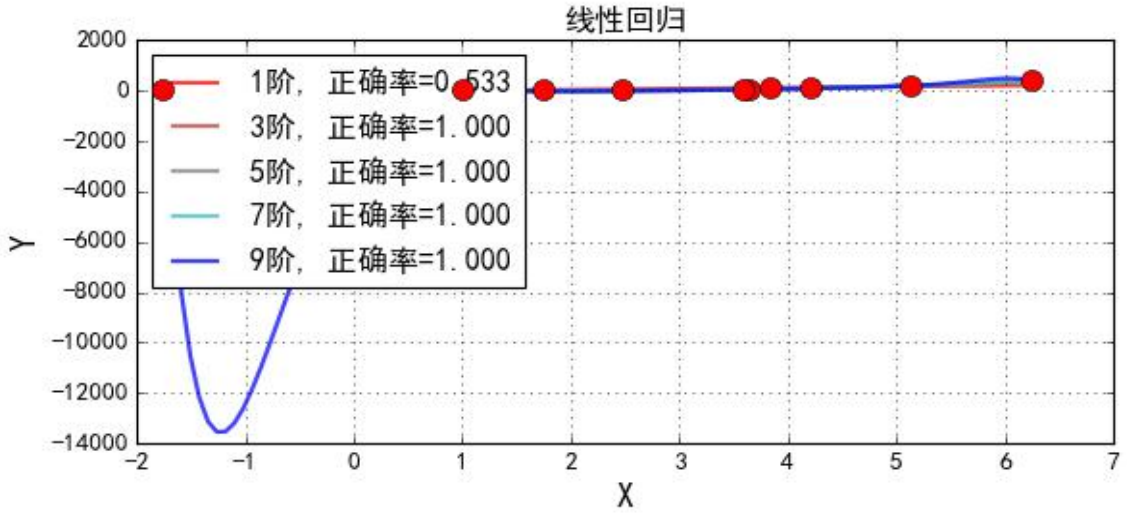
- 同时使用L1正则和L2正则的线性回归模型就称为Elasitc Net算法(弹性网络算法)

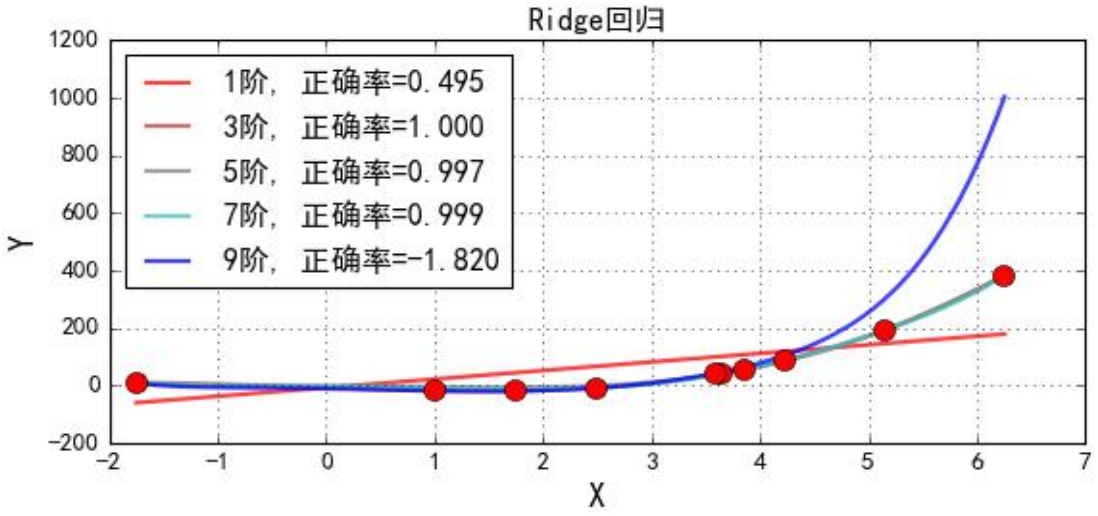
$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2+\lambda\left(p\sum_{j=1}^{n}\left|\theta_j\right|+(1-p)\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2\right)$$

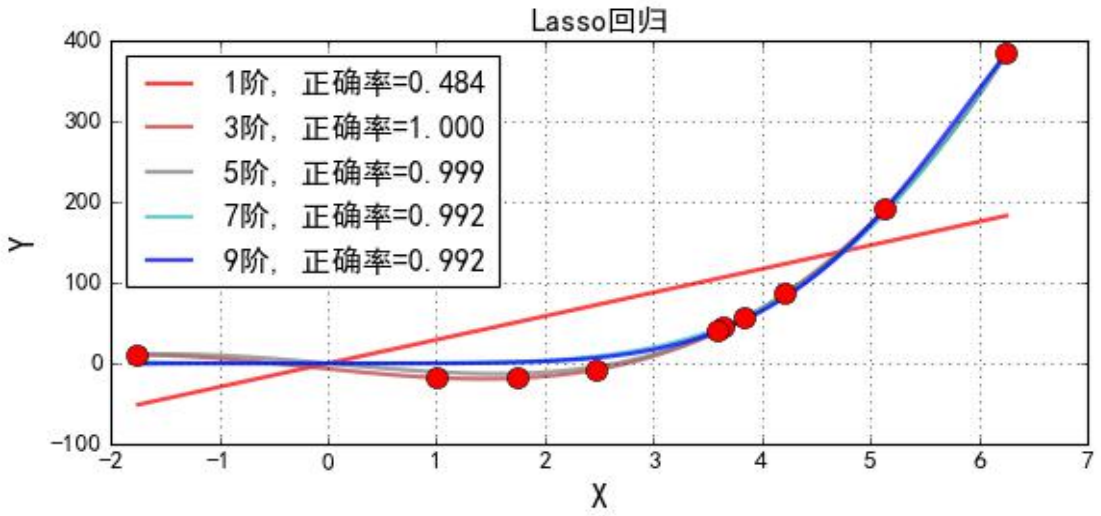
$$\begin{cases}\lambda>0\\ p\in[0,1]\end{cases}$$

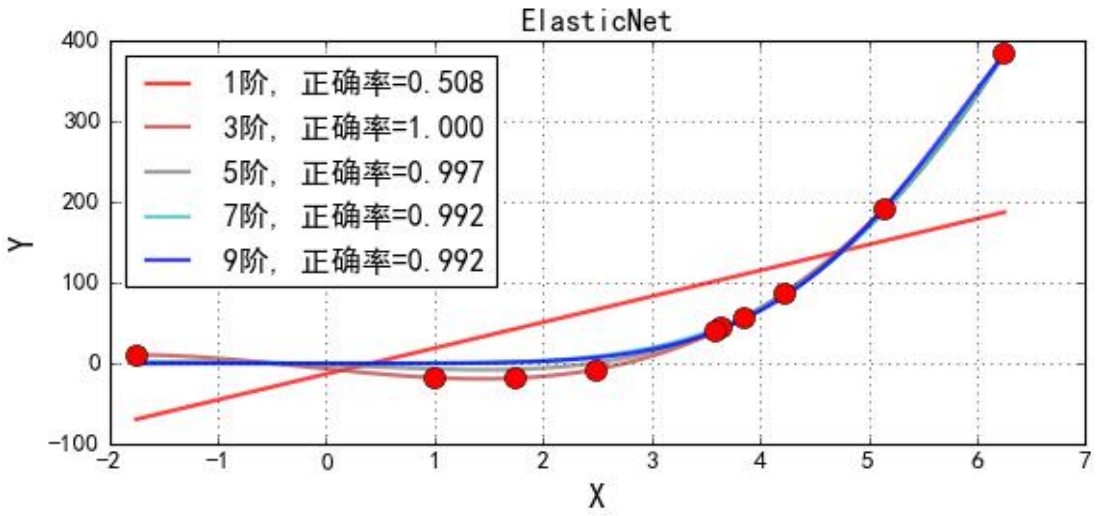
线性回归算法过拟合比较(一)

各种不同线性回归过拟合显示









线性回归算法过拟合比较(二)


```
线性回归:1阶，系数为： [-44.14102611  40.05964256]
线性回归:3阶，系数为： [ -6.80525963 -13.743068     0.93453895   1.79844791]
线性回归:5阶，系数为： [ -5.60899679 -14.80109301   0.75014858   2.11170671  -0.07724668   0.00566633]
线性回归:7阶，系数为： [-41.70721172  52.38570529 -29.56451338  -7.66322829  12.07162703  -3.86969096   0.53286096  -0.02725536]
线性回归:9阶，系数为： [-2465.58378507  6108.6381056  -5111.99327317   974.74973548  1078.89648247  -829.50276827   266.13230319   -45.71741
527     4.11582735    -0.15281063]
Ridge回归:1阶，系数为： [ -6.71593385  29.79090057]
Ridge回归:3阶，系数为： [ -6.7819845  -13.73679293   0.92827639   1.79920954]
Ridge回归:5阶，系数为： [-0.82920155 -1.07244754 -1.41803017 -0.93057536  0.88319116 -0.07073168]
Ridge回归:7阶，系数为： [-1.62586368 -2.18512108 -1.82690987 -2.27495708  0.98685071  0.30551091 -0.10988434  0.00846908]
Ridge回归:9阶，系数为： [-10.50566712  -6.12564342  -1.96421973   0.80200162   0.59148104  -0.23358235   0.20297017  -0.08109698   0.0132585
7  -0.00072184]
Lasso回归:1阶，系数为： [ -0.          29.27359177]
Lasso回归:3阶，系数为： [ -6.7688595  -13.75928024   0.93989323   1.79778598]
Lasso回归:5阶，系数为： [ -0.         -12.00109345  -0.50746853   1.74395236   0.07086952  -0.00583605]
Lasso回归:7阶，系数为： [-0.         -0.         -0.         -0.08083315  0.19550746  0.03066137 -0.00020584 -0.00046928]
Lasso回归:9阶，系数为： [-0.         -0.         -0.         -0.          0.04439727  0.05587113  0.00109023 -0.00021498 -0.00004479 -0.0000
0674]
ElasticNet:1阶，系数为： [-13.22089654  32.08359338]
ElasticNet:3阶，系数为： [ -6.7688595  -13.75928024   0.93989323   1.79778598]
ElasticNet:5阶，系数为： [-1.65823671 -5.20271875 -1.26488859  0.94503683  0.2605984  -0.01683786]
ElasticNet:7阶，系数为： [-0.         -0.         -0.         -0.15812511  0.22150166  0.02955069 -0.00040066 -0.00046568]
ElasticNet:9阶，系数为： [-0.         -0.         -0.         -0.          0.05255118  0.05364699  0.00111995 -0.00020596 -0.00004365 -0.000
00667]
```

模型效果判断

$$MSE = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2$$

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2}$$

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{m}\left(y_i - \bar{y}\right)^2} \qquad \bar{y} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$$

模型效果判断

- MSE：误差平方和，越趋近于0表示模型越拟合训练数据。
- RMSE：MSE的平方根，作用同MSE
- R^2：取值范围(负无穷,1]，值越大表示模型越拟合训练数据；最优解是1；当模型预测为随机值的时候，有可能为负；若预测值恒为样本期望，R^2为0
- TSS：总平方和TSS(Total Sum of Squares)，表示样本之间的差异情况，是伪方差的m倍
- RSS：残差平方和RSS（Residual Sum of Squares），表示预测值和样本值之间的差异情况，是MSE的m倍

机器学习调参

- 在实际工作中，对于各种算法模型(线性回归)来讲，我们需要获取θ、λ、p的值；θ的求解其实就是算法模型的求解，一般不需要开发人员参与(算法已经实现)，主要需要求解的是λ和p的值，这个过程就叫做**调参(超参)**
- 交叉验证：将训练数据分为多份，其中一份进行数据验证并获取最优的超参：λ和p；比如：十折交叉验证、五折交叉验证(scikit-learn中默认)等

梯度下降案例

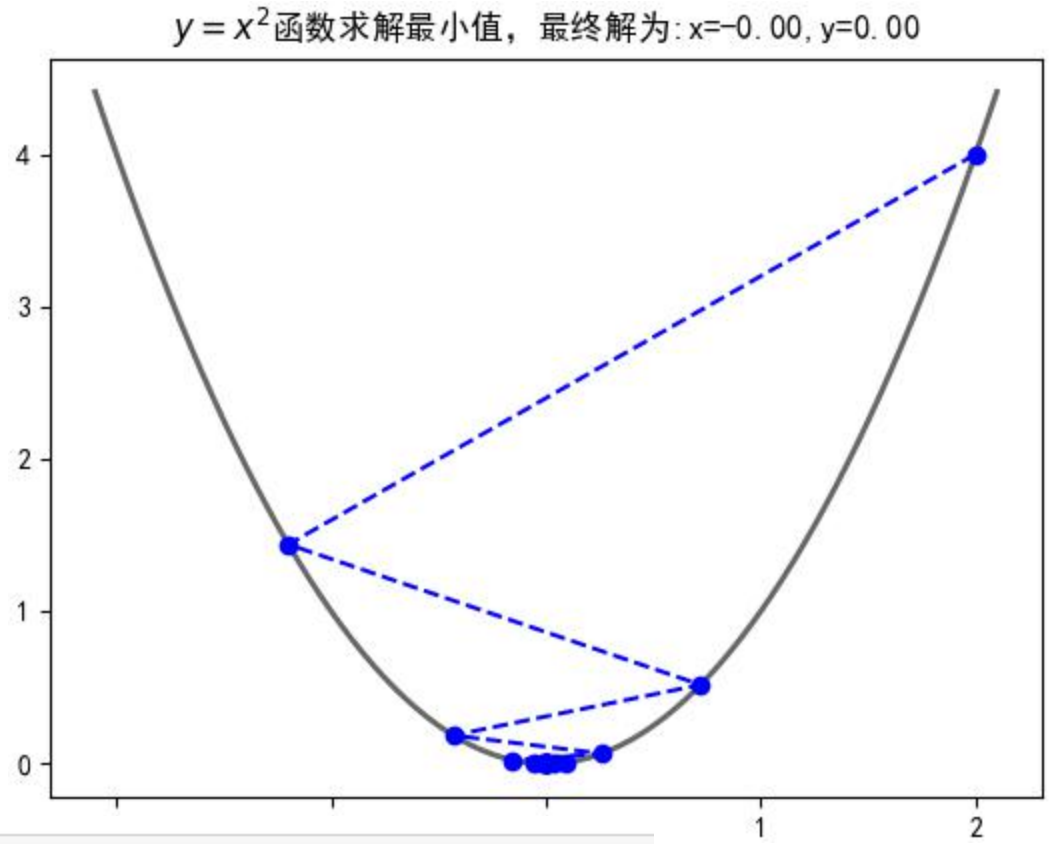
$$y = f(x) = x^2$$

```
## 原函数
def f(x):
    return x ** 2
## 导数
def h(x):
    return 2 * x

X = []
Y = []

x = 2
step = 0.8
f_change = f(x)
f_current = f(x)
X.append(x)
Y.append(f_current)
while f_change > 1e-10:
    x = x - step * h(x)
    tmp = f(x)
    f_change = np.abs(f_current - tmp)
    f_current  = tmp
    X.append(x)
    Y.append(f_current)
print u"最终结果为:", (x, f_current)
```

最终结果为： (-5.686057605985963e-06, 3.233125109859082e-11)




```
fig = plt.figure()
X2 = np.arange(-2.1, 2.15, 0.05)
Y2 = X2 ** 2

plt.plot(X2, Y2, '-', color='#666666', linewidth=2)
plt.plot(X, Y, 'bo—')
plt.title(u'$y=x^2$函数求解最小值，最终解为:x=%.2f,y=%.2f'
          % (x, f_current))
plt.show()
```

梯度下降案例

$$z = f(x, y) = x^2 + y^2$$

```
## 原函数
def f(x, y):
    return x ** 2 + y ** 2
## 偏函数
def h(t):
    return 2 * t

X = []
Y = []
Z = []

x = 2
y = 2
f_change = x ** 2 + y ** 2
f_current = f(x, y)
step = 0.1
X.append(x)
Y.append(y)
Z.append(f_current)
while f_change > 1e-10:
    x = x - step * h(x)
    y = y - step * h(y)
    f_change = f_current - f(x, y)
    f_current = f(x, y)
    X.append(x)
    Y.append(y)
    Z.append(f_current)
print u"最终结果为:", (x, y)
```

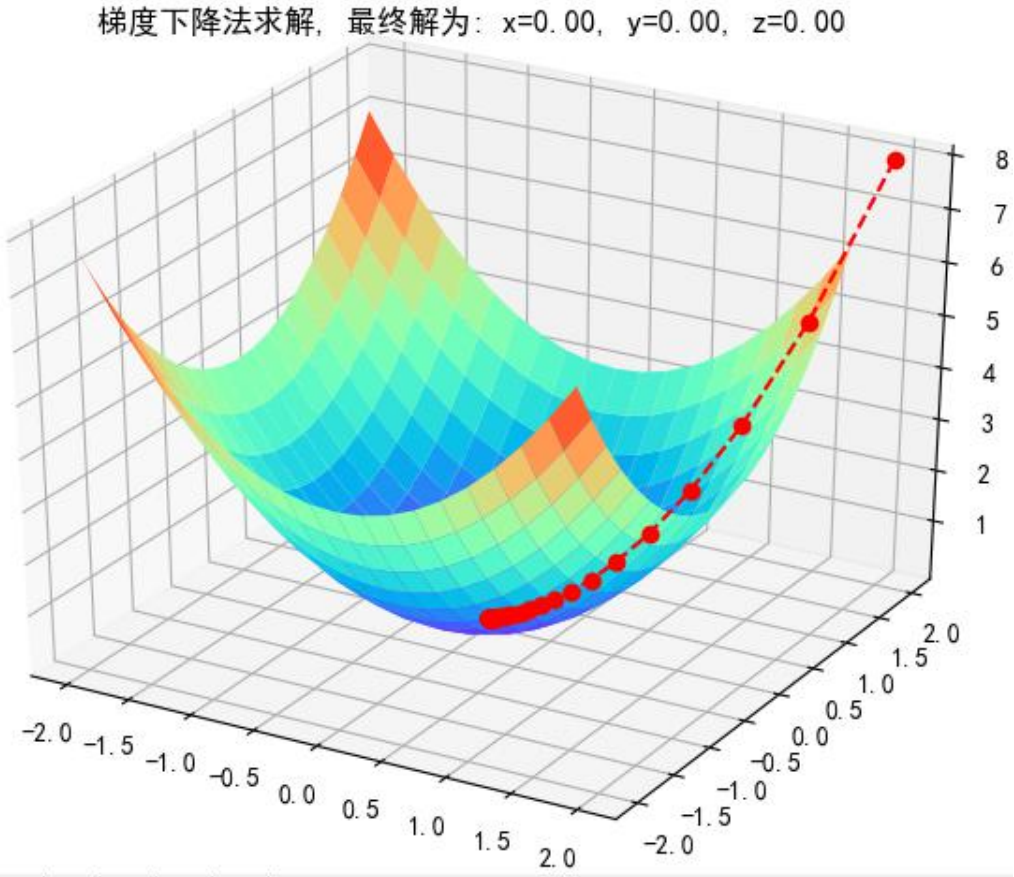
最终结果为： (9.353610478917782e-06, 9

```
fig = plt.figure()
ax = Axes3D(fig)
X2 = np.arange(-2, 2, 0.2)
Y2 = np.arange(-2, 2, 0.2)
X2, Y2 = np.meshgrid(X2, Y2)
Z2 = X2 ** 2 + Y2 ** 2

ax.plot_surface(X2, Y2, Z2, rstride=1, cstride=1, cmap='rainbow')
ax.plot(X, Y, Z, 'ro—')

ax.set_title(u'梯度下降法求解，最终解为：x=%.2f，y=%.2f，z=%.2f' % (x, y, f_current))

plt.show()
```



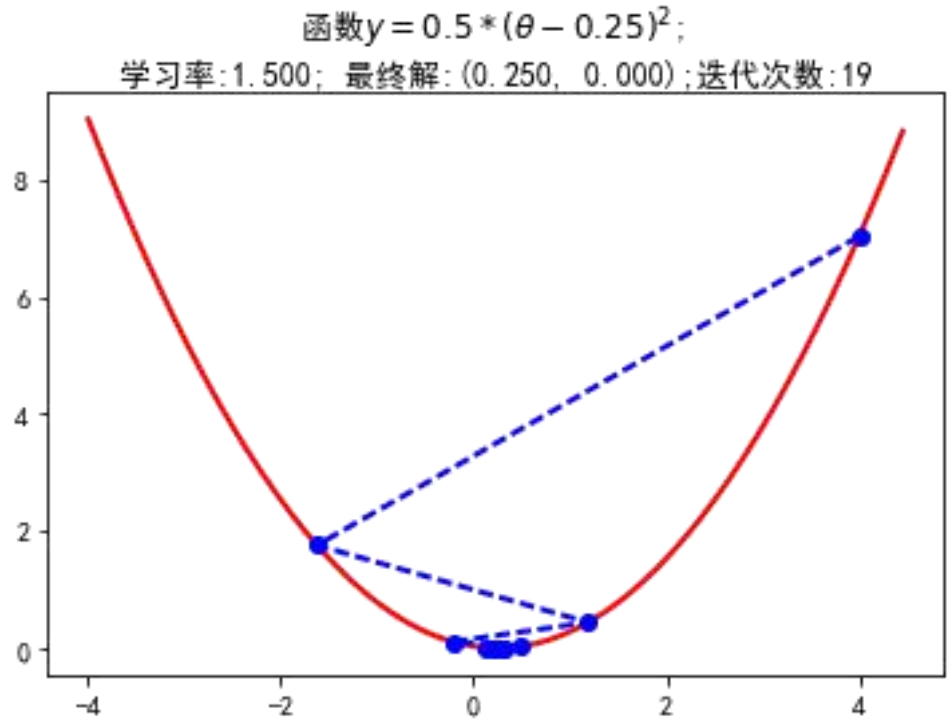
梯度下降法

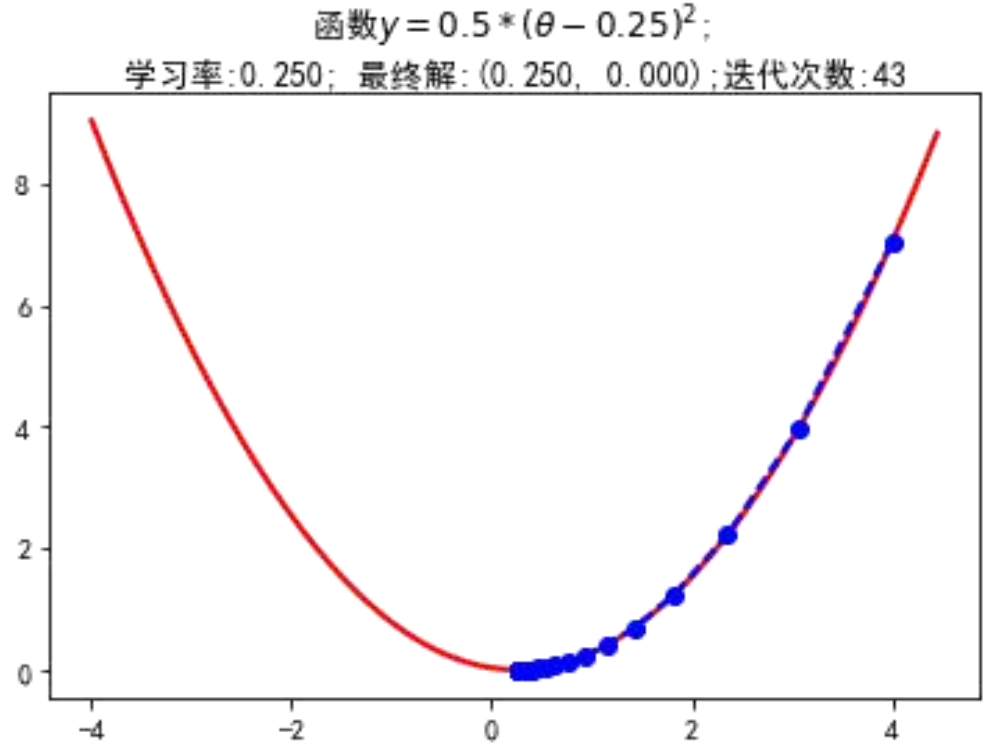
- 梯度下降法(Gradient Descent， GD)常用于求解**无约束**情况下**凸函数(Convex Function)**的**极小值**，是一种**迭代类型**的算法，因为凸函数只有一个极值点，故求解出来的极小值点就是函数的**最小值点。**

$$J(\theta)=\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

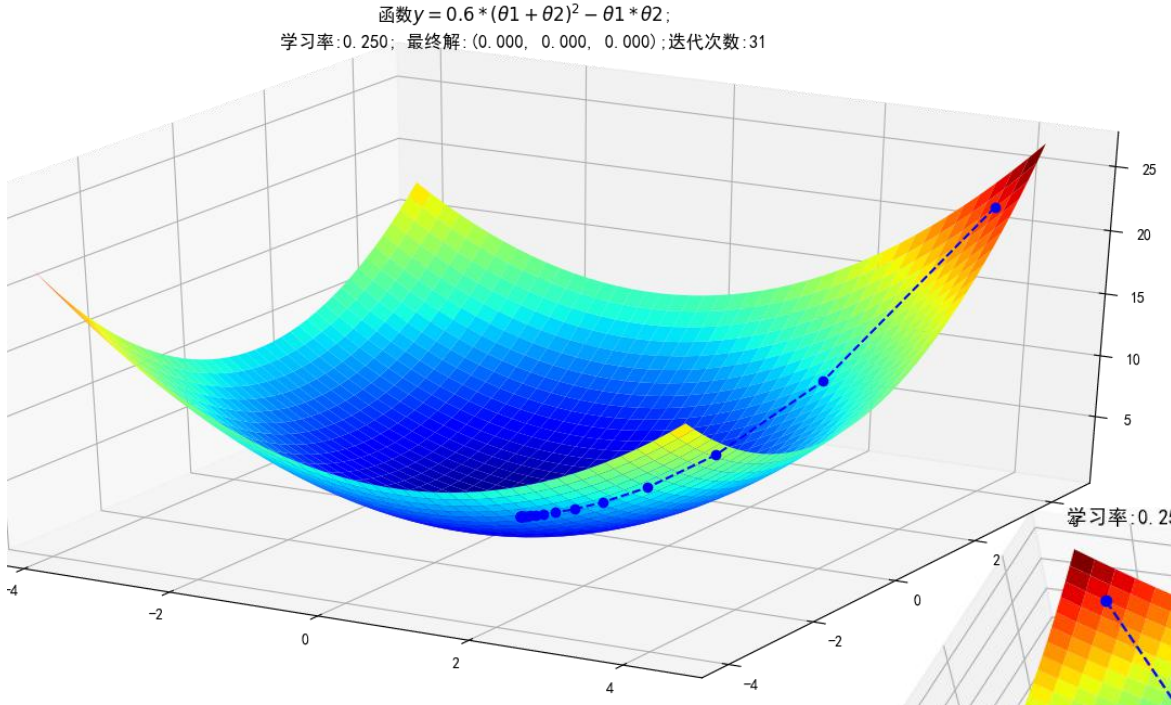
$$\theta^*=\arg\min_{\theta} J(\theta)$$

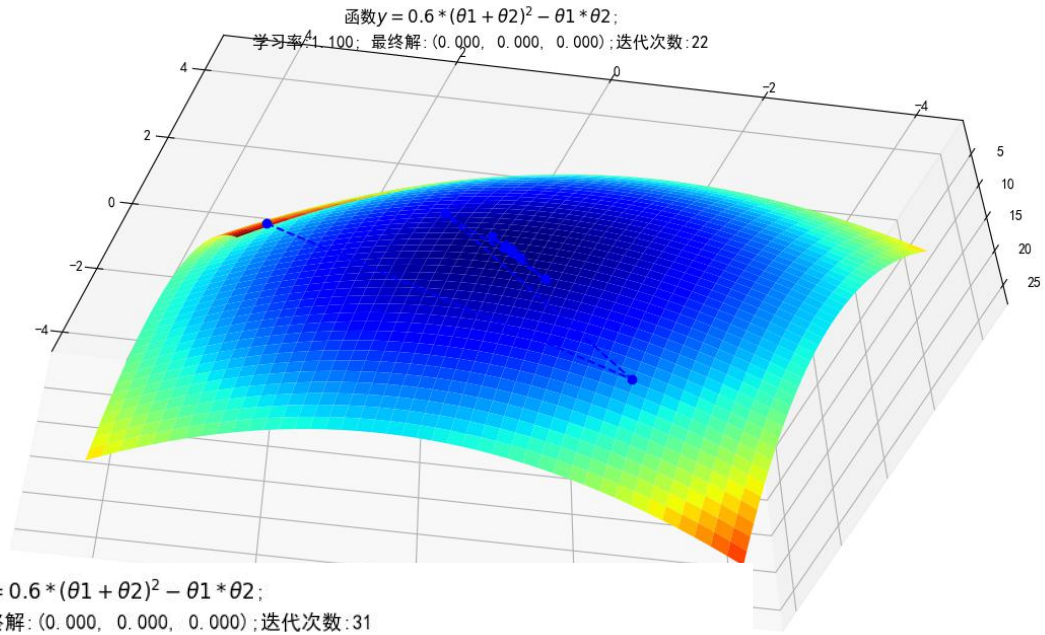
梯度下降法案例代码

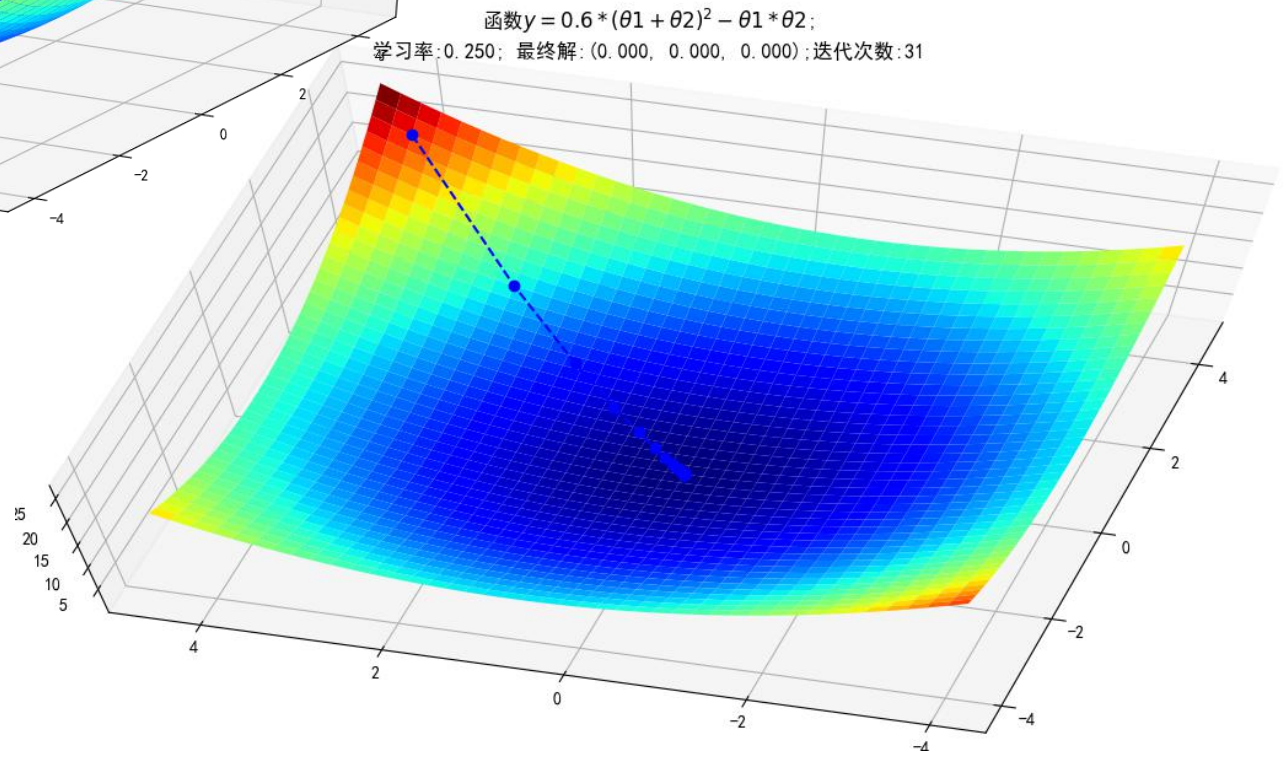

函数$y=0.5*(\theta-0.25)^2$;
学习率:1.500; 最终解:(0.250, 0.000);迭代次数:19
8
6
4
2
0
−4
−2
0
2
4


函数$y=0.5*(\theta-0.25)^2$;
学习率:0.250; 最终解:(0.250, 0.000);迭代次数:43
8
6
4
2
0
−4
−2
0
2
4

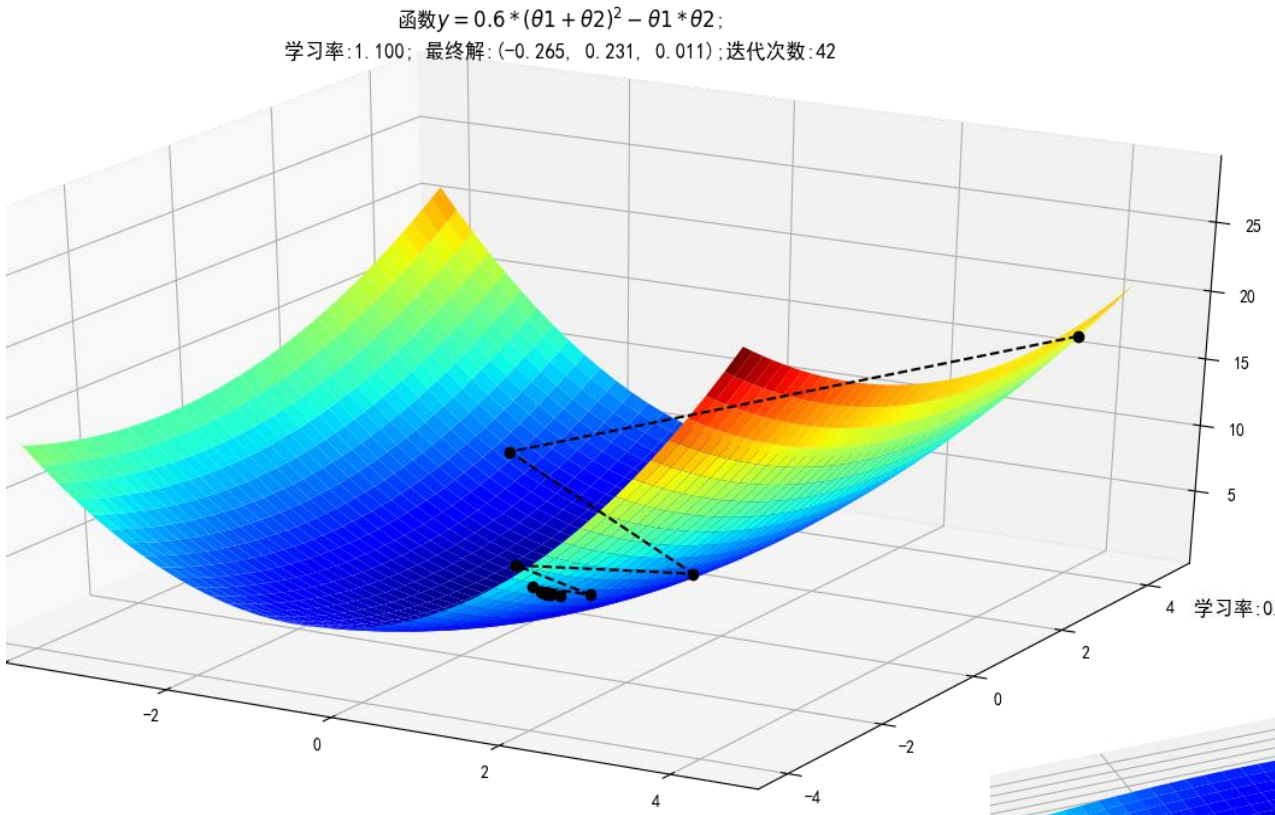
梯度下降法案例代码

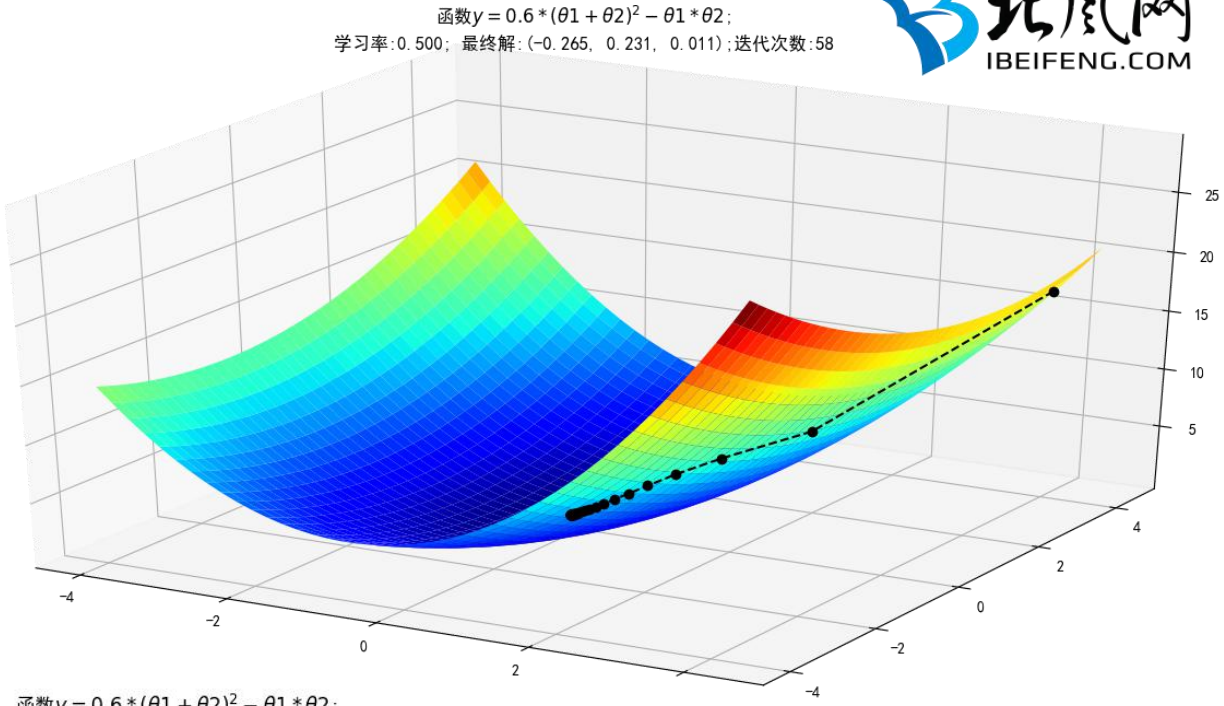

函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:0.250; 最终解:(0.000, 0.000, 0.000);迭代次数:31

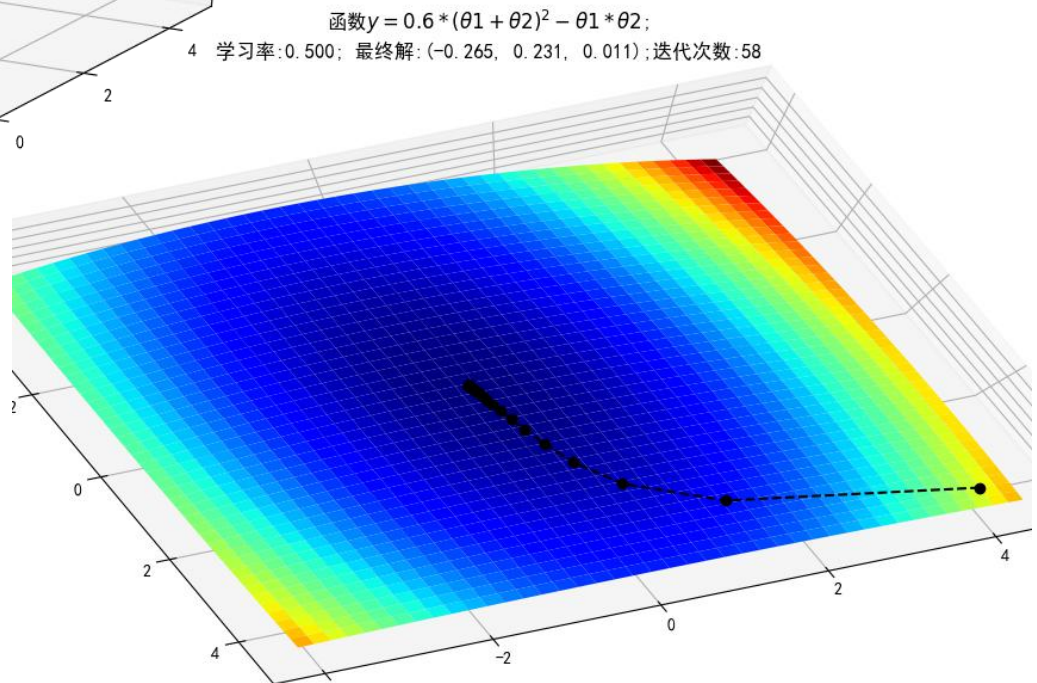

函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:1.100; 最终解:(0.000, 0.000, 0.000);迭代次数:22


函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:0.250; 最终解:(0.000, 0.000, 0.000);迭代次数:31

梯度下降法案例代码


函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:1.100; 最终解:(-0.265, 0.231, 0.011);迭代次数:42


函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:0.500; 最终解:(-0.265, 0.231, 0.011);迭代次数:58

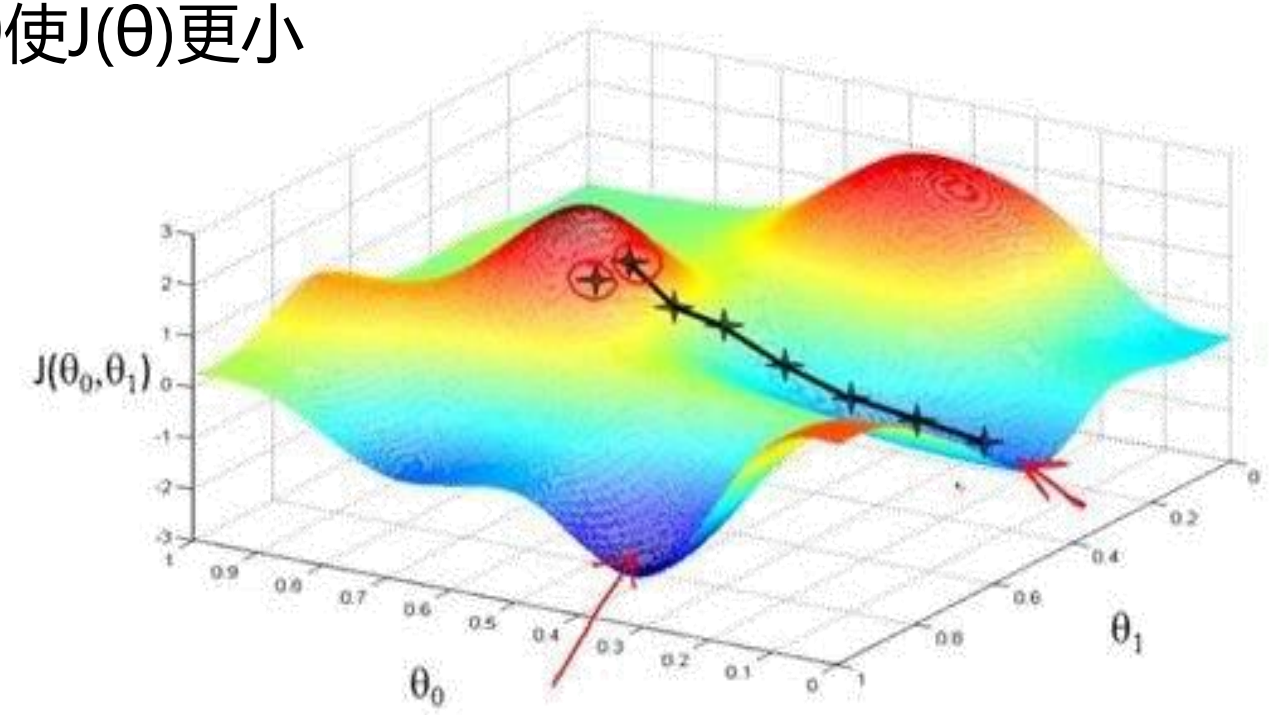

函数$y=0.6*(\theta1+\theta2)^2-\theta1*\theta2$;
学习率:0.500; 最终解:(-0.265, 0.231, 0.011);迭代次数:58

梯度下降算法

- 目标函数θ求解 $J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$
- 初始化θ(随机初始化，可以初始为0)
- 沿着负梯度方向迭代，更新后的θ使J(θ)更小

$$\theta=\theta-\alpha\bullet\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta}$$

  - α：学习率、步长



梯度方向

仅考虑单个样本的单个θ参数的梯度值

$$J(\theta)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta)=\frac{\partial}{\partial\theta_j}\frac{1}{2}(h_\theta(x)-y)^2$$

$$=2\cdot\frac{1}{2}(h_\theta(x)-y)\cdot\frac{\partial}{\partial\theta_j}(h_\theta(x)-y)$$

$$=(h_\theta(x)-y)\frac{\partial}{\partial\theta_j}\left(\sum_{i=0}^{n}\theta_i x_i-y\right)$$

$$=(h_\theta(x)-y)x_j$$

批量梯度下降算法(BGD)

使用所有样本的梯度值作为当前模型参数θ的更新

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = (h_\theta(x) - y) x_j$$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j} = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial}{\partial \theta_j} = \sum_{i=1}^{m} \left(x_j^{(i)} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) \right) = \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)} \right) x_j^{(i)}$$

$$\theta_j = \theta_j + \alpha \sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - h_\theta\left(x^{(i)}\right) \right) x_j^{(i)}$$

随机梯度下降算法(SGD)

使用单个样本的梯度值作为当前模型参数θ的更新

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = (h_\theta(x) - y)x_j$$

for i= 1 to m,{

$$\theta_j = \theta_j + \alpha\left(y^{(i)} - h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)x_j^{(i)}$$

}

BGD和SGD算法比较

- SGD速度比BGD快(整个数据集从头到尾执行的迭代次数少)
- SGD在某些情况下(全局存在多个相对最优解/J(θ)不是一个二次)，SGD有可能跳出某些小的局部最优解，所以一般情况下不会比BGD坏；SGD在收敛的位置会存在J(θ)函数波动的情况。
- BGD一定能够得到一个局部最优解(在线性回归模型中一定是得到一个全局最优解)，SGD由于随机性的存在可能导致最终结果比BGD的差
- **注意：优先选择SGD**

小批量梯度下降法(MBGD)

- 如果即需要保证算法的训练过程比较快，又需要保证最终参数训练的准确率，而这正是小批量梯度下降法（Mini-batch Gradient Descent，简称MBGD）的初衷。MBGD中不是每拿一个样本就更新一次梯度，而且拿b个样本(b一般为10)的平均梯度作为更新方向。

for i= 1 to m/10,{

$$\theta_j = \theta_j + \alpha \sum_{k=i}^{i+10} \left(y^{(k)} - h_\theta \left(x^{(k)} \right) \right) x_j^{(k)}$$

}

梯度下降法

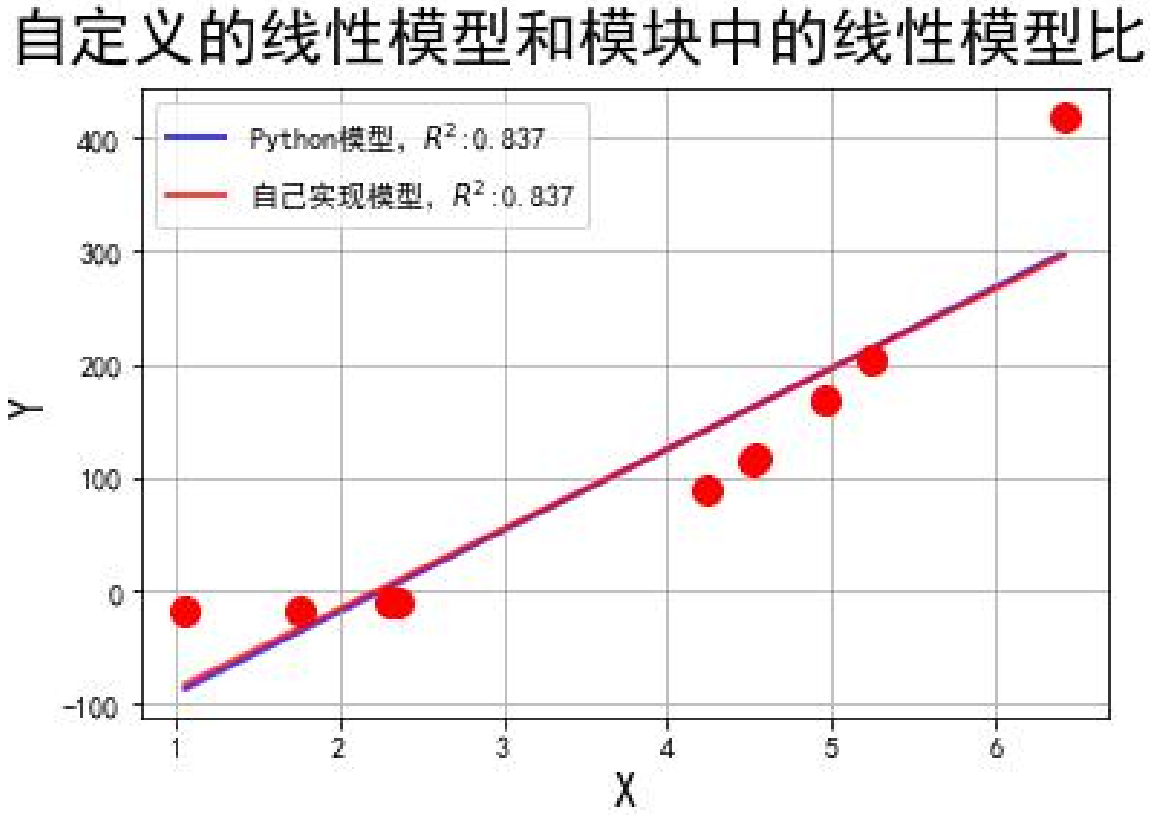
- 由于梯度下降法中负梯度方向作为变量的变化方向，所以有可能导致最终求解的值是局部最优解，所以在使用梯度下降的时候，一般需要进行一些调优策略：
  - **学习率的选择**：学习率过大，表示每次迭代更新的时候变化比较大，有可能会跳过最优解；学习率过小，表示每次迭代更新的时候变化比较小，就会导致迭代速度过慢，很长时间都不能结束；
  - **算法初始参数值的选择**：初始值不同，最终获得的最小值也有可能不同，因为梯度下降法求解的是局部最优解，所以一般情况下，选择多次不同初始值运行算法，并最终返回损失函数最小情况下的结果值；
  - **标准化**：由于样本不同特征的取值范围不同，可能会导致在各个不同参数上迭代速度不同，为了减少特征取值的影响，可以将特征进行标准化操作。

梯度下降法

- BGD、SGD、MBGD的区别：
  - 当样本量为m的时候，每次迭代BGD算法中对于参数值更新一次，SGD算法中对于参数值更新m次，MBGD算法中对于参数值更新m/n次，相对来讲SGD算法的更新速度最快；
  - SGD算法中对于每个样本都需要更新参数值，当样本值不太正常的时候，就有可能会导致本次的参数更新会产生相反的影响，也就是说SGD算法的结果并不是完全收敛的，而是在收敛结果处波动的；
  - SGD算法是每个样本都更新一次参数值，所以SGD算法特别适合样本数据量大的情况以及在线机器学习(Online ML)。

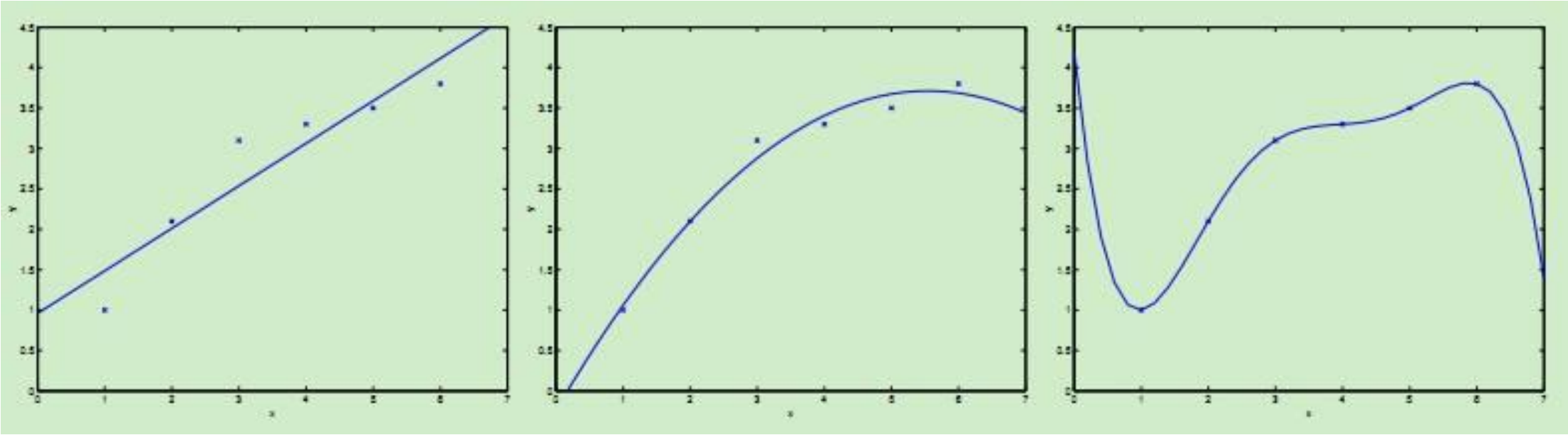
回归算法案例：基于梯度下降法实现线性回归算法(作业)

- 基于梯度下降法编写程序实现回归算法，并自行使用模拟数据进行测试，同时对同样的模拟数据进行三种算法的比较(python sklearn LinearRegression、SGDRegressor和自己实现的线性回归算法)



线性回归的扩展

- 线性回归针对的是θ而言是一种，对于样本本身而言，样本可以是非线性的
- 也就是说最终得到的函数f:x->y；函数f(x)可以是非线性的，比如：曲线等



$$y = \theta_0 + \theta_1 x$$

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$$

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$$

线性回归总结

- 算法模型：线性回归(Linear)、岭回归(Ridge)、LASSO回归、Elastic Net
- 正则化：L1-norm、L2-norm
- 损失函数/目标函数：$J(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^2 \rightarrow \min_\theta J(\theta)$
- θ求解方式：最小二乘法(直接计算，目标函数是平方和损失函数)、梯度下降(BGD\SGD\MBGD)

局部加权回归-损失函数

- 普通线性回归损失函数：

$$J(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left(h_{\theta}\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^{2}$$

- 局部加权回归损失函数：

$$J(\theta)=\sum_{i=1}^{m}w^{(i)}\left(h_{\theta}\left(x^{(i)}\right)-y^{(i)}\right)^{2}$$

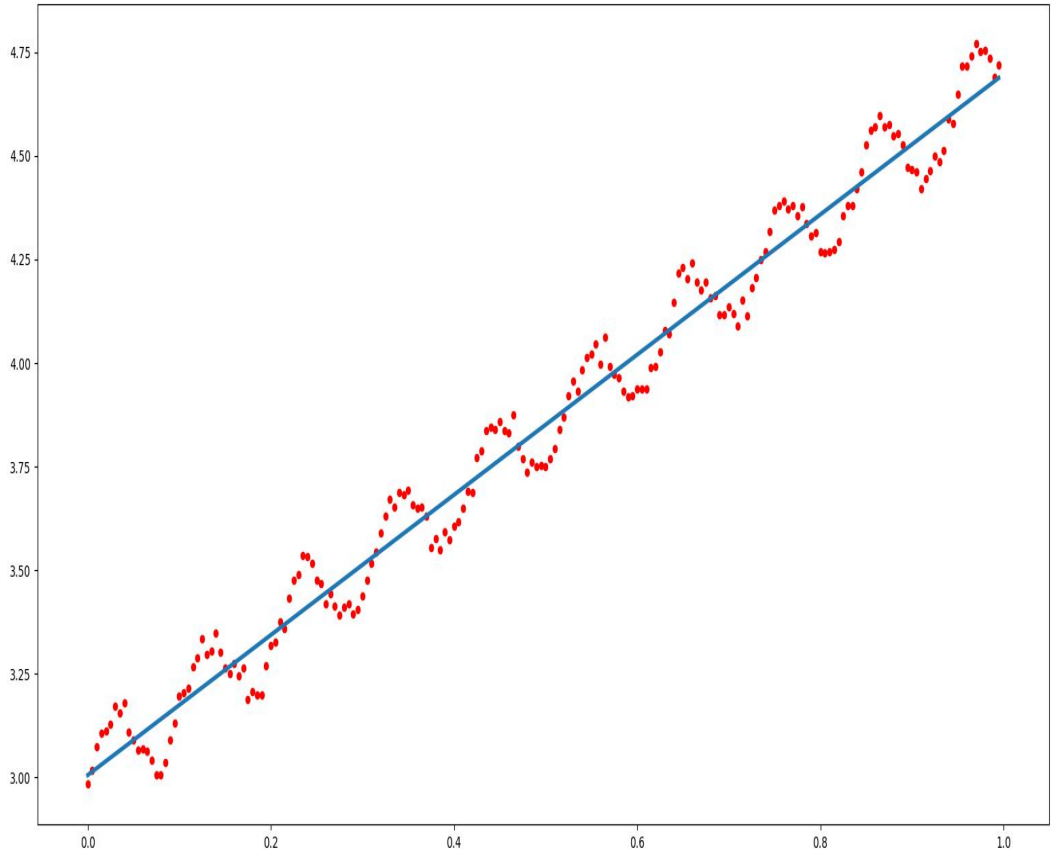
局部加权回归-权重值设置

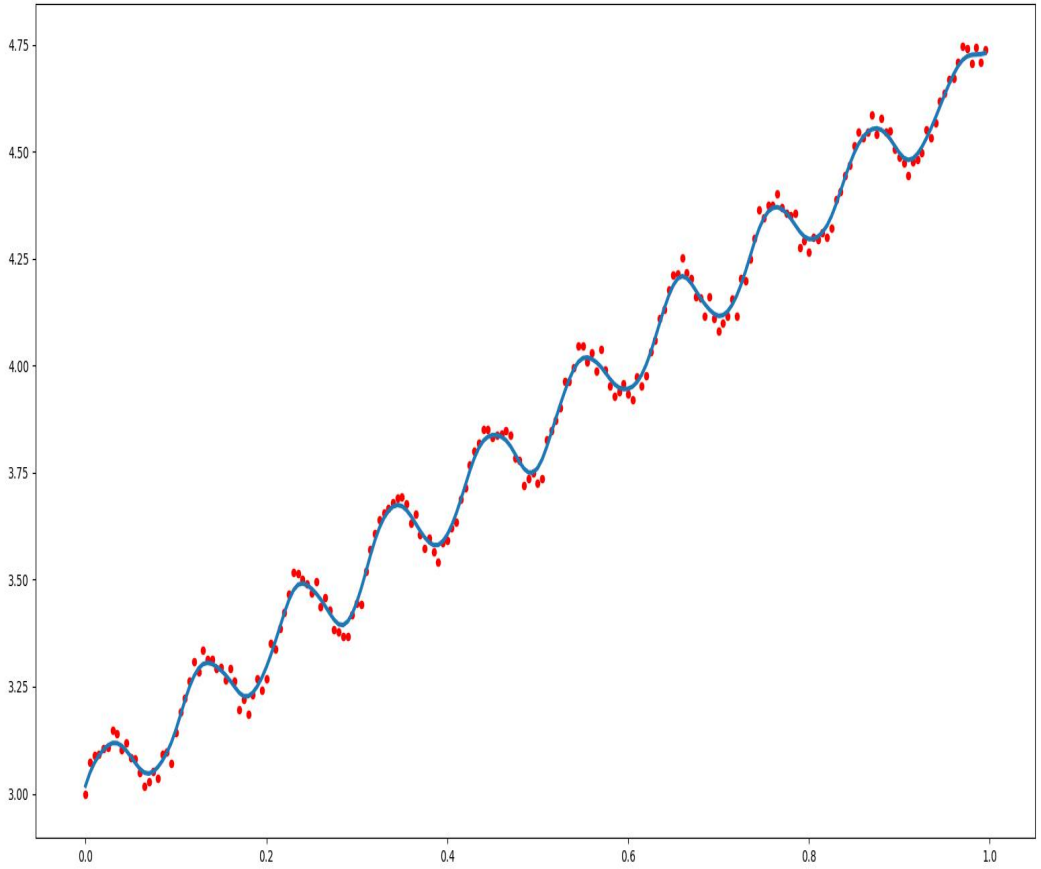
- $w^{(i)}$是权重，它根据要预测的点与训练数据集中的点的距离来为数据集中的点赋权值。当某点离要预测的点越远，其权重越小，否则越大。常用值选择公式为：

$$w^{(i)} = \exp\left(-\frac{\left(x^{(i)} - x'\right)^2}{2k^2}\right)$$

- 该函数称为指数衰减函数，其中k为波长参数，它控制了权值随距离下降的速率
- 注意：使用该方式主要应用到样本之间的相似性考虑。
- **NOTE：Locally Weighted Linear Regression(LWR)是一种非参数学习算法，也就是说参数不固定，在每一次预测的时候，均需要使用使用训练数据重新训练模型参数。**

局部加权回归-直观理解


4.75
4.50
4.25
4.00
3.75
3.50
3.25
3.00
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


4.75
4.50
4.25
4.00
3.75
3.50
3.25
3.00
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

回归算法综合案例(二)：波士顿房屋租赁价格预测(作业)

北风网 IBEIFENG.COM

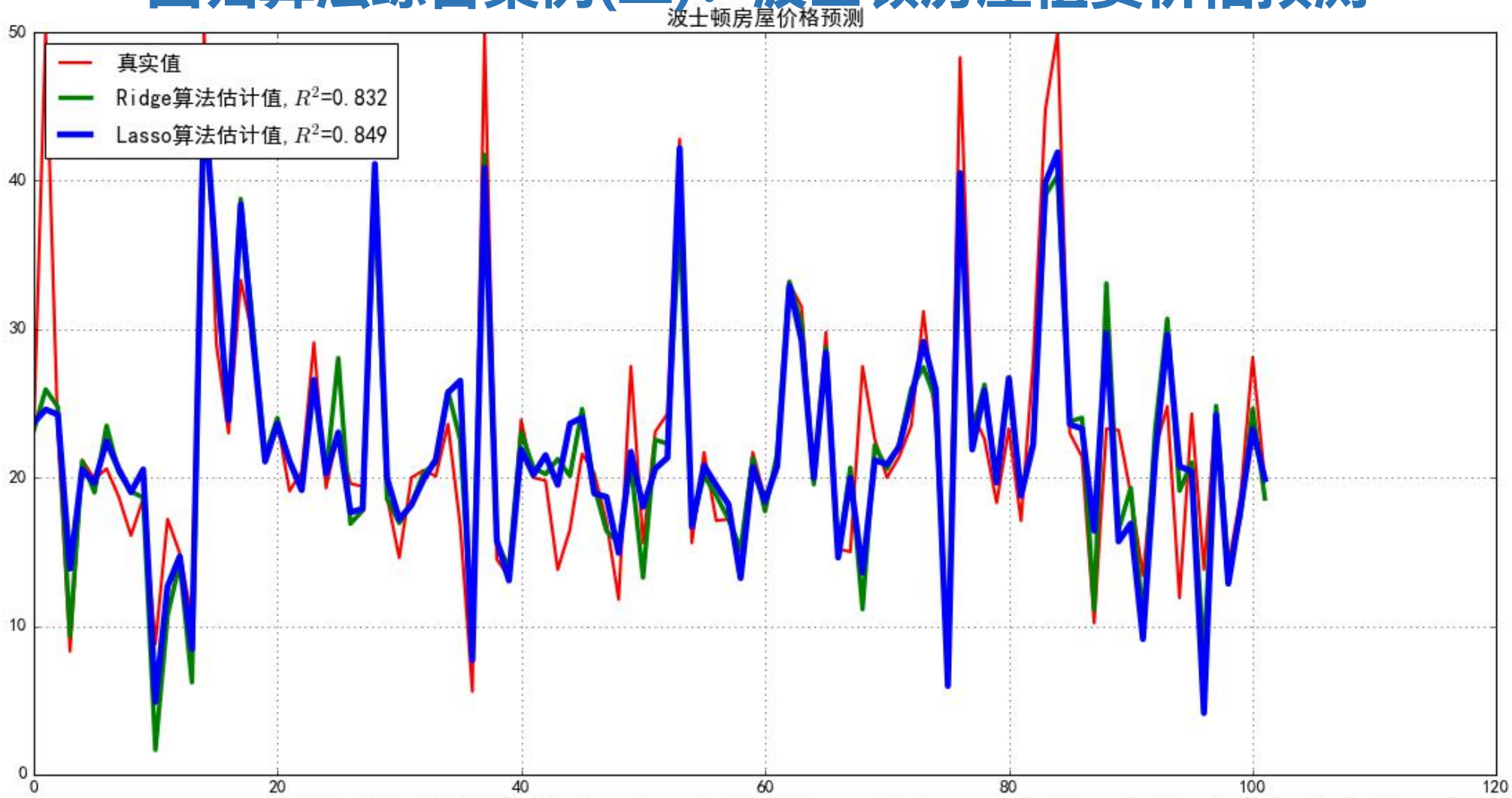
- 基于波士顿房屋租赁数据进行房屋租赁价格预测模型构建，分别使用Lasso回归、Ridge回两种回归算法构建模型，并分别构建2/3/4阶多项式扩展算法中的最优算法(参数)，并比较这两种回归算法的效果；另外使用lasso回归算法做特征选择(选择特征参数不为0的属性数据作为最终的特征属性，用这个选择出来的特征属性矩阵做Ridge回归)
  - 数据下载url: http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Housing(现在没法下载啦)

Attribute Information:

1. CRIM: per capita crime rate by town
2. ZN: proportion of residential land zoned for lots over 25,000 sq.ft.
3. INDUS: proportion of non-retail business acres per town
4. CHAS: Charles River dummy variable (= 1 if tract bounds river; 0 otherwise)
5. NOX: nitric oxides concentration (parts per 10 million)
6. RM: average number of rooms per dwelling
7. AGE: proportion of owner-occupied units built prior to 1940
8. DIS: weighted distances to five Boston employment centres
9. RAD: index of accessibility to radial highways
10. TAX: full-value property-tax rate per $10,000
11. PTRATIO: pupil-teacher ratio by town
12. B: 1000(Bk - 0.63)^2 where Bk is the proportion of blacks by town
13. LSTAT: % lower status of the population
14. MEDV: Median value of owner-occupied homes in $1000's

0.31533	0.00	6.200	0	0.5040	8.2660	78.30	2.8944	8	307.0	17.40	385.05	4.14	44.80
0.52693	0.00	6.200	0	0.5040	8.7250	83.00	2.8944	8	307.0	17.40	382.00	4.63	50.00
0.38214	0.00	6.200	0	0.5040	8.0400	86.50	3.2157	8	307.0	17.40	387.38	3.13	37.60
0.41238	0.00	6.200	0	0.5040	7.1630	79.90	3.2157	8	307.0	17.40	372.08	6.36	31.60
0.29819	0.00	6.200	0	0.5040	7.6860	17.00	3.3751	8	307.0	17.40	377.51	3.92	46.70
0.44178	0.00	6.200	0	0.5040	6.5520	21.40	3.3751	8	307.0	17.40	380.34	3.76	31.50
0.53700	0.00	6.200	0	0.5040	5.9810	68.10	3.6715	8	307.0	17.40	378.35	11.65	24.30
0.46296	0.00	6.200	0	0.5040	7.4120	76.90	3.6715	8	307.0	17.40	376.14	5.25	31.70
0.57529	0.00	6.200	0	0.5070	8.3370	73.30	3.8384	8	307.0	17.40	385.91	2.47	41.70
0.33147	0.00	6.200	0	0.5070	8.2470	70.40	3.6519	8	307.0	17.40	378.95	3.95	48.30
0.44791	0.00	6.200	1	0.5070	6.7260	66.50	3.6519	8	307.0	17.40	360.20	8.05	29.00
0.33045	0.00	6.200	0	0.5070	6.0860	61.50	3.6519	8	307.0	17.40	376.75	10.88	24.00
0.52058	0.00	6.200	1	0.5070	6.6310	76.50	4.1480	8	307.0	17.40	388.45	9.54	25.10
0.51183	0.00	6.200	0	0.5070	7.3580	71.60	4.1480	8	307.0	17.40	390.07	4.73	31.50
0.08244	30.00	4.930	0	0.4280	6.4810	18.50	6.1899	6	300.0	16.60	379.41	6.36	23.70
0.09252	30.00	4.930	0	0.4280	6.6060	42.20	6.1899	6	300.0	16.60	383.78	7.37	23.30
0.11329	30.00	4.930	0	0.4280	6.8970	54.30	6.3361	6	300.0	16.60	391.25	11.38	22.00

回归算法综合案例(二)：波士顿房屋租赁价格预测




```
Ridge算法:最优参数: {'poly__degree': 3, 'linear__fit_intercept': True, 'poly__include_bias': True, 'poly__interaction_only': True}
Ridge算法:R值=0.832
Lasso算法:最优参数: {'poly__degree': 3, 'linear__fit_intercept': False, 'poly__include_bias': True, 'poly__interaction_only': True}
Lasso算法:R值=0.849
```

回归算法综合案例(二)：波士顿房屋租赁价格预测

```
## 模型训练 ===> 单个Lasso模型（一阶特征选择）(2参数给定1阶情况的最优参数)
model = Pipeline([
            ('ss', StandardScaler()),
            ('poly', PolynomialFeatures(degree=1, include_bias=True, interaction_only=True)),
            ('linear', LassoCV(alphas=np.logspace(-3,1,20), fit_intercept=False))
        ])
# 模型训练
model.fit(x_train, y_train)


# 模型评测
## 数据输出
print "参数:", zip(names,model.get_params('linear')['linear'].coef_)
print "截距:", model.get_params('linear')['linear'].intercept_
```

```
参数: [('CRIM', 22.600592809201991), ('ZN', -0.93534557687414488), ('INDUS', 1.0202352850146854), ('CHAS', -0.0), ('NOX', 0.594831384154614
9), ('RM', -1.8002644875942369), ('AGE', 2.5861907995357281), ('DIS', -0.064956108249539249), ('RAD', -2.8017533936656509), ('TAX', 1.934332
9692037559), ('PTRATIO', -1.7218677875512203), ('B', -2.2762334623842988), ('LSTAT', 0.70288003005515387)]
截距: 0.0
```

CHAS列的数据对于LassoCV模型而言无用，所以在进行实际模型构建的时候，可以不考虑该特征

回归算法综合案例(三)：葡萄酒质量预测

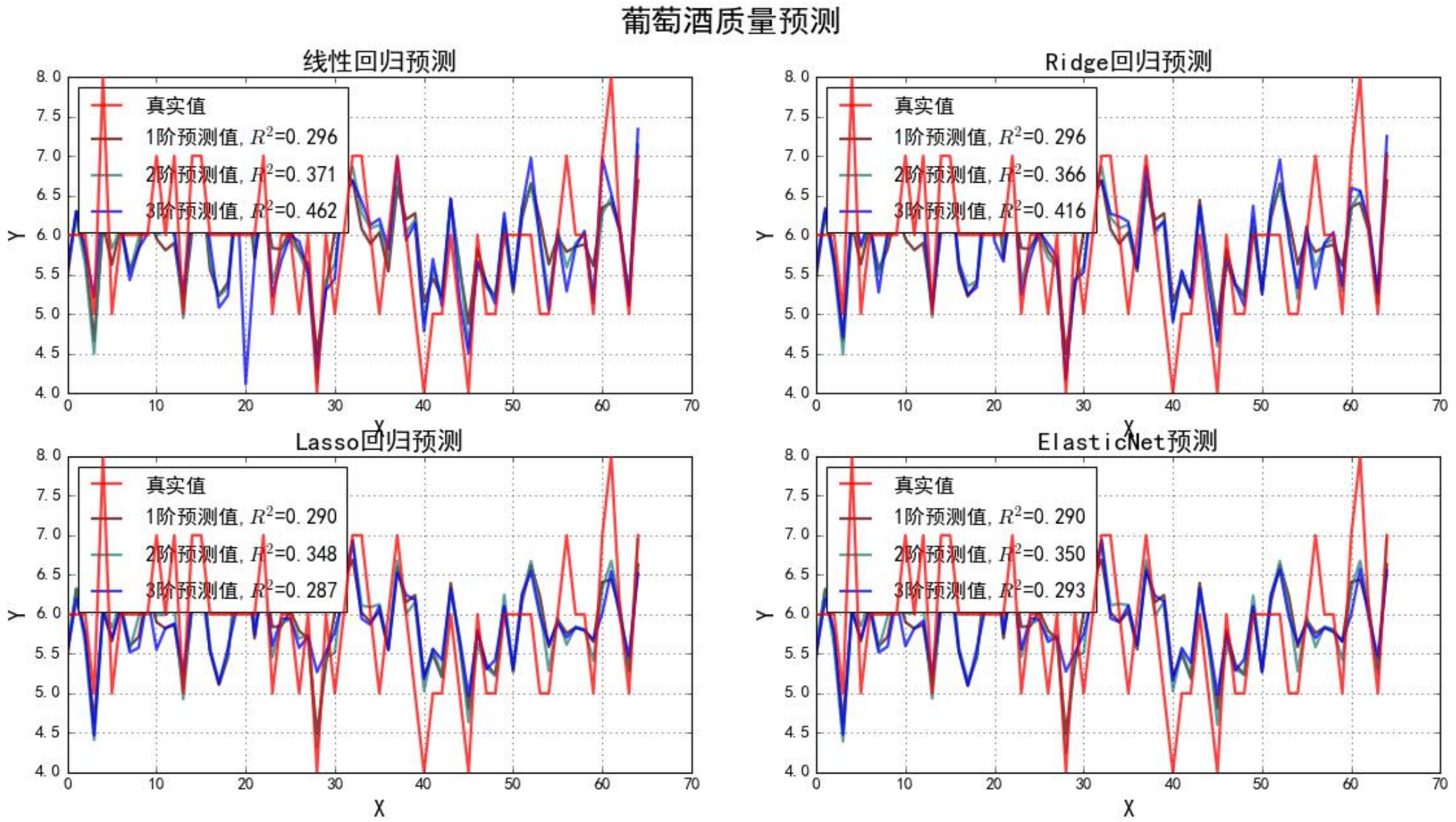
- 基于葡萄酒数据进行葡萄酒质量预测模型构建，分别使用线性回归、Lasso回归、Ridge回归、Elasitc Net四类回归算法构建模型(并分别测试1/2/3阶)，并比较这些回归算法的效果
  - 数据下载url: http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Wine+Quality

Attribute Information:

For more information, read [Cortez et al., 2009].
Input variables (based on physicochemical tests):
1 - fixed acidity
2 - volatile acidity
3 - citric acid
4 - residual sugar
5 - chlorides
6 - free sulfur dioxide
7 - total sulfur dioxide
8 - density
9 - pH
10 - sulphates
11 - alcohol
Output variable (based on sensory data):
12 - quality (score between 0 and 10)

```
2  7.4;0.7;0;1.9;0.076;11;34;0.9978;3.51;0.56;9.4;5
3  7.8;0.88;0;2.6;0.098;25;67;0.9968;3.2;0.68;9.8;5
4  7.8;0.76;0.04;2.3;0.092;15;54;0.997;3.26;0.65;9.8;5
5  11.2;0.28;0.56;1.9;0.075;17;60;0.998;3.16;0.58;9.8;6
6  7.4;0.7;0;1.9;0.076;11;34;0.9978;3.51;0.56;9.4;5
7  7.4;0.66;0;1.8;0.075;13;40;0.9978;3.51;0.56;9.4;5
8  7.9;0.6;0.06;1.6;0.069;15;59;0.9964;3.3;0.46;9.4;5
9  7.3;0.65;0;1.2;0.065;15;21;0.9946;3.39;0.47;10;7
10 7.8;0.58;0.02;2;0.073;9;18;0.9968;3.36;0.57;9.5;7
11 7.5;0.5;0.36;6.1;0.071;17;102;0.9978;3.35;0.8;10.5;5
```

回归算法综合案例(三)：葡萄酒质量预测



Logistic回归

- Logistic/sigmoid函数 $p = h_\theta(x) = g(\theta^T x) = \frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}$

$$y = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}$$

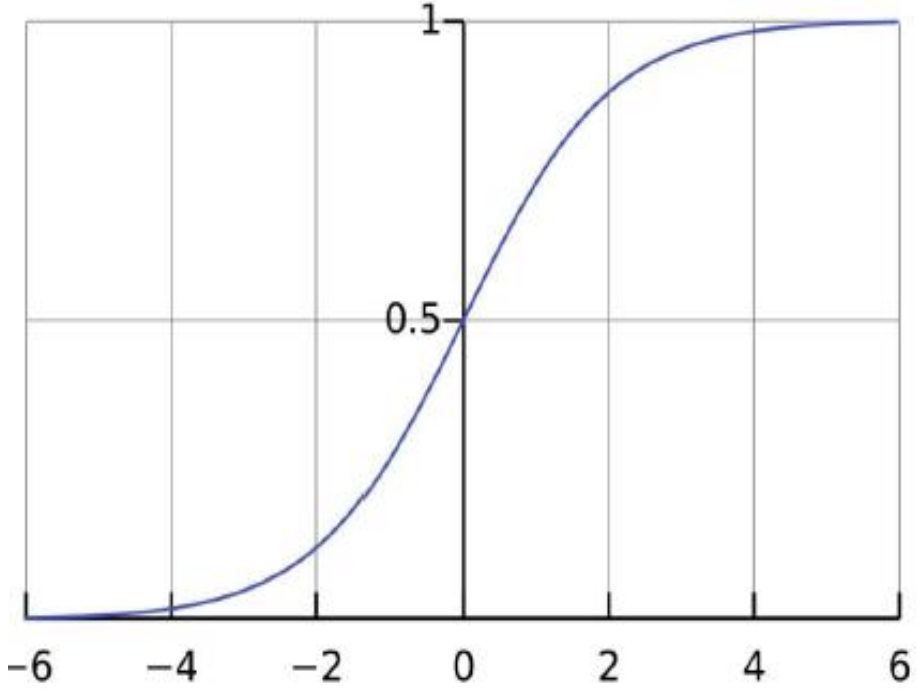
$$\hat{y} = \begin{cases} 1, p > threshold \\ 0, p \le threshold \end{cases}$$

$$g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

$$g'(z) = \left(\frac{1}{1+e^{-z}}\right)' = \frac{e^{-z}}{(1+e^{-z})^2}$$

$$= \frac{1}{1+e^{-z}} \cdot \frac{e^{-z}}{1+e^{-z}} = \frac{1}{1+e^{-z}} \cdot \left(1 - \frac{1}{1+e^{-z}}\right)$$

$$= g(z) \cdot (1 - g(z))$$



Logistic回归及似然函数

- 假设：$P(y=1|x;\theta)=h_\theta(x)$

  $P(y=0|x;\theta)=1-h_\theta(x)$

	y=1	y=0
p(y|x)	p	1-p

$$P(y|x;\theta)=(h_\theta(x))^y(1-h_\theta(x))^{(1-y)}$$

- 似然函数：$L(\theta)=p(\vec{y}|X;\theta)=\prod_{i=1}^{m}p(y^{(i)}|x^{(i)};\theta)$

$$=\prod_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}))^{y^{(i)}}(1-h_\theta(x^{(i)}))^{(1-y^{(i)})}$$

- 对数似然函数：

$$\ell(\theta)=\ln L(\theta)=\sum_{i=1}^{m}(y^{(i)}\ln h_\theta(x^{(i)})+(1-y^{(i)})\ln(1-h_\theta(x^{(i)})))$$

最大似然/极大似然函数的随机梯度

- 对数似然函数：$\ell(\theta)=\ln L(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}\ln h_\theta\left(x^{(i)}\right)+\left(1-y^{(i)}\right)\ln\left(1-h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$

$$\frac{\partial\ell(\theta)}{\partial\theta_j}=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{y^{(i)}}{h_\theta\left(x^{(i)}\right)}-\frac{1-y^{(i)}}{1-h_\theta\left(x^{(i)}\right)}\right)\cdot\frac{\partial h_\theta\left(x^{(i)}\right)}{\partial\theta_j}$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{y^{(i)}}{g\left(\theta^T x^{(i)}\right)}-\frac{1-y^{(i)}}{1-g\left(\theta^T x^{(i)}\right)}\right)\cdot\frac{\partial g\left(\theta^T x^{(i)}\right)}{\partial\theta_j}$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{y^{(i)}}{g\left(\theta^T x^{(i)}\right)}-\frac{1-y^{(i)}}{1-g\left(\theta^T x^{(i)}\right)}\right)\cdot g\left(\theta^T x^{(i)}\right)\left(1-g\left(\theta^T x^{(i)}\right)\right)\cdot\frac{\partial\theta^T x^{(i)}}{\partial\theta_j}$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}\left(1-g\left(\theta^T X^{(i)}\right)\right)-\left(1-y^{(i)}\right)g\left(\theta^T X^{(i)}\right)\right)\cdot X_j^{(i)}=\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}-g\left(\theta^T X^{(i)}\right)\right)\cdot X_j^{(i)}$$

极大似然估计与Logistic回归目标函数

- 由于在极大似然估计中，当似然函数最大的时候模型最优；而在机器学习领域中，目标函数最小的时候，模型最优；故可以使用似然函数乘以-1的结果作为目标函数。

$$\ell(\theta)=\ln L(\theta)=\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}\ln h_\theta\left(x^{(i)}\right)+\left(1-y^{(i)}\right)\ln\left(1-h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$$

$$loss=-\ell(\theta)=-\sum_{i=1}^{m}\left(y^{(i)}\ln h_\theta\left(x^{(i)}\right)+\left(1-y^{(i)}\right)\ln\left(1-h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left[-y^{(i)}\ln\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)-\left(1-y^{(i)}\right)\ln\left(1-h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)\right]$$

θ参数求解

- Logistic回归θ参数的求解过程为(类似梯度下降方法):

$$\theta_j = \theta_j + \alpha \sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - h_\theta \left(x^{(i)} \right) \right) x_j^{(i)}$$

$$\theta_j = \theta_j + \alpha \left(y^{(i)} - h_\theta \left(x^{(i)} \right) \right) x_j^{(i)}$$

Softmax回归

- softmax回归是logistic回归的一般化，适用于K分类的问题，针对于每个类别都有一个参数向量θ，第k类的参数为向量θ_k，组成的二维矩阵为θ_{k*n}；
- softmax函数的本质就是将一个K维的任意实数向量压缩（映射）成另一个K维的实数向量，其中向量中的每个元素取值都介于（0，1）之间。
- softmax回归概率函数为：

$$p(y=k \mid x;\theta)=\frac{e^{\theta_k^T x}}{\sum_{l=1}^{K} e^{\theta_l^T x}}, k=1,2\cdots,K$$

Softmax算法原理

$$p(y=k \mid x;\theta)=\frac{e^{\theta_k^T x}}{\sum_{l=1}^{K} e^{\theta_l^T x}}, k=1,2\cdots,K$$

$$h_\theta(x)=\begin{bmatrix} p(y^{(i)}=1 \mid x^{(i)};\theta) \\ p(y^{(i)}=2 \mid x^{(i)};\theta) \\ \cdots \\ p(y^{(i)}=k \mid x^{(i)};\theta) \end{bmatrix}=\frac{1}{\sum_{j=1}^{k} e^{\theta_j^T x^{(i)}}}\begin{bmatrix} e^{\theta_1^T x} \\ e^{\theta_2^T x} \\ \cdots \\ e^{\theta_k^T x} \end{bmatrix} \Rightarrow \theta=\begin{bmatrix} \theta_{11} & \theta_{12} & \cdots & \theta_{1n} \\ \theta_{21} & \theta_{22} & \cdots & \theta_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \theta_{k1} & \theta_{k2} & \cdots & \theta_{kn} \end{bmatrix}$$

Softmax算法损失函数

$$J(\theta)=-\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}I\left(y^{(i)}=j\right)\ln\left(\frac{e^{\theta_j^T x^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k}e^{\theta_l^T x^{(i)}}}\right)$$

$$I\left(y^{(i)}=j\right)=\begin{cases}1, & y^{(i)}=j\\ 0, & y^{(i)}\neq j\end{cases}$$

Softmax算法梯度下降法求解

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k} I\left(y^{(i)} = j\right)\ln\left(\frac{e^{\theta_j^T x^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k} e^{\theta_l^T x^{(i)}}}\right)$$

$$I\left(y^{(i)} = j\right) = \begin{cases} 1, & y^{(i)} = j \\ 0, & y^{(i)} \neq j \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta_j} - I\left(y^{(i)} = j\right)\ln\left(\frac{e^{\theta_j^T x^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k} e^{\theta_l^T x^{(i)}}}\right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \theta_j} - I\left(y^{(i)} = j\right)\left(\theta_j^T x^{(i)} - \ln\left(\sum_{l=1}^{k} e^{\theta_l^T x^{(i)}}\right)\right)$$

$$= -I\left(y^{(i)} = j\right)\left(1 - \frac{e^{\theta_j^T x^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k} e^{\theta_l^T x^{(i)}}}\right)x^{(i)}$$

Softmax算法梯度下降法求解

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = -I\left(y^{(i)} = j\right)\left(1 - \frac{e^{\theta_j^T x^{(i)}}}{\sum_{l=1}^{k} e^{\theta_l^T x^{(i)}}}\right) x^{(i)}$$

$$\theta_j = \theta_j + \alpha \sum_{i=1}^{m} I\left(y^{(i)} = j\right)\left(1 - p\left(y^{(i)} = j \middle| x^{(i)}; \theta\right)\right) x^{(i)}$$

$$\theta_j = \theta_j + \alpha I\left(y^{(i)} = j\right)\left(1 - p\left(y^{(i)} = j \middle| x^{(i)}; \theta\right)\right) x^{(i)}$$


北风网
IBEIFENG.COM