线性回归 (Linear Regression)

线性回归是机器学习中最基础的模型之一。本章我们将从最小二乘法 (Least Squares) 出发，介绍线性回归的定义、矩阵形式以及几何意义。

---

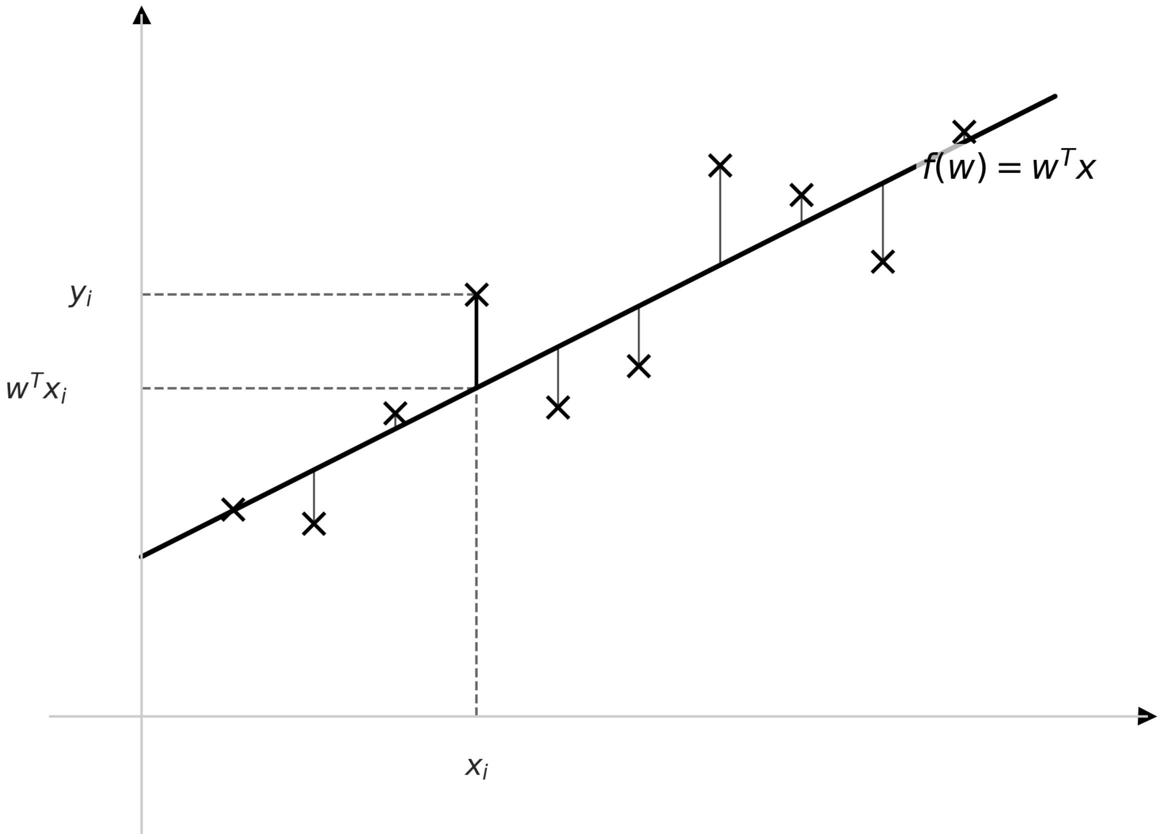
1. 最小二乘法 (Least Squares Estimation)

1.1 几何视角：最小二乘法 (Geometric View: Least Squares)

对于线性回归问题，我们有一组观测数据 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$。

- $x_i \in \mathbb{R}^p$：第 i 个样本的输入特征。
- $y_i \in \mathbb{R}$：第 i 个样本的输出标签。
- N：样本总数。
- p：特征维度。

我们的目标是寻找一个线性函数 $f(w) = w^T x$，使其能够尽可能准确地预测目标值 y。



(图示：一维线性回归拟合示意图。图中展示了数据点 (x_i, y_i) 与拟合直线 $f(w) = w^T x$ 之间的关系。)

核心概念：
如图中所示，对于任意一个样本点 x_i (例如图中标注的 x_i)：

- **真实值 (Label)**：y_i 是数据中记录的真实标签。
- **预测值 (Prediction)**：$f(x_i) = w^T x_i$ 是模型给出的预测结果。

- **残差 (Residual)**：真实值与预测值之间的垂直距离 $e_i = y_i - w^T x_i$。

为了量化模型的优劣，我们采用**最小二乘法 (Least Squares Estimation, LSE)**，即最小化所有样本点残差的平方和 (Residual Sum of Squares, RSS)：

$$L(w) = \sum_{i=1}^{N}(y_i - f(w))^2 = \sum_{i=1}^{N}(y_i - w^T x_i)^2 = ||Y - Xw||^2 \tag{1}$$

我们的优化目标是找到最优参数 $\hat{w}$：

$$\hat{w} = \underset{w}{\operatorname{argmin}}\, L(w) \tag{2}$$

1.2 矩阵形式 (Matrix Format)

为了方便计算，我们将数据写成矩阵形式。

定义：

- **设计矩阵 (Design Matrix)** $X \in \mathbb{R}^{N\times p}$：

$$X = (x_1, x_2, \ldots, x_N)^T = \begin{pmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_N^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Np} \end{pmatrix} \tag{3}$$

- **标签向量 (Label Vector)** $Y \in \mathbb{R}^{N\times 1}$：

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \tag{4}$$

此时，损失函数可以重写为：

$$\begin{aligned} L(w) &= (Xw - Y)^T(Xw - Y) \\ &= (w^T X^T - Y^T)(Xw - Y) \\ &= w^T X^T X w - w^T X^T Y - Y^T X w + Y^T Y \\ &= w^T X^T X w - 2w^T X^T Y + Y^T Y \end{aligned} \tag{5}$$

求解：
对 w 求偏导并令其为 0：

$$\frac{\partial L(w)}{\partial w} = 2X^T X w - 2X^T Y = 0 \tag{6}$$

得到正规方程 (Normal Equation)：

$$X^T X w = X^T Y \tag{7}$$

若 $X^T X$ 可逆，则最优解为：

1.3 几何解释：列空间投影 (Geometric View: Column Space Projection)

除了 1.1 节中在数据空间 (Data Space) 的直观理解外，最小二乘法在**样本空间 (Sample Space)** 中有一个更为深刻的几何解释。

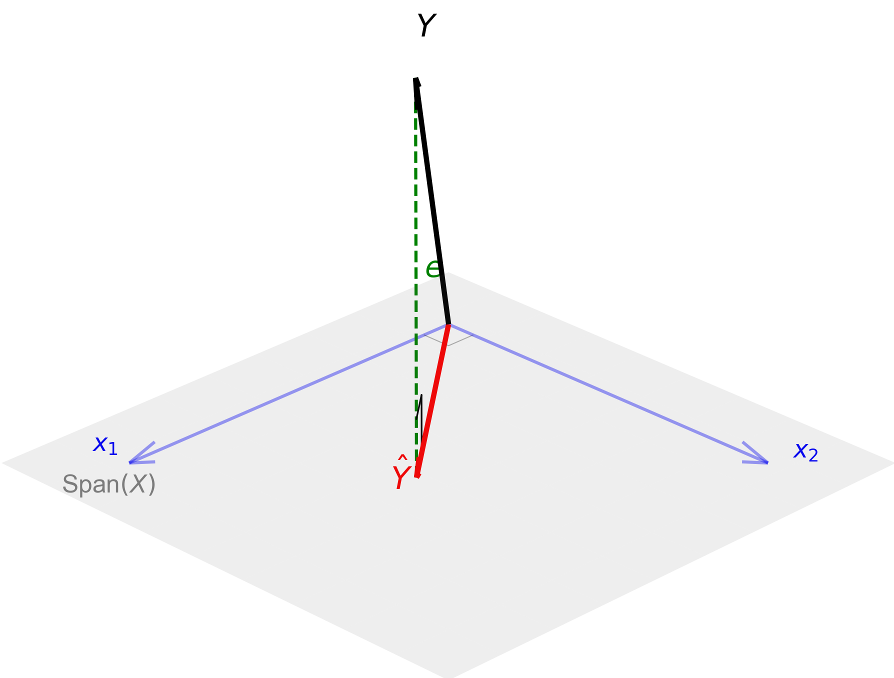
我们将 Y 和 X 的每一列都看作是 $\mathbb{R}^N$ 空间中的向量。

- $Y \in \mathbb{R}^N$：观测向量。
- $X = [x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(p)}]$：设计矩阵的 p 个列向量，每个 $x^{(j)} \in \mathbb{R}^N$。

这 p 个列向量张成了一个子空间 (Subspace)，称为**列空间 (Column Space)**，记为 $\mathcal{S} = \text{span}(X)$。

我们的模型预测值是 $\hat{Y} = Xw = x^{(1)}w_1 + \dots + x^{(p)}w_p$。
这意味着，**预测向量 $\hat{Y}$ 必须落在 X 的列空间 $\mathcal{S}$ 内**。

目标：
寻找一个 w，使得预测向量 $\hat{Y}$ 与真实向量 Y 之间的欧氏距离 $||Y - \hat{Y}||$ 最小。



(图示：最小二乘法的几何投影。$\hat{Y}$ 是 Y 在列空间 $\text{span}(X)$ 上的正交投影，残差 e 垂直于该平面。)

正交投影 (Orthogonal Projection)：
几何上非常明显，当 $\hat{Y}$ 是 Y 在子空间 $\mathcal{S}$ 上的**正交投影**时，距离最小。
此时，残差向量 $e = Y - \hat{Y}$ (即 $Y - Xw$) 必须垂直于子空间中的任意向量。

即残差垂直于 X 的每一列：

$$(x^{(j)})^T(Y - Xw) = 0, \quad \forall j = 1, \dots, p \tag{8}$$

写成矩阵形式就是：

$$X^T(Y - Xw) = 0 \tag{9}$$

这导出了正规方程：

$$X^TY = X^TXw \tag{10}$$

若 X^TX 可逆，则：

$$\hat{w} = (X^TX)^{-1}X^TY \tag{11}$$

投影矩阵 (Projection Matrix)：
如果我们把 $\hat{w}$ 代回预测公式，可以得到预测向量 $\hat{Y}$ 与 Y 的线性关系：

$$\hat{Y} = X\hat{w} = X(X^TX)^{-1}X^TY = HY \tag{12}$$

其中矩阵 $H = X(X^TX)^{-1}X^T$ 被称为**帽子矩阵 (Hat Matrix)** 或投影矩阵，它的作用是将任意向量 Y 投影到 X 的列空间中。

1.4 概率视角：极大似然估计 (Probabilistic View: MLE)

除了直观的几何解释，最小二乘法还可以从概率论的角度导出。
我们假设目标值 y 与输入 x 之间的关系如下：

$$y = f(w) + \varepsilon = w^Tx + \varepsilon \tag{13}$$

其中误差项 ε 服从**高斯分布 (Gaussian Distribution)**，且独立同分布 (i.i.d.)，均值为 0，方差为 σ^2：

$$\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \tag{14}$$

这意味着，给定输入 x 和参数 w，目标值 y 也服从高斯分布：

$$y|x; w \sim \mathcal{N}(w^Tx, \sigma^2) \tag{15}$$

其概率密度函数为：

$$p(y|x; w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(y - w^Tx)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{16}$$

极大似然估计 (Maximum Likelihood Estimation, MLE)：
为了估计参数 w，我们希望找到一组参数，使得观测数据 Y 出现的概率最大。
似然函数定义为所有样本概率密度的乘积：

$$L(w) = p(Y|X; w) = \prod_{i=1}^{N} p(y_i|x_i; w) \tag{17}$$

为了方便计算，通常取**对数似然 (Log-Likelihood)**：

$$
\begin{aligned}
\ell(w) = \log L(w) &= \sum_{i=1}^{N} \log p(y_i|x_i;w) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{ -\frac{(y_i - w^T x_i)^2}{2\sigma^2} \right\} \right) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \left(\log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{(y_i - w^T x_i)^2}{2\sigma^2} \right) \\
&= N \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} (y_i - w^T x_i)^2
\end{aligned} \tag{18}
$$

我们的目标是**最大化**对数似然函数 $\ell(w)$：

$$
\hat{w}_{MLE} = \underset{w}{\operatorname{argmax}}\, \ell(w) \tag{19}
$$

去掉常数项（第一项与 w 无关），最大化 $\ell(w)$ 等价于**最小化**第二项中的平方和部分：

$$
\hat{w}_{MLE} = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} (y_i - w^T x_i)^2 = \underset{w}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} (y_i - w^T x_i)^2 \tag{20}
$$

结论：LSE $\iff$ MLE

在高斯噪声假设 ($noise \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$) 下，极大似然估计 (MLE) 等价于最小二乘法 (LSE)。

$$
\underbrace{\underset{w}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} ||w^T x_i - y_i||_2^2}_{LSE} \iff \underbrace{\underset{w}{\operatorname{argmax}} \log \prod_{i=1}^{N} p(y_i|x_i;w)}_{MLE} \tag{21}
$$

这证明了最小二乘法不仅仅是直观上的“拟合距离最小”，在统计学上它也是高斯噪声假设下的最优参数估计。

---

2. 正则化 (Regularization)

在实际应用中，如果样本数量 N 远大于特征维度 p ($N \gg p$)，最小二乘法通常能工作得很好。
但在某些情况下（例如样本量不足，或特征维度过高），模型容易出现**过拟合 (Overfitting)**。

解决过拟合的常见方法：

1. **增加数据量** (More Data)。
2. **特征选择/特征提取** (Feature Selection / Extraction)，例如 PCA。
3. **正则化** (Regularization)。

2.1 正则化框架 (Regularization Framework)

正则化的核心思想是在损失函数中引入一个**惩罚项 (Penalty Term)**，以约束模型的复杂度。
通用的优化目标可以写为：

$$
\hat{w} = \underset{w}{\operatorname{argmin}} [L(w) + \lambda P(w)] \tag{22}
$$

- $L(w)$：原始损失函数 (Loss)，例如 $\sum ||w^T x_i - y_i||^2$。
- $P(w)$：惩罚项 (Penalty)，用于限制参数 w 的大小。

- λ：正则化系数 (Regularization Coefficient)，用于平衡“拟合程度”与“模型复杂度”。

常见的两种正则化：

1. **L1 正则化 (Lasso)**：
   $P(w) = ||w||_1 = \sum |w_j|$
2. **L2 正则化 (Ridge / 岭回归)**：
   $P(w) = ||w||_2^2 = w^T w$
   这也常被称为**权重衰减 (Weight Decay)**。

2.2 岭回归 (Ridge Regression)

损失函数定义：

$$J(w) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - w^T x_i)^2 + \lambda w^T w \tag{23}$$

写成矩阵形式：

$$J(w) = (Xw - Y)^T (Xw - Y) + \lambda w^T w \tag{24}$$

求解最优参数：
对 w 求导并令其为 0：

$$\begin{aligned} \frac{\partial J(w)}{\partial w} &= 2X^T X w - 2X^T Y + 2\lambda w \\ &= 2(X^T X + \lambda I) w - 2X^T Y = 0 \end{aligned} \tag{25}$$

求解最优解 $\hat{w}$：
我们希望最小化 $J(w)$，因此对 w 求导并令其为 0：

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = 2(X^T X + \lambda I) w - 2X^T Y = 0 \tag{26}$$

整理得到岭回归的解析解：

$$\hat{w}_{Ridge} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y \tag{27}$$

岭回归的意义：

- **解决不可逆问题**：即使 $X^T X$ 不可逆（如 $N < p$），加上 λI ($\lambda > 0$) 后矩阵 $(X^T X + \lambda I)$ 变得正定且可逆。
- **权重衰减 (Weight Decay)**：λ 越大，惩罚项越大，迫使参数 w 的模长越小（趋向于 0），从而降低模型复杂度，防止过拟合。

2.3 贝叶斯视角：最大后验估计 (Bayesian View: MAP)

岭回归也可以从贝叶斯统计的角度导出。
我们不再把 w看作一个固定的未知参数，而是看作一个随机变量，并假设它服从**高斯先验分布 (Gaussian Prior)**：

$$w \sim \mathcal{N}(0, \sigma_0^2 I) \tag{28}$$

即 $p(w) \propto \exp\left\{-\frac{||w||^2}{2\sigma_0^2}\right\}$。

根据贝叶斯公式，后验概率 (Posterior) 为：

$$p(w|y) = \frac{p(y|w) \cdot p(w)}{p(y)} \tag{29}$$

其中 $p(y|w)$ 是似然函数，$p(y)$ 是归一化常数（与 w 无关）。

最大后验估计 (Maximum A Posteriori, MAP)：
我们要找到使得后验概率最大的 w：

$$\begin{aligned} \hat{w}_{MAP} &= \underset{w}{\operatorname{argmax}}\, p(w|y) \\ &= \underset{w}{\operatorname{argmax}}\, p(y|w) \cdot p(w) \\ &= \underset{w}{\operatorname{argmax}}[\log p(y|w) + \log p(w)] \end{aligned} \tag{30}$$

代入高斯似然和高斯先验：

- **似然函数 (Likelihood)** $y|w \sim \mathcal{N}(w^T x, \sigma^2)$：

$$p(y|w) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(y_i - w^T x_i)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{31}$$

- **先验概率 (Prior)** $w \sim \mathcal{N}(0, \sigma_0^2 I)$：

$$p(w) = \frac{1}{(2\pi\sigma_0^2)^{p/2}} \exp\left\{-\frac{||w||^2}{2\sigma_0^2}\right\} \tag{32}$$

取对数：

$$\begin{aligned} \log p(y|w) &= \sum_{i=1}^{N}\left(\log\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} - \frac{(y_i - w^T x_i)^2}{2\sigma^2}\right) \propto -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - w^T x_i)^2 \\ \log p(w) &= \log\frac{1}{(2\pi\sigma_0^2)^{p/2}} - \frac{||w||^2}{2\sigma_0^2} \propto -\frac{1}{2\sigma_0^2}||w||^2 \end{aligned} \tag{33}$$

忽略常数项，最大化对数后验等价于：

$$\hat{w}_{MAP} = \underset{w}{\operatorname{argmax}}\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - w^T x_i)^2 - \frac{1}{2\sigma_0^2}||w||^2\right] \tag{34}$$

等价于**最小化**负号后的内容：

$$\hat{w}_{MAP} = \underset{w}{\operatorname{argmin}}\left[\sum_{i=1}^{N}(y_i - w^T x_i)^2 + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2}||w||^2\right] \tag{35}$$

结论：
这正是岭回归的损失函数，其中正则化系数 λ 对应于噪声方差与先验方差的比值：

$$\lambda = \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2} \tag{36}$$

- σ_0^2 越小（先验越强，越确信 w 接近 0），则 λ 越大，正则化越强。