Linear Regression 线性回归

线性回归，给定一个样本集合 $D = (x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_m, y_m)$ 这里的x_i, y_i都可以是高维向量，可以找到一个线性模拟$f(x_i) = wx_i + b$，只要确定了w跟b，这个线性模型就确定了，如何评估样本y与你的$f(x)$之间的差别，最常用的方法是最小二乘法。

也就是说，我们用一条直线去模拟当前的样本，同时预测未来的数据，即我们给定某一个x值，根据模型可以返回给我们一个y值，这就是线性回归。

为了表示方便，我们使用如下的形式表示假设函数，为了方便 $h_\theta(x)$ 也可以记作 $h(x)$。

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$$

现在的问题是我们如何选择θ_0跟θ_1 ，使得对于训练样本(x, y)，$h(x)$最『接近』y。$h(x)$与y越是接近，说明假设函数越是准确。这里我们选择均方误差作为衡量标准，即每个样本的估计值与实际值之间的差的平方的均值最小。

用公式表达为

$$\underset{\theta_0, \theta_1}{min} \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2$$

$\frac{1}{2m}$是为了后续求导的计算方便，不影响最小化均方误差。

下面引入`代价函数（cost function）`。

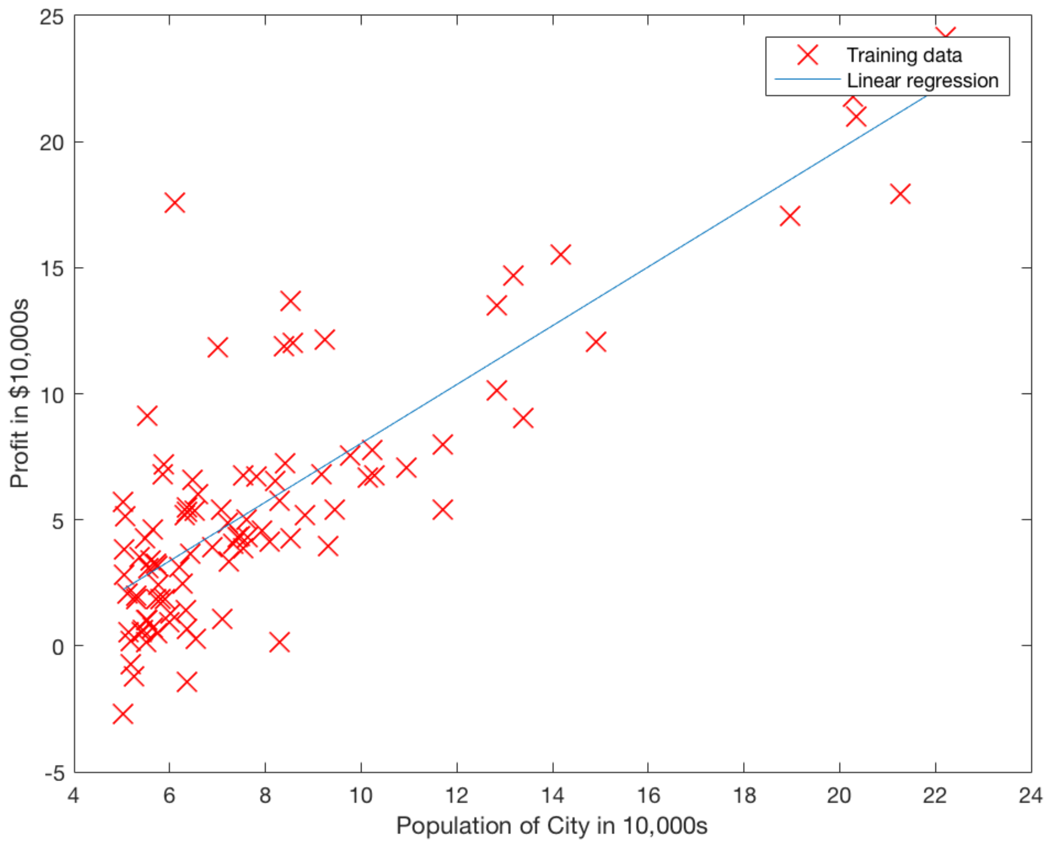
Linear Regression cost function

$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2$$

```
X = [ones(m,1),data(:,1)]; %Add a column of ones to x
Z = (X*theta - y).^2;
J = sum(Z(:,1)) / (2*m);
```

也就是我们的优化目标，使得代价函数$J(\theta_0, \theta_1)$最小，即$min_{\theta_0, \theta_1} J(\theta_0, \theta_1)$

对应于不同的θ_0 θ_1 ，函数$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$表示不同的直线。如下图，是我们最理想的情况。

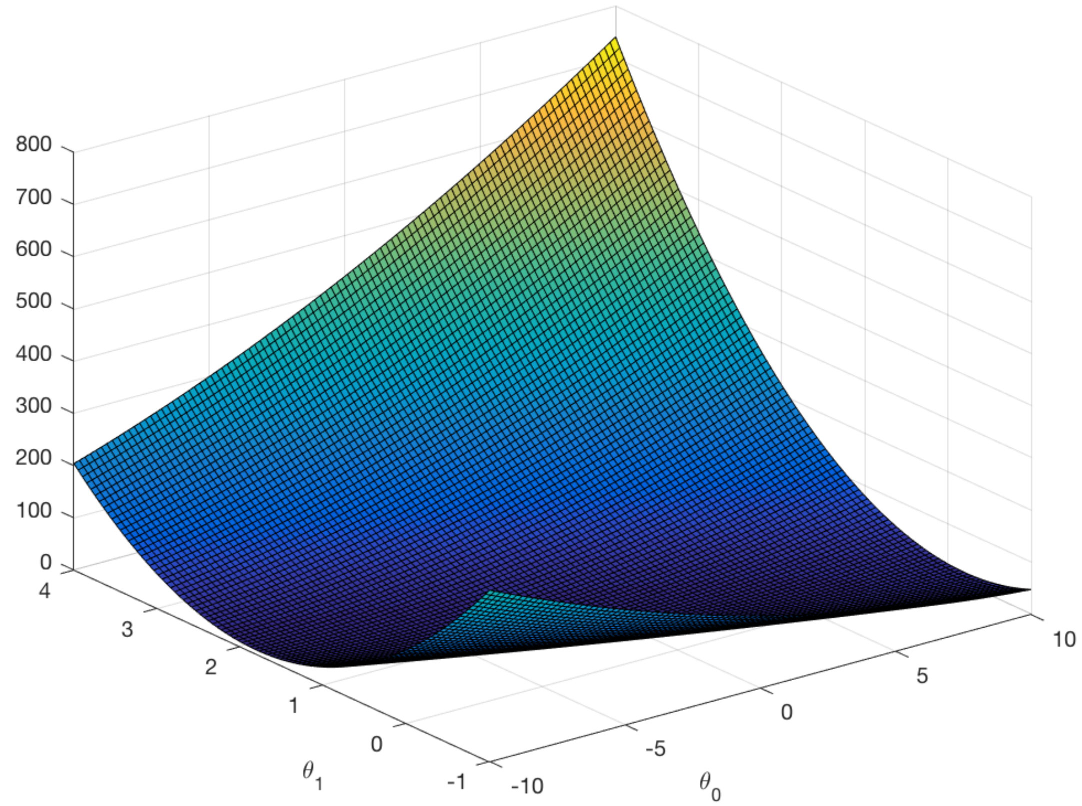


我们需要不断的尝试不同的$\theta_0\theta_1$直到找到一个最佳的$h_\theta(x)$。是否有特定的算法，来帮助我们自动的找到最佳的$h_\theta(x)$呢？下面我们介绍梯度下降法。

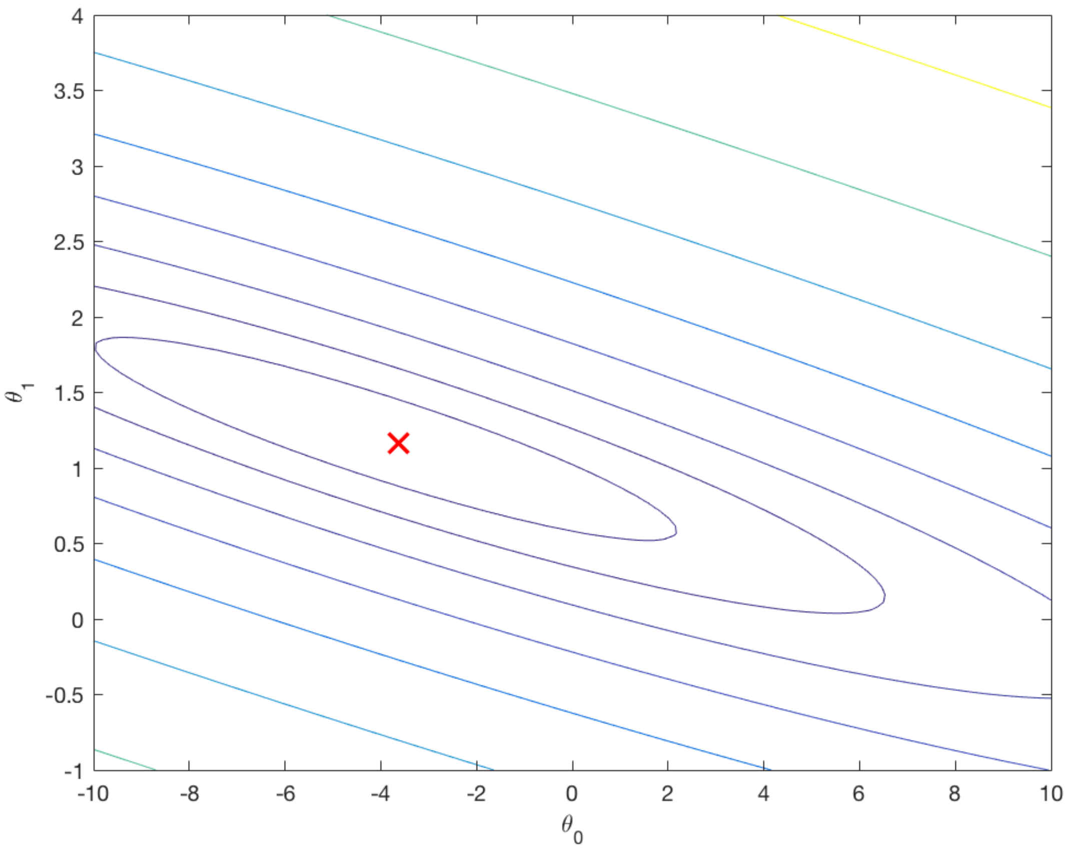
梯度下降（Gradient descent）

梯度下降法是一种优化方法，它可以帮助我们快速的找到一个函数的局部极小值点，也就是$min\,J(\theta_0,\theta_1)$。它的基本思想是：我们先随机一个初始的$\theta_0\theta_1$，通过不断的改变它们的值，使得$J(\theta)$变小，最终找到$J(\theta)$的最小值点。

为了更好的理解梯度下降法，我们同时设置的$\theta_0\theta_1$的值，再绘出$J(\theta_0,\theta_1)$的图形，因为有两个变量，因此$J(\theta_0,\theta_1)$的图形为一个曲面。如下所示，图形的最低点即为我们想要求得的$min\,J(\theta_0,\theta_1)$。



3D的图形不方便研究`Gradient descent`因此我们使用二维的等高线，同一等高线上的点对应的$J(\theta_0, \theta_1)$的值相同，如下图所示，越靠近二维等高线的中心，表示$J(\theta_0, \theta_1)$的值越小。



Have some function $J(\theta_0, \theta_1)$

want $min_{\theta_0,\theta_1} J(\theta_0, \theta_1)$

Outline:

- Start with some θ_0, θ_1
- keep changing θ_0, θ_1 to reduce $J(\theta_0, \theta_1)$ until we hopefully end up at $min_{\theta_0,\theta_1} J(\theta_0, \theta_1)$

下面看看算法的具体过程，如下所示，其中α叫做`学习率（learn rate）`用来控制梯度下降的幅度，$\frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta_0, \theta_1)$叫做梯度（代价函数对每个$\theta$的偏导）。这里要注意的是每次必须同时的改变$\theta_0$和$\theta_1$的值。

Gradient descent algorithm

repeat until convergence {

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta_0, \theta_1)$$

(simultaneously update θ_j for $j = 0$ and $j = 1$)

}

当$j = 0$时，

$\frac{\partial}{\partial\theta_0}J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})$

$\theta_0 := \theta_0 - \alpha\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})$

当$j = 1$时，

$\frac{\partial}{\partial\theta_1}J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})x^{(i)}$

$\theta_1 := \theta_1 - \alpha\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})x^{(i)}$

```
Z = X' * (X * theta - y) * alpha / m;
theta = theta - Z;
```

学习率α会影响梯度下降的幅度，如果α太小，θ的每次变化幅度会很小，梯度下降的速度就会很慢，如果α过大，则θ每次的变化幅度就会很大，有可能使得$J(\theta)$越过最低点，永远无法收敛到最小值。随着$J(\theta)$越来越接近最低点，对应的梯度值$\frac{\partial}{\partial\theta_j}J(\theta_0, \theta_1)$也会越来越小，每次下降的程度也会越来越慢，因此我们并不需要刻意的去减少α的值。

事实上，由于线性回归的代价函数总是一个凸函数（Convex Function）这样的函数没有局部最优解，只有一个全局最优解，因此我们在使用梯度下降的时候，总会找到一个全局的最优解。

Linear Regression with Mulitiple Variables

在实际问题中，输入的数据会有很多的特征值，而不仅仅只有一个。这里我们约定，用n来表示特征的数量，m表示训练样本的数量。$x^{(i)}$表示第i个训练样本，$x_j^{(i)}$表示第i个训练样本的第j个特征值。

单元线性回归中的假设函数为

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x$$

同理类比得，在多元线性回归中的假设函数为

$$h_\theta(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_n x_n$$

$$h_\theta(x) = \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \cdots + \theta_n x_n = \theta^T x$$

cost function

多元线性回归的代价函数跟一元线性回归的代价函数相同。只是x由Scale Value变为了Vector Value。

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2$$

梯度下降（Gradient descent）

repeat until convergence {

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

(simultaneously update θ_j for $j = 0, \cdots, n$)

}

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

$$\theta_0 := \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_0^{(i)}$$

$$\theta_1 := \theta_1 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_1^{(i)}$$

$$\theta_2 := \theta_2 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_2^{(i)}$$

($x_0^{(i)}$ =1)

特征放缩

对于多元线性回归，如果每个特征值的相差范围很大，梯度下降的速度会很慢，这时候就需要对特征值数据做缩放处理（Feature Scaling），从而将所有特征的数据数量级都放缩在一个很小的范围内，以加快梯度下降的速度。

常用的特征处理的方法就是均值归一化（Mean Normalization）

$$x_i = \frac{x_i - \mu_i}{\max - \min}$$

或者

$$x_i = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i}$$

正规方程

当我们使用梯度下降法去求未知参数θ的最优值时，需要通过很多次的迭代才能得到全局最优解，有的时候梯度下降的速度会很慢。有没有其他更好的方法呢？假设代价函数$J(\theta) = a\theta^2 + b\theta + c$，$\theta$是一个实数，求$\theta$的最优解，只需要令它的导数为零。

事实上的θ是一个$n+1$维向量，需要我们对每个θ_i求偏导，令偏导为零，就可以求出每个θ_i的值。

首先, 在数据集前加上一列x_0, 值都为1；然后将所有的变量都放入矩阵X中(包括加上的x_0)；再将输出值放入向量y中，最后通过公式$\theta = (X^T X)^{-1} X^T y$, 就可以算出$\theta$的值。这个公式就叫做正规方程，正规方程不需要进行特征放缩。

对于正规方程中$X^T X$不可逆的情况，可能是我们使用了冗余的特征，特征的数量超过了样本的数量，我们可以通过删掉一些不必要的特征或者使用正则化来解决。

```
theta = pinv(X'*x)*x'*y;
```

Gradient Descent VS Normal Equation

Gradient Descent	Normal Equation
Need to choose α.	No need to choose α.
Need many iterations.	No need to iterate.
Works well even when n is large.	need to compute $(X^T X)^{-1}$,slow if n is very large.

参考文献

- 《机器学习》周志华老师著
- 《统计学习方法》李航老师著
- Couresera Machine Learning Andrew-Ng
- Machine-Learning-Andrew-Ng-My-Notes