监督学习
--回归

万永权

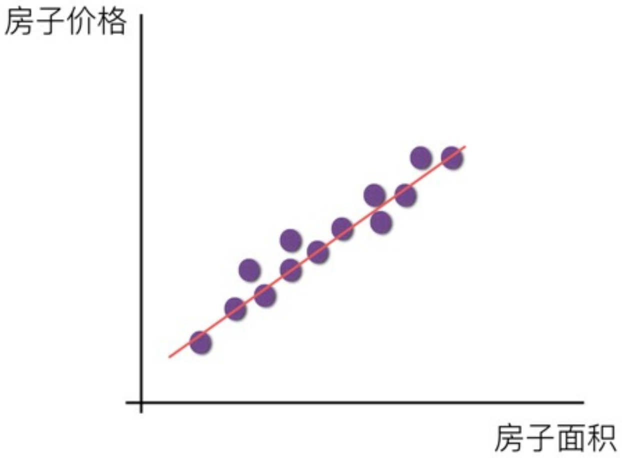
目录

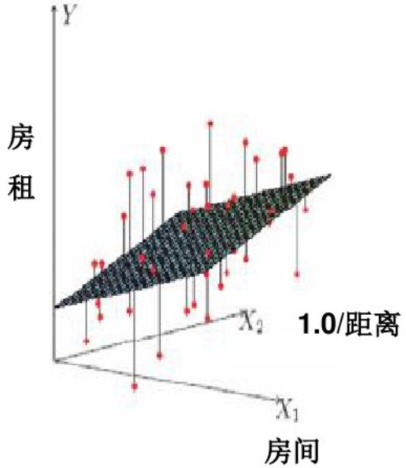
CONTENTS

回归

- 回归属于监督学习中的一类任务。
  该任务的核心思想是从连续型的统计数据中得到数学模型，然后将该数学模型用于预测或者分类。

- 回归方法处理的数据可以是一维的，也可以是多维的。





回归（Regression）

- 英国人类学家高尔登（Francis Galton）首次在《自然遗传》一书中，提出并阐明了“相关”和“相关系数”两个概念，为相关论奠定了基础。
- 1870年，他和英国统计学家Karl Pearson对上千个家庭的身高、臂长、拃长做了测量，发现：
- 儿子身高（Y）与父亲身高（X）存在线性关系：
  - $Y = 0.516X + 33.73$
- Galton 将这种身高趋向于种族稳定的现象称为“回归”。

回归

- “回归”成为表示变量之间某种数量依存关系的统计学术语
- 机器学习中的“回归”，借鉴了统计学中的同名术语
- 机器学习中回归任务的实现，采用了机器学习中的一套规则、实现方法和评价标准，这些与统计学有着很大的不同

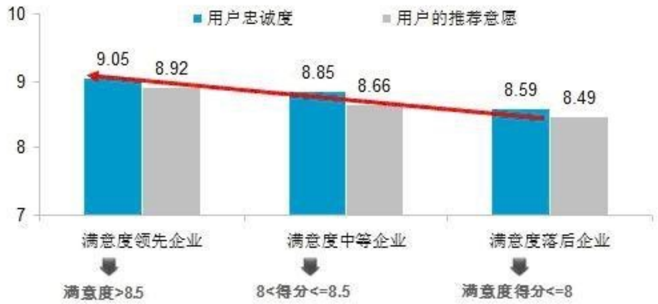
回归的应用

回归分析简单有效，应用十分广泛，包括：

◆广告点击率的预估、

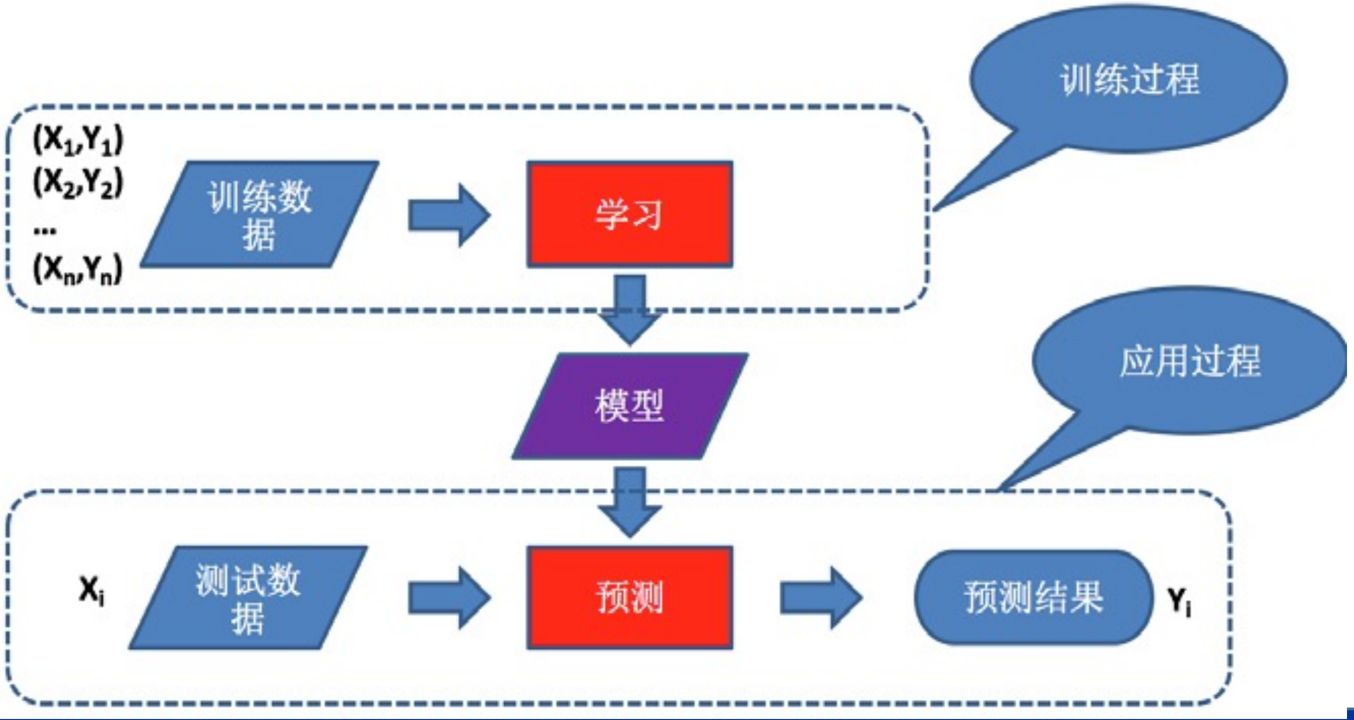
◆大型网站的容量规划、

◆用户满意度的分析等等。



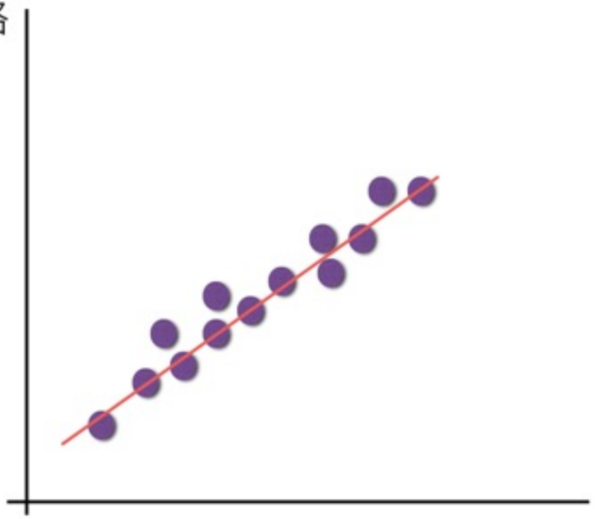
回归

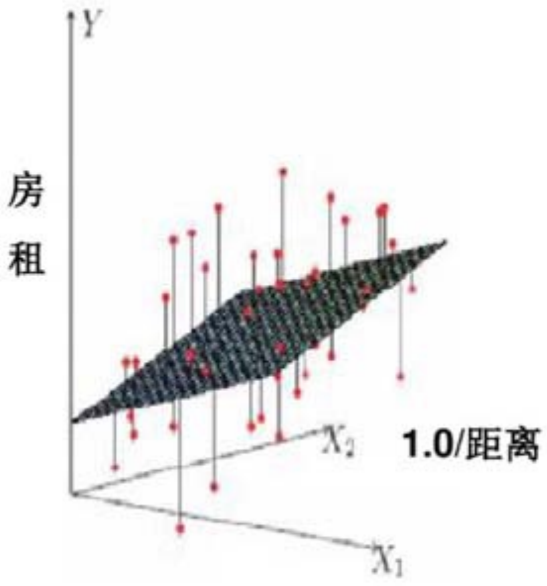
- 回归分析研究的主要是因变量（目标）和自变量（特征）之间的定量依存关系。
- 按数量依存关系的类型，可分为线性回归分析和非线性回归分析。
- 学习过程如下：



回归

- 根据自变量的个数，回归可以分为：
  - 一元回归分析
  - 多元回归分析



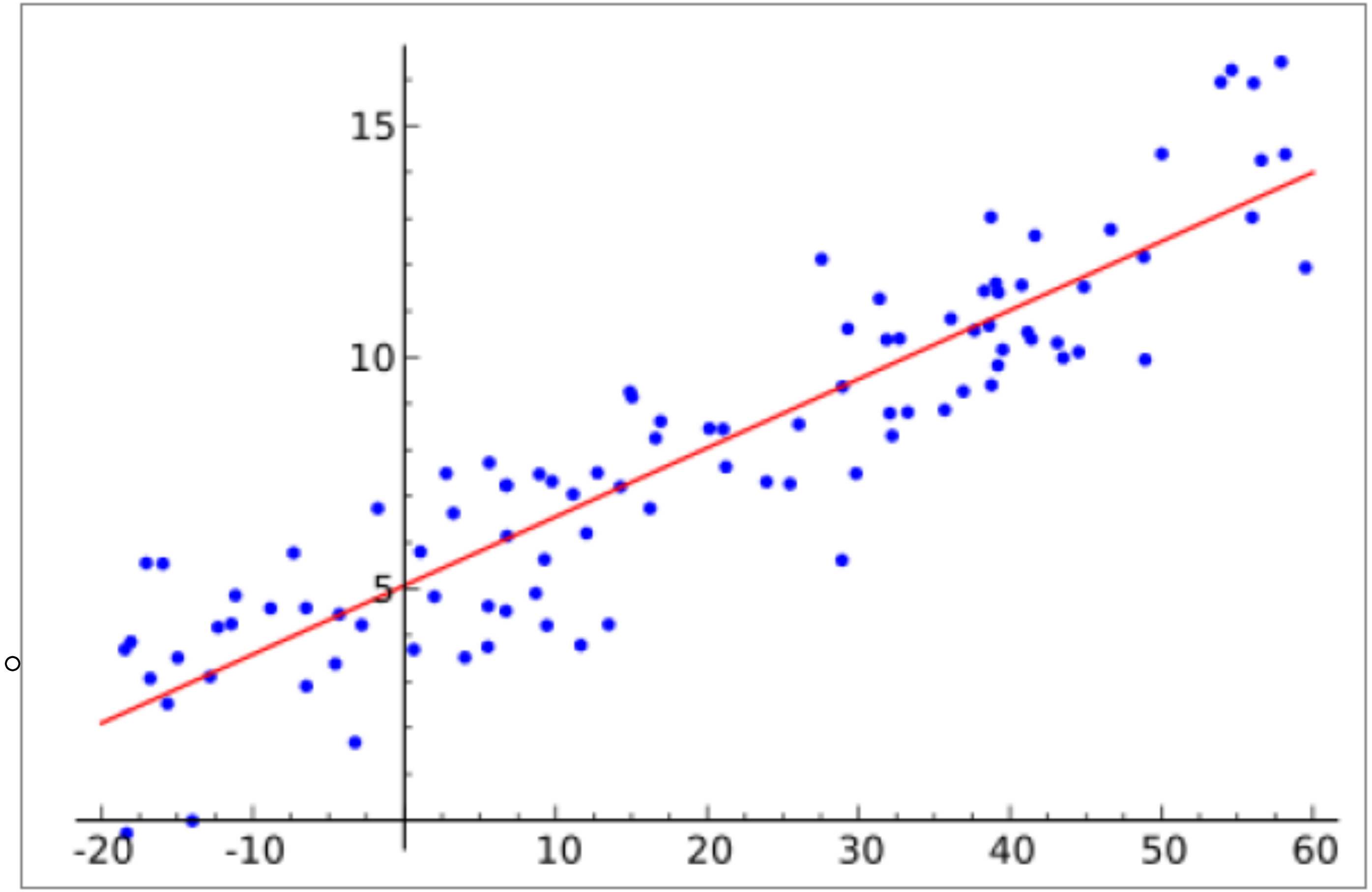


（1）线性回归

- 线性回归模型：$y = w^T x + e$，其中w^T是模型参数向量的转置，e表示误差。
- 研究一个因变量与一个或多个自变量间多项式的回归分析方法，称为**多项式回归**。
- 如果自变量只有一个时，称为**一元多项式回归**；
- 如果自变量有两个或两个以上时，称为**多元多项式回归**。
- 若一个因变量与一个或多个自变量间是非线性关系，例如，$y(x)= w_2x^2+w_1x+e$，则称为**非线性回归**。
- 在一元多项式回归分析中，若一个自变量和一个因变量的关系可用一条直线近似表示，这种回归称为**一元线性回归**，即找一条直线来拟合数据。
- 如果在多元多项式回归分析中，一个因变量和多个自变量之间是线性关系，则称为**多元线性回归**。

线性回归

- 线性回归中，采用具有如下特征的函数对观测数据进行建模：
  - 该函数是模型参数的线性组合；
  - 该函数取决于一个（一元线性回归）或多个独立自变量（多元线性回归）。



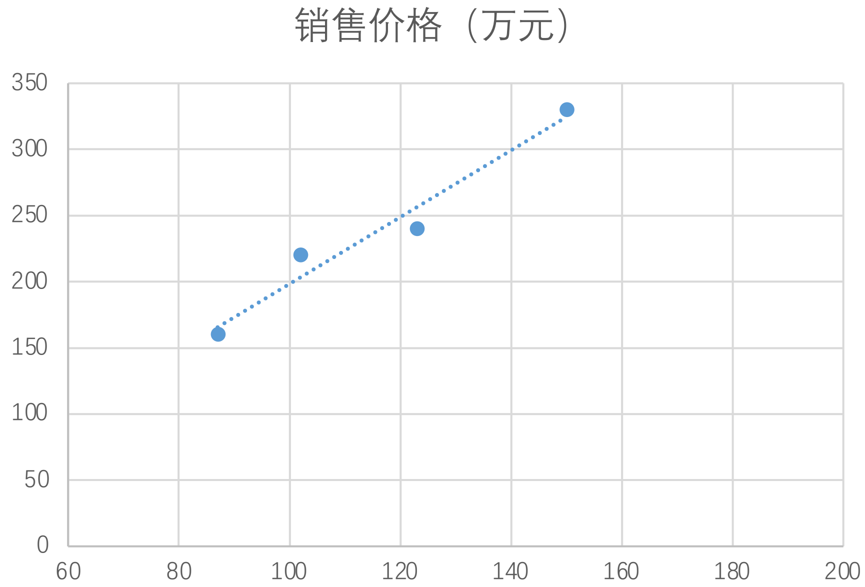
$$y(\mathbf{x}) = \mathbf{w}\cdot\mathbf{x} + b$$

模型表达：$y\,(x,w)=w_1x_1+\ldots+w_nx_n+b$

回归

假设有房屋销售的数据：

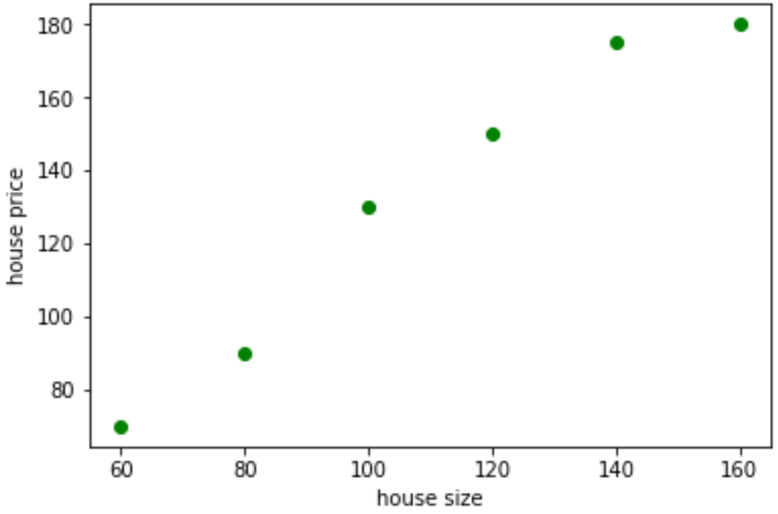
面积（平方米）	销售价格（万元）
123	240
150	330
87	160
102	220

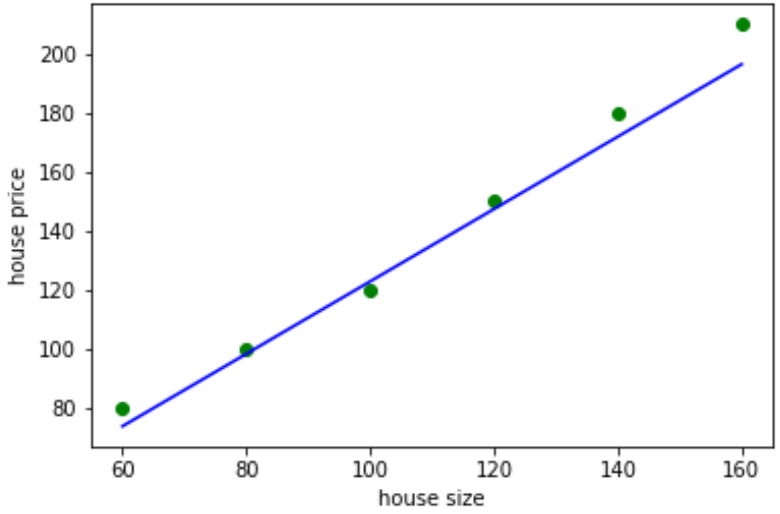


例:

房屋的价格与面积、卧室数目、地铁、电梯等有关系，这些称为特征。假设我们的房屋价格仅仅与面积有关系，那么我们如何找出房屋价格和面积之间的关系呢?

训练样本	房屋面积	价格
1	60	70
2	80	90
3	100	130
4	120	150
5	140	175
6	160	180





一元线性回归

- 寻找 X 和 Y 之间的线性关系
- 其中 X 只有一维数据

$$Y = \theta_0 + \theta_1 * X$$

- θ_0 和 θ_1 均称为 参数
- 一元线性回归的任务就是通过给定的训练数据，来获得最佳的参数值，这个过程称为“学习”，从数据中学习。
- 参数决定了回归直线相对于训练集的准确程度，即，模型预测值与训练集中实际值之间的差距，称为误差。
- 学习的目的是为了获得参数的最优值，从而完成模型的构建。

一元线性回归

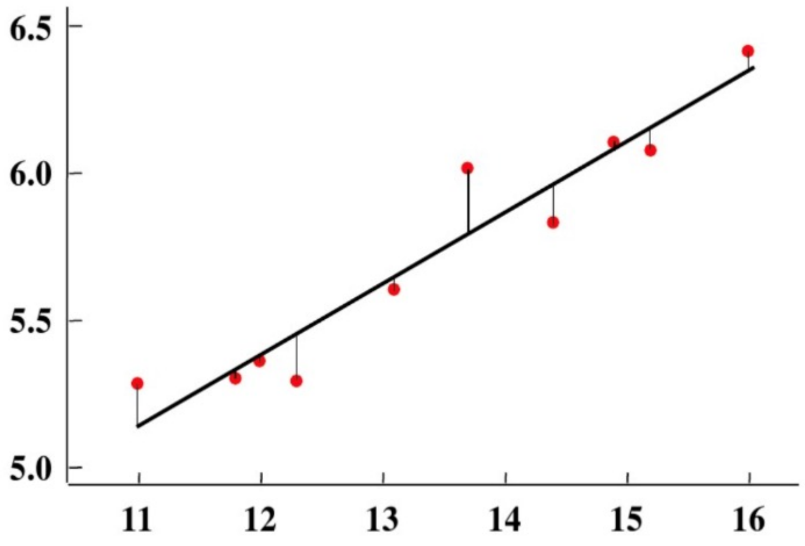
如何确定参数 θ_0 和 θ_1 呢?

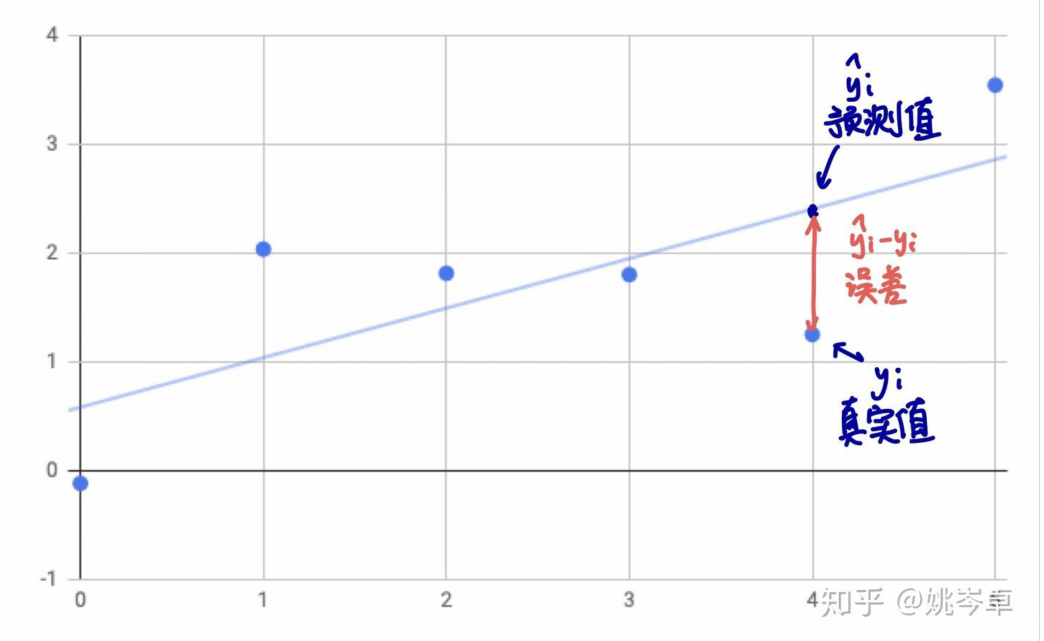
常采用的策略是误差平方和最小化准则，即：

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(\hat{Y}(\mathrm{i}) - Y(\mathrm{i})\right)^2$$

$$min_\theta\ J_\theta$$

$\hat{Y} - Y$ 为残差：实测点到回归直线的纵向距离

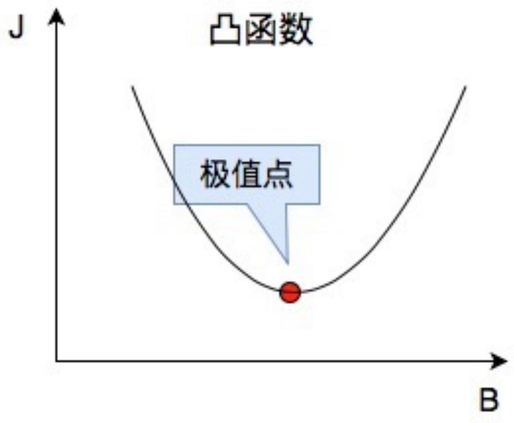




一元线性回归

问题转化为求J_θ的最小值问题。
步骤包括：
1. 对目标函数求导；
2. 令其导数为0，求得极值。

如果该函数是凸函数，极值点就是最值点。
这就是著名方法——最小二乘法的基本思想。



直接计算法

一元线性回归方程

- 设一元线性回归方程为 $\hat{y} = \alpha x + \beta$
- 数据样本点为 (x_1, y_1), (x_2, y_2), $\cdots$, (x_n, y_n)
- 要使得这 n 个样本点落在在一元线性回归方程附近，不妨假设误差为 ε,使得每个样本点都落在一元线性回归方程上。
- 因此 $\hat{y}_i = y_i + \varepsilon_i$ 恒成立。
- 回归直线应满足的条件是：全部观测值与对应的回归估计值的误差平方和最小，即：

$$
\begin{aligned}
\arg\min_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 &= \arg\min_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \\
&= \arg\min_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \alpha x_i - \beta)^2
\end{aligned}
$$

一元线性回归

- 令 $J(\alpha,\beta)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\alpha x_i-\beta)^2$ ，原问题就转化为求关于α和β二元函数J的极小值的问题。
- 由微积分相关知识可知：

关于α的导数

$$\nabla_\alpha J(\alpha,\beta)=-2\sum_{i=1}^{n}(y_i-\alpha x_i-\beta)x_i$$

$$=-2\sum_{i=1}^{n}x_iy_i+2\alpha\sum_{i=1}^{n}x_i^2+2\beta\sum_{i=1}^{n}x_i$$

关于β的导数

$$\nabla_\beta J(\alpha,\beta)=-2\sum_{i=1}^{n}(y_i-\alpha x_i-\beta)$$

$$=-2\sum_{i=1}^{n}y_i+2\alpha\sum_{i=1}^{n}x_i+2n\beta$$

一元线性回归

- 然后令 $\nabla_\alpha J(\alpha,\beta)=0$ 和 $\nabla_\beta J(\alpha,\beta)=0$ 即可求出α、β的值。

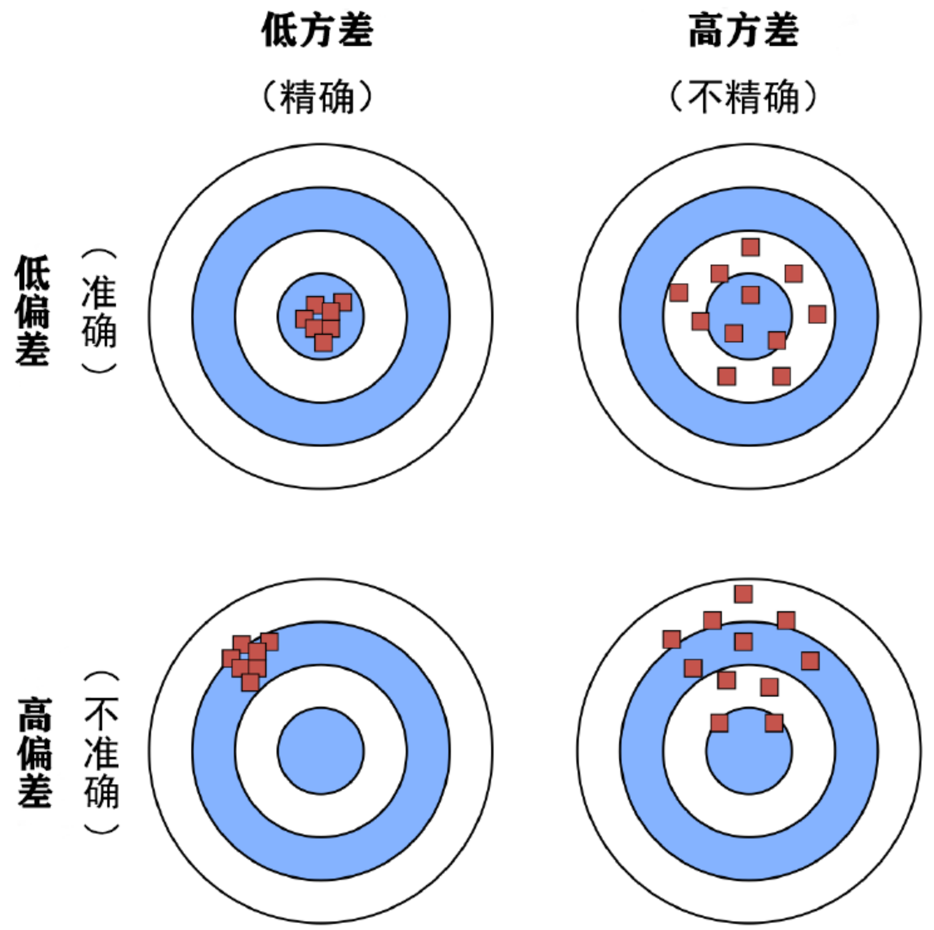
$$\nabla_\beta J(\alpha,\beta)=0$$
$$\Rightarrow \sum_{i=1}^n y_i=\alpha\sum_{i=1}^n x_i+n\beta$$
$$\Rightarrow \bar{y}=\alpha\bar{x}+\beta$$

$$\nabla_\alpha J(\alpha,\beta)=0$$
$$\Rightarrow \sum_{i=1}^n x_i y_i=\alpha\sum_{i=1}^n x_i^2+\beta\sum_{i=1}^n x_i$$
$$\Rightarrow \alpha=\frac{\sum\limits_{i=1}^n (x_i y_i-\bar{y}x_i)}{\sum\limits_{i=1}^n (x_i^2-\bar{x}x_i)}=\frac{\sum\limits_{i=1}^n x_i y_i-\frac{1}{n}(\sum\limits_{i=1}^n x_i)(\sum\limits_{i=1}^n y_i)}{\sum\limits_{i=1}^n x_i^2-\frac{1}{n}(\sum\limits_{i=1}^n x_i)(\sum\limits_{i=1}^n x_i)}$$
$$=\frac{\sum\limits_{i=1}^n (x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum\limits_{i=1}^n (x_i-\bar{x})^2}$$

教材P155

偏差与方差

教材P163



◆偏差

- 描述模型预测值与实际值之间的偏离关系

◆方差

- 描述模型预测值的变化范围

- 偏差-方差权衡

模型　　训练时间等

- 过拟合：对噪声过于敏感，方差大 → 增加表示/有效容量
- 欠拟合：对噪声过于不敏感，偏差大 → 降低表示/有效容量

在固定数据集上无法同时优化方差和偏差

方差和协方差

- 协方差（Covariance）在概率论和统计学中用于衡量两个变量的总体误差。 而方差是协方差的一种特殊情况，即当两个变量是相同的情况。
- 可以通俗的理解为：两个变量在变化过程中是同方向变化？还是反方向变化？同向或反向程度如何？
  - 你变大，同时我也变大，说明两个变量是同向变化的，这时协方差就是正的。
  - 你变大，同时我变小，说明两个变量是反向变化的，这时协方差就是负的。
  - 从数值来看，协方差的数值越大，两个变量同向程度也就越大。反之亦然。

最小二乘法

- 最小二乘法（又称最小平方法）是一种数学优化技术。它通过最小化误差的平方和寻找数据的最佳函数匹配。
- 利用最小二乘法可以简便地求得未知的数据，并使得这些求得的数据与实际数据之间误差的平方和为最小。
- 基本思路是：令

$$f(x) = a_1\varphi_1(x) + a_2\varphi_2(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x)$$

其中，$\varphi(x)$ 是事先选定的一组线性无关的函数，

α_k 是待定系数， $(k = 1, 2, \cdots, m, m < n)$

拟合准则是使 y_i $(i = 1,2,\cdots,n)$与 $f(x_i)$的距离 δ_i的平方和最小。

从样本数据出发推导损失函数

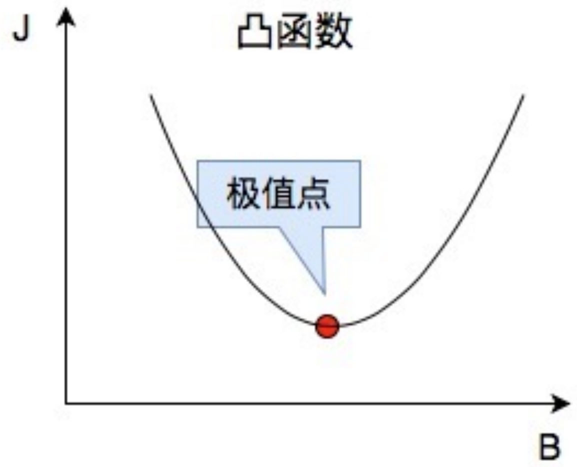
在样本数据中 $y^{(i)}$ 是实际存在值而 $h_\theta(x^{(i)})$ 对应的是模型预测值，显然如果想要模型预测的效果好，那么对应的误差就要小，假设函数在任意样本点的误差为 $|h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)}|$ 则 m 个样本点的误差和为 $\sum_{i=1}^{m}|h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)}|$ ，因此问题就转化为求解 $\arg\min_\theta \sum_{i=1}^{m}|h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)}|$

为了后续求解最优值(绝对值函数不好求导)，所以损失函数采用了误差平方和的形式

$$\arg\min_\theta \sum_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)})-y^{(i)})^2$$ 。

回归

- 问题转化为求 J_θ 的最小值问题。
- 步骤包括:
- 1. 对目标函数求导;
- 2. 令其导数为0，求得极值。
- 如果该函数是凸函数，极值点就是最值点。
- 这就是著名方法——最小二乘法的基本思想。



梯度下降算法

梯度下降法是一种迭代算法，迭代更新参数θ的值，逐步实现目标函数的极小化。

具体的更新过程如下：

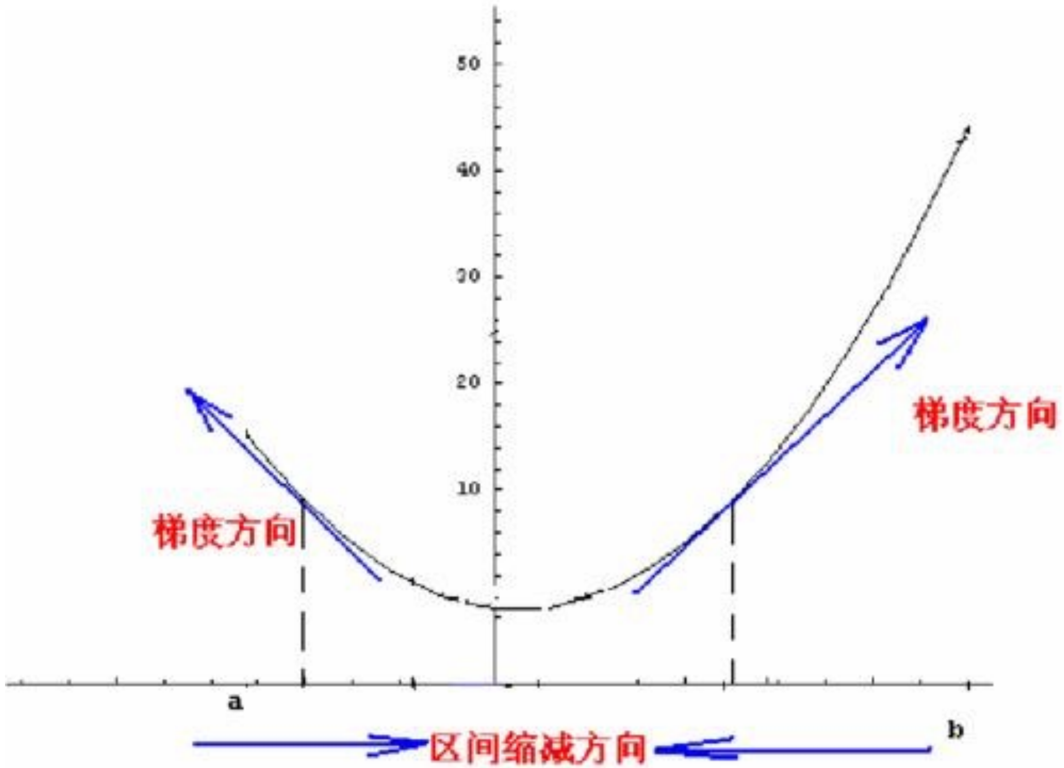
1. 随机初始化参数 θ
2. 迭代新的θ使得 $J(\theta)$更小

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

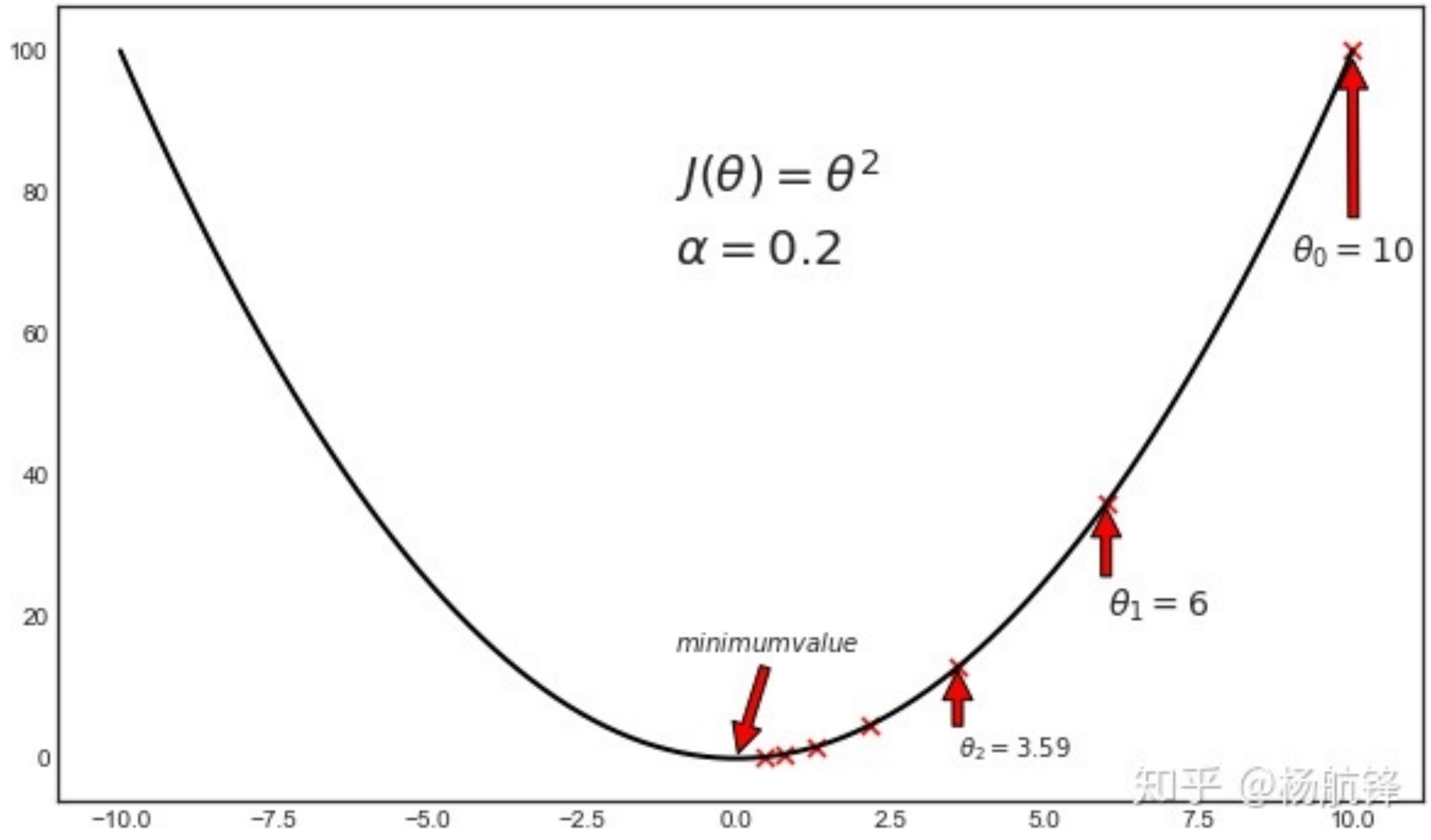
$$\theta_j := \theta_j - \alpha\frac{\partial J(\Theta)}{\partial \theta_j}$$

3. 如果 $J(\theta)$ 能够继续减少，则返回 2

α 为步长（学习速率）：超参数



梯度下降法



100
80
60
40
20
0
−10.0
−7.5
−5.0
−2.5
0.0
2.5
5.0
7.5
10.0
$J(\theta) = \theta^2$
$\alpha = 0.2$
$\theta_0 = 10$
$\theta_1 = 6$
$\theta_2 = 3.59$
minimumvalue
知乎 @杨航锋

参数与超参数

参数就是模型内部的配置变量，可以用数据估计它的值。

参数有以下特征：

- 进行模型预测时需要模型参数；
- 模型参数值可以定义模型功能；
- 模型参数用数据估计或数据学习得到；
- 模型参数一般不由实践者手动设置；
- 模型参数通常作为学习模型的一部分保存。

通常使用优化算法估计模型参数，优化算法是对参数的可能值进行的一种有效搜索。

参数与超参数

模型超参数是模型外部的配置，其值不能从数据估计得到。

具体特征有：

- 超参数常应用于估计模型参数的过程中；
- 超参数通常由实践者直接指定；
- 超参数通常可以使用启发式方法来设置；
- 超参数通常根据给定的预测建模问题而调整。

对于给定的问题，无法知道模型超参数的最优值。

但可以使用经验法则来探寻其最优值，或复制用于其它问题的值，也可以通过反复试验的方法。

梯度下降法求解凸优化问题

- 梯度下降算法不一定能够找到全局的最优解，有可能是一个局部最优解。然而，如果损失函数是凸函数，那么梯度下降法得到的解就一定是全局最优解

线性回归算法

岭回归

$$\min_{w} \|Xw-y\|_2^2+\alpha\|w\|_2^2$$

lasso回归

$$\min_{w} \frac{1}{2n}\|Xw-y\|_2^2+\alpha\|w\|_1$$

ElasticNet回归

$$\min_{w} \frac{1}{2n}\|Xw-y\|_2^2+\alpha\rho\|w\|_1+\frac{\alpha(1-\rho)}{2}\|w\|_2^2$$

多项式回归

$$\hat{y}(w,x)=w_0+w_1x_1+w_2x_2$$

$$\hat{y}(w,x)=w_0+w_1x_1+w_2x_2+w_3x_1x_2+w_4x_1^{\,2}+w_5x_1^{\,2}$$

$$z=[x_1,x_2,x_1x_2,x_1^2,x_2^2]$$

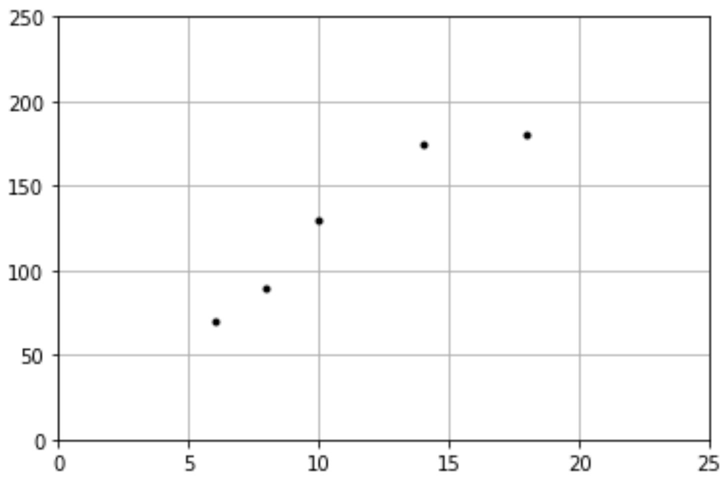
$$\hat{y}(w,x)=w_0+w_1z_1+w_2z_2+w_3z_3+w_4z_4+w_5z_5$$

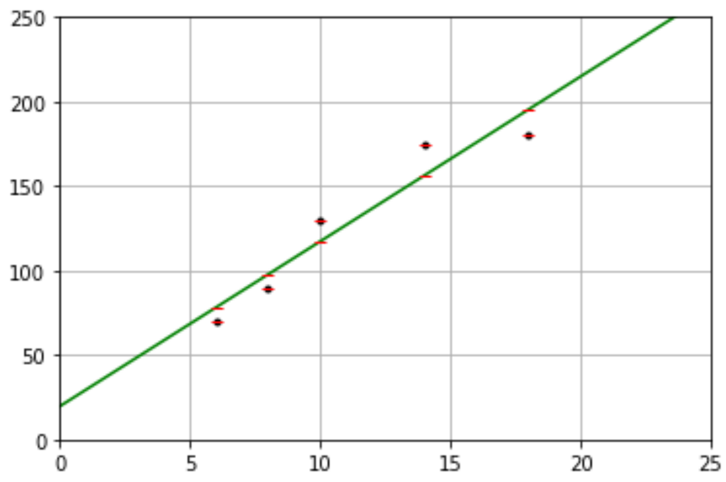
一元线性回归

用给定的数据来建立披萨的价格与其大小之间的线性回归方程。

序号	披萨直径	披萨价格
1	6	70
2	8	90
3	10	130
4	14	175
5	18	180

一元线性回归





线性回归方程：

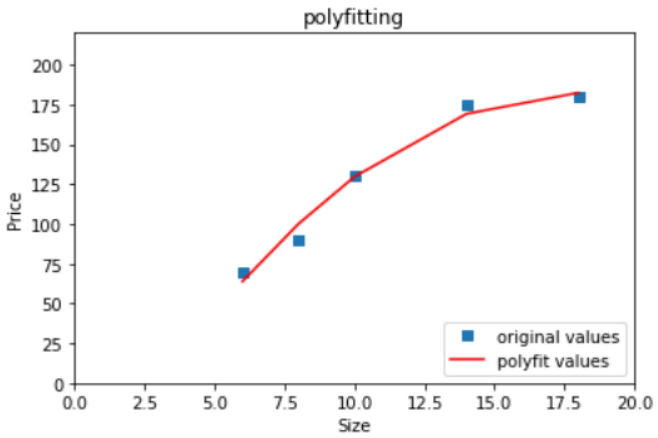
$$y = \underset{\theta_0}{19.66} + \underset{\theta_1}{9.76} * x$$

一元线性回归

```
Console 3/A

Python 3.8.3 (default, Jul  2 2020, 17:30:36) [MSC v.1916 64 bit (AMD64)]
Type "copyright", "credits" or "license" for more information.

IPython 7.16.1 -- An enhanced Interactive Python.

In [1]: runfile('C:/Users/ld/.spyder-py3/PizzaSizeAndPrice.py', wdir='C:/Users/ld/.spyder-py3')

Figures now render in the Plots pane by default. To make them also appear inline in the Console,
uncheck "Mute Inline Plotting" under the Plots pane options menu.

 [19.65517241]
[[9.76293103]]
预测一张12英寸的披萨:136.81
残差平方和：874.78
残差平方平均值：174.96

In [2]:

IPython console  History
```

一元线性回归

可以引入 x 的二次项，使用含有3个参数的多项式回归方程（n = 2）




```
Console 1/A

In [32]: runfile('C:/Users/ld/.spyder-py3/PizzaSizeAndPriceQuadratic.py',
x is :
 [ 6  8 10 14 18]
y is :
 [ 70  90 130 175 180]
f1 is :
 [ -0.82022921  29.56156716 -83.97654584]
p1 is :
         2
-0.8202 x + 29.56 x - 83.98
yvals is :
 [ 63.86460554 100.02132196 129.61620469 169.12046908 182.37739872]

In [33]:
```

一元线性回归

- 引入x的二次项之后的回归方程是：

$$y = -0.8202\,x^2 + 29.56\,x - 83.98$$

- 该模型还是线性回归模型吗?

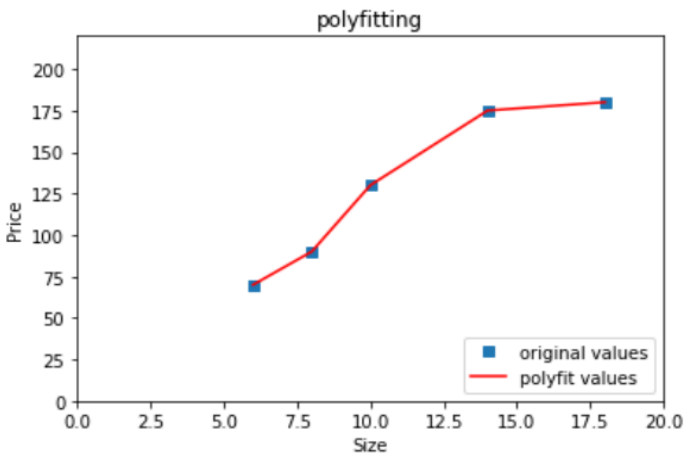
- 一元m次多项式回归方程：

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \cdots + \theta_m x^m$$

- 多项式回归模型是线性回归模型的一种，此时回归方程关于回归系数是线性的，并不是说只能使用x的一次项。

一元线性回归

继续引入 x 的高次方项（n = 4）
含有 5 个参数




```
Console 1/A
p1 is :
         4         3         2
0.04297 x - 2.128 x + 36.89 x - 251.7 x + 656.2
yvals is :
 [ 70.  90. 130. 175. 180.]

In [36]: runfile('C:/Users/ld/.spyder-py3/PizzaSizeAndPriceQuadratic.py',
x is :
 [ 6  8 10 14 18]
y is :
 [ 70  90 130 175 180]
f1 is :
 [ 4.29687500e-02 -2.12760417e+00  3.68906250e+01 -2.51739583e+02
  6.56250000e+02]
p1 is :
         4         3         2
0.04297 x - 2.128 x + 36.89 x - 251.7 x + 656.2
yvals is :
 [ 70.  90. 130. 175. 180.]

In [37]:
```

（2）逻辑回归

- 逻辑回归又称为**逻辑回归分析**，是通过历史数据的表现对未来结果发生的概率进行预测。
- 尽管逻辑回归输出的是实数值，但本质上它**是一种分类方法，而不是回归方法**。
- 逻辑回归的自变量可以有一个，也可以有多个。
- 逻辑回归的因变量可以是二分类，也可以是多分类。二分类更为常用，也更容易解释。
- 若采用**sigmoid函数**计算概率，令阈值为0.5，则完成**二分类**任务。

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

- 若采用**softmax函数**计算概率，则逻辑回归可完成**多分类**任务。

$$f(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{k=1}^{M} e^{x_k}} \qquad i=1,\ldots,M \quad ; \quad M\text{为类别数}$$

输出的实数表示未知样本 x 属于某一类别的概率.

线性回归与逻辑回归的异同点

- 线性回归与逻辑回归的区别在于:
  - 线性回归用于**预测连续值**，其输出的值域是实数集，其模型是线性的;
  - 逻辑回归主要用于**解决分类问题**，其输出的值域为[0,1]，其模型是非线性的。
- 线性回归与逻辑回归的共同点在于:

  两者的输入数据既可以是连续的值，也可以是离散的值。