中国科学技术大学
University of Science and Technology of China

人工智能讲义

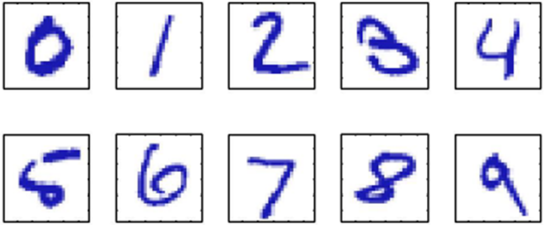
线性回归

March 27, 2018

Outline

1. 从例子开始
2. 损失函数
3. 最小化损失

h 如何获得



手写体数字识别：问题描述

- 每个手写体字符 x 是 100*100 的像素点方阵，每个像素点取值 0 或 1，也就是说每个输入变量是长度为 100*100 的 0-1 方阵（二维矩阵）
- 每个手写体字符的输出离散化为 0,1,2,3,4,5,6,7,8,9。
- 我们也可以将输出定义为任意实数 y，然后视 y 和这 10 个数字字符的远近做离散化近似。如 $y = 2.4$ 时，y 可以离散化为 2；$y = -20$ 时，y 可以离散化为 0 等

手写体数字识别问题分析 1: f 是什么?

- 人眼看到输入，人脑对输出做出判决;
- 该 f 目前无法用数学函数来显示表达;
- 该 f 由视觉/光学/神经信息处理等等一系列物理过程构成，非常复杂

手写体数字识别问题分析 2: h 是什么?

- 用最简的线性函数 $h(\mathbf{x}) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} + b$ 来近似 f
- 公式中的点表示两个矩阵的点积：两个矩阵对应位置的元素相乘然后全部加起来
- 其中 $\mathbf{W}$ 是 100*100 的实数矩阵，对图片 x 的每个像素点给一个权值，描述其在识别过程中的作用。每个像素点对每个字符的贡献可能会不同/有冲突，权值该如何设置?

h 如何获得

$$h(\mathbf{x}) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} + b \sim f$$

手写体数字识别：解决问题 搜索最优的 $\mathbf{W}$ 和 b

- 线性函数 $h(\mathbf{x})$ 由其系数矩阵 $\mathbf{W}$ 和常数项 b 确定，这二者称为线性函数 $h(\mathbf{x})$ 的参数
- 不同参数得到的不同 $h(\mathbf{x})$，最后识别字符时，准确率会有差异，找到使得差异最小的那组最优参数
- 找最优参数的方法：最小二乘法

输入变量 x 的预处理

$h(x) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} + b \Rightarrow h(x) = \mathbf{W} \cdot \phi(x)$

- 完整的线性函数应该包括常数项 b
- 但是，我们把输入变量 x 做一个简单的变换，$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t \longrightarrow \mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n, 1)^t$，就可以消去线性函数中的常数项 b
- 更一般地，我们将输入变量 x，做一次变换，即 $x \longrightarrow \phi(x) = (\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots, \phi_n(x))^t$，不管 x 是几维变量，经过一次变换，成为 n 维向量，我们称变换后的结果为 “输入特征向量”，该变换称为 “特征提取函数”。
- 故线性 h 的表达式 $h(x) = \mathbf{W} \cdot \mathbf{x}$ 就变成 $h(x) = \mathbf{W} \cdot \phi(x)$，以之作为我们讨论线性 h 的标准表达式

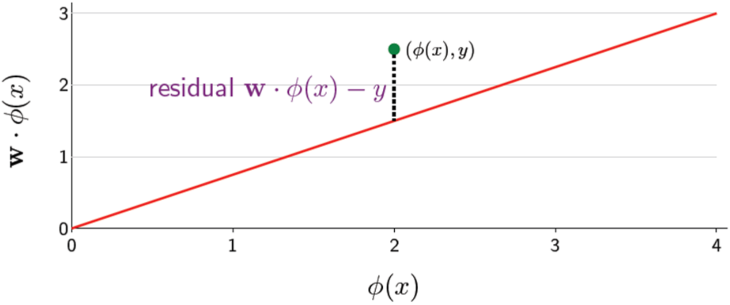
从评价标准：准确性出发

- 从分析事情要达到的目标出发，反向思考，我们应怎么去找 h
- 我们称 $h(x)$ 和 $f(x)$ 在某个输入 x 上值不一样，为"误差"或"损失"
  - 绝对损失：$loss_1(h, f, x) = |f(x) - h(x)|$，适用于连续 y 值情形
  - 平方损失：$loss_2(h, f, x) = (f(x) - h(x))^2$，适用于连续 y 值情形
  - 计数损失：$loss_0(h, f, x) = 1[f(x) \neq h(x)]$，适用于离散 y 值情形

线性 h 的"一行"损失函数

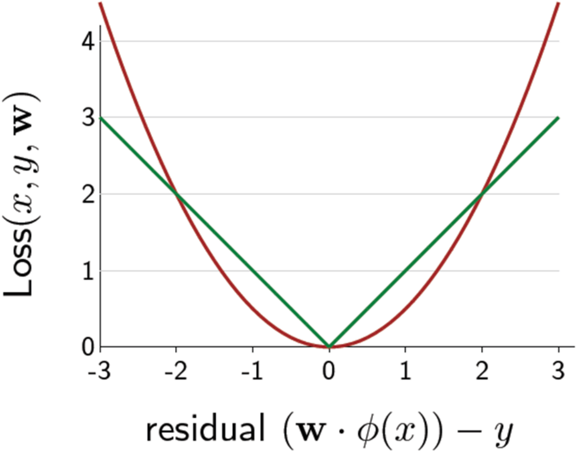
- 所谓"一行"是指用表格描述 h，一行代表 x 的某一个取值；有时也称一个数据的损失。
- h 为线性函数时，损失函数如下：
  - 绝对损失：$loss_1(\mathbf{W}, f, x) = |f(x) - h(x)| = |\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x)|$
  - 平方损失：$loss_2(\mathbf{W}, f, x) = (f(x) - h(x))^2 = (\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x))^2$
  - 计数损失：$loss_0(\mathbf{W}, f, x) = 1[f(x) \neq \mathbf{W} \cdot \phi(x)]$

以下我们仅考虑线性 h 的情形。



若令 $y = f(x)$,

- 我们定义：$\mathbf{W} \cdot \phi(x) - y$ 为残差/residual
- 例子如上图所示，绿点为真实数据，红线为我们找到的近似线性 h，黑色虚线长度表示了残差的大小，
- 残差有正负



解释说明

- 红色曲线是平方残差损失函数，$loss_2(\mathbf{W}, f, x) = (f(x) - h(x))^2 = (\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x))^2$
- 绿色曲线是绝对值残差损失函数，$loss_1(\mathbf{W}, f, x) = |f(x) - h(x)| = |\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x)|$

或者说完整映射表 h 中，所有行的损失之和

- 以平方损失为例：
  $\sum_x loss_2(\mathbf{W}, f, x) = (f(x) - h(x))^2 = (\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x))^2$
- 仅具备理论价值，是我们评价 h 近似 f 的准确性的最理想标准
- 然后计算的时空代价使得其不实用。

为什么要把各个不同 x 的损失加起来？

- 通常 x 的取值数目是很多的，超过了 W 中的未知参数个数，也就是若每个 x（称为样本）都要求是损失为 0，那么每个样本数据就是一个线性方程，整个方程组很有可能无解，因此必然有部分/全部样本损失不为 0，所以用求和来代替，看整体效应。

实用的评价标准

- $TrainLoss(D_{train}, \mathbf{W}) = \frac{\sum_{(x,y)\in D_{train}} loss(x,y,\mathbf{W})}{|D_{train}|}$
- 也称为 “训练误差”

训练集上为什么会有损失?

- 模型/假设 h 不准确，例如线性 h 太简单了，几乎不能描述世上绝大多数的事物。
- 训练数据集有噪声（如测量不准确，错误数据等)。

也称“经验风险”

- $TestLoss(D_{test}, \mathbf{W}) = \frac{\sum_{(x,y)\in D_{test}} loss(x,y,\mathbf{W})}{|D_{test}|}$
- 通常用测试集上的所有损失来作为 h 的评价标准。

如何降低训练集和测试集上的损失?

- 如何最小化损失之和?
- 测试集不能被直接使用，只能用在最后的评估过程中，所以我们只能尽可能最小化训练集上的误差。

涉及的主要工作

- 选择恰当的损失函数，即确定一个数据/一行/一个样本的损失函数的定义
- 求解最小化 $TrainLoss(D_{train}, \mathbf{W}) = \frac{\sum_{(x,y)\in D_{train}} loss(x,y,\mathbf{W})}{|D_{train}|}$ 问题

最小化问题分析

- 已知量：D_{train}，残缺的表格，样本数据集，训练数据集，每一个数据可表示为 (x_i, y_i)
- 未知量：$\mathbf{W}$，线性 h 的系数，也是我们最小化 $TrainLoss(\cdot)$ 所需要调整的、搜索的变量。
- 寻找最优的 $\mathbf{W}$，使得 $TrainLoss(\cdot)$ 最小。寻找一个 $\mathbf{W}$，减少某个样本的残差，容易; 寻找一个 $\mathbf{W}$，减少所有样本上的残差，困难，可能不同的样本对 $\mathbf{W}$ 的要求有冲突。

损失函数的选择

考量的方面

- 平方损失函数：近似寻找 y 的均值，综合所有样本的影响
- 绝对损失函数：近似寻找 y 的中值，抵抗离群点/样本的影响

当采用平方损失函数时，

- $TrainLoss(\ \cdot\ ) = \sum loss_2(\mathbf{W}, f, x) = (f(x) - h(x))^2 = \sum(\mathbf{W} \cdot \phi(x) - f(x))^2$
- 即为著名的 最小二乘法

梯度下降法

- 算法略。(参考“优化问题求解”一章)

算法时间复杂度

- 算法的每一步，即每一次循环，更新一次 W，都需要完全扫描一次训练数据集，即：$W_{s+1} = W_s - \lambda_s \nabla_W\left(\frac{\sum_{(x,y)\in D_{train}} (W_s \cdot \phi(x) - y)^2}{|D_{train}|}\right) = W_s - \lambda_s \frac{\sum_{(x,y)\in D_{train}} 2(W_s \cdot \phi(x) - y)\phi(x)}{|D_{train}|}$
- 当训练数据集很大时，包括千万/上亿的行时，算法的时间开销巨大。
- 数据挖掘工程实践中常考虑这类问题。此时训练数据集太大，无法一次载入内存，涉及内外存数据交换，时间开销更大，因此需要对算法进行改进。

随机梯度下降法

- 计算梯度方向时，只用了一个随机样本的信息，替代经典梯度下降算法要计算所有训练数据集对梯度方向的贡献。
- 即：$W_{s+1} = W_s - \lambda_s \frac{\sum_{(x,y)\in D_{train}} 2(W_s \cdot \phi(x) - y)\phi(x)}{|D_{train}|} \Longrightarrow W_{s+1} = W_s - \lambda_s \nabla_W((W_s \cdot \phi(x_i) - y_i)^2)$

时间性能得到提升，不许要每次循环都载入一次训练数据集；付出的代价是更多的循环次数。