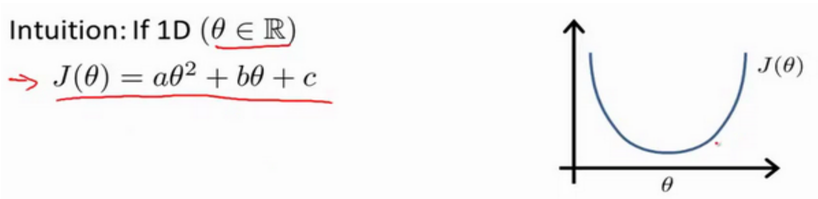
4.6 正规方程

参考视频: 4 - 6 - Normal Equation (16 min).mkv

到目前为止，我们都在使用梯度下降算法，但是对于某些线性回归问题，正规方程方法是更好的解决方案。如：

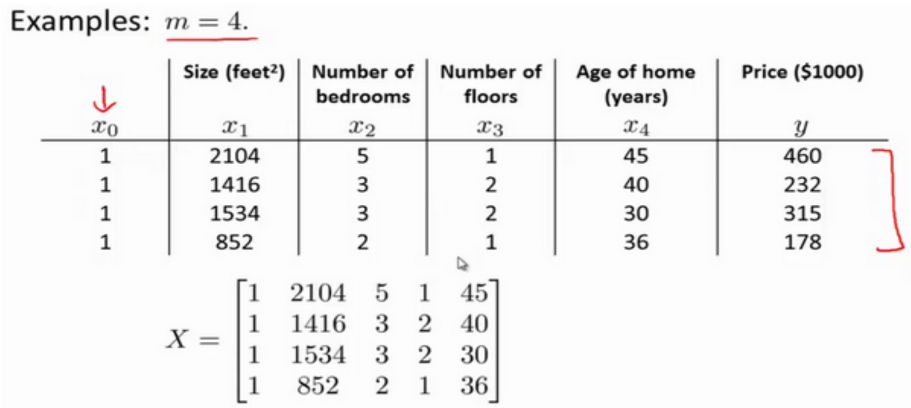


正规方程是通过求解下面的方程来找出使得代价函数最小的参数的：$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_j) = 0$ 。

假设我们的训练集特征矩阵为 X（包含了 $x_0 = 1$）并且我们的训练集结果为向量 y，则利用正规方程解出向量 $\theta = (X^T X)^{-1} X^T y$

上标 **T** 代表矩阵转置，上标-1 代表矩阵的逆。设矩阵$A = X^T X$，则：$(X^T X)^{-1} = A^{-1}$

以下表示数据为例：



Examples: $m = 4$.

x_0	Size (feet²) x_1	Number of bedrooms x_2	Number of floors x_3	Age of home (years) x_4	Price ($1000) y
1	2104	5	1	45	460
1	1416	3	2	40	232
1	1534	3	2	30	315
1	852	2	1	36	178

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2104 & 5 & 1 & 45 \\ 1 & 1416 & 3 & 2 & 40 \\ 1 & 1534 & 3 & 2 & 30 \\ 1 & 852 & 2 & 1 & 36 \end{bmatrix}$$

即：

X(0)	X(1)	X(2)	X(3)	X(4)	y
1	2104	5	1	45	460
1	1416	3	2	40	232
1	1534	3	2	30	315
1	852	2	1	36	178

运用正规方程方法求解参数：

$$\left(\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2104 & 1416 & 1534 & 852 \\ 5 & 3 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 1 \\ 45 & 40 & 30 & 36 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 2104 & 5 & 1 & 45 \\ 1 & 1416 & 3 & 2 & 40 \\ 1 & 1534 & 3 & 2 & 30 \\ 1 & 852 & 2 & 1 & 36 \end{bmatrix}\right)^{-1} \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2104 & 1416 & 1534 & 852 \\ 5 & 3 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 1 \\ 45 & 40 & 30 & 36 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 460 \\ 232 \\ 315 \\ 178 \end{bmatrix}$$

在 **Octave** 中，正规方程写作：

```
pinv(X'*X)*X'*y
```

注：对于那些不可逆的矩阵（通常是因为特征之间不独立，如同时包含英尺为单位的尺寸和米为单位的尺寸两个特征，也有可能是特征数量大于训练集的数量），正规方程方法是不能用的。

梯度下降与正规方程的比较：

梯度下降	正规方程
需要选择学习率α	不需要
需要多次迭代	一次运算得出
当特征数量n大时也能较好适用	需要计算$(X^TX)^{-1}$ 如果特征数量n较大则运算代价大，因为矩阵逆的计算时间复杂度为$O(n^3)$，通常来说当n小于 10000 时还是可以接受的
适用于各种类型的模型	只适用于线性模型，不适合逻辑回归模型等其他模型

总结一下，只要特征变量的数目并不大，标准方程是一个很好的计算参数θ的替代方法。具体地说，只要特征变量数量小于一万，我通常使用标准方程法，而不使用梯度下降法。

正规方程的 **python** 实现：

```python
import numpy as np
def normalEqn(X, y):
   theta = np.linalg.inv(X.T@X)@X.T@y #X.T@X 等价于X.T.dot(X)
   return theta
```

4.7 正规方程及不可逆性（选修）

参考视频: 4 - 7 - Normal Equation Noninvertibility (Optional) (6 min).mkv

在这段视频中谈谈正规方程（**normal equation**），以及它们的不可逆性。 由于这是一种较为深入的概念，并且总有人问我有关这方面的问题，因此，我想在这里来讨论它，由于概念较为深入，所以对这段可选材料大家放轻松吧，也许你可能会深入地探索下去，并且会觉得理解以后会非常有用。但即使你没有理解正规方程和线性回归的关系，也没有关系。

我们要讲的问题如下：$\theta = (X^TX)^{-1}X^Ty$

备注：本节最后我把推导过程写下。

有些同学曾经问过我，当计算 θ=inv(X'X) X'y ，那对于矩阵$X'X$的结果是不可逆的情况咋办呢?

如果你懂一点线性代数的知识，你或许会知道，有些矩阵可逆，而有些矩阵不可逆。我们称那些不可逆矩阵为奇异或退化矩阵。

问题的重点在于$X'X$的不可逆的问题很少发生，在 **Octave** 里，如果你用它来实现θ的计算，你将会得到一个正常的解。在 **Octave** 里，有两个函数可以求解矩阵的逆，一个被称为pinv()，另一个是 inv()，这两者之间的差异是些许计算过程上的，一个是所谓的伪逆，另一个被称为逆。使用 pinv() 函数可以展现数学上的过程，这将计算出θ的值，即便矩阵$X'X$是不可逆的。

在 pinv() 和 inv() 之间，又有哪些具体区别呢 ?

其中 inv() 引入了先进的数值计算的概念。例如，在预测住房价格时，如果x_1是以英尺为尺寸规格计算的房子，x_2是以平方米为尺寸规格计算的房子，同时，你也知道 1 米等于 3.28 英尺 (四舍五入到两位小数)，这样，你的这两个特征值将始终满足约束：$x_1 = x_2 * (3.28)^2$。

实际上，你可以用这样的一个线性方程，来展示那两个相关联的特征值，矩阵$X'X$将是不可逆的。

第二个原因是，在你想用大量的特征值，尝试实践你的学习算法的时候，可能会导致矩阵$X'X$的结果是不可逆的。 具体地说，在m小于或等于 n 的时候，例如，有m等于 10 个的训练样本也有n等于 100 的特征数量。要找到适合的$(n+1)$ 维参数矢量θ，这将会变成一个 101 维的矢量，尝试从 10 个训练样本中找到满足 101 个参数的值，这工作可能会让你花上

一阵子时间，但这并不总是一个好主意。因为，正如我们所看到你只有 10 个样本，以适应这 100 或 101 个参数，数据还是有些少。

稍后我们将看到，如何使用小数据样本以得到这 100 或 101 个参数，通常，我们会使用一种叫做正则化的线性代数方法，通过删除某些特征或者是使用某些技术，来解决当m比n小的时候的问题。即使你有一个相对较小的训练集，也可使用很多的特征来找到很多合适的参数。 总之当你发现的矩阵$X'X$的结果是奇异矩阵，或者找到的其它矩阵是不可逆的，我会建议你这么做。

首先，看特征值里是否有一些多余的特征，像这些x_1和x_2是线性相关的，互为线性函数。同时，当有一些多余的特征时，可以删除这两个重复特征里的其中一个，无须两个特征同时保留，将解决不可逆性的问题。因此，首先应该通过观察所有特征检查是否有多余的特征，如果有多余的就删除掉，直到他们不再是多余的为止，如果特征数量实在太多，我会删除些用较少的特征来反映尽可能多内容，否则我会考虑使用正规化方法。 如果矩阵$X'X$是不可逆的，（通常来说，不会出现这种情况），如果在 **Octave** 里，可以用伪逆函数 `pinv()` 来实现。这种使用不同的线性代数库的方法被称为伪逆。即使$X'X$的结果是不可逆的，但算法执行的流程是正确的。总之，出现不可逆矩阵的情况极少发生，所以在大多数实现线性回归中，出现不可逆的问题不应该过多的关注X^TX是不可逆的。

增加内容：

$\theta = (X^TX)^{-1}X^Ty$ 的推导过程：

$J(\theta) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)^2$ 其中：$h_\theta(x) = \theta^TX = \theta_0x_0 + \theta_1x_1 + \theta_2x_2 + \ldots + \theta_nx_n$

将向量表达形式转为矩阵表达形式，则有$J(\theta) = \frac{1}{2}(X\theta - y)^2$ ，其中X为m行n列的矩阵（m为样本个数，n为特征个数），θ为n行 1 列的矩阵，y为m行 1 列的矩阵，对$J(\theta)$进行如下变换:

$$J(\theta) = \frac{1}{2}(X\theta - y)^T(X\theta - y)$$

$$= \frac{1}{2}(\theta^TX^T - y^T)(X\theta - y)$$

$$= \frac{1}{2}(\theta^TX^TX\theta - \theta^TX^Ty - y^TX\theta - y^Ty)$$

接下来对$J(\theta)$偏导，需要用到以下几个矩阵的求导法则:

$\frac{dAB}{dB} = A^T$

$\frac{dX^TAX}{dX} = 2AX$

所以有:

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta} &= \frac{1}{2}(2X^TX\theta - X^Ty - (y^TX)^T - 0) \\ &= \frac{1}{2}(2X^TX\theta - X^Ty - X^Ty - 0) \\ &= X^TX\theta - X^Ty\end{aligned}$$

令$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta} = 0$,

则有$\theta = (X^TX)^{-1}X^Ty$