机器学习：函数拟合(Functional Imitation)

机器学习的回归问题，可以看做是函数拟合问题，这里我们给出函数拟合的定义和评判指标。

1. 函数拟合

假设给定了 n 个数据点：$(x_i,\ y_i),\ i=1,2\cdots n$ 。

希望找到一条直线 $y=f(x)=ax+b$ 使得拟合度最好。

$$\hat{y}_i=f(x_i)=y_i+\varepsilon_i$$

ε 为预测值和真实值之间的误差。可以定义一下关于误差的一些指标。

最大误差， $\varepsilon \triangleq (\varepsilon_1\cdots\varepsilon_n)^T$

$$E_\infty(f)=\max_{1\le i\le n}|\varepsilon_i|=||\varepsilon||_\infty$$

平均误差：

$$E_1(f)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|\varepsilon_i|\propto||\varepsilon||_1$$

均方误差：

$$E_2(f)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\varepsilon_i)\propto||\varepsilon||_2$$

均方根误差：

$$E_2(f)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\varepsilon_i)^{\frac{1}{2}}\propto||\varepsilon||_2$$

$\min E_2(f),\ subject\ to\ \varepsilon_i = y_i - f(x_i), \forall i$ 。在Lesson 4 监督学习之回归(Linear, NonLinear, Lasso, Ridge, Generalization)中我们将用到均方误差来求解线性回归问题。

2. 多项式拟合

给定 $(x_i,\ y_i),\ i=0,1\cdots n$ 。假设:

$$\begin{aligned} f(x) &= P_n(x) \\ &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 \end{aligned}$$

确定 $a_n^*, \cdots, a_0^*$ ，使得多项式的拟合度最好。

$$\begin{aligned} (x_0, \cdots y_0) \quad y_0 &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 + \varepsilon_0 \\ (x_1, \cdots y_1) \quad y_1 &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 + \varepsilon_1 \\ &\vdots \\ (x_n, \cdots y_n) \quad y_n &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0 + \varepsilon_n \end{aligned}$$

写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0^n & x_1^{n-1} & \cdots & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1} & \cdots & 1 \\ \vdots & & & \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ a_{n-1} \\ \vdots \\ a_0 \end{pmatrix} + \varepsilon = Ax + \varepsilon$$

在Lesson 4 监督学习之回归(Linear, NonLinear, Lasso, Ridge, Generalization)中我们将具体求解多项式回归问题。