



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE 软件学院
BEIHANG UNIVERSITY

人工智能

第3讲：机器学习-有监督学习I

线性分类

张晶

2025春季

- 参考资料： 吴飞, 《人工智能导论：模型与算法》，高等教育出版社
- 在线课程： <https://www.icourse163.org/course/ZJU-1003377027?from=searchPage>



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

提纲

一、机器学习基本概念

二、线性回归与线性分类

三、线性判别分析

四、支持向量机

五、决策树

六、集成学习



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

提纲

一、机器学习基本概念

二、线性回归与线性分类

三、线性判别分析

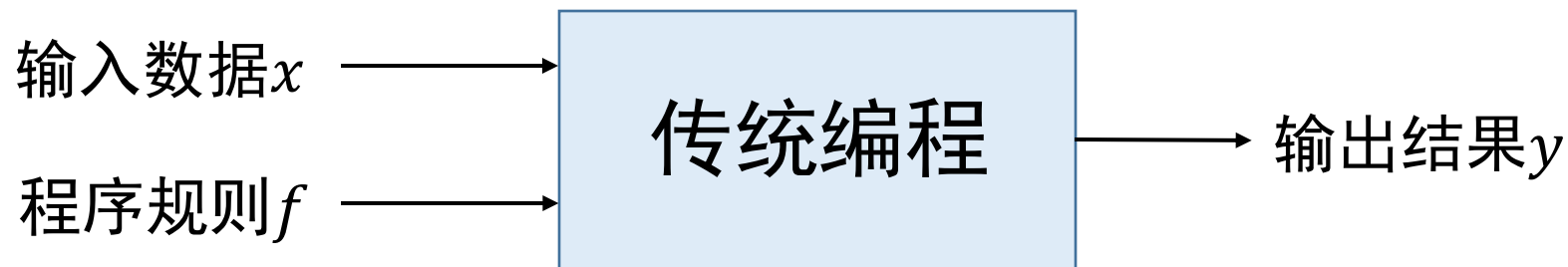
四、支持向量机

五、决策树

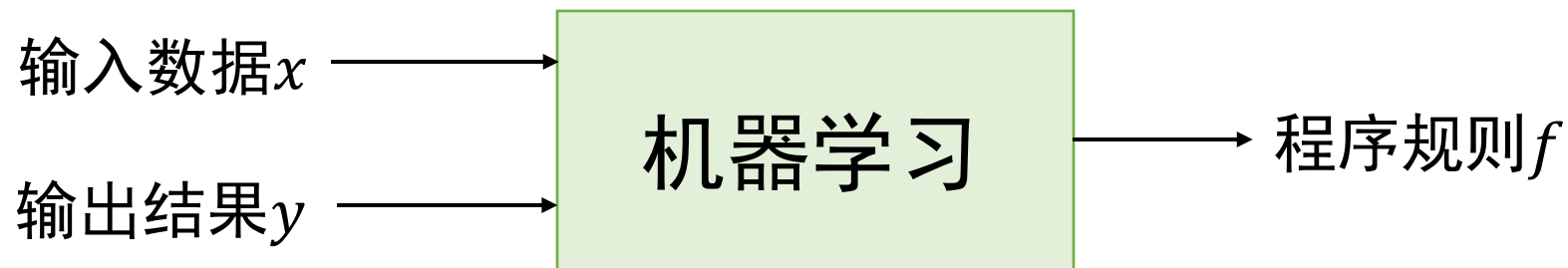
六、集成学习



机器学习 v.s. 传统编程



```
def classification(x):  
    if x==[0,0,1,1,0,0]:  
        y=0  
    elif x==[0,0,1,0,0,0]:  
        y=1  
    elif x ==[0,1,1,1,0,0]:  
        y=2  
    return y
```



```
x=[[0,0,1,1,0,0],  
   [0,0,1,0,0,0],  
   [0,1,1,1,0,0]]  
y=[0,1,2]  
def classification(x,y):  
    model=linear()  
    model.fit(x,y)  
    return model
```

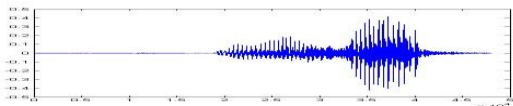


北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

机器学习：从数据中学习知识 $f(x) = y$

- 语音识别

$$f(\text{语音波形}) = \text{“你好”}$$



- 图像分类

$$f(\text{猫的图片}) = \text{“猫”}$$



- 围棋游戏

$$f(\text{围棋棋盘}) = \text{“5-5”}$$



(下一步落子位置)



监督学习的重要元素

标注数据

■ 标识了类别信息的数据

学习模型

■ 定义映射模型类型

损失函数

■ 对映射结果进行度量

优化方法

■ 对映射模型进行学习



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

提纲

一、机器学习基本概念

二、线性回归与线性分类

三、线性判别分析

四、支持向量机

五、决策树

六、集成学习



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

线性回归

Linear Regression



线性回归：一元线性回归

- **训练数据**: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
- **学习模型**: $f(x_i) = wx_i + b \ (1 \leq i \leq n)$
 - 记在当前参数下第 i 个训练样本 x_i 的预测值为 $f(x_i)$
 - x_i 的标注值（实际值） y_i 与预测值 $f(x_i)$ 之差记为 $(y_i - f(x_i))^2$
- **损失函数**: $L(w, b) = \sum_{i=1}^n \text{loss}(x_i, y_i) = \sum_{i=1}^n (y_i - (wx_i + b))^2$
- **优化目标**: 寻找一组 w 和 b ，使得损失函数定义的误差总和 $L(w, b)$ 值最小。
- **优化方法**: 最小二乘法
 - 对 $L(w, b)$ 参数 w 和 b 分别求偏导，令其导数值为零，再求取参数 w 和 b 的取值。



线性回归：多元线性回归

- **训练数据**: $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$
 - 其中, $\mathbf{x}_i = [x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,D}] \in \mathbb{R}^D$ 为代表多元特征的第 i 个数据向量
 - D 为数据向量的维度, 也就是特征个数
- **学习模型**: $f(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^D w_j x_{i,j} + w_0 = \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0, (1 \leq i \leq n)$
- **损失函数**: $L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^n \text{loss}(\mathbf{x}_i, y_i) = \sum_{i=1}^n (y_i - (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0))^2$
- **优化方法**: 最小二乘法



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

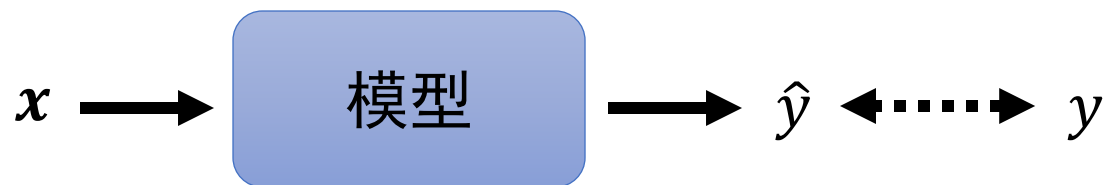
线性分类

Linear Classification

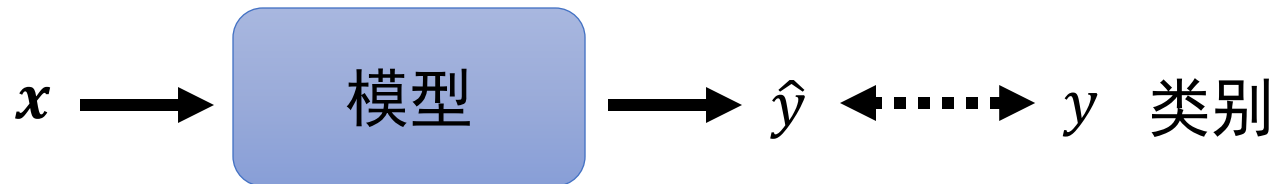


线性分类：用线性回归做分类？

- 线性回归



- 用线性回归做分类？



0 = 类别 0

1 = 类别 1



线性分类模型

- 二分类问题定义：

- 数据：假设训练集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ ，样本 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 的类别标签为 y_i 。其中， y_i 的取值范围是 $\{0, 1\}$ ，即一共有2类样本。
- 模型：线性分类器

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = g(f(\mathbf{x})) = g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$$

- 目标：正确分类问题

线性分类模型

二分类问题举例

- 下表给出了一组同学的身高和体重，以及这些同学的性别。请根据身高和体重这两个特征，建立线性分类模型，预测性别。

身高 cm	160	162	165	170	177	180	185	190	...
体重 kg	55	52	57	50	70	75	80	75	...
性别	女	女	女	女	男	男	男	男	...

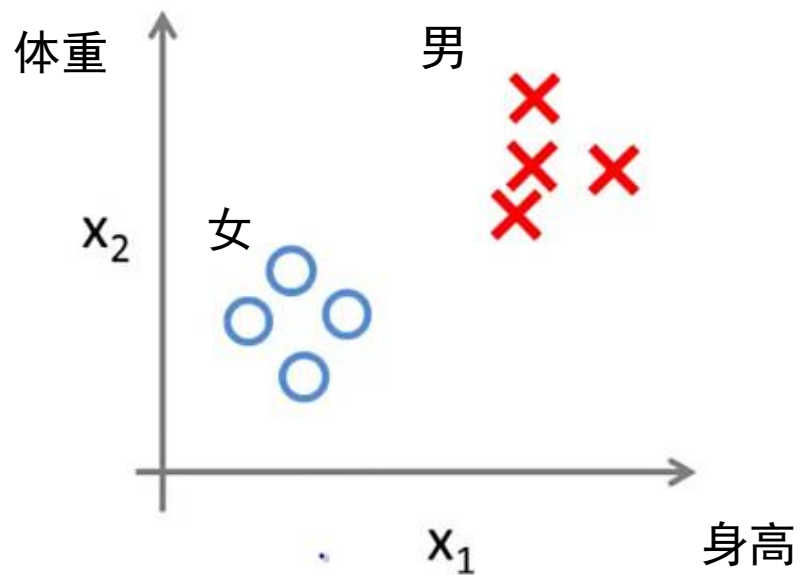


北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

线性分类模型

二分类问题举例

- 下表给出了一组同学的身高和体重，以及这些同学的性别。请根据身高和体重这两个特征，建立线性分类模型，预测性别。





线性分类模型

- 多分类问题定义：

- 数据：假设训练集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ ，样本 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 的类别标签为 y_i 。其中， y_i 的取值范围是 $\{0, 1, 2, \dots\}$ 。
- 模型：线性分类器

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = g(f(\mathbf{x})) = g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$$

- 目标：正确分类问题

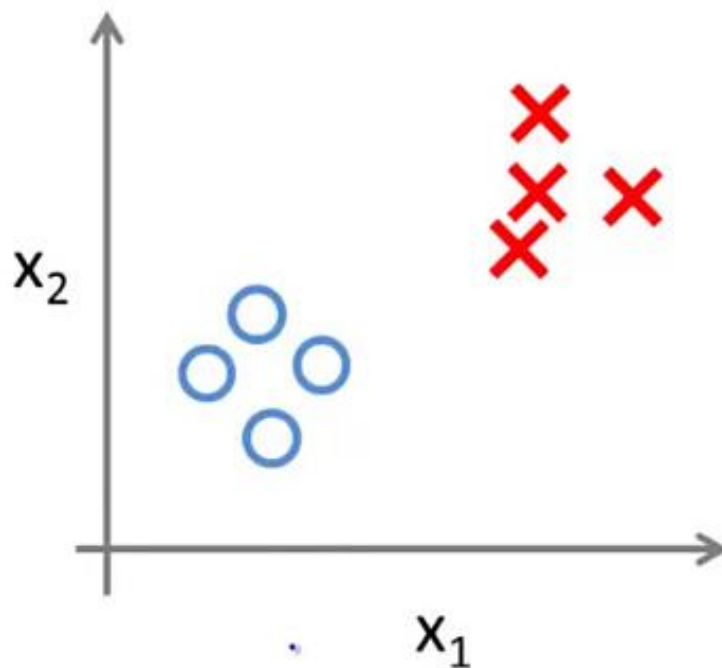


北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

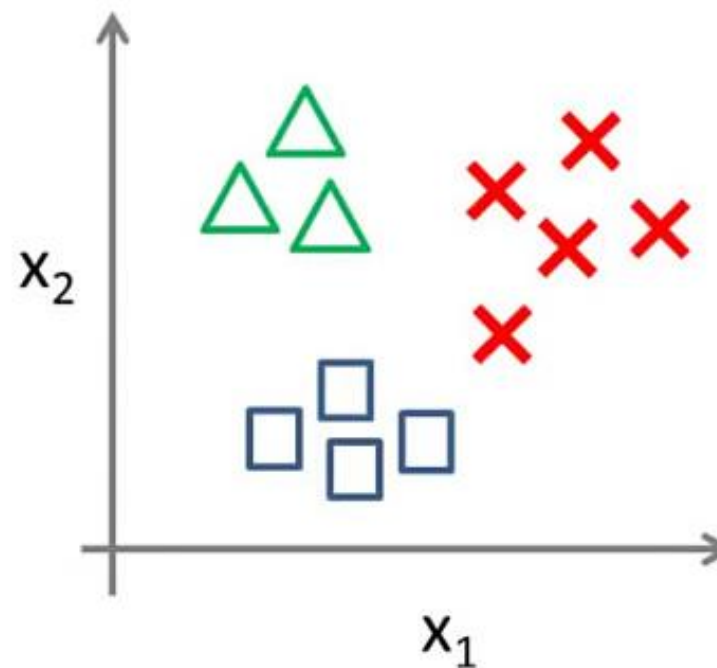
线性分类模型

- 多分类问题定义：

二分类问题



多分类问题



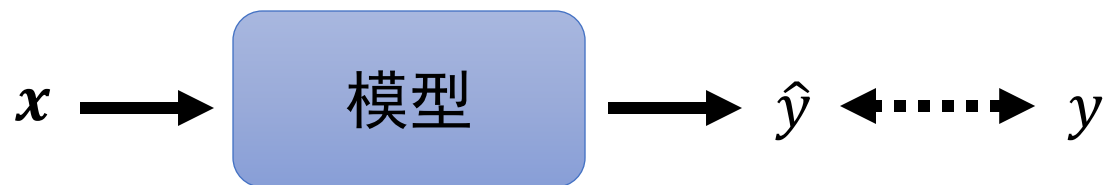
直接用线性回归模型做分类任务会有什么问题？

作答

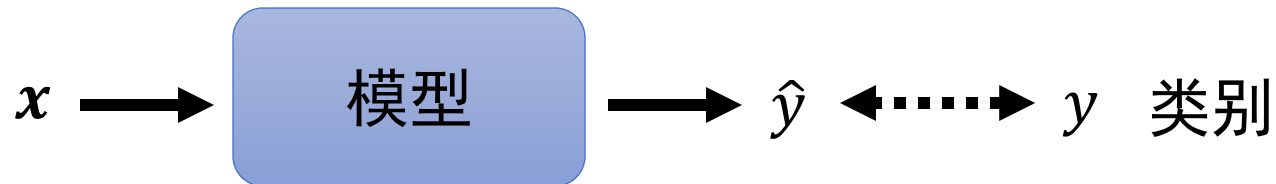


线性分类：用线性回归做分类？

- 线性回归



- 用线性回归做分类？



更不同？

0 = 类别 0
1 = 类别 1
2 = 类别 2

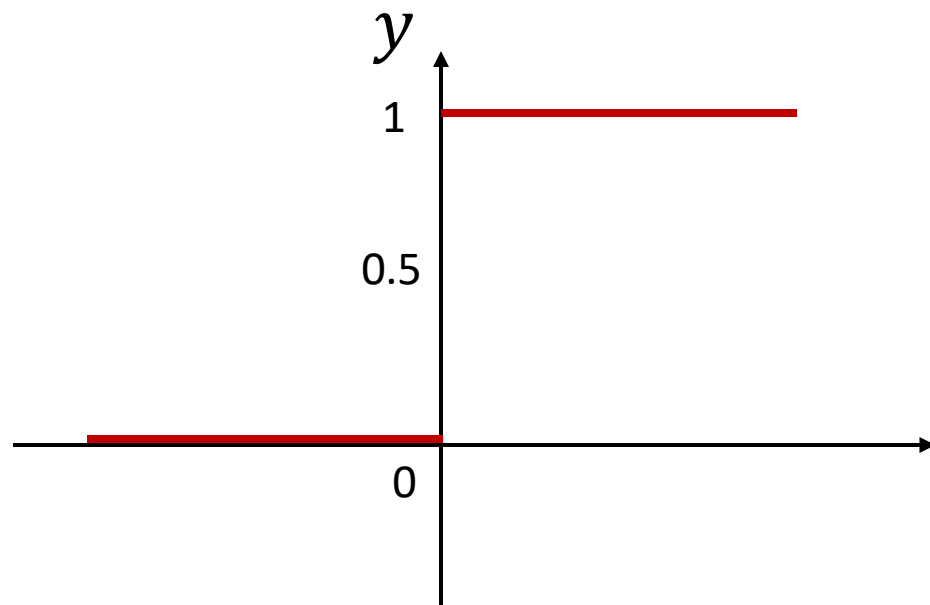
更相似？



线性分类：以二分类为例

- 线性回归产生的实值输出： $z_i = wx_i + b$
- 线性分类期望的输出： $y_i \in \{0,1\}$

$$y_i = \begin{cases} 1 & z_i > 0 \\ 0.5 & z_i = 0 \\ 0 & z_i < 0 \end{cases}$$





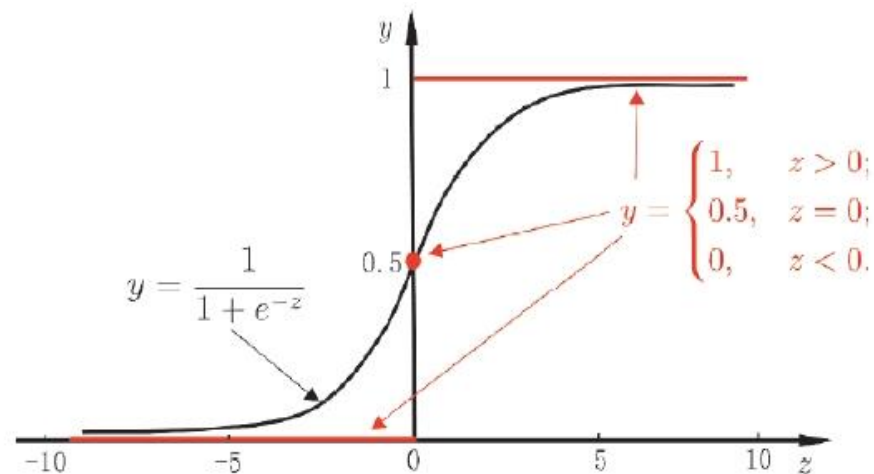
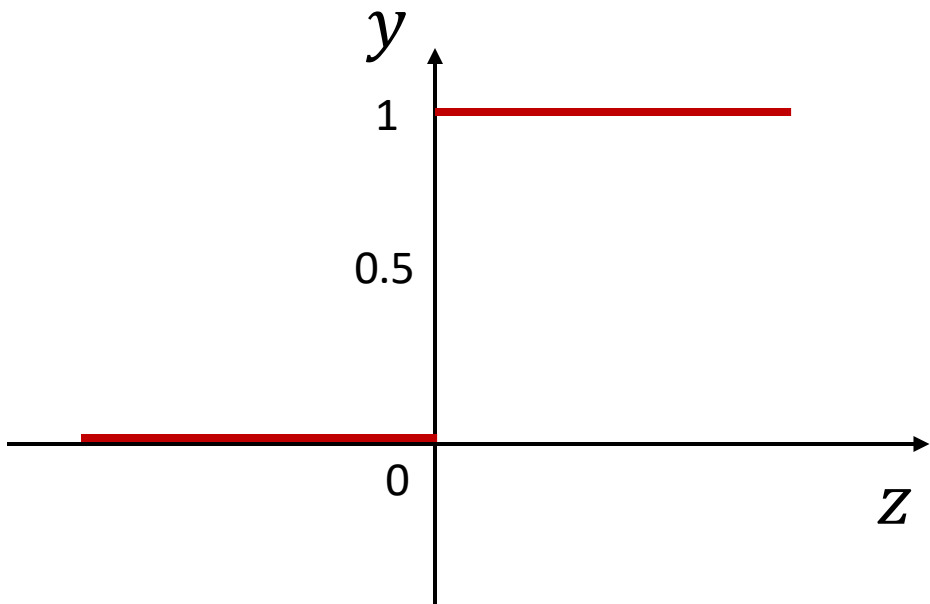
线性分类：以二分类为例

- 训练数据： $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$ ，其中 $y_i \in \{0, 1\}$
- 学习模型： ?
- 损失函数： ?
- 优化方法： ?



北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE
BEIHANG UNIVERSITY 软件学院

线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)



Sigmoid函数

- 对数几率回归(logistic regression)就是在回归模型中引入 sigmoid函数的一种广义线性模型。
- Logistic回归模型可如下表示：

$$\hat{y} = \frac{1}{1+e^{-z}} = \frac{1}{1+e^{-(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)}} \quad , \quad \text{其中 } \hat{y} \in (0,1), z = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

- 这里 $\frac{1}{1+e^{-z}}$ 是sigmoid函数、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 是输入数据、 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$ 和 $b \in \mathbb{R}$ 是回归函数的参数。

线性分类模型

二分类问题举例

- 下表给出了一组同学的身高和体重，以及这些同学的性别。请根据身高和体重这两个特征，建立线性分类模型，预测性别。

身高 cm	160	162	165	170	177	180	185	190	...
体重 kg	55	52	57	50	70	75	80	75	...
性别	女	女	女	女	男	男	男	男	...



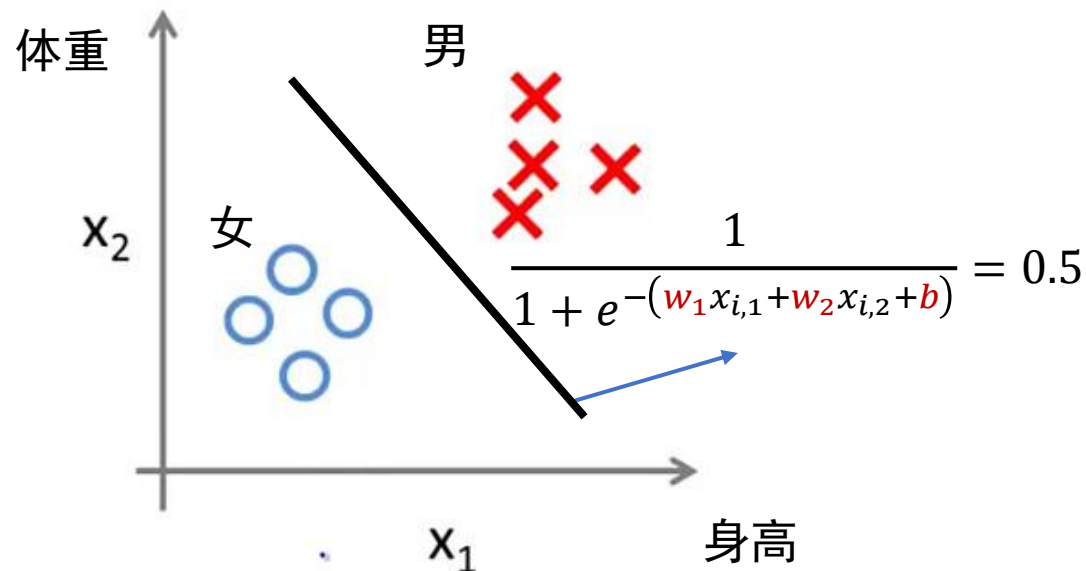
北京航空航天大学
COLLEGE OF SOFTWARE BEIHANG UNIVERSITY
软件学院

线性分类模型

二分类问题举例

- 令身高为 $x_{i,1}$ ，体重为 $x_{i,2}$ ，性别为 y

- 学习模型：
$$f(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{1+e^{-(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)}} = \frac{1}{1+e^{-(w_1 x_{i,1} + w_2 x_{i,2} + b)}} \quad (1 \leq i \leq n)$$



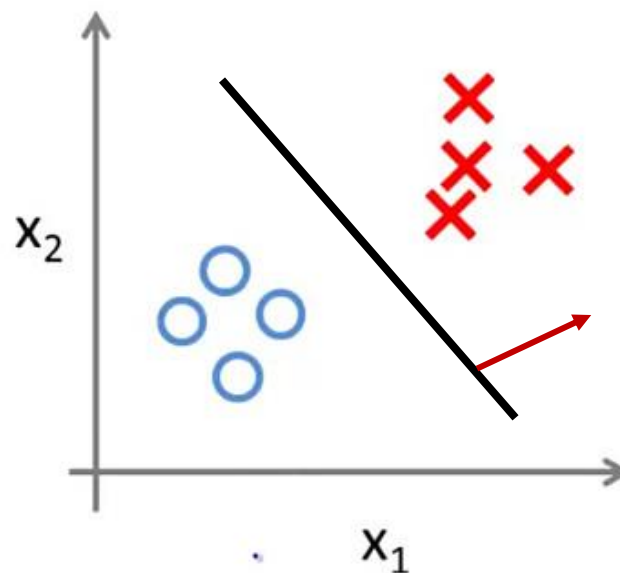


线性分类模型

- 线性分类模型的一般形式

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b), \text{ 其中 } g(z) = \begin{cases} 1, & z > 0 \\ 0.5 & z = 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}$$

- $g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b) > 0.5 \Rightarrow \mathcal{C}_1$
- $g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b) < 0.5 \Rightarrow \mathcal{C}_2$
- g 为激活函数



决策边界:
 $g(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b) = 0.5$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

- 线性模型：通过特征的线性组合来进行预测的函数

$$\hat{y} = f(x) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

- 广义线性模型：

$$\hat{y} = g^{-1}(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)$$

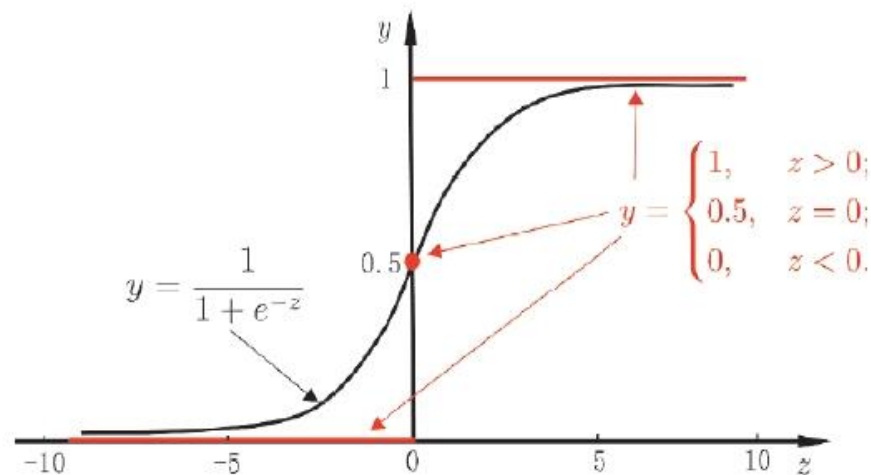
- 线性模型用于**分类**：

- 找一个单调可微函数将分类任务的真实标记 y 与线性回归模型的预测值联系起来。
- 比如对数几率回归中：

$$\ln\left(\frac{\hat{y}}{1 - \hat{y}}\right) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

即

$$\hat{y} = \frac{1}{1 + e^{-(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)}}$$





线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

- 训练数据： $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$ ，其中 $y_i \in \{0, 1\}$
- 学习模型： $f(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x_i + b)}} \quad (1 \leq i \leq n)$
- 损失函数： ?
- 优化方法： ?



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 假设模型输出 $f_{\theta}(x)$ 表示输入数据 x 属于类别1的后验概率 $p(y = 1|x)$

$$f_{\theta}(x) = p(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x + b)}}$$

- 那么 x 属于类别0的后验概率为

$$p(y = 0|x) = 1 - p(y = 1|x) = \frac{e^{-(w^T x + b)}}{1 + e^{-(w^T x + b)}}$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

几率 (Odds)

- 几率定义为事件发生与不发生的概率比：

$$Odds = \frac{p(y = 1|\mathbf{x})}{p(y = 0|\mathbf{x})}$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 假设模型输出 $f_{\theta}(x)$ 表示输入数据 x 属于类别1的后验概率 $p(y = 1|x)$

$$f_{\theta}(x) = p(y = 1|x) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x + b)}}$$

$$p(y = 0|x) = \frac{e^{-(w^T x + b)}}{1 + e^{-(w^T x + b)}}$$

- 于是有：

$$\text{logit}(p(y = 1|x)) = \ln \left(\frac{p(y = 1|x)}{p(y = 0|x)} \right) = \ln \left(\frac{p(y = 1|x)}{1 - p(y = 1|x)} \right) = \underline{w^T x + b}$$

几率(odds)： x 属于
正例的相对可能性

对数几率(log
odds) 或logit

线性回
归方程



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

$$\text{logit}(p(y = 1|\mathbf{x})) = \log\left(\frac{p(y = 1|\mathbf{x})}{p(y = 0|\mathbf{x})}\right) = \log\left(\frac{p}{1-p}\right) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

- 如果输入数据 \mathbf{x} 属于正例的概率大于其属于负例的概率，即 $p(y = 1|\mathbf{x}) > 0.5$ ，则输入数据 \mathbf{x} 可被判断属于正例。
- 等价于 $\frac{p(y = 1|\mathbf{x})}{p(y = 0|\mathbf{x})} > 1$ ，即 $\log\left(\frac{p(y = 1|\mathbf{x})}{p(y = 0|\mathbf{x})}\right) > \log 1 = 0$ ，即 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b > 0$ 成立。



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

$$\text{logit}(p(y = 1|\mathbf{x})) = \log\left(\frac{p(y = 1|\mathbf{x})}{p(y = 0|\mathbf{x})}\right) = \log\left(\frac{p}{1-p}\right) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

- $y = 1$ 的对数几率是由输入 \mathbf{x} 的线性函数表示的模型 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$ ，因此，logistic 回归是一个线性分类模型。
- 在预测时，可以计算线性函数 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$ 取值是否大于0来判断输入数据 \mathbf{x} 的类别归属。



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 为了估计后验概率 $f_{\theta}(x) = p(y = 1|\mathbf{x})$ ，可以用极大似然估计！
- 模型参数的似然函数被定义为 $\mathcal{L}(\theta|\mathcal{D}) = p(\mathcal{D}|\theta)$ ，其中 $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i) | 1 \leq i \leq n\}$ 表示所有观测数据（或训练数据）， θ 表示模型参数（ $\theta = \{\mathbf{w}, b\}$ ）。



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 对于二分类问题，标签 y 的取值为 0 或 1。可以将条件概率表示为：

$$p(y_i|x_i) = (f_{\theta}(x_i))^{y_i} (1 - f_{\theta}(x_i))^{1-y_i}$$

- 当 $y_i = 1$ 时， $p(y_i = 1|x_i) = f_{\theta}(x_i)$ 。
- 当 $y_i = 0$ 时， $p(y_i = 0|x_i) = 1 - f_{\theta}(x_i)$ 。



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 在最大化对数似然函数过程中，一般假设观测所得每一个样本数据是独立同分布 (independent and identically distributed, i.i.d) ，于是可得：

$$\mathcal{L}(\theta|\mathcal{D}) = p(\mathcal{D}|\theta) = \prod_{i=1}^n p(y_i|x_i, \theta) = \prod_{i=1}^n (f_{\theta}(x_i))^{y_i} (1 - f_{\theta}(x_i))^{1-y_i}$$

- 对上述公式取对数：

$$L(\theta) = \log(\mathcal{L}(\theta|\mathcal{D})) = \sum_{i=1}^n y_i \log(f_{\theta}(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f_{\theta}(x_i))$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 最大似然估计目的是计算似然函数的最大值，而分类过程是需要损失函数最小化。因此，在上式前加一个负号得到**损失函数(交叉熵)**：

$$L(\theta) = -\log(\mathcal{L}(\theta|\mathcal{D})) = -\left(\sum_{i=1}^n y_i \log(f_{\theta}(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f_{\theta}(x_i))\right)$$

真实值 预测值

- $L(\theta)$ 等价于：
$$L(\theta) = \begin{cases} -\log(f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 1 \\ -\log(1 - f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 0 \end{cases}$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

- 训练数据： $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$ ，其中 $y_i \in \{0, 1\}$
- 学习模型： $f(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x_i + b)}} \quad (1 \leq i \leq n)$
- 损失函数： $L(\theta) = -(\sum_{i=1}^n y_i \log(f_{\theta}(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f_{\theta}(x_i)))$
- 优化方法： ?

根据 $L(\theta) = \begin{cases} -\log(f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 1 \\ -\log(1 - f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 0 \end{cases}$, $f_{\theta}(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x_i + b)}}$

请回答，该损失函数是否满足：

- 1) 损失 $L(\theta)$ 为非负数
- 2) 当预测值 $f_{\theta}(x_i)$ 与真值 y 非常接近时，损失接近0

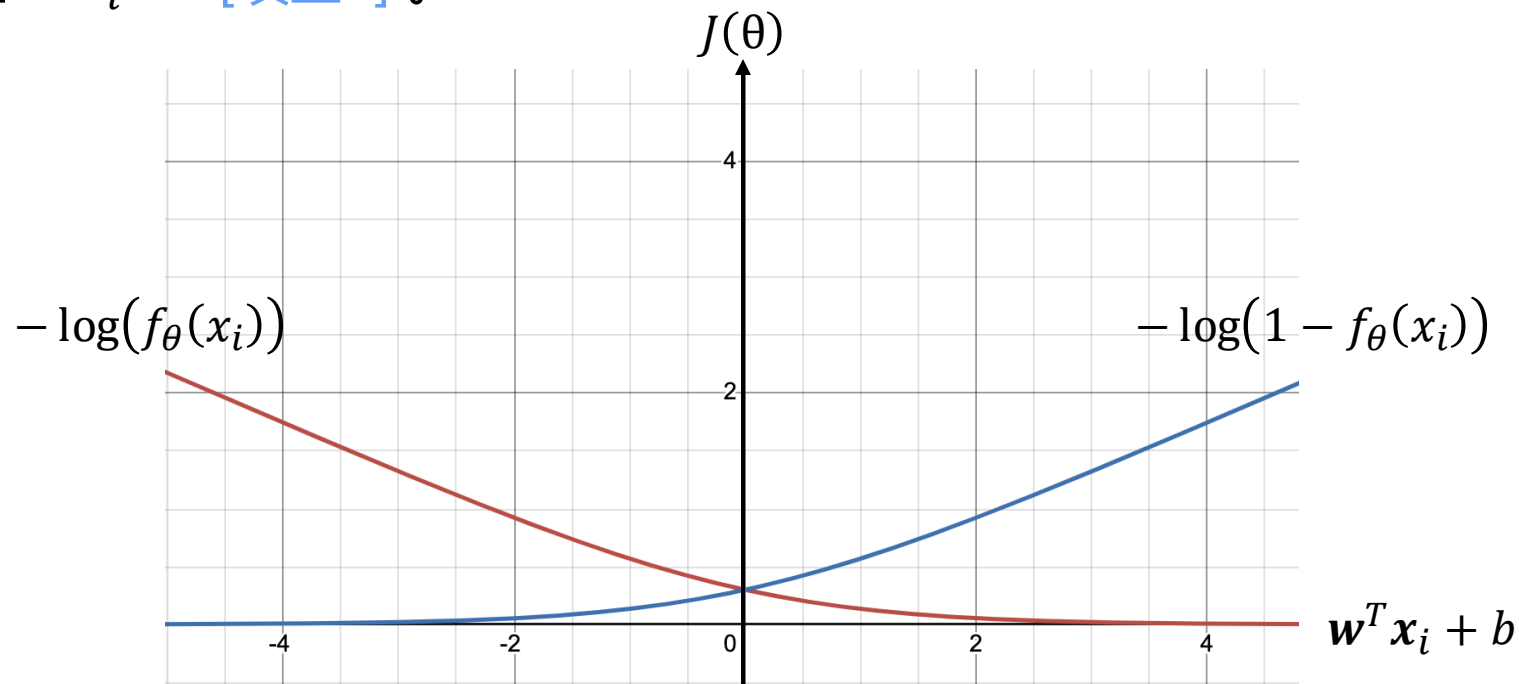
作答

根据 $L(\theta) = \begin{cases} -\log(f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 1 \\ -\log(1 - f_{\theta}(x_i)) & \text{if } y = 0 \end{cases}$, 其中 $f_{\theta}(x_i) = \frac{1}{1+e^{-(w^T x_i + b)}}$

以及下图损失函数的示意, 请分析,

$y = 1$ 时, 希望 $w^T x_i + b$ [填空1],

$y = 0$ 时, 希望 $w^T x_i + b$ [填空2]。



作答



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

- **训练数据**: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$, 其中 $y_i \in \{0, 1\}$
- **学习模型**: $f(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x_i + b)}} \quad (1 \leq i \leq n)$
- **损失函数**: $L(\theta) = -(\sum_{i=1}^n y_i \log(f_{\theta}(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f_{\theta}(x_i)))$
- **优化方法**: 梯度下降
 - 对 $L(\theta)$ 参数 θ 分别求偏导, $\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j}$ 。
 - 更新 $\theta_j = \theta_j - \eta \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j}$, 其中 η 为学习率

- 损失函数：

$$L(\theta) = -\left(\sum_{i=1}^n y_i \log(f_{\theta}(x_i)) + (1 - y_i) \log(1 - f_{\theta}(x_i))\right)$$

- 优化方法：梯度下降

- 请推导对 $L(\theta)$ 参数 θ_j 的偏导 $\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j}$

作答



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

概率输出：从回归到分类

- 需要最小化损失函数来求解参数。
- 损失函数对参数 θ 的偏导如下（其中， $f'_\theta(x) = f_\theta(x)(1 - f_\theta(x))$, $\log' x = \frac{1}{x}$ ）

$$\begin{aligned}\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j} &= - \sum_{i=1}^n \left(y_i \frac{1}{f_\theta(x_i)} \frac{\partial f_\theta(x_i)}{\partial \theta_j} + (1 - y_i) \frac{1}{1 - f_\theta(x_i)} \frac{\partial (1 - f_\theta(x_i))}{\partial \theta_j} \right) \\ &= - \sum_{i=1}^n \frac{1}{f_\theta(x_i)} \left(\frac{y_i}{f_\theta(x_i)} - \frac{1 - y_i}{1 - f_\theta(x_i)} \right) \\ &= - \sum_{i=1}^n x_i f_\theta(x_i) (1 - f_\theta(x_i)) \left(\frac{y_i}{f_\theta(x_i)} - \frac{1 - y_i}{1 - f_\theta(x_i)} \right) \\ &= - \sum_{i=1}^n x_i (y_i (1 - f_\theta(x_i)) - (1 - y_i) f_\theta(x_i)) = \sum_{i=1}^n (y_i - f_\theta(x_i)) x_i\end{aligned}$$

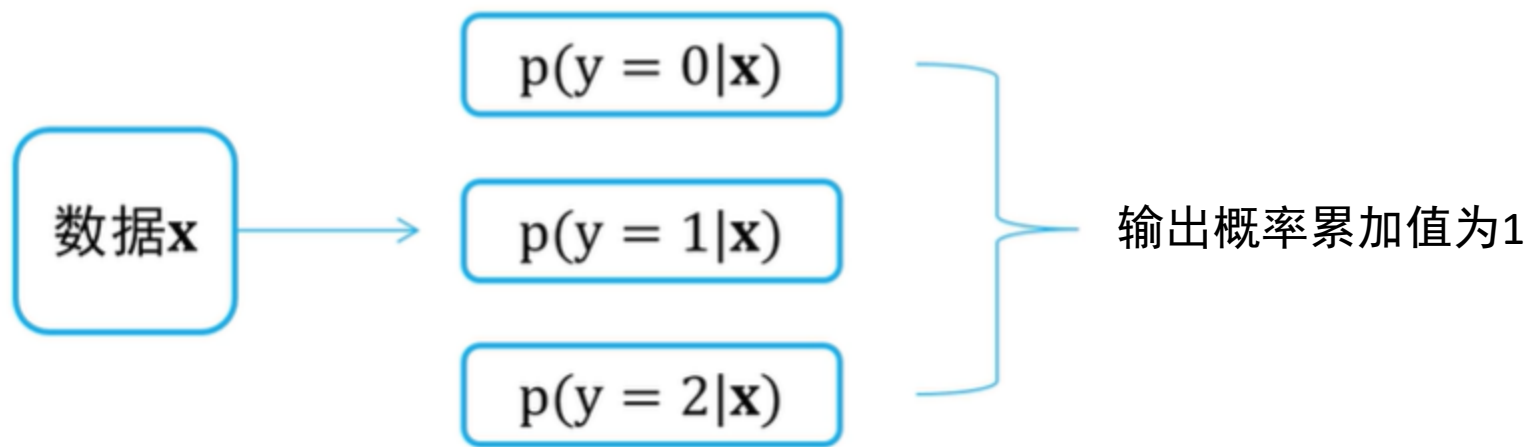
- 将求导结果代入**梯度下降**迭代公式得： $\theta_j = \theta_j - \eta \sum_{i=1}^n (y_i - f_\theta(x_i)) x_i$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

从回归到分类：从两类分类到多类分类

- Logistic回归只能用于解决**二分类**问题
- 将它进行推广为多项逻辑斯蒂回归模型（multi-nominal logistic model，也即softmax函数），用于处理多类分类问题，可以得到处理**多类分类**问题的softmax回归

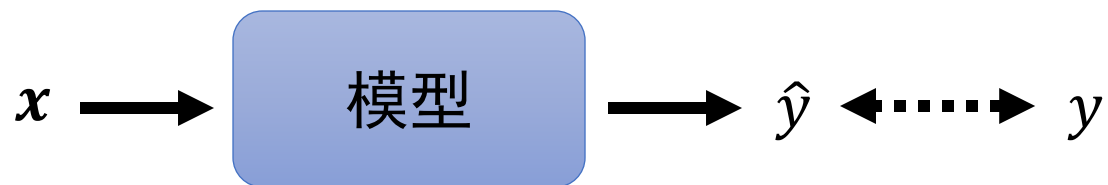


三个类别互斥

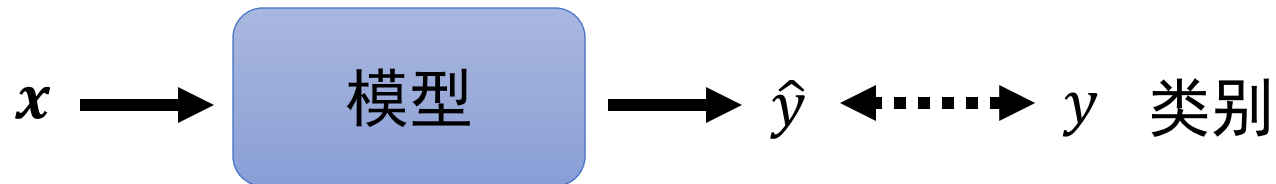


线性分类：用线性回归做分类？

- 线性回归



- 用线性回归做分类？



更不同？

0 = 类别 0
1 = 类别 1
2 = 类别 2

更相似？



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

从回归到分类（softmax 分类）：从两类分类到多类分类

- 多类分类问题需要先把真值 y 表示为独热向量：

类别 1

$$y = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

类别2

$$y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

类别3

$$y = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

从回归到分类（softmax 分类）：从两类分类到多类分类

类别 1

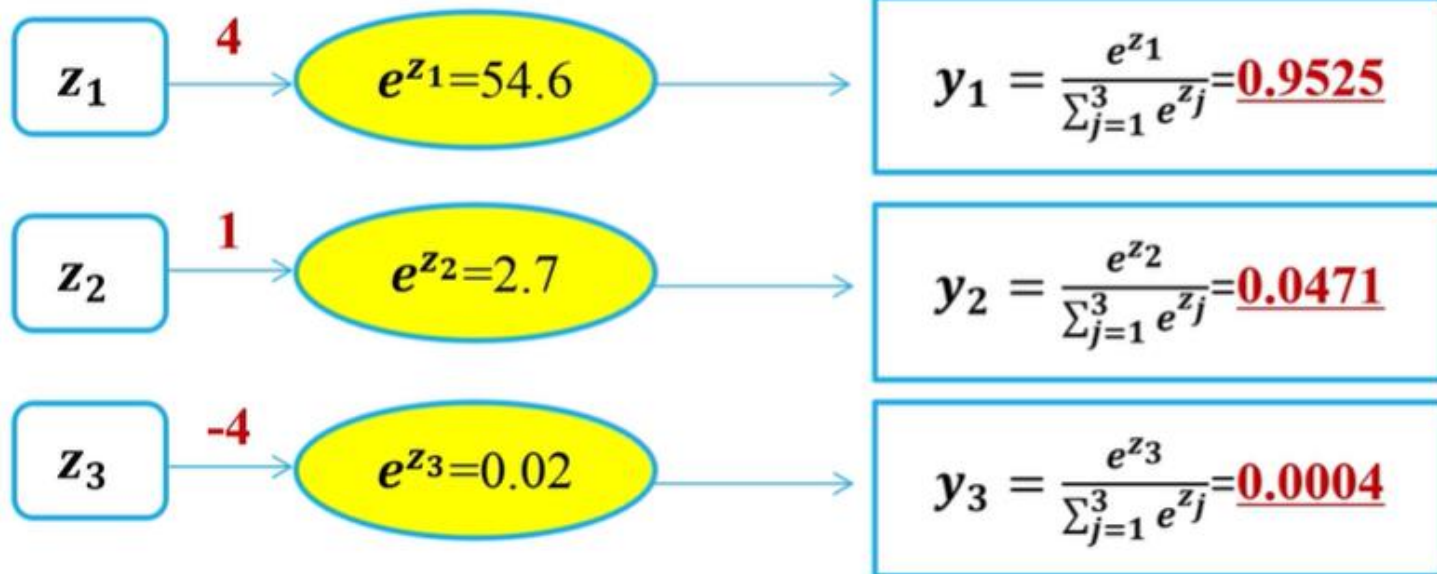
$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

类别 2

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

类别 3

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



$$0 < y_i < 1, \sum_i y_i = 1$$



线性分类：对数几率回归 (Logistic Regression)

- **训练数据**: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$, 其中 y_i 为 K 类标签
- **学习模型**: $p(y_{i,k}|x_i) = \frac{\exp(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)_k}{\sum_j \exp(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)_j} \quad (1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq K)$
- **损失函数**: $L(\theta) = -\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^K y_{i,j} \log(p(y_{i,j}|x_i))$
- **优化方法：梯度下降**
 - 对 $L(\theta)$ 参数 θ 分别求偏导, $\frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j}$ 。
 - 更新 $\theta_j = \theta_j - \eta \frac{\partial L(\theta)}{\partial \theta_j}$, 其中 η 为学习率