

人工智能

第2讲: 机器学习-有监督学习

线性回归与线性分类

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



回顾: 什么是人工智能

- 从Turing的Imitation Game, 讲到Turing测试
- 把人工智能的核心领域与大脑功能做初步的对应

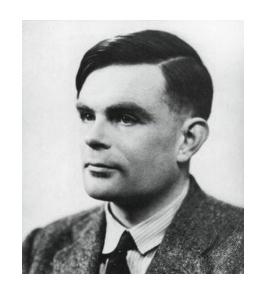
像人一样思考的系统

...... 有头脑的机器

.....模拟人类的思维

像人一样行动的系统

...执行人需要智能完成的功能



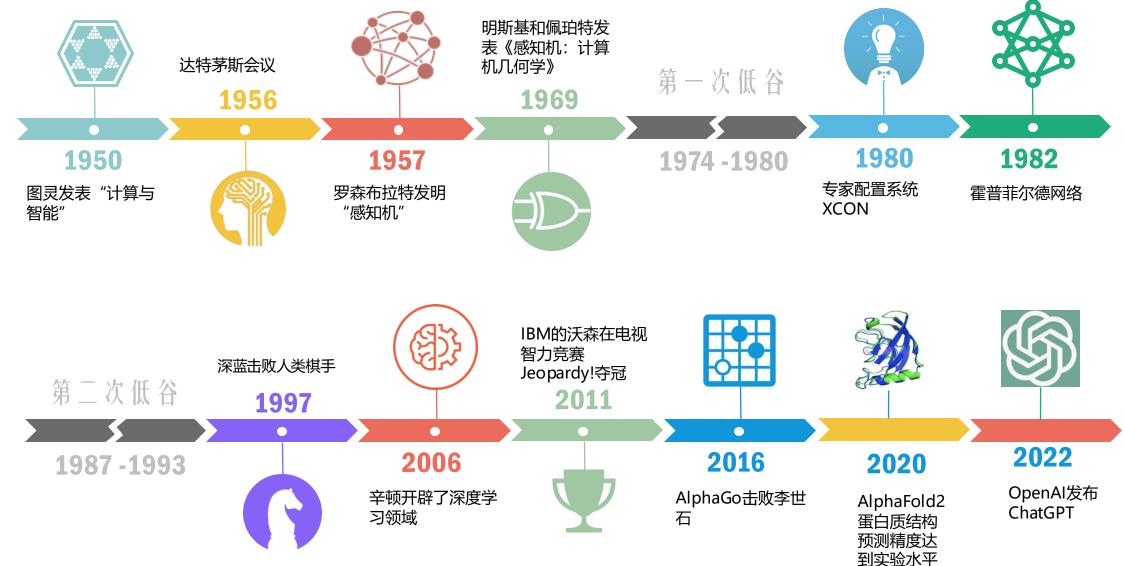
Alan Turing 阿兰·图灵



根据图灵故事拍摄的电影



回顾:人工智能的发展历史与脉络:人工智能关键历史节点





回顾:人工智能三种主流方法区别

学习模式	优势	不足
符号主义(用规则教)	与人类逻辑推理相似, 解释性强	难以构建完备的知识规 则库
联结主义(用数据学)	直接从数据中学	以深度学习为例: 依赖 于数据、解释性不强
行为主义(用问题引导)	从经验中进行能力的持 续学习	非穷举式搜索而需更好 策略

从数据到知识与能力,能力增强是最终目标 三种学习方法的综合利用值得关注!



提纲

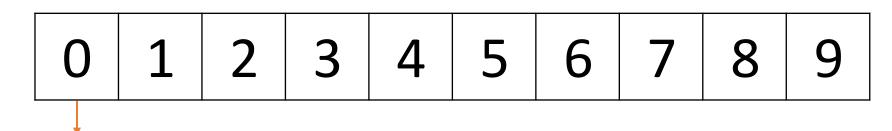
- 一、机器学习基本概念
- 二、线性回归与线性分类
- 三、线性判别分析
- 四、支持向量机
- 五、决策树
- 六、集成学习



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

请思考,如何实现对这些包含数字图像的自动识别/分类?



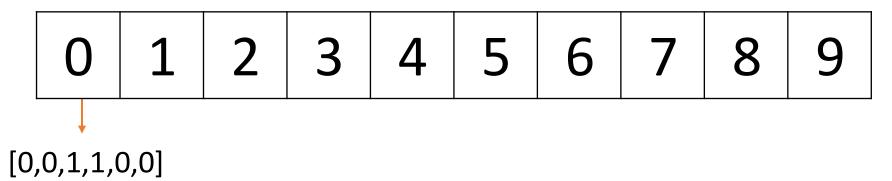
[0,0,1,1,0,0]

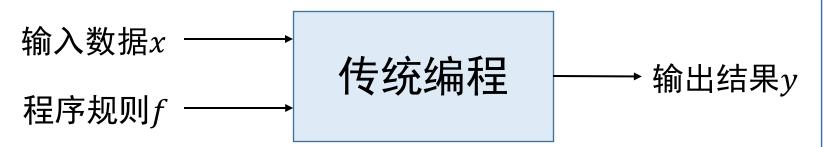
注:图片可转换为矩阵,空白区域用0表示,字迹区域用1表示:

Γ0	0	1	1	0	07
0	1/	0	0	1	0
0	1	0	0	1	0
0	1	0	0	1	0
0	0	1	1	0	0
Γ^0	0	0	0	0	0]



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
```

下图为经典手写数字识别数据集。

请思考,如何实现对这些手写数字图像的自动识别/分类?



Yann LeCun (杨立昆)

MNIST dataset

http://yann.lecun.com/exdb/mnist/



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
```

```
输入数据x —  机器学习 — 程序规则f
```



机器学习: 从数据中学习知识 f(x) = y

• 语音识别

• 图像分类

• 围棋游戏



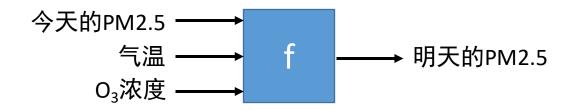
(下一步落子位置)



机器学习的分类(按问题分类)

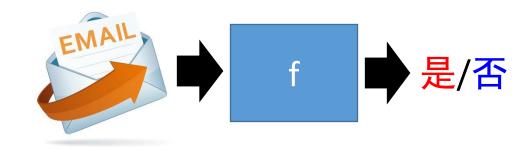
• 回归问题: 函数输出标量(连续)

预测PM2.5



• 分类问题: 给定选项(类别), 函数输出其中一个正确选项(离散)

垃圾邮件过滤





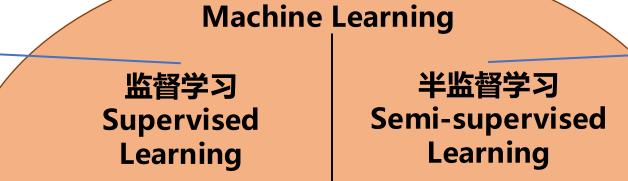
机器学习的分类 (按数据标注情况分类)

- 数据有标签
- 直接反馈
- 预测结果

x_1	x_2	x_3	x_4
y_1	y_2	y_3	y_4

- 数据无标签
- 无反馈
- 寻找数据规律

1 - 1 - 1 - 1



机器学习

无监督学习 Unsupervised Learning 强化学习 Reinforcement Learning

- 部分数据有标签
- 部分反馈
- 预测结果

x_1	x_2	x_3	x_4
y_1	y_2		

- ・ 稀疏标签 (奖励)
- 稀疏反馈
- ・ 序列决策

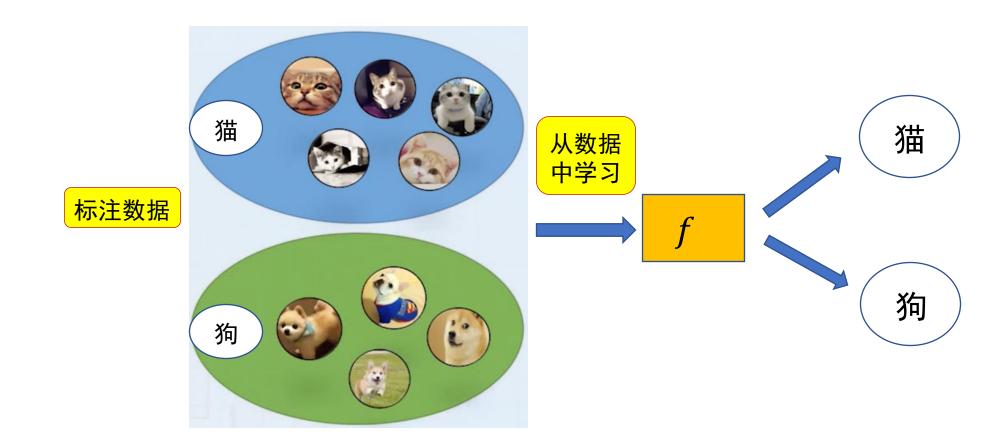
$$x_1 \to x_2 \to x_3 \to x_4$$

$$y$$



机器学习的分类(按数据标注情况分类)

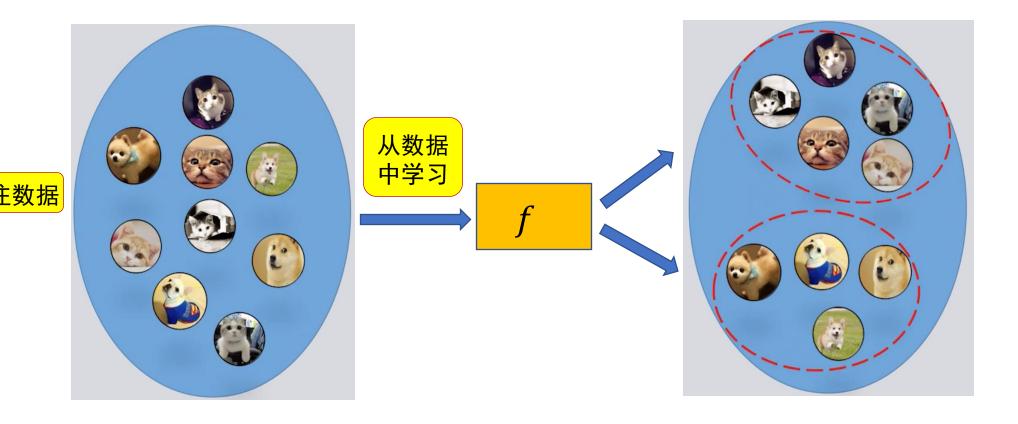
• 有监督学习(supervised learning)





机器学习的分类(按数据标注情况分类)

• 无监督学习(unsupervised learning)





监督学习的重要元素

标注数据

学习模型

损失函数

优化方法

■ 标识了类别信息的数据

■ 定义映射模型类型

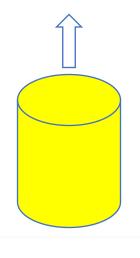
■ 对映射结果进行度量

■ 对映射模型进行学习



监督学习:主要要素

训练映射函数f使得 $f(x_i)$ 预测结果尽量等于 y_i



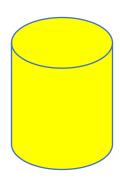
训练数据集 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$

- 训练集中一共有n个标注数据,第i个标注数据记为 (x_i, y_i) ,
 - *x_i*: 第*i*个样本数据
 - y_i : x_i 的标注信息(真值, groundtruth)。
- 定义一个映射函数f(也被称为模型),f对 x_i 的预测结果记为 $f(x_i)$ 。
- 损失函数Loss就是用来计算 x_i 真值 y_i 与预测值 $f(x_i)$ 之间差值的函数。
- 在训练过程中希望优化映射函数,使得在训练数据集上得到 "损失"之和最小,即 $\min \sum_{i=1}^n Loss(f(x_i), y_i)$ 。

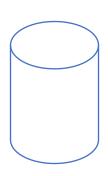


监督学习: 训练数据与测试数据

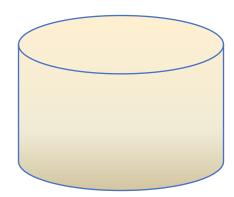
从训练数据集<mark>学习</mark> 映射函数*f* 的未知参数 在测试数据集 <mark>测试</mark>映射函数*f* 未知数据集 上<mark>测试</mark>映射函数*f*



训练数据集 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$



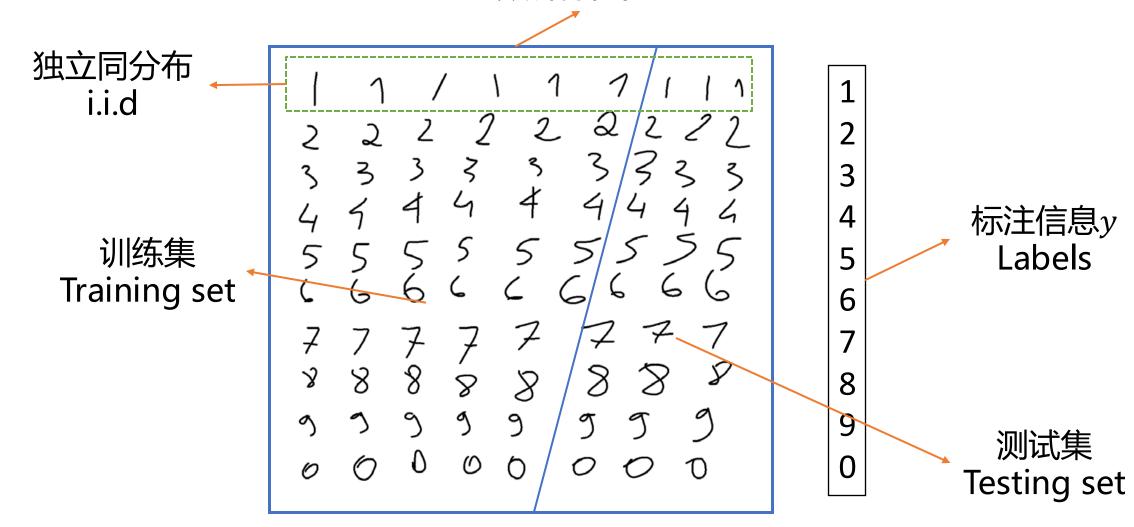
测试数据集 $(x_i', y_i'), i = 1, ..., m$





监督学习: 训练数据与测试数据

数据样本x





监督学习:映射函数f

•映射函数(模型) f: 比如线性模型

$$\widehat{y}_i = f(x_i) = wx_i + b \ (1 \le i \le n)$$

■ *x_i* : 输入样本数据

■ ŷ_i: 模型输出结果

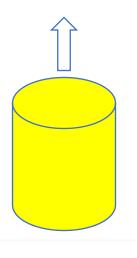
■ w 和 b 为未知参数(需要从数据中学习)

■ 基于领域知识定义模型*f*(*x_i*)



监督学习: 损失函数

训练映射函数f使得 $f(x_i)$ 预测结果尽量等于 y_i



训练数据集 $(x_i, y_i), i = 1, ..., n$

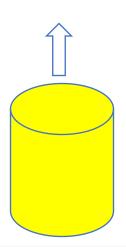
损失函数名称	损失函数定义
0-1损失函数	$Loss(y_i, f(x_i)) = \begin{cases} 1, f(x_i) \neq y_i \\ 0, f(x_i) = y_i \end{cases}$
平方损失函数	$Loss(y_i, f(x_i)) = (y_i - f(x_i))^2$
绝对损失函数	$Loss(y_i, f(x_i)) = y_i - f(x_i) $
对数损失函数/ 对数似然损失 函数	$Loss(y_i, P(y_i x_i)) = -logP((y_i x_i))$

典型的损失函数



监督学习

训练映射函数f



训练数据集

$$(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$$

- 回归
- 分类
- 识别
- 推荐
- 生成

• ...



提纲

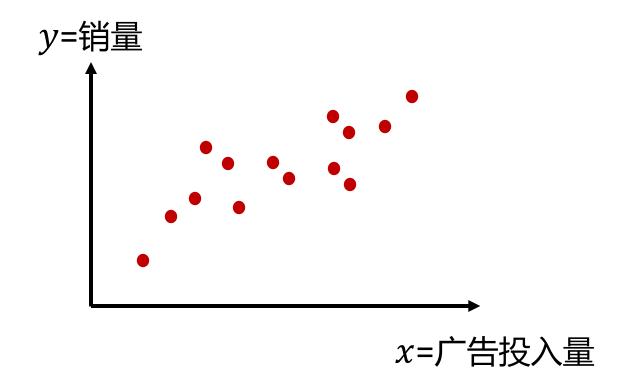
- 一、机器学习基本概念
- 二、线性回归与线性分类
- 三、线性判别分析
- 四、支持向量机
- 五、决策树
- 六、集成学习



线性回归 Linear Regression

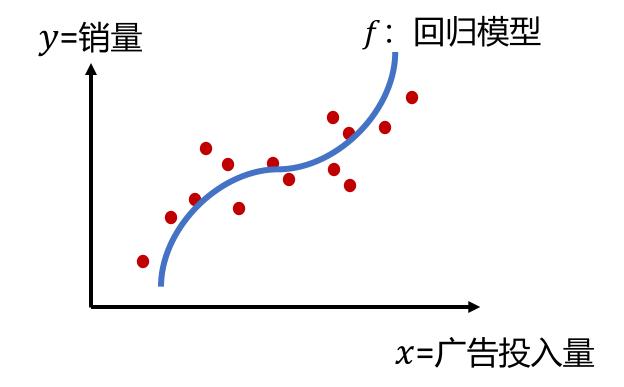


在现实生活中,往往需要分析若干变量之间的关系,如碳排放量与气候变暖之间的关系、某一商品广告投入量与该商品销售量之间的关系。



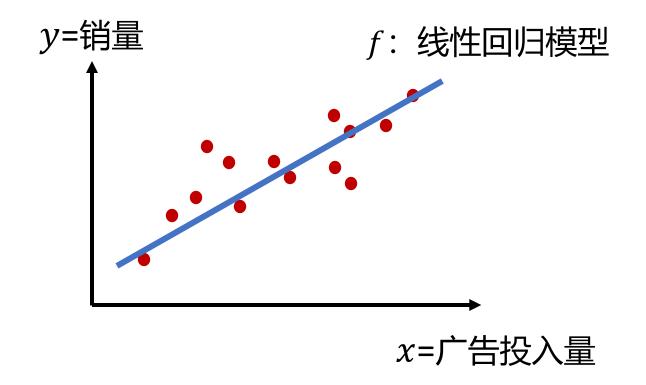


这种分析不同变量之间存在关系的研究叫回归分析,刻画不同变量之间关系的模型被称为回归模型。



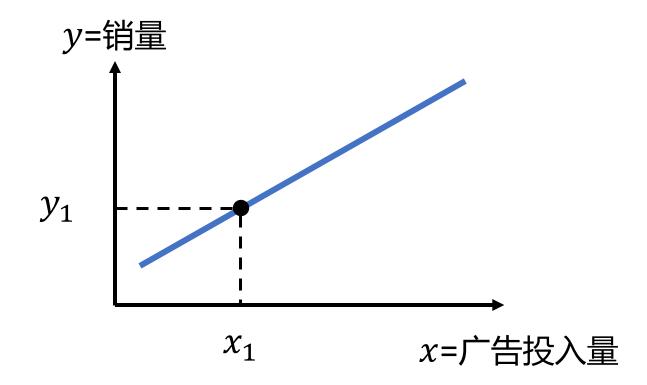


这种分析不同变量之间存在关系的研究叫回归分析,刻画不同变量之间关系的模型被称为回归模型。如果这个模型是线性的,则称为线性回归模型。





 一旦确定了回归模型,就可以进行预测等分析工作,如从碳排放量预测气 候变化程度、从广告投入量预测商品销售量等。



- 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
- 学习模型: $f(x_i) = wx_i + b \ (1 \le i \le n)$
 - 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: $L(w,b) = \sum_{i=1}^{n} loss(x_i, y_i) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (wx_i + b))^2$
- 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。



一元线性回归模型例子

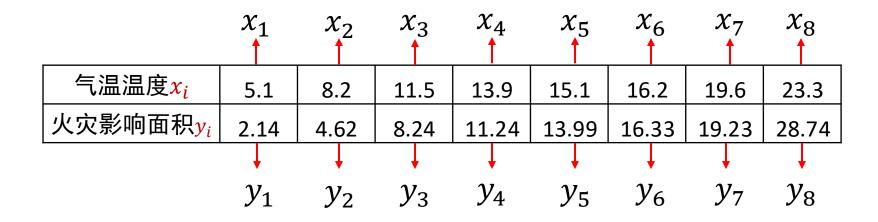
• 下表给出了芒提兹尼欧(Montesinho)地区发生森林火灾的部分历史数据,表中列举了每次发生森林火灾时的气温温度取值x和受到火灾影响的森林面积y。

气温温度	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
火灾影响面积	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

- 可否对气温温度与火灾所影响的森林面积之间关系进行建模呢?
- 初步观察之后,可以使用简单的线性模型构建两者之间关系。
- 即气温温度x与火灾所影响的森林面积y之间存在y = wx + b形式的关系。



• 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$



- 学习模型: $f(x_i) = wx_i + b \ (1 \le i \le n)$
- 损失函数: $L(b,w) = \sum_{i=1}^{n} loss(x_i, y_i) = \sum_{i=1}^{8} (y_i (wx_i + b))^2$

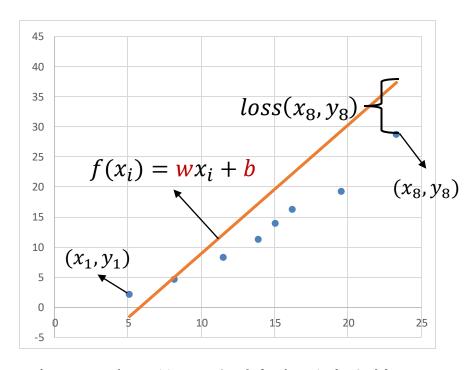


气温温度	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
火灾影响面积	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

- 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
- 学习模型: $f(x_i) = wx_i + b \ (1 \le i \le n)$
 - w为直线的斜率; b为直线的截距
- 损失函数:

$$L(\mathbf{w}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{n} loss(x_i, y_i) = \sum_{i=1}^{8} (y_i - (\mathbf{w}x_i + \mathbf{b}))^2$$

- 损失函数是关于未知参数w和b的函数。
- 最优解即是使得损失最小所对应的w和b的值。



气温温度取值和受到火灾影响森林面 积之间的一元线性回归模型(橙色实 线为回归模型)

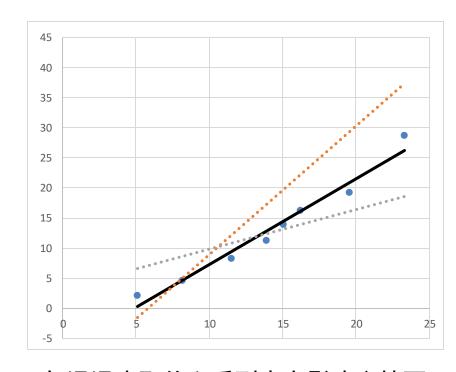


气温温度	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
火灾影响面积	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

- 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
- 学习模型: $f(x_i) = wx_i + b \ (1 \le i \le n)$
 - w为直线的斜率; b为直线的截距
- 损失函数:

$$L(\mathbf{w}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{n} loss(x_i, y_i) = \sum_{i=1}^{8} (y_i - (\mathbf{w}x_i + \mathbf{b}))^2$$

- 损失函数是关于未知参数w和b的函数。
- 最优解即是使得损失最小所对应的w和b的值。

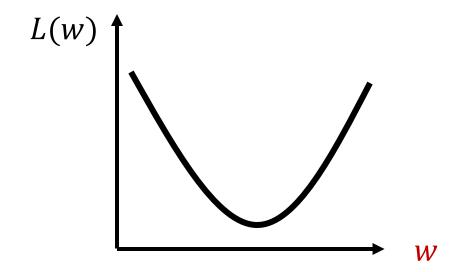


气温温度取值和受到火灾影响森林面 积之间的一元线性回归模型(黑色实 线为最佳回归模型)



• 损失函数: $L(b, w) = \sum_{i=1}^{8} (y_i - (wx_i + b))^2$

• 暂且忽略b: $L(w) = \sum_{i=1}^{8} (y_i - wx_i)^2$





- 损失函数: $L(b, w) = \sum_{i=1}^{8} (y_i (wx_i + b))^2$
- 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。
 - 对b求偏导:

- 损失函数: $L(b,w) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (wx_i + b))^2$
- 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。
 - 对b求偏导:



- 损失函数: $L(b,w) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (wx_i + b))^2$
- 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。

■ 对
$$b$$
求偏导: $\partial L(w,b) = \sum_{i=1}^{n} 2(x_i - y_i)$

$$\frac{\partial L(w,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - wx_i - b)(-1) = 0$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{n} (y_i - wx_i - b) = 0$$

$$(\diamondsuit \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i, \ \bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i)$$

$$\rightarrow n\bar{y} - nw\bar{x} - nb = 0 \qquad \qquad b = \bar{y} - w\bar{x}$$



$$b = \bar{y} - w\bar{x}$$

- 损失函数: $L(b,w) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (wx_i + b))^2$
- 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。
 - 利用 $b = \bar{y} w\bar{x}$, 对w求偏导:



线性回归:一元线性回归

■ 对w求偏导:

$$\frac{\partial L(w,b)}{\partial w} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - wx_i - b)(-x_i) = 0$$

将 $b = \bar{y} - w\bar{x}$ 代入上式:

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{n} (y_i - wx_i - \overline{y} + w\overline{x})(x_i) = 0$$

$$\rightarrow \sum_{i=1}^{n} (y_i x_i - w x_i x_i - \overline{y} x_i + w \overline{x} x_i) = 0$$

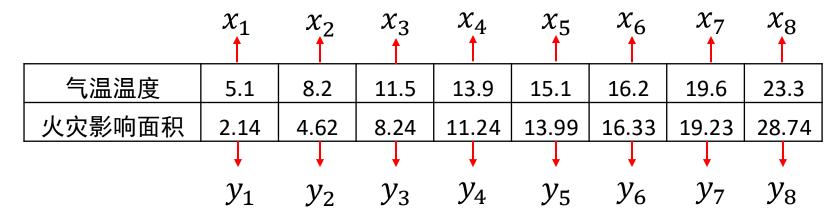
$$\to \sum_{i=1}^{n} (y_i x_i - \bar{y} x_i) - w \sum_{i=1}^{n} (x_i x_i - \bar{x} x_i) = 0$$

$$\to (\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \bar{x}\bar{y}) - w(\sum_{i=1}^{n} x_i x_i - \bar{x}^2) = 0$$

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\,\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i x_i - n\bar{x}^2}$$



• 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$

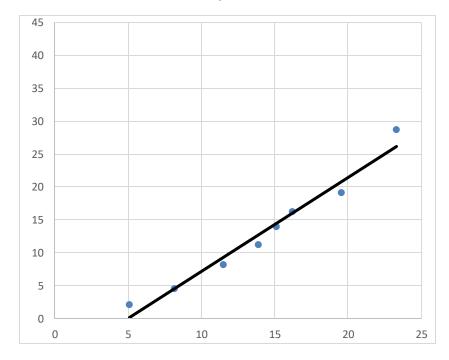


- 优化结果: $b = \bar{y} w\bar{x}$, $w = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i x_i \bar{x}^2}$
- 带入训练数据: $b = \bar{y} w\bar{x} = -7.09$, $w = \frac{(x_1y_1 + x_2y_2 + \dots + x_8y_8) 8\bar{x}\bar{y}}{(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_8^2) 8\bar{x}^2} = 1.428$
- 预测火灾所影响森林面积与气温温度之间的一元线性回归模型为y = 1.428x 7.09,即火灾所影响的森林面积 = $1.428 \times 气温温度 7.09$

• 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$

气温温度	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
火灾影响面积	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

火灾所影响的森林面积 = 1.428 × 气温温度 - 7.09



- 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
 - 其中, $x_i = [x_{i,1}, x_{i,2}, ..., x_{i,D}] \in \mathbb{R}^D$ 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: $f(x_i) = \sum_{j=1}^{D} w_j x_{i,j} + w_0 = \mathbf{w}^T x_i + w_0, (1 \le i \le n)$
- 损失函数: $L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} loss(\mathbf{x}_i, y_i) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0))^2$
- 优化方法: 最小二乘法



多元线性回归模型例子

• 扩展到数据特征的维度是多维的情况,在数据中增加一个影响火灾影响面积的因素—风力。

气温	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
风力	4.5	5.8	4	6.3	4	7.2	6.3	8.5
火灾影响面积	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

• 可利用多元线性回归来建模



该例子中,训练数据样本个数为[填空1],数据特征维度为[填空2]



- 训练数据: $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$
 - 其中, $x_i = [x_{i,1}, x_{i,2}, ..., x_{i,D}] \in \mathbb{R}^D$ 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

气温 <i>x_{i,1}</i>	5.1	8.2	11.5	13.9	15.1	16.2	19.6	23.3
风力 $x_{i,2}$	4.5	5.8	4	6.3	4	7.2	6.3	8.5
火灾影响面积 y_i	2.14	4.62	8.24	11.24	13.99	16.33	19.23	28.74

- 学习模型: $f(x_i) = \sum_{j=1}^{D} w_j x_{i,j} + w_0 = \mathbf{w}^T x_i + w_0, (1 \le i \le n)$
- 损失函数: $L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} loss(\mathbf{x}_i, y_i) = \sum_{i=1}^{n} (y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0))^2$
- 优化方法: 最小二乘法

请问多元线性回归中,假设数据向量的维度为D,那么多元线性回归模型的参数量为[填空1]

• 损失函数:最小化均方误差函数

$$L(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{w}_0))^2$$

• 为了方便,使用矩阵来表示所有的训练数据和数据标签。

$$X = [x_1, ..., x_n]^T, y = [y_1, ..., y_n]^T$$

• 其中每一个数据 x_i 会扩展一个维度,其值为1,对应参数 w_0 。

$$X = \begin{bmatrix} x_1, \dots, x_n \\ 1, \dots, 1 \end{bmatrix}^T$$

• 均方误差函数可以表示为:

$$L(\mathbf{w}) = (\mathbf{y} - X\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - X\mathbf{w})$$



• 均方误差函数可以表示为:

$$L(\mathbf{w}) = (\mathbf{y} - X\mathbf{w})^T (\mathbf{y} - X\mathbf{w})$$

• 均方误差函数L(w)对所有参数w求导可得:

$$\nabla L(\mathbf{w}) = -2X^T(\mathbf{y} - X\mathbf{w})$$

• 因为均方误差函数L(w)是一个二次的凸函数,所以函数只存在一个极小值点,也同样是最小值点,所以令 $\nabla L(w) = 0$ 可得

$$X^T X \boldsymbol{w} = X^T \boldsymbol{y}$$
$$\boldsymbol{w} = (X^T X)^{-1} X^T \boldsymbol{y}$$



• 对于上面的例子, 转化为矩阵的表示形式为:

$$y = [2.14 \quad 4.62 \quad 8.24 \quad 11.24 \quad 13.99 \quad 16.33 \quad 19.23 \quad 28.74]^{T}$$

• 其中矩阵X多出一行全1,是因为常数项 w_0 ,可以看作是数值为全1的特征的对应系数。计算可得

$$\mathbf{w} = [1.312 \quad 0.626 \quad -9.103]^T$$

$$f(x_i) = 1.312x_{i,1} + 0.626x_{i,2} - 9.103$$

