第三章 线性模型

很熟悉的基本形式

$$f(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + ... + w_d x_d + b$$

以及向量形式

$$f(x) = w^T x + b$$

线性回归

数据集 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_m, y_m)\}$，`linear refression`学习得到一个线性模型尽可能准确预测实值的输出标记。

均方误差

用于线性回归中的性能度量。

欧几里得距离

欧氏距离 `Euclidean distance`，就是最熟知的直角三角形求你斜边长。对于二维，$dis = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$，对于三维，$dis = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z1)^2)}$

MSE

反映估计量与被估计量之间的差异程度，即估计值与真值之差的平方的期望。MSE可以评价数据的变化程度，值越小精确度越好

和方差

$$SSE = \sum_{i=1}^{m} w_i (f(x_i) - y_i)^2$$

均方差

$$MSE = \frac{SSE}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{m} w_i (f(x_i) - y_i)^2$$

MSE最小化

$$\begin{aligned}(w^*, b^*) &= arg \min_{(w,b)} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2 \\ &= arg \min_{(w,b)} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - wx_i - b)^2\end{aligned}$$

最小二乘法

`least square nethod`--基于均方误差最小化进行模型求解。找一条直线，所有样本到直线上的欧氏距离之和最小。

参数估计

即求 w 和 b 使 SSE 最小化。对 w 和 b 分别求偏导：

$$
\begin{gathered}
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w} = 2\left(w\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \sum_{i=1}^{m}(y_i - b)x_i\right) = 0 \\
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b} = 2\left(mb - \sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i)\right) = 0 \\
\Rightarrow \\
w = \frac{\sum_{i=1}^{m} y_i(x_i - \overline{x})}{\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \frac{1}{m}(\sum_{i=1}^{m} x_i)^2} \\
b = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i)
\end{gathered}
$$

多元线性回归

对于 $f(x_i) = w^T x_i + b_i$ 数据集 D 为 $m \times (d+1)$ 的矩阵 X:

$$
\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x_1^T} & 1 \\ \boldsymbol{x_2^T} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x_m^T} & 1 \end{pmatrix}
$$

标记的向量形式 $\boldsymbol{y} = (y_1; y_2; \dots; y_m)$，以及 w 与 b 的向量形式

$$
\hat{\boldsymbol{w}} = (\boldsymbol{w}; b) = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \\ b \end{pmatrix}
$$

则大小为 $(d+1) \times 1$，有

$$
\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 x_{11} + w_2 x_{12} + \dots + w_d x_{1d} + b \\ w_1 x_{21} + w_2 x_{22} + \dots + w_d x_{2d} + b \\ \vdots \\ w_1 x_{m1} + w_2 x_{m2} + \dots + w_d x_{md} + b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_m) \end{pmatrix}
$$

有和方差

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

对 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 求导

$$\frac{\partial E_{\hat{\boldsymbol{w}}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}} = 2\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}} - \boldsymbol{y})$$

要使上式 **等于0**

- 矩阵的秩

  用初等行变换将矩阵A化为阶梯形矩阵, 则矩阵中非零行的个数就定义为这个矩阵的秩, 记为r(A)

- 满秩矩阵

  矩阵的行列数都为r(A)

- 正定矩阵

  A是n阶方阵，若对任何非零向量x，都有$x^TAx > 0$，则A为正定矩阵

当 $\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}$ 为满秩矩阵或正定矩阵时，$\boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}} - \boldsymbol{y}) = 0$ 得到

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

所以

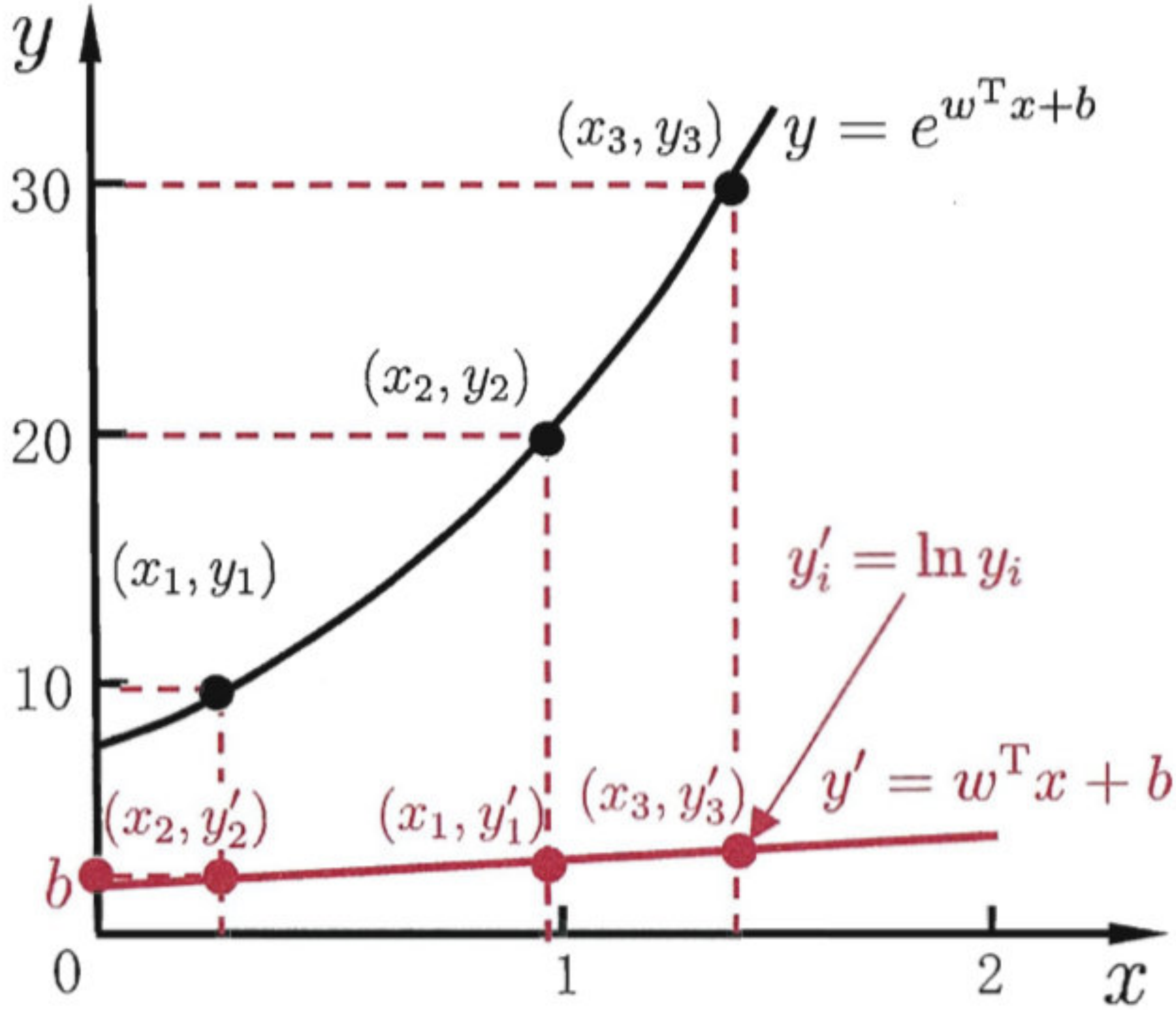
$$f(\hat{\boldsymbol{x}_i}) = \hat{\boldsymbol{x}_i}^T(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

但是现实数据集中往往数据很多导致 X 的列数远大于行数，此时可以求解出多个 $\hat{w}$，选择其中的一个作为输出则引入 **正则化项**，正则化不展开讨论。

对数线性回归 log-linear regression

简写线性回归模型为 $y' = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$，令 $y = e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}$，则有 $ln\,y = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$

对数线性回归示意图



这里看得有点儿懵逼，有几个定义

- 广义线性回归
- 单调可谓函数/联系函数 $g(\cdot)$
- 广义线性回归模型 $y = g^{-1}(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b)$

对数线性回归是广义线性回归模型在 $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 的特例...

对数几率回归

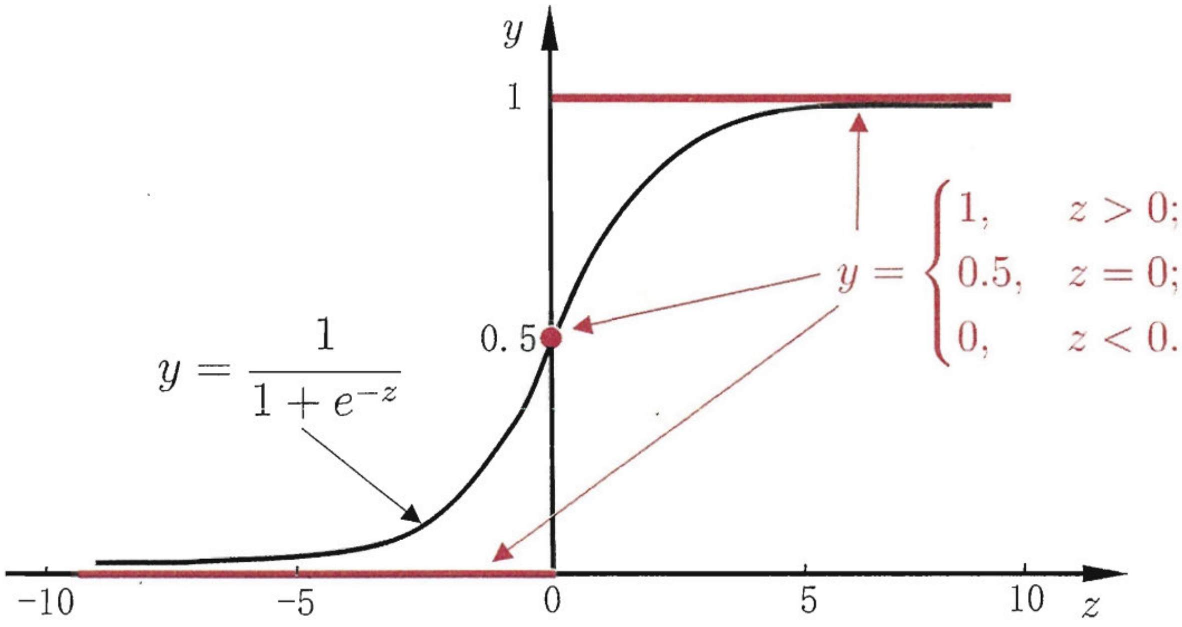
对数几率回归针对分类任务——找一个单调微函数将真实标记 y 和回归模型的预测值进行联系。

二分类

对于二分类，将预测出的实值 $z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$ 用 **越阶函数** 映射到区间 {0, 1}，即熟悉的 `Sigmoid函数`

$$y = \frac{1}{1+e^{-z}} = \begin{cases} 0\,, \ z < 0 \\ 0.5\,, \ z = 0 \\ 1, z > 0 \end{cases}$$

图像



对两边取对数，y 样本的正例概率，则 1 - y 为反例概率，则 $\frac{y}{1-y}$ 为几率，反应了正例 x 的可能性，对几率取对数，就叫做对数几率。

$$ln\frac{y}{1-y} = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$$

使用 **极大似然估计** 来估计两个参数 w 和 b 的值

$$ln\frac{p(y=1|\boldsymbol{x})}{p(y=0|\boldsymbol{x})} = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b$$
$$p(y=1|\boldsymbol{x}) = \frac{e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}}{1+e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}}$$
$$p(y=0|\boldsymbol{x}) = \frac{1}{1+e^{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+b}}$$
$$l(\boldsymbol{w},b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i|\boldsymbol{x_i};\boldsymbol{w},b)$$

使每个样本接近真实值的概率越大越好。令 $(\boldsymbol{w},b) = \boldsymbol{\beta}$，$\hat{x} = (\boldsymbol{x};1)$，则 $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + b = \boldsymbol{\beta}^T\hat{x}$

令

$$p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\beta) = p(y=1|\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})$$
$$p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\beta) = p(y=0|\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta}) = 1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\beta)$$

重写似然项

$$p(y_i|\boldsymbol{x_i};\boldsymbol{w},b) = y_i p_1(\hat{\boldsymbol{x}};\beta) + (1-y_i)p_0(\hat{\boldsymbol{x}};\beta)$$

则把式子代入到最大化式得到

$$l(\beta)=\sum_{i=1}^{m}\ln(y_i p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\beta)+(1-y_i)p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\beta))$$

$$\text{其中} p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\beta)=\frac{e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}}{1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}}, p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\beta)=\frac{1}{1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}i}}, \text{代入}$$

$$l(\beta)=\sum_{i=1}^{m}\ln\left(\frac{y_i e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}+1-y_i}{1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}i}}\right)=\sum_{i=1}^{m}\left(\ln(y_i e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}_i}+1-y_i)-\ln(1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}i})\right)$$

因为 $y_i=0or1$

$$l(\beta)=\begin{cases}\sum_{i=1}^{m}(-\ln(1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}i})), & y_i=0\\ \sum_{i=1}^{m}(\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}_i-\ln(1+e^{\beta^T\hat{\boldsymbol{x}}i})), & y_i=1\end{cases}$$

综合得到

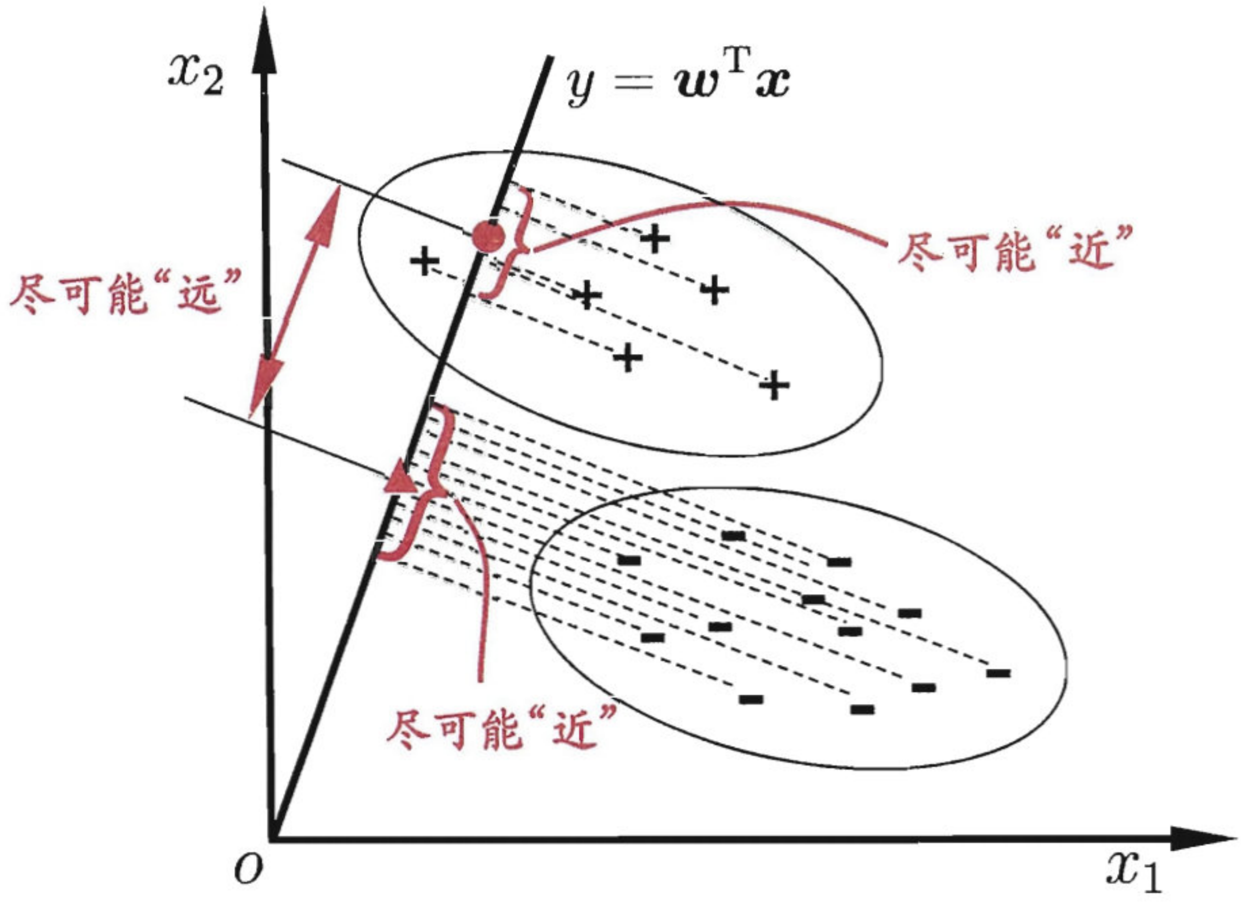
$$l(\beta)=\sum_{i=1}^{m}(-y_i\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i+\ln(1+e^{\boldsymbol{\beta}^T\hat{x}_i}))$$

对 β 求导得

$$\frac{\partial l(\beta)}{\partial\beta}=-\sum_{i=1}^{m}\hat{\boldsymbol{x}}_i(y_i-\hat{y}i)=\sum_{i=1}^{m}\hat{\boldsymbol{x}}_i(\hat{y}_i-y_i)$$
$$=\boldsymbol{X}^T(\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{y})\ =\boldsymbol{X}^T(p_1(\boldsymbol{X};\beta)-\boldsymbol{y})$$

线性判别分析LDA

`Linear Discriminant Analysis`，思路：**将训练样本投影到一条直线上，使得同类的样例尽可能近，不同类的样例尽可能远**



- 数据集 $D = \{(\boldsymbol{x_i}, y_i)\}_{i=1}^m, y_i \in \{0, 1\}$
- X_i，μ，$\sum_i$，$i \in \{0, 1\}$ 数据集、均值向量、协方差矩阵
- 两类样本在直线 $\boldsymbol{w}$ 上的投影分别为 $\boldsymbol{w^T \mu_o}$，$\boldsymbol{w^T \mu_1}$
- 两类样本的协方差分别为 $\boldsymbol{w^T \sum_o w}$，$\boldsymbol{w^T \sum_1 w}$
- 尽可能近：$\boldsymbol{w^T \sum_o w} + \boldsymbol{w^T \sum_1 w}$ 尽可能小
- 尽可能远：$||\boldsymbol{w^T \mu_o} - \boldsymbol{w^T \mu_1}||_2^2$ 尽可能大

这里就涉及到几个距离

- 类间散度矩阵 `between-class scaltter matrix`，越大越好

$$S_w = \sum 0 + \sum 1 = \sum_{x \in X_0} (x - \mu_0)(x - \mu_0)^T + \sum_{x \in X_1} (x - \mu_1)(x - \mu_1)^T$$

- 类间散度矩阵 `between-class scaltter matrix`，越小越好

$$S_b = (\mu_0 - \mu_1)(\mu_0 - \mu_1)^T$$

- **LDA** 的最大化目标“广义瑞利商” `generalized Rayleigh quotient`，越大越好

$$
\begin{aligned}
J &= \frac{||\boldsymbol{w}^T\mu_0 - \boldsymbol{w}^T\mu_1||_2^2}{\boldsymbol{w}^T(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{||(\boldsymbol{w}^T\mu_0 - \boldsymbol{w}^T\mu_1)^T||_2^2}{\boldsymbol{w}^T(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{||(\mu_0-\mu_1)^T\boldsymbol{w}||_2^2}{\boldsymbol{w}^T(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{[(\mu_0-\mu_1)^T\boldsymbol{w}]^T(\mu_0-\mu_1)^T\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{\boldsymbol{w}^T(\mu_0-\mu_1)(\mu_0-\mu_1)^T\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{\boldsymbol{w^T S_b w}}{\boldsymbol{w^T S_w w}}
\end{aligned}
$$

我们要在此确立 w，由于解只和方向有关和长度无关，令 $\boldsymbol{w^T S_w w}=1$，则广义瑞利商可以进一步表示为

$$
\begin{aligned}
\min_w &= -\boldsymbol{w^T S_b w} \\
s.t.\ & \boldsymbol{w^T S_w w} = 1
\end{aligned}
$$

拉格朗日乘子法 等价于 $\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}=\lambda\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}$，推导过程见南瓜书[https://datawhalechina.github.io/pumpkin-book/#/chapter3/chapter3?id=_330]

令 $\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}=\lambda(\boldsymbol{\mu_0}-\boldsymbol{\mu_1})$，得到 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{S_w^{-1}}(\boldsymbol{\mu_0}-\boldsymbol{\mu_1})$

多分类学习

- N 个类别 C_1，C_2，... ，C_N
- 数据集 $D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\dots,(x_m,y_m)\}$，$y\in\{C_1,\ C_2,\ \dots,C_N\}$

拆解法

"一对一"

`One vs. One`，**OvO**，将 N 个类别两两匹配产生 $N(N-1)/2$ 个二分类任务，结果通过投票产生，被预测最多的类别作为最终的分类结果。

"一对其余"

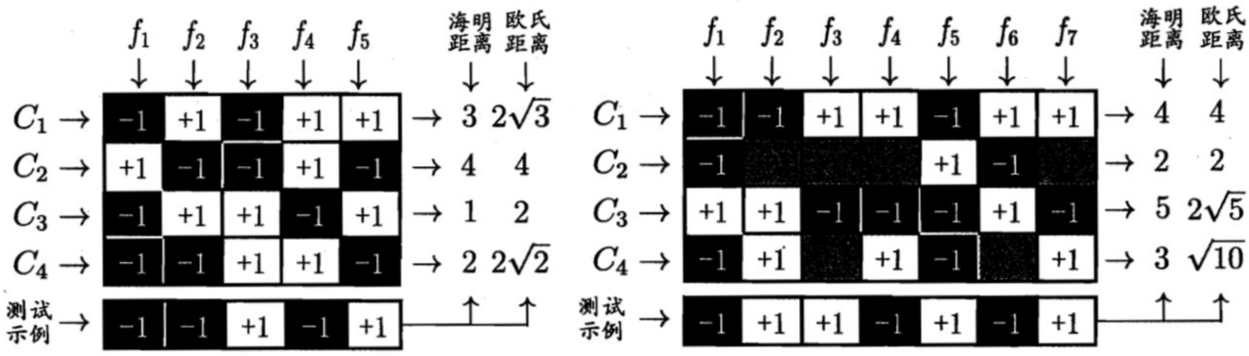
`One vs. Rest`， **OvR**，每次被一个类的样例作为正例，其余的样例作为反例训练 N 个分类器，最终得到 N 个分类结果，选择分类器的 **预测置信度大** 的。

"多对多"

`Many vs. Many`， **MvM**，每次将若干个类作为正例，其余作为反例。为了能够正确选取正反例，用到"纠错输出码" `Error Correcting Output Codes`，**ECOC**:

- 编码，N 个类做 M 次划分，得到 M 个分类器
- 解码，M 个分类器妒忌样本进行预测，预测标记组成一个编码，与每个类别自身的编码比较，其中 **距离最小** 的为预测结果

类别划分通过 **"编码矩阵"** 指定，二元码制定正反类，三元码多一个停用类。



(a) 二元 ECOC 码　　(b) 三元 ECOC 码

上图为编码示意图，+1 为正例，-1 位反例， f 为分类器，C 为类别，对于纠错输出码中的最优编码问题，是个 NP 问题。

方法对比

OvO 时间少，**OvR** 存储开销少，两者在大多数情形下的预测性能都取决于数据分布，差别不大。

类别不平衡问题

对于一个98%都是正例的样本来说，就预测不出反例，这就是 **类别不平衡** 问题。

- 预测出的值为 y，则 $\frac{y}{1-y}$ 为几率
- 用之前的阈值 0.5 来决策的规则是，若几率大于1则为正例
- 令 m^+，m^- 分别表示正例数与反例数，则观测几率为 $\frac{m^+}{m^-}$
- 所以新的判定为当 $\frac{m^+}{m^-} > 1$ 时为正例
- 对两者进行综合调整，得到 **"再缩放"** 值

$$\frac{y'}{1-y'} = \frac{y}{1-y} \times \frac{m^-}{m^+}$$

解决方法有以下三种

欠采样

在训练样本较多的类别中少取

过采样

在训练样本较少的类别中多取

再缩放

基于原数据，对预测值进行再缩放处理。