

李绍园
刘冲

周志华 著

MACHINE
LEARNING

机器学习

清华大学出版社

第三章：线性模型

目录

□ 线性回归

- 最小二乘法

□ 二分类任务

- 对数几率回归
- 线性判别分析

□ 多分类任务

- 一对—
- 一对其余
- 多对多

□ 类别不平衡问题

基本形式

□ 线性模型一般形式

$$f(\mathbf{x}) = w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_dx_d + b$$

$\mathbf{x} = (x_1; x_2; \dots; x_d)$ 是由属性描述的示例，其中 x_i 是 \mathbf{x} 在第 i 个属性上的取值

□ 向量形式

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

其中 $\mathbf{w} = (w_1; w_2; \dots; w_d)$

线性模型优点

- 形式简单、易于建模
- 可解释性
- 非线性模型的基础
 - 引入层级结构或高维映射

- 一个例子
 - 综合考虑色泽、根蒂和敲声来判断西瓜好不好
 - 其中根蒂的系数最大，表明根蒂最要紧；而敲声的系数比色泽大，说明敲声比色泽更重要

$$f_{\text{好瓜}}(\mathbf{x}) = 0.2 \cdot x_{\text{色泽}} + 0.5 \cdot x_{\text{根蒂}} + 0.3 \cdot x_{\text{敲声}} + 1$$

线性回归

□ 给定数据集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_m, y_m)\}$

其中 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}; x_{i2}; \dots; x_{id})$, $y_i \in \mathbb{R}$

□ 线性回归 (linear regression) 目的

- 学得一个线性模型以尽可能准确地预测实值输出标记

□ 离散属性处理

- 有“序”关系
 - 连续化为连续值
- 无“序”关系
 - 有k个属性值，则转换为k维向量

线性回归

□ 单一属性的线性回归目标

$$f(x) = wx_i + b \quad \text{使得} \quad f(x_i) \simeq y_i$$

□ 参数/模型估计：最小二乘法 (least square method)

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

线性回归 - 最小二乘法

□ 最小化均方误差

$$E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^m (y_i - wx_i - b)^2$$

□ 分别对 w 和 b 求导，可得

$$\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w} = 2 \left(w \sum_{i=1}^m x_i^2 - \sum_{i=1}^m (y_i - b) x_i \right)$$

$$\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b} = 2 \left(mb - \sum_{i=1}^m (y_i - wx_i) \right)$$

线性回归 - 最小二乘法

- 得到闭式 (closed-form) 解

$$w = \frac{\sum_{i=1}^m y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^m x_i^2 - \frac{1}{m} \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)^2}$$

$$b = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - wx_i)$$

其中

$$\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$$

多元线性回归

□ 给定数据集

$$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \dots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$$

$$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}; x_{i2}; \dots; x_{id}) \quad y_i \in \mathbb{R}$$

□ 多元线性回归目标

$$f(\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b \text{ 使得 } f(\boldsymbol{x}_i) \simeq y_i$$

多元线性回归

- 把 \mathbf{w} 和 b 吸收入向量形式 $\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{w}; b)$, 数据集表示为

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^T & 1 \\ \mathbf{x}_2^T & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_m^T & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{y} = (y_1; y_2; \dots; y_m)$$

多元线性回归 – 最小二乘法

□ 最小二乘法 (least square method)

$$\hat{\mathbf{w}}^* = \arg \min_{\hat{\mathbf{w}}} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{w}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{w}})$$

令 $E_{\hat{\mathbf{w}}} = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{w}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{w}})$, 对 $\hat{\mathbf{w}}$ 求导得到

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

令上式为零可得 $\hat{\mathbf{w}}$ 最优解的闭式解

多元线性回归 – 满秩讨论

- $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 是满秩矩阵或正定矩阵，则

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

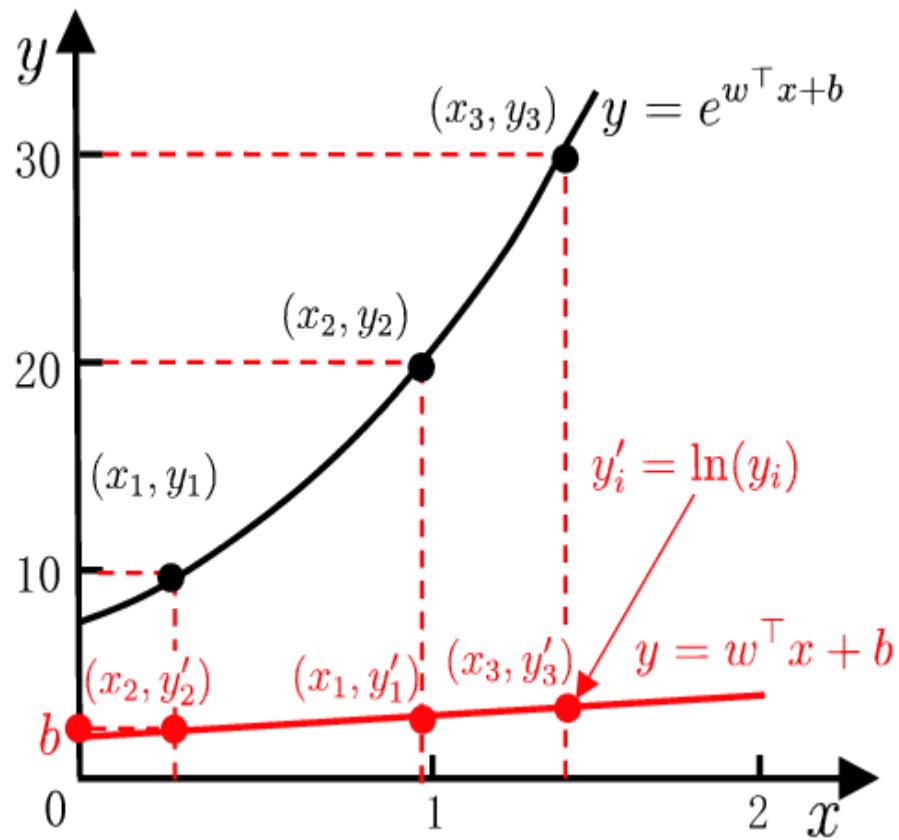
其中 $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ 是 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的逆矩阵，线性回归模型为

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

- $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 不是满秩矩阵
 - 根据归纳偏好选择解 (参见1.4节)
 - 引入正则化 (参加6.4节, 11.4节)

对数线性回归

- 输出标记的对数为线性模型逼近的目标



$$\ln y = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$



$$y = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

线性回归 - 广义线性模型

- 一般形式

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

- $g(\cdot)$ 称为联系函数 (link function)
 - 单调可微函数
- 对数线性回归是 $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 时广义线性模型的特例

目录

□ 线性回归

- 最小二乘法

□ 二分类任务

- 对数几率回归
- 线性判别分析

□ 多分类任务

- 一对—
- 一对其余
- 多对多

□ 类别不平衡问题

二分类任务

- 预测值与输出标记

$$z = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b \quad \textcolor{red}{vs} \quad y \in \{0, 1\}$$

- 寻找函数将分类标记与线性回归模型输出联系起来
- 最理想的函数——单位阶跃函数

$$y = \begin{cases} 0, & z < 0; \\ 0.5, & z = 0; \\ 1, & z > 0, \end{cases}$$

- 预测值大于零就判为正例，小于零就判为反例，预测值为临界值零则可任意判别

二分类任务

□ 单位阶跃函数缺点

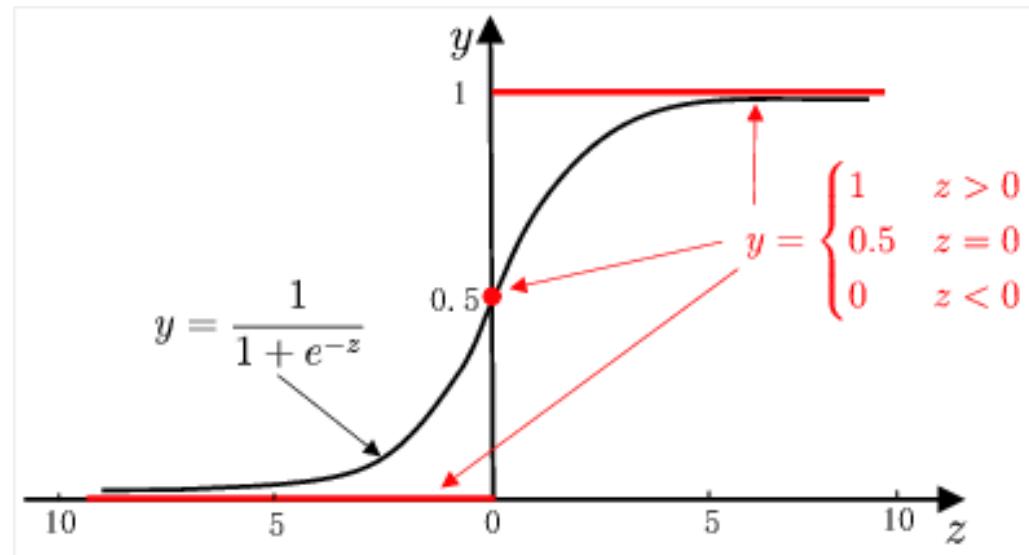
- 不连续

□ 替代函数——对数几率函数 (logistic function)

- 单调可微、任意阶可导

单位阶跃函数与对数几率函数的比较

$$y = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$



对数几率回归

□ 运用对数几率函数

$$y = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad \text{变为} \quad y = \frac{1}{1 + e^{-(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b)}}$$

□ 对数几率 (log odds)

- 样本作为正例的相对可能性的对数

$$\ln \frac{y}{1 - y}$$

□ 对数几率回归优点

- 无需事先假设数据分布
- 可得到“类别”的近似概率预测
- 可直接应用现有数值优化算法求取最优解

对数几率回归 - 极大似然法

□ 对数几率

$$\ln \frac{p(y=1 \mid \mathbf{x})}{p(y=0 \mid \mathbf{x})} = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$$

显然有

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

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

对数几率回归 - 极大似然法

- 极大似然法 (maximum likelihood)
 - 给定数据集

$$\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^m$$

- 最大化样本属于其真实标记的概率
 - 最大化对数似然函数

$$\ell(\mathbf{w}, b) = \sum_{i=1}^m \ln p(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}_i, b)$$

对数几率回归 - 极大似然法

□ 转化为最小化负对数似然函数求解

- 令 $\beta = (\mathbf{w}; b)$, $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}; 1)$, 则 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b$ 可简写为 $\beta^T \hat{\mathbf{x}}$

- 再令

$$p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \beta) = p(y = 1 \mid \hat{\mathbf{x}}; \beta)$$

$$p_0(\hat{\mathbf{x}}_i; \beta) = p(y = 0 \mid \hat{\mathbf{x}}; \beta) = 1 - p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \beta)$$

则似然项可重写为

$$p(y_i \mid \mathbf{x}_i; \mathbf{w}_i, b) = y_i p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \beta) + (1 - y_i) p_0(\hat{\mathbf{x}}_i; \beta)$$

- 故等价形式为要最小化

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

对数几率回归

□ 求解得

$$\boldsymbol{\beta}^* = \arg \min_{\boldsymbol{\beta}} \ell(\boldsymbol{\beta})$$

□ 牛顿法第 $t+1$ 轮迭代解的更新公式

$$\boldsymbol{\beta}^{t+1} = \boldsymbol{\beta}^t - \left(\frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^T} \right)^{-1} \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

其中关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的一阶、二阶导数分别为

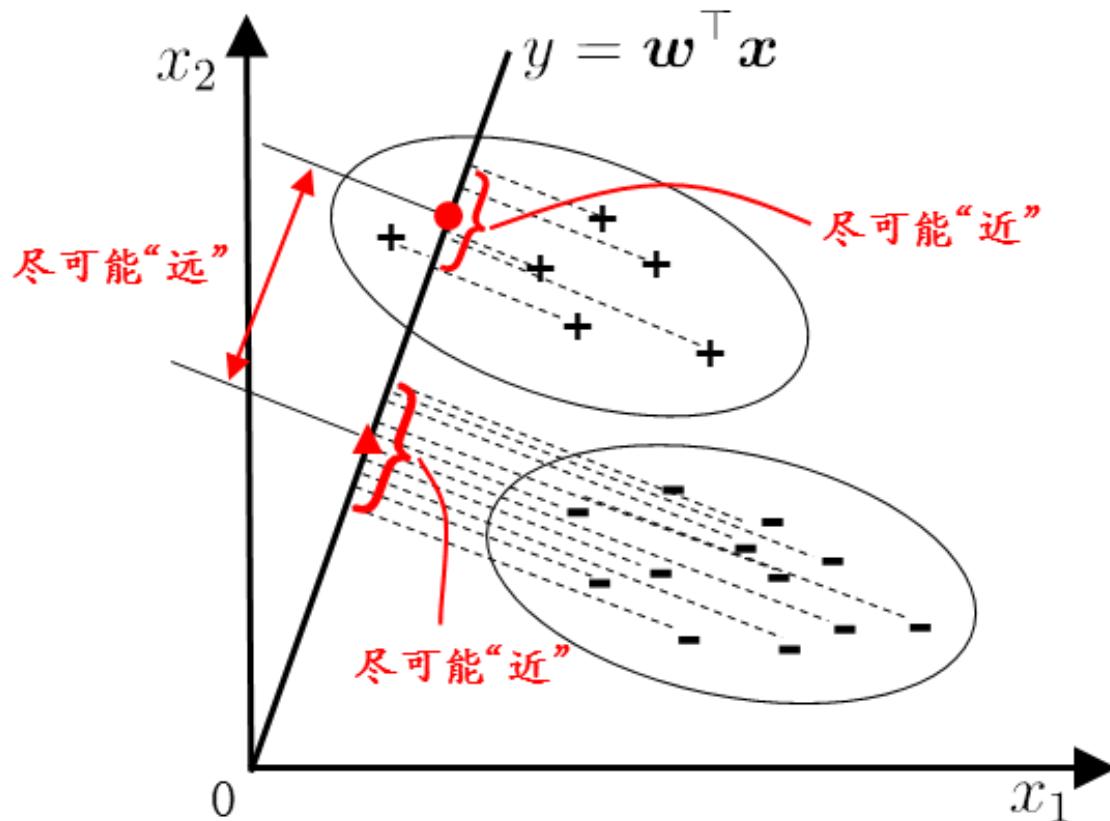
$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = - \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{x}}_i (y_i - p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \boldsymbol{\beta}))$$

$$\frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^T} = \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{x}}_i \hat{\mathbf{x}}_i^T p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) (1 - p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \boldsymbol{\beta}))$$

高阶可导连续凸函数，梯度下降法/牛顿法 [Boyd and Vandenberghe, 2004]

二分类任务 - 线性判别分析

□ 线性判别分析 (Linear Discriminant Analysis) [Fisher, 1936]



LDA也可被视为一种
监督降维技术

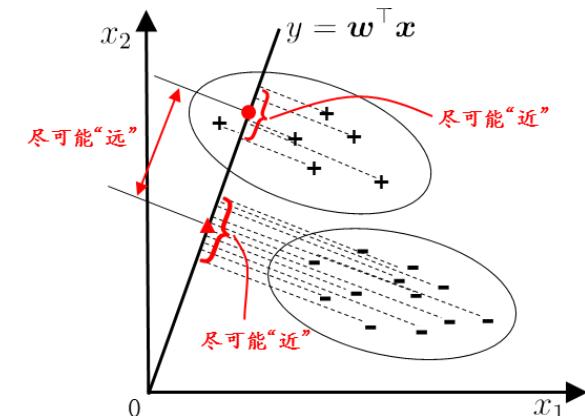
二分类任务 - 线性判别分析

□ LDA的思想

- 欲使同类样例的投影点尽可能接近，可以让同类样例投影点的协方差尽可能小
- 欲使异类样例的投影点尽可能远离，可以让类中心之间的距离尽可能大

□ 一些变量

- 第*i*类示例的集合 X_i
- 第*i*类示例的均值向量 μ_i
- 第*i*类示例的协方差矩阵 Σ_i
- 两类样本的中心在直线上的投影： $w^T \mu_0$ 和 $w^T \mu_1$
- 两类样本的协方差： $w^T \Sigma_0 w$ 和 $w^T \Sigma_1 w$



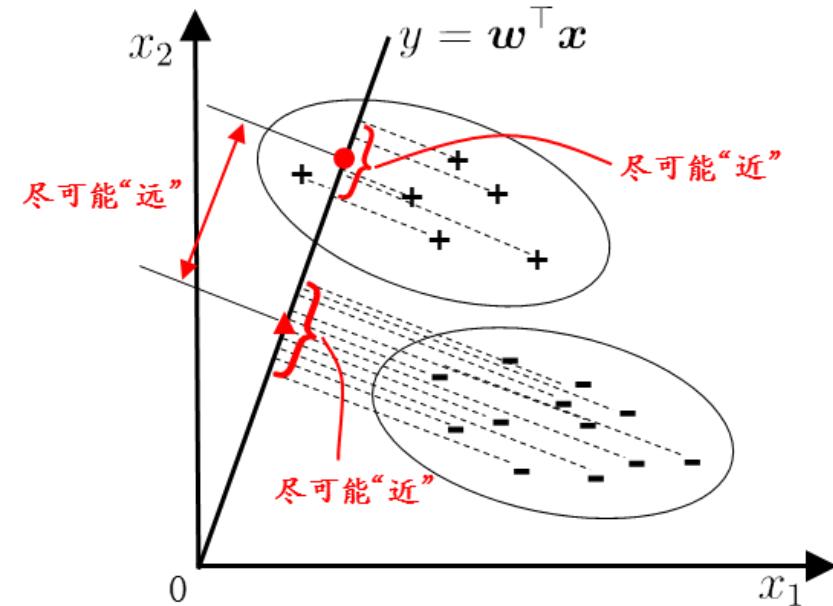
二分类任务 - 线性判别分析

- 使同类样例投影点尽可能接近
即让同类样例投影点的协方差尽可能小：

$$\mathbf{w}^T \Sigma_0 \mathbf{w} + \mathbf{w}^T \Sigma_1 \mathbf{w}$$

- 使异类样例投影点尽可能远离
即让类中心之间距离最可能大

$$\|\mathbf{w}^T \boldsymbol{\mu}_0 - \mathbf{w}^T \boldsymbol{\mu}_1\|_2^2$$



二分类任务 - 线性判别分析

□ 最大化目标

$$J = \frac{\|\mathbf{w}^T \boldsymbol{\mu}_0 - \mathbf{w}^T \boldsymbol{\mu}_1\|_2^2}{\mathbf{w}^T \boldsymbol{\Sigma}_0 \mathbf{w} + \mathbf{w}^T \boldsymbol{\Sigma}_1 \mathbf{w}}$$

□ 类内散度矩阵

$$\mathbf{S}_w = \boldsymbol{\Sigma}_0 + \boldsymbol{\Sigma}_1$$

$$= \sum_{x \in X_0} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0)^T + \sum_{x \in X_1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_1)^T$$

□ 类间散度矩阵

$$\mathbf{S}_b = (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1) (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)^T$$

二分类任务 - 线性判别分析

- 广义瑞利商 (generalized Rayleigh quotient)

$$J = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_b \mathbf{w}}{\mathbf{w}^T \mathbf{S}_w \mathbf{w}}$$

- 令 $\mathbf{w}^T \mathbf{S}_w \mathbf{w} = 1$, 最大化广义瑞利商等价形式为

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{w}} -\mathbf{w}^T \mathbf{S}_b \mathbf{w} \\ \text{s.t. } & \mathbf{w}^T \mathbf{S}_w \mathbf{w} = 1 \end{aligned}$$

- 运用拉格朗日乘子法

$$\mathbf{S}_b \mathbf{w} = \lambda \mathbf{S}_w \mathbf{w}$$

二分类任务 - 线性判别分析

□ 同向向量

$$\underline{\mathbf{S}_b \mathbf{w}} = \lambda \underline{(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)}$$

同向向量

□ 结果 $\mathbf{w} = \mathbf{S}_w^{-1} (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$

□ 求解

- 奇异值分解 $\mathbf{S}_w = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^T$

□ LDA的贝叶斯决策论解释

- 两类数据同先验、满足高斯分布且协方差相等时，LDA达到最优分类

LDA推广 - 多分类任务

- 全局散度矩阵

$$\mathbf{S}_t = \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w$$

- 类内散度矩阵

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_{w_i}$$

其中

$$\mathbf{S}_{w_i} = \sum_{x \in X_i} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T$$

- 求解得

$$\mathbf{S}_b = \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w$$

$$= \sum_{i=1}^N m_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

LDA推广 - 多分类任务

□ 优化目标

$$\max_{\mathbf{W}} \frac{\text{tr}(\mathbf{W}^T \mathbf{S}_b \mathbf{W})}{\text{tr}(\mathbf{W}^T \mathbf{S}_w \mathbf{W})}$$

其中 $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d \times (N-1)}$



$$\mathbf{S}_b \mathbf{W} = \lambda \mathbf{S}_w \mathbf{W}$$

\mathbf{W} 的闭式解则是 $\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_b$ 的 $N-1$ 个最大广义特征值所对应的特征向量组成的矩阵

□ 多分类LDA将样本投影到N-1维空间，N-1通常远小于数据原有的属性数，因此LDA也被视为一种监督降维技术

目录

□ 线性回归

- 最小二乘法

□ 二分类任务

- 对数几率回归
- 线性判别分析

□ 多分类任务

- 一对—
- 一对其余
- 多对多

□ 类别不平衡问题

多分类学习

□ 多分类学习方法

- 二分类学习方法推广到多类
- 利用二分类学习器解决多分类问题 **(常用)**
 - 对问题进行拆分，为拆出的每个二分类任务训练一个分类器
 - 对于每个分类器的预测结果进行集成以获得最终的多分类结果

□ 拆分策略

- 一对一 (One vs. One, OvO)
- 一对其余 (One vs. Rest, OvR)
- 多对多 (Many vs. Many, MvM)

多分类学习 - 一对一

□ 拆分阶段

- N 个类别两两配对
 - $N(N-1)/2$ 个二类任务
- 各个二类任务学习分类器
 - $N(N-1)/2$ 个二类分类器

□ 测试阶段

- 新样本提交给所有分类器预测
 - $N(N-1)/2$ 个分类结果
- 投票产生最终分类结果
 - 被预测最多的类别为最终类别

多分类学习 - 一对其余

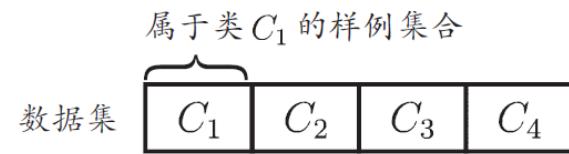
□ 任务拆分

- 某一类作为正例，其他反例
 - N 个二类任务
- 各个二类任务学习分类器
 - N 个二类分类器

□ 测试阶段

- 新样本提交给所有分类器预测
 - N 个分类结果
- 比较各分类器预测置信度
 - 置信度最大类别作为最终类别

多分类学习 - 两种策略比较



多分类学习 - 两种策略比较

一对一

- 训练 $N(N-1)/2$ 个分类器，存储开销和测试时间大
- 训练只用两个类的样例，训练时间短

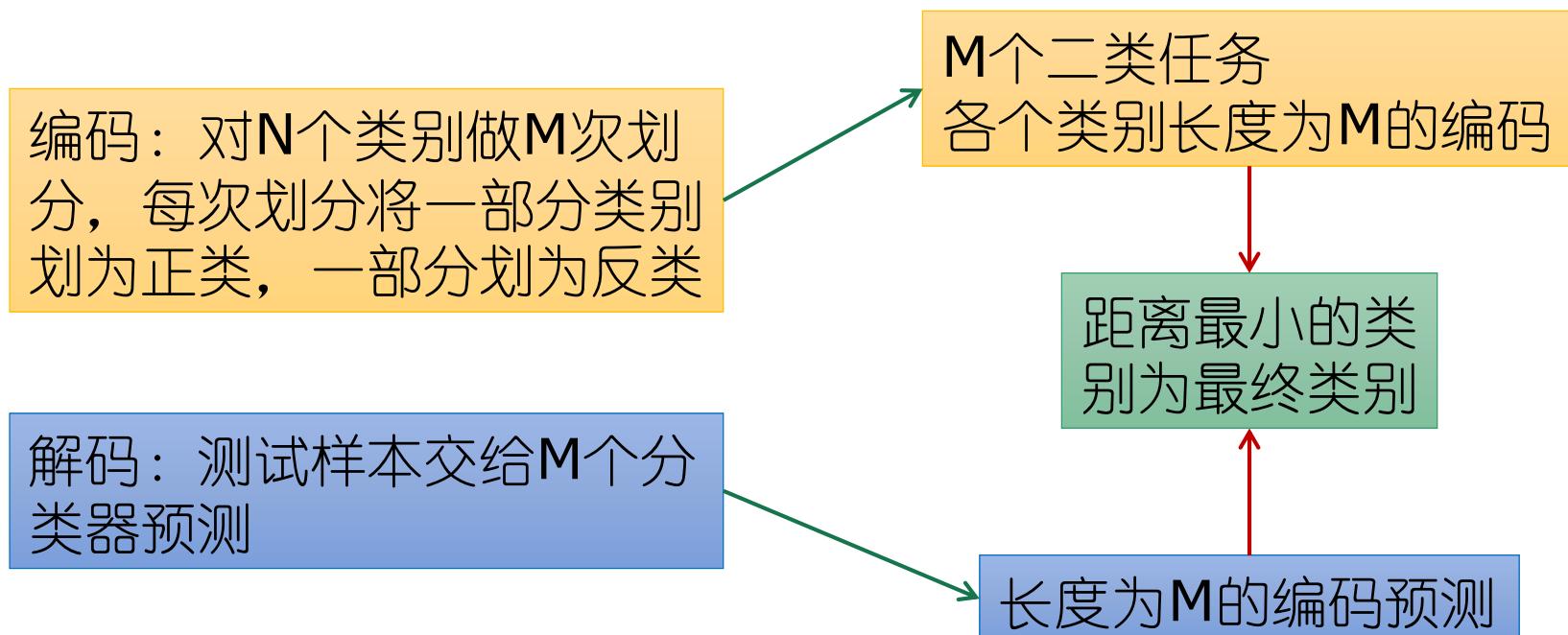
一对其余

- 训练 N 个分类器，存储开销和测试时间小
- 训练用到全部训练样例，训练时间长

预测性能取决于具体数据分布，多数情况下两者差不多

多分类学习 - 多对多

- 多对多 (Many vs Many, MvM)
 - 若干类作为正类，若干类作为反类
- 纠错输出码 (Error Correcting Output Code, ECOC)



多分类学习 - 多对多

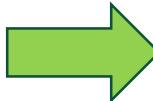
□ 纠错输出码(Error Correcting Output Code, ECOC)

- ECOC编码对分类器错误有一定容忍和修正能力，编码越长、纠错能力越强
- 对同等长度的编码，理论上来说，任意两个类别之间的编码距离越远，则纠错能力越强

类别不平衡问题

□ 类别不平衡 (class imbalance)

- 不同类别训练样例数相差很大情况 (正类为小类)

类别平衡正例预测 $\frac{y}{1-y} > 1$  正负类比例 $\frac{y}{1-y} > \frac{m^+}{m^-}$

□ 再缩放

- 欠采样 (undersampling)
 - 去除一些反例使正反例数目接近 (EasyEnsemble [Liu et al., 2009])
- 过采样 (oversampling)
 - 增加一些正例使正反例数目接近 (SMOTE [Chawla et al. 2002])
- 阈值移动 (threshold-moving)

优化提要

- 各任务下（回归、分类）各个模型优化的目标
 - 最小二乘法：最小化均方误差
 - 对数几率回归：最大化样本分布似然
 - 线性判别分析：投影空间内最小（大）化类内（间）散度

- 参数的优化方法
 - 最小二乘法：线性代数
 - 对数几率回归：凸优化梯度下降、牛顿法
 - 线性判别分析：矩阵论、广义瑞利商

总结

□ 线性回归

- 最小二乘法（最小化均方误差）

□ 二分类任务

- 对数几率回归
 - 单位阶跃函数、对数几率函数、极大似然法
- 线性判别分析
 - 最大化广义瑞利商

□ 多分类学习

- 一对—
- 一对其余
- 多对多
 - 纠错输出码

□ 类别不平衡问题

- 基本策略：再缩放