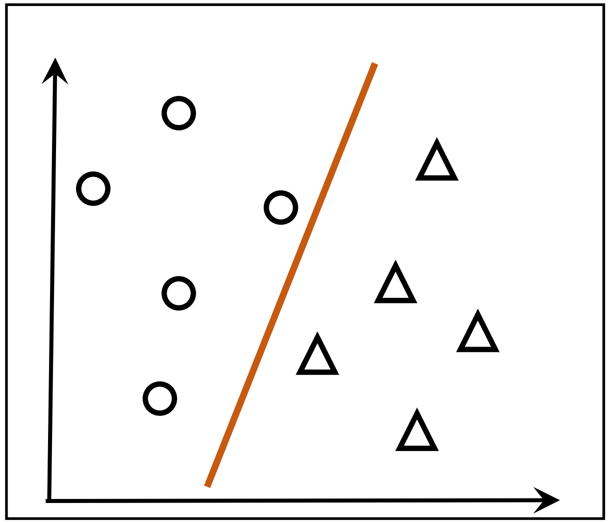
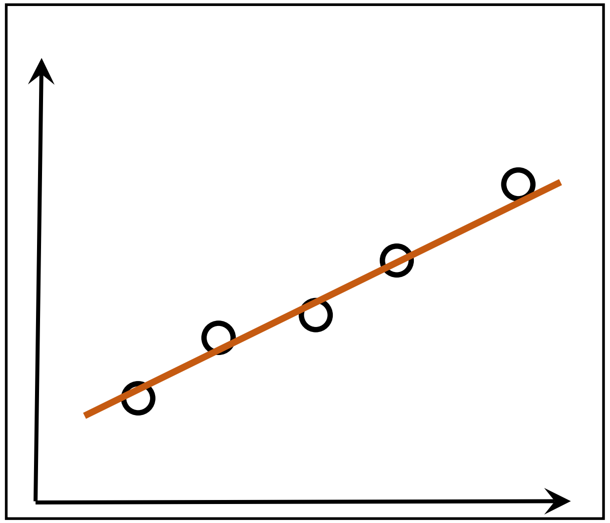
三、线性模型

线性模型



分类



回归

线性模型(linear model)试图学得一个通过属性的线性组合来进行预测的函数

$$f(\boldsymbol{x}) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_d x_d + b$$

向量形式： $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b$

简单、基本、可理解性好

线性回归 (Linear Regression)

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

离散属性的处理：若有“序”(order)，则连续化；
否则，转化为 k 维向量

令均方误差最小化，有

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

对 $E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - wx_i - b\right)^2$ 进行最小二乘参数估计

线性回归 (Linear Regression)

分别对 w 和 b 求导：

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

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

令导数为 0, 得到闭式(closed-form)解：

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

多元(Multi-variate)线性回归

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

$$\boldsymbol{x}_i=\left(x_{i1};x_{i2};\ldots;x_{id}\right) \qquad y_i\in\mathbb{R}$$

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

$$\mathbf{X}=\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} & 1 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{y}=\left(y_1;y_2;\ldots;y_m\right)$$

多元(Multi-variate)线性回归

同样采用最小二乘法求解，有

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

令 $E_{\hat{\boldsymbol{w}}} = \left(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)$，对$\hat{\boldsymbol{w}}$ 求导:

$$\frac{\partial E_{\hat{\boldsymbol{w}}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}} = 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}} - \boldsymbol{y}\right)$$ 令其为零可得 $\hat{\boldsymbol{w}}$

然而，麻烦来了：涉及矩阵求逆!

- 若 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 满秩或正定，则$\hat{\boldsymbol{w}}^* = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$
- 若 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 不满秩，则可解出多个$\hat{\boldsymbol{w}}$

此时需求助于归纳偏好，或引入 正则化 (regularization) ⟶ 第6、11章

线性模型的变化

对于样例 $(\boldsymbol{x}, y)$, $y \in \mathbb{R}$, 若希望线性模型的预测值逼近真实标记，

则得到线性回归模型 $y = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$

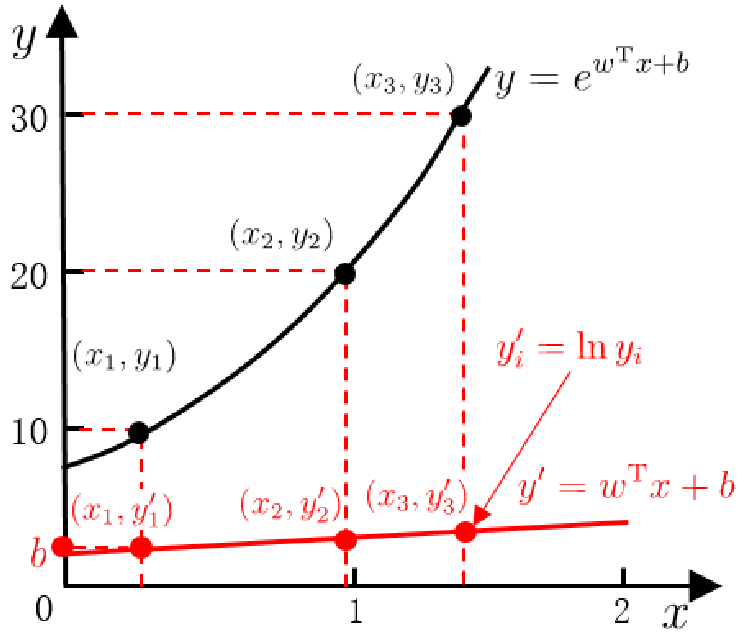
令预测值逼近 y 的衍生物?

若令 $\ln y = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$

则得到对数线性回归

(log-linear regression)

实际是在用 $e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}$ 逼近 y



广义(Generalized)线性模型

一般形式: $y = \underbrace{g^{-1}}_{\text{单调可微的 联系函数 (link function)}} \left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b \right)$

单调可微的 联系函数 (link function)

令 $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 则得到 对数线性回归

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

… …

二分类任务

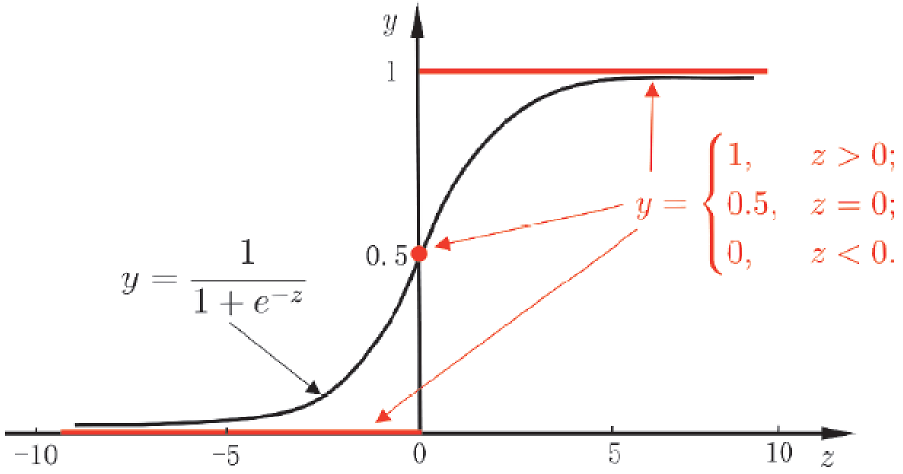
线性回归模型产生的实值输出 $z = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$

期望输出 $y \in \{0, 1\}$

找 z 和 y 的联系函数

理想的“单位阶跃函数”
(unit-step function)

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



性质不好，
需找“替代函数”
(surrogate function)

常用
单调可微、任意阶可导

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

对数几率函数
(logistic function)
简称“对率函数”

注意：Logistic与“逻辑” 没有半毛钱关系！
1. Logistic 源自 Logit，不是Logic； 2. 实数值，并非“非0即1”的逻辑值

对率回归

以对率函数为联系函数:

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

即:

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

几率(odds), 反映了 $\boldsymbol{x}$ 作为正例的相对可能性

"对数几率"
(log odds, 亦称 logit)

"对数几率回归" (logistic regression)
简称 "对率回归"

- 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

注意：它是
分类学习算法!

求解思路

若将 y 看作类后验概率估计 $p(y=1 \mid \boldsymbol{x})$ ，则

$$\ln \frac{y}{1-y} = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$$ 可写为 $$\ln \frac{p(y=1 \mid \boldsymbol{x})}{p(y=0 \mid \boldsymbol{x})} = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$$

于是，可使用“极大似然法” → 第7章
(maximum likelihood method)

给定数据集 $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$

最大化“对数似然”(log-likelihood)函数

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

求解思路

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

再令 $p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) = p(y = 1 \mid \hat{\boldsymbol{x}}; \boldsymbol{\beta}) = \dfrac{e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}{1 + e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$

$$p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) = p(y = 0 \mid \hat{\boldsymbol{x}}; \boldsymbol{\beta}) = 1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{1 + e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$$

则似然项可重写为 $p(y_i \mid \boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}_i, b) = y_i p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) + (1 - y_i) p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})$

于是，最大化似然函数 $\ell(\boldsymbol{w}, b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i \mid \boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}, b)$

等价为最小化 $\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{m} \left(-y_i \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}_i + \ln\left(1 + e^{\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}_i}\right)\right)$

高阶可导连续凸函数，可用经典的数值优化方法
如梯度下降法/牛顿法 [Boyd and Vandenberghe, 2004]

类别不平衡 (class-imbalance)

不同类别的样本比例相差很大；“小类”往往更重要

基本思路：

若 $\frac{y}{1-y} > 1$ 则 预测为正例.

若 $\frac{y}{1-y} > \frac{m^+}{m^-}$ 则 预测为正例.

基本策略

—— “再缩放” (rescaling)：

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

然而，精确估计 m^-/m^+ 通常很困难！

常见类别不平衡学习方法：

- 过采样 (oversampling)
  例如：SMOTE
- 欠采样 (undersampling)
  例如：EasyEnsemble
- 阈值移动 (threshold-moving)