Linear Classification

Background

上一讲提到的线性回归，是机器学习的基础。线性回归具有**线性、全局性、数据未加工**三个特点，打破这些特点我们就可以获得新的模型。
机器学习框架

线性回归解决的是对新的数据的函数值的预测（如房价，时间），而线性分类则是对新数据类的预测（如天气，是否为良性肿瘤）。
线性回归和线性分类的关系可以这么理解：

$$\text{线性回归} \xrightarrow{\text{激活函数}} \text{线性分类}$$

这实际上也是一种**降维**，关于激活函数（activation function）$f: w^T x + b$，根据其值域可以分为两种：

1). 软分类：$f: \mathbb{R}^P \rightarrow [0, 1]$
2). 硬分类：$f: \mathbb{R}^P \rightarrow \{0, 1\}$

激活函数的反函数f^{-1}称为链接函数(link function)
依照上述的分类，我们有这样的一些模型：

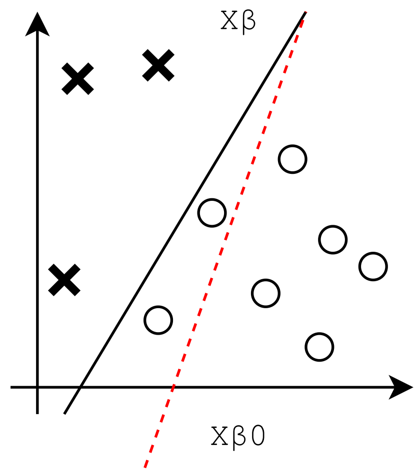
Linear Regression

Perceptron

假设数据线性可分，我们可以使用“**错误驱动**”的办法来解决分类问题。
假设我们的模型为$f(x) = \text{sign}(W^T x), x, W \in \mathbb{R}^p$；
其中$\text{sign}(x)$为符号函数（$x = 0$处可以定义为-1），

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1 & , x \geq 0 \\ \\ -1 & , x < 0 \end{cases}$$

我们考虑这样的一组数据集，它的正确分类如下图所示：



其中“x”和“o”表示两种分类，红色虚线是我们一开始预设的一种分类W_0^Tx，黑色实线是正确的分类W^Tx，我们可以看出有两组数据分类发生了错误。我们可以不断地调整接近这个正确的分类。
为了具体实现这样一种方法，我们需要制定一种策略，即找到一个Loss Function。
一个直观的想法就是，被分类错误的点的个数：

$$L(W) = \| D \|, D = \{\text{被分类错误的点}\}$$

我们对这个想法进行一下改进：

$$L(W) = \sum_{i=1}^{N} X\{y_i W^T x_i < 0\}$$

其中$X(x)$为特征函数(Indicator Function)，表示一个元素是否在集合中。
这个改进的原理是$f(x) \in \{-1, 1\}$，如果分类正确，那么$y \cdot W^Tx > 0$，否则就是< 0
但是，我们观察一下这个Loss function，假设W发生一个轻微的变化ΔW,X的值可能从1变为0，即这个函数是不可导的，这样的Loss Funtion我们无法求解，甚至是一个NP Hard问题。
让我们回到$y_i W^T x_i$这个函数本身，不难发现它关于W是一个连续函数，那么我们不妨直接把yW^Tx作为Loss Function（加上符号使得在错误点减少时函数值也减小）：

$$L(W) = \sum_{x_i \in D} -y_i W^T x_i$$
$$\nabla_W L = \sum_{x_i \in D} -y_i x_i$$

使用随机梯度下降法SGD：

$$W^{t+1} \leftarrow W^t - \lambda \nabla_W L = W^t + \lambda \sum_{x_i \in D} y_i x_i$$

在选取学习率（λ）的时候，我们可以绘制$\min L(W) - No.iterations$的曲线，选取...，0.001，0.003，0.01，0.03，0.1，0.3，1，...（每次扩大三倍）来得到最快收敛的学习率。
另外，为了加速收敛，我们可以对特征值进行正则化（Mean Normalization）,让特征值保持在和$[-1,1]$近似的区间当中：

$$x_i^{'} = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i}$$

在样本不是线性可分的时候，我们可以使用pocket algorithm.

Fisher判别分析

考虑一组数据集

$$X = (x_1, x_2, ...x_N)^T_{(N*p)}$$
$$Y = (y_1, y_2, ..., y_N)^T_{(N*1)}$$

即

$$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N, x_i \in \mathbb{R}^p, y_i \in \{-1, 1\}$$

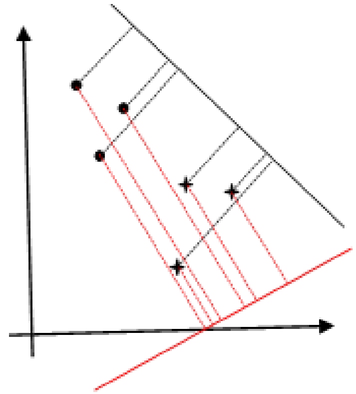
我们让

$$X_{C1} = \{x_i | y_i = 1\}, X_{C2} = \{x_i | y_i = -1\}$$

假设

$$\| X_{C1} \| = N_1, \| X_{C2} \| = N_2, N_1 + N_2 = N$$

Fisher判别分析采取的思想就是“类内小，类间大”



考虑一系列多维的数据（图中为2维），我们要把这些数据投影到一维上去，如投影至黑线，我们可以找到一个值（threshold）使得这两种数据区分开来，但是如果选取红线的话则无法做到。

事实上，如果我们要找到一个最佳投影轴，那么它一定是所有基底的线性组合，回顾上文的感知机算法，我们找到了W使得$sign(W^Tx)$符合我们的分类，W这个p维向量，实际上代表着那个线性组合的系数，也就是说我们找到的那个投影轴和之前找到的线性函数是正交的。

假设$\| W \| = 1$,令

$$
\begin{aligned}
z_i &= W^T x_i \\
\overline{Z} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} z_i = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} W^T x_i \\
S_Z &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(z_i - \overline{Z})(z_i - \overline{Z})^T \\
C1: \overline{Z_1} &= \frac{1}{N_1}\sum_{x_i \in X_{C1}} W^T x_i \\
S_{Z_1} &= \frac{1}{N_1}\sum_{x_i \in X_{C1}} (z_i - \overline{Z}_1)(z_i - \overline{Z}_1)^T \\
C2: \overline{Z_2} &= \frac{1}{N_2}\sum_{x_i \in X_{C2}} W^T x_i \\
S_{Z_2} &= \frac{1}{N_2}\sum_{x_i \in X_{C2}} (z_i - \overline{Z}_2)(z_i - \overline{Z}_2)^T
\end{aligned}
$$

类间函数用：$(\overline{Z}_1 - \overline{Z}_2)^2$
类内函数用：$S_{Z_1} + S_{Z_2}$
所以我们可以得到目标函数：

$$
\begin{aligned}
J(W) &= \frac{(\overline{Z}_1-\overline{Z}_2)^2}{S_{Z_1}+S_{Z_2}} \\
\hat{W} &= \arg\max_{W} J(W) \\
(\overline{Z}_1-\overline{Z}_2)^2 &= (\frac{1}{N_1}\sum_{x_i\in X_{C1}} W^T x_i - \frac{1}{N_2}\sum_{x_i\in X_{C2}} W^T x_i)^2 \\
&= (W^T(\overline{X}_1-\overline{X}_2))^2 \\
&= W^T(\overline{X}_1-\overline{X}_2)(\overline{X}_1-\overline{X}_2)^T W \\
S_{Z_1}+S_{Z_2} &= W^T(\frac{1}{N_1}\sum_{x_i\in X_{C1}}(x_i-\overline{X}_1)(x_i-\overline{X}_1)^T \\
&\quad + \frac{1}{N_2}\sum_{x_i\in X_{C2}}(x_i-\overline{X}_2)(x_i-\overline{X}_2))^T W \\
&= W^T(S_{X_1}+S_{X_2})W \\
J(W) &= \frac{W^T(\overline{X}_1-\overline{X}_2)(\overline{X}_1-\overline{X}_2)^T W}{W^T(S_{X_1}+S_{X_2})W}
\end{aligned}
$$

定义类内方差(between-class)：$S_b=(\overline{X}_1-\overline{X}_2)(\overline{X}_1-\overline{X}_2)^T$
定义类间方差(within-class)：$S_w=S_{X_1}+S_{X_2}$

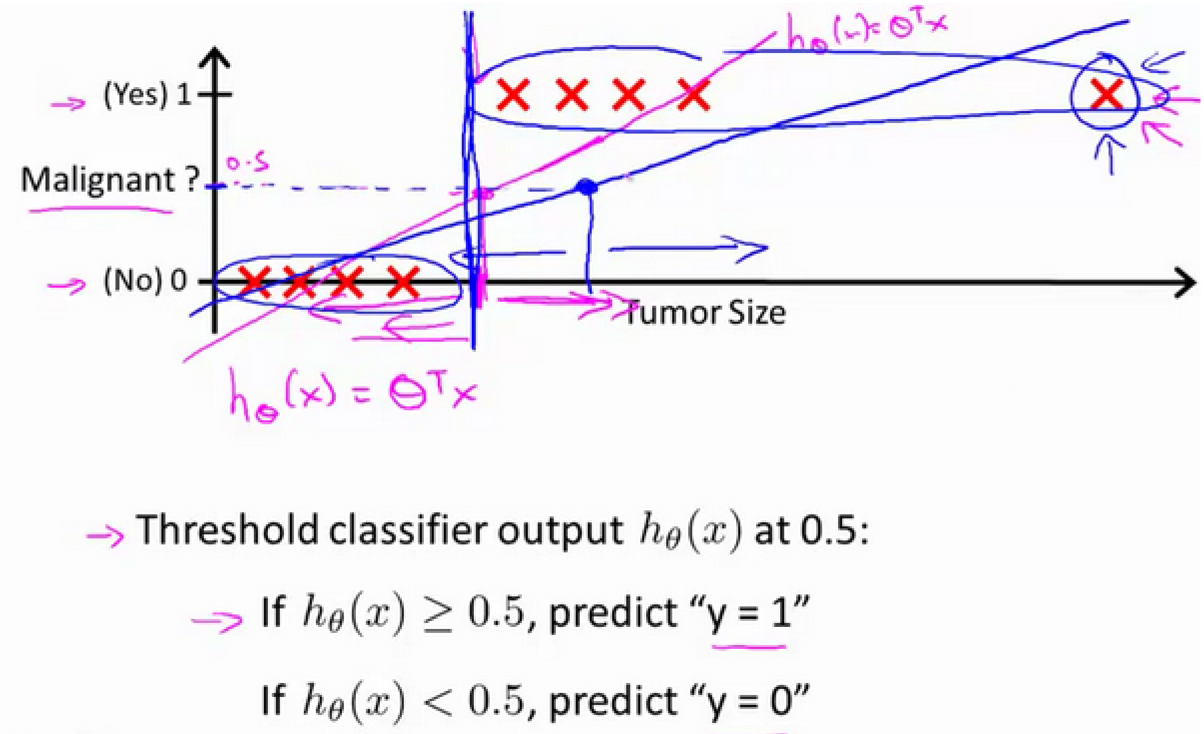
$$
\frac{\partial \mathcal{J}(W)}{\partial W} = 2S_bW(W^TS_wW)^{-1} - (W^TS_bW)\cdot 2S_wW\cdot(W^TS_wW)^{-2}
$$

令$\frac{\partial \mathcal{J}(W)}{\partial W}=0$，可得

$$
\begin{aligned}
2S_bW(W^TS_wW)^{-1} &= (W^TS_bW)\cdot 2S_wW\cdot(W^TS_wW)^{-2} \\
S_bWW^TS_wW &= W^TS_bWS_wW \\
S_wW &= \frac{W^TS_wW}{W^TS_bW}S_bW \\
W &= \frac{W^TS_wW}{W^TS_bW}S_w^{-1}S_bW \\
&\propto {S_w}^{-1}(\overline{X}_1-\overline{X}_2)(\overline{X}_1-\overline{X}_2)^T W \\
&\propto {S_w}^{-1}(\overline{X}_1-\overline{X}_2)
\end{aligned}
$$

Logistic Regression

下面介绍软输出中的概率判别模型：
在处理分类问题的时候，一个办法是我们使用linear regression对数据进行拟合，把结果≥ 0.5的置1，在< 0.5的置零，但是这样的方法存在着问题:



当我们添加最右侧的一个数据的时候，linear regression就无法很好地对数据进行分类，为了很好地解决分类问题，我们可以使用logistic regression：
为了完成$w^T x$到集合$\{0, 1\}$的映射，我们需要使用激活函数。一般的我们有如下sigmoid function:

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

通过$\sigma(z)$我们完成了$\mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$的映射，这实际上也是$w^T x \rightarrow p$（概率）的映射。

$$y = 1 : p_1 = P(y = 1|x) = \sigma(w^T x) = \frac{1}{1 + e^{-w^T x}} = \psi(x; w)$$
$$y = 0 : p_0 = P(y = 0|x) = 1 - P(y = 1|x) = \frac{e^{-w^T x}}{1 + e^{-w^T x}}$$

为了表示方便，我们有$P(y|x) = p_1^y p_0^{1-y}$，所以w的极大似然估计值为：

$$
\begin{aligned}
MLE : \hat{w} &= \arg\max_w \log P(y|x) \\
&= \arg\max_w \log \prod_{i=1}^{N} P(y_i|x_i) \\
&= \arg\max_w \sum_{i=1}^{N} \log P(y_i|x_i) \\
&= \arg\max_w \sum_{i=1}^{N} (y_i \log p_1 + (1-y_i) \log p_0) \\
&= \arg\max_w \sum_{i=1}^{N} (y_i \log(\psi(x_i; w)) + (1-y_i) \log(1-\psi(x_i; w)))
\end{aligned}
$$

Loss function:

$$
J(w) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} \mathrm{Cost}(\psi(x_i; w), y))
$$

where

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Cost}(\psi(x_i; w), y)) &= \begin{cases} -\log(\psi(x; w)) & , y = 1 \\ \\ -\log(1-\psi(x; w)) & , y = 0 \end{cases} \\
&= -y \log(\psi(x; w)) - (1-y) \log(1-\psi(x; w))
\end{aligned}
$$

这样设置的意义是当$\psi(x; w)$和y相差越大时，我们的cost就会越接近$+\infty$，因此p_0, p_1哪个更大，就把它放入哪个类中，这样的cost就会最小。
求和的部分实际上是交叉熵（Cross Entrophy）的相反数，因此

$$
\mathrm{MLE}^{max} \Rightarrow \text{loss function}^{min}(\text{Cross Entrophy})
$$

这样的一个loss function在凸分析中可以证明是凸函数（可以收敛到全局最优），所以我们可以对其使用梯度下降算法(GDA)获得w的估计值。

$$
\mathrm{Repeat}\{w_j := w_j - \alpha \sum_{i=1}^{N} (\psi(x_i; w) - y_i)(x_i)_j\}
$$

> simultaneously update all w_j

我们也可以用其他的优化算法来获得w，如：Conjugate gradient, BFGS, L-BFGS等，这些算法的优点在于不需要认为地选取学习率，也有更快的收敛速度，当然它们也不可避免地更加复杂。

Gauss Discriminant Analysis

之前提到的logistic regression，属于概率判别模型，它求出了$P(y|x)$的值，而下面的概率生成模型并不关心值本身的大小，它关心的是$P(y=0|x)$和$P(y=1|x)$的大小关系。
根据贝叶斯公式：

$$P(y|x)=\frac{P(x|y)\cdot P(y)}{P(x)}$$

所以有，

$$P(y|x)\propto P(x|y)\cdot P(y)=P(x,y)$$

为了预测一个新数据的分类我们应当有：

$$\hat{y}=\arg\max_{y\in\{0,1\}} P(y|x)=\arg\max_{y\in\{0,1\}} P(x|y)P(y)$$

不妨假设y服从伯努利分布$Bernoulli(\phi)$，即

y	0	1
P	φ	1-φ

假设$x|y=1\sim N(\mu_1,\Sigma),x|y=0\sim N(\mu_2,\Sigma)$
Loss funcction:

$$
\begin{aligned}
\theta &= (\mu_1, \mu_2, \Sigma, \phi) \\
L(\theta) &= \log \prod_{i=1}^{N} P(x|y)P(y) \\
&= \sum_{i=1}^{N} \log(P(x|y)P(y)) \\
&= \sum_{i=1}^{N} [\log P(x|y) + \log P(y)] \\
&= \sum_{i=1}^{N} [\log N(\mu_1, \Sigma)^{y_i} + \log N(\mu_2, \Sigma)^{1-y_i} + \log(\phi^{y_i}(1-\phi)^{1-y_i})] \\
\hat{\theta} &= \arg\max_{\theta} L(\theta)
\end{aligned}
$$

为了表示方便我们令：

$$
\begin{aligned}
C_1 &= x_i | y_i = 1, |C_1| = N_1 \\
C_2 &= x_i | y_i = 0, |C_2| = N_2
\end{aligned}
$$

Lemma:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial tr(AB)}{\partial A} = B^T \\
&\frac{\partial |A|}{\partial A} = |A| \cdot A^{-1} \\
&tr(AB) = tr(BA) \\
&tr(ABC) = tr(BC \cdot A) = tr(C \cdot AB)
\end{aligned}
$$

下面求各个参数的极大似然估计值：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial L}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^{N} (\frac{y_i}{\phi} - \frac{1-y_i}{1-\phi}) = 0 \\
&\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} (y_i(1-\phi) - (1-y_i)\phi) = 0 \\
&\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} y_i - N\phi = 0
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow \hat{\phi} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i = \frac{N_1}{N}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \mu_1} &= \frac{\partial}{\partial \mu_1}\sum_{i=1}^{N} y_i \log\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{p}{2}}|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x_i-\mu_1)^T\Sigma^{-1}(x_i-\mu_1)\right)\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \mu_1}\sum_{i=1}^{N} y_i\left(-\frac{1}{2}(x_i-\mu_1)^T\Sigma^{-1}(x_i-\mu_1)\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial \mu_1}\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} y_i(x_i^T\Sigma^{-1}x_i - x_i^T\Sigma^{-1}\mu_1 - \mu_1^T\Sigma^{-1}x_i + \mu_1^T\Sigma^{-1}\mu_1\right) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} y_i(-2\Sigma^{-1}x_i + 2\Sigma^{-1}\mu_1) = 0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} y_i(\mu_1 - x_i) = 0$$

$$\Rightarrow \hat{\mu_1} = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} y_i} = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i x_i}{N_1}$$

$$\hat{\mu_2} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(1-y_i)x_i}{\sum_{i=1}^{N}(1-y_i)} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(1-y_i)x_i}{N_2} \quad \text{（similarly）}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \Sigma} &= \frac{\partial}{\partial \Sigma}\left(\sum_{x_i\in C_1}\log N(\mu_1,\Sigma) + \sum_{x_i\in C_2}\log N(\mu_2,\Sigma)\right) \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\left(N\log|\Sigma| + \sum_{j=1}^{2}\left(\sum_{x_i\in C_j}(x_i-\mu_j)^T\Sigma^{-1}(x_i-\mu_j)\right)\right) \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\left(N\log|\Sigma| + tr\left(\sum_{j=1}^{2}\left(\sum_{x_i\in C_j}(x_i-\mu_j)^T\Sigma^{-1}(x_i-\mu_j)\right)\right)\right) \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\left(N\log|\Sigma| + tr\left(\sum_{j=1}^{2}\left(\sum_{x_i\in C_j}(x_i-\mu_j)^T(x_i-\mu_j)\Sigma^{-1}\right)\right)\right) \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\left(N\log|\Sigma| + tr\left(\sum_{j=1}^{2}(N_jS_j\Sigma^{-1})\right)\right) \\
&= -\frac{1}{2}\left(N\cdot\frac{1}{|\Sigma|}\cdot|\Sigma|\Sigma^{-1} - N_1S_1^T\Sigma^{-2} - N_2S_2^T\Sigma^{-2}\right) \\
&= -\frac{1}{2}\left(N\Sigma^{-1} - N_1S_1\Sigma^{-2} - N_2S_2\Sigma^{-2}\right) = 0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow N\Sigma - N_1S_1 - N_2S_2 = 0$$

$$
\Rightarrow N\Sigma - N_1S_1 - N_2S_2 = 0
$$

$$
\Rightarrow \hat{\Sigma} = \frac{1}{N}(N_1S_1 + N_2S_2)
$$

Naive Bayes Classifier

下面介绍朴素贝叶斯分类器，它是一种最简单的概率图模型（有向图），其核心思想是朴素贝叶斯假设（条件独立假设），即在给定类别的情况下，它的属性相互独立，其主要动机是简化运算，基于这种思想我们有：

$$
\begin{aligned}
\hat{y} &= \arg\max_y P(y|x) \\
&= \arg\max_y \frac{P(y)P(x|y)}{P(x)} \\
&= \arg\max_y P(y)P(x|y) \\
&= \arg\max_y P(y)\prod_{i=1}^{p} P(x_i|y)
\end{aligned}
$$

如果是二分类问题，我们假设$y \sim Bernoulli \quad Distribution$，如果是多分类问题，则假设$y \sim Categorial \quad Distribution$，当特征$x_j$离散时，我们假设其服从$Categorial \quad Distribution$，在其连续时假设其服从正态分布$N(\mu_j, \sigma_j^2)$。
我们可以使用MLE来解决这个估计问题。