



# 机器学习

# 第二章 线性模型

2022年8月

#### 目录

- 01 线性回归
- 02 逻辑回归
- 03 线性判别分析
- 04 多分类学习
- 04 类别不平衡问题

### 1. 线性回归

- 1.1线性回归概述
- 1.2 梯度下降
- 1.3 正则化
- 1.4回归的评价指标
- 1.5 简单线性回归代码实现

### 1.1回归的概念

#### 监督学习分为回归和分类

- ✓回归(Regression、Prediction)
  - ✓ 如何预测上海浦东的房价?
  - ✓ 未来的股票市场走向?
- ✓ 分类 (Classification)

标签离散

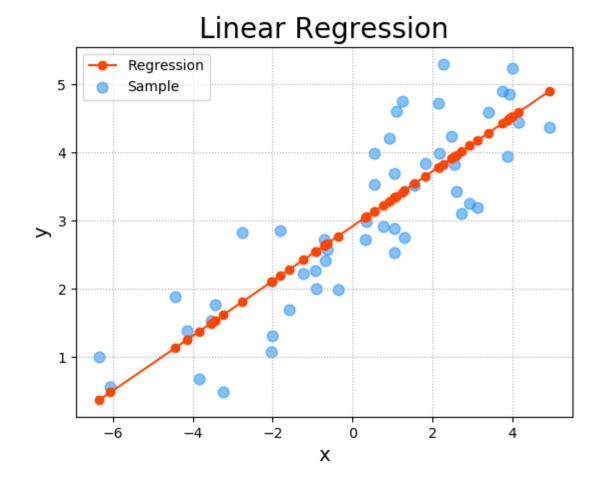
- ✓ 身高1.85m, 体重100kg的男人穿什么尺码的T恤?
- ✓ 根据肿瘤的体积、患者的年龄来判断良性或恶性?

标签连续

### 1.1 线性回归-概念

#### 线性回归 (Linear Regression)

是一种通过属性的线性组合来进行预测的线性模型,其目的是找到一条直线或者一个平面或者更高维的超平面,使得预测值与真实值之间的误差最小化。



### 1.1 线性回归-基本形式

• 线性模型一般形式

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

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

• 向量形式

$$f\left(\boldsymbol{x}\right) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$$

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

#### 1.1 线性回归-线性模型优点

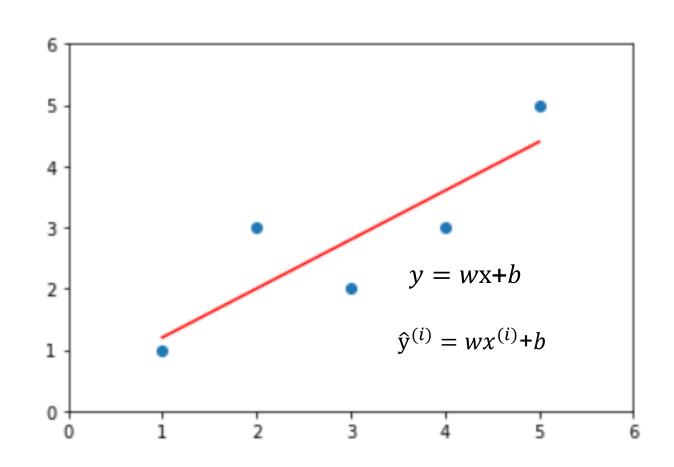
- ■形式简单、易于建模
- ■可解释性
- ■非线性模型的基础
  - ●引入层级结构或高维映射

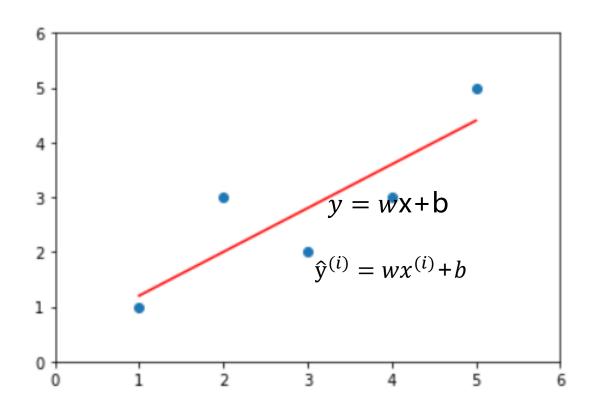
#### ■一个例子

- 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

$$f_{\text{GL}}(\mathbf{x}) = 0.2 \cdot x_{\text{E}} + 0.5 \cdot x_{\text{R}} + 0.3 \cdot x_{\text{B}} + 1$$

- **m** 代表训练集中样本的数量
- x 代表特征/输入变量
- y 代表目标变量/输出变量
- (x, y) 代表训练集中的样本
- $(x^{(i)}, y^{(i)})$  代表第i个观察样本
- ŷ 代表预测的值
- w代表斜率
- b代表截距





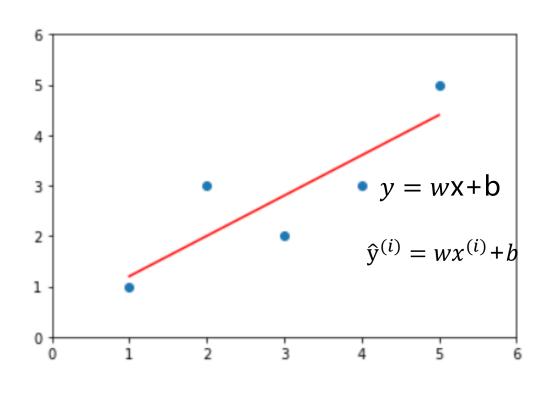
简单线性回归:样本特征只有一个

寻找最拟合的曲线: y = wx + b

对每一个样本的预测值: $\hat{y}^{(i)} = wx^{(i)} + b$ 

**真值**: y<sup>i</sup>

想要寻找最佳拟合的直线方程,就应该使得 **预测值和真实值要越来越近**(差距要尽量 小)。



y<sup>i</sup>与ŷ<sup>(i)</sup>尽可能接近

 $|y^i - \hat{y}^{(i)}|$  尽可能小

考虑所有样本:

$$\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$

使 $\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$ 尽可能小

继续转化:

$$J(w,b) = \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - b)^2$$
 尽可能小

典型的最小二乘法问题:最小化误差的平方

目标: 找到w、b使 
$$J(w,b)$$
 最小 
$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial w} = 0$$
 
$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial b} = 0$$

$$J(w,b) = \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - b)^{2} \qquad \frac{\partial J(w,b)}{\partial b} = 0$$

$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} 2(y^{(i)} - wx^{(i)} - b)(-1) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - b) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} - w \sum_{i=1}^{m} x^{(i)} - mb = 0$$

$$mb = \sum_{i=1}^{m} y^{(i)} - w \sum_{i=1}^{m} x^{(i)} \longrightarrow \mathbf{b} = \overline{\mathbf{y}} - \mathbf{w}\overline{\mathbf{x}}$$

$$J(w,b) = \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - b)^{2} \qquad \frac{\partial J(w,b)}{\partial w} = 0$$

$$\frac{\partial J(w,b)}{\partial w} = \sum_{i=1}^{m} 2(y^{(i)} - wx^{(i)} - b)(-x^{(i)}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - b)x^{(i)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - wx^{(i)} - \bar{y} + w\bar{x})x^{(i)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - w(x^{(i)})^{2} - x^{(i)}\bar{y} + wx^{(i)}\bar{x}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - w(x^{(i)})^2 - x^{(i)}\bar{y} + wx^{(i)}\bar{x}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\bar{y} - w(x^{(i)})^2 + wx^{(i)}\bar{x}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\bar{y}) - \sum_{i=1}^{m} (w(x^{(i)})^2 - wx^{(i)}\bar{x}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\bar{y}) - w\sum_{i=1}^{m} ((x^{(i)})^2 - x^{(i)}\bar{x}) = 0$$

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\bar{y})}{\sum_{i=1}^{m} ((x^{(i)})^2 - x^{(i)}\bar{x})}$$

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\bar{y})}{\sum_{i=1}^{m} ((x^{(i)})^{2} - x^{(i)}\bar{x})}$$

$$\sum_{i=1}^{m} x^{(i)}\bar{y} = \bar{y}\sum_{i=1}^{m} x^{(i)} = m\bar{y}\,\bar{x} = \bar{x}\sum_{i=1}^{m} y^{(i)} = \sum_{i=1}^{m} \bar{x}y^{(i)}$$

又因为:

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

所以:

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)}y^{(i)} - x^{(i)}\overline{y} + \overline{x}\overline{y} - \overline{x}y^{(i)})}{\sum_{i=1}^{m} \left( (x^{(i)})^{2} - x^{(i)}\overline{x} - x^{(i)}\overline{x} + \overline{x}^{2} \right)}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)} - \overline{x})(y^{(i)} - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)} - \overline{x})^{2}}$$

#### 求解可得:

$$w = \frac{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)} - \overline{x})(y^{(i)} - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{m} (x^{(i)} - \overline{x})^2}$$

$$\boldsymbol{b} = \overline{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\overline{\boldsymbol{x}}$$

### 1.1 线性回归

- *m* 代表训练集中样本的数量
- n 代表特征的数量
- x 代表特征/输入变量
- y 代表目标变量/输出变量

(x, y) 代表训练集中的样本

 $(x^{(i)}, y^{(i)})$  代表第i个观察样本

h 代表学习算法的解决方案或函数也称为假设(hypothesis)

 $\hat{y} = h(x)$ ,代表预测的值

建筑面积	总层数	楼层	实用面积	房价
143.7	31	10	105	36200
162.2	31	8	118	37000
199.5	10	10	170	42500
96.5	31	13	74	31200

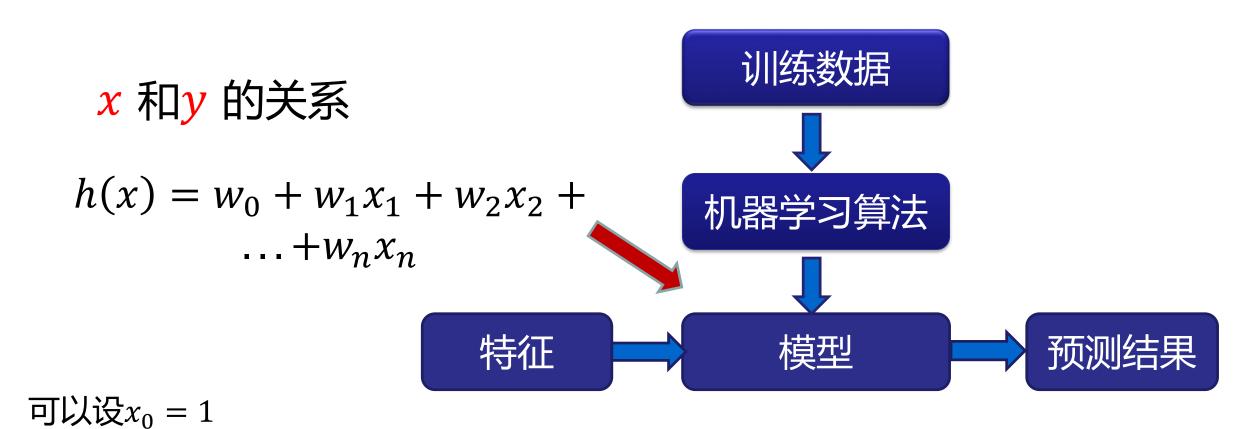
 $x^{(i)}$ 是特征矩阵中的第i行,是一个**向**量。

上图的: 
$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} 162.2 \\ 31 \\ 8 \\ 118 \end{bmatrix} \qquad y^{(2)} = 37000$$

 $x_j^{(i)}$ 代表特征矩阵中第 i 行的第 j 个特征

上图的
$$x_2^{(2)} = 31, x_3^{(2)} = 8$$

#### 1.1线性回归-算法流程



注意: 若表达式  $h(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_n x_n + b$ , 则b可以融入到 $w_0$ 

 $\mathbb{I} : h(x) = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \ldots + w_n x_n = w^T X$ 

### 1.1 线性回归-算法流程

$$h(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n$$

损失函数采用平方和损失:

$$l(x^{(i)}) = \frac{1}{2}(h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

要找到一组  $w(w_0, w_1, w_2, \ldots, w_n)$  ,

使得
$$J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

(残差平方和)最小

损失函数(Loss Function)度量单样本预测的错误程度,损失函数值越小,模型就越好。常用的损失函数包括: 0-1损失函数、平方损失函数、绝对损失函数、对数损失函数等。

代价函数(Cost Function)度量全部样本集的平均误差。常用的代价函数包括均方误差、均方根误差、平均绝对误差等。

目标函数(Object Function)代价函数和正则化函数,最终要优化的函数。

### 1.1 线性回归-最小二乘法(LSM)

要找到一组  $w(w_0, w_1, w_2, ..., w_n)$ , 使得 $J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$ 

(残差平方和) 最小,即最小化: $\frac{\partial J(w)}{\partial w}$ 

将向量表达形式转为矩阵表达形式,则有 $J(w) = \frac{1}{2}(Xw - Y)^2$ ,其中X为m行n + 1列的矩阵(m为样本个数,n为特征个数),w为n + 1行1列的矩阵(包含了 $w_0$ ),Y为m行1列的矩阵,则 $J(w) = \frac{1}{2}(Xw - Y)^2 = \frac{1}{2}(Xw - Y)^T(Xw - Y)$ 

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & x_3^{(1)} & \dots & x_n^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & x_3^{(2)} & \dots & x_n^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_1^{(m)} & x_2^{(m)} & x_2^{(m)} & \dots & x_n^{(m)} \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ y^{(m)} \end{bmatrix}$$

需要用到向量平方的性质:

$$\sum_{i} z_i^2 = z^T z$$

### 1.1 线性回归-最小二乘法(LSM)

为最小化,接下来对J(w)偏导,

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w} (Xw - Y)^T (Xw - Y) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w} (w^T X^T Xw - Y^T Xw - w^T X^T Y + Y^T Y)$$

由于中间两项互为转置:

$$\frac{\partial J(w)}{\partial w} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w} \left( w^T X^T X w - 2 w^T X^T Y + Y^T Y \right) = \frac{1}{2} \left( 2 X^T X w - 2 X^T Y + 0 \right)$$

$$= X^T X w - X^T Y$$

$$\diamondsuit \frac{\partial J(w)}{\partial w} = 0,$$

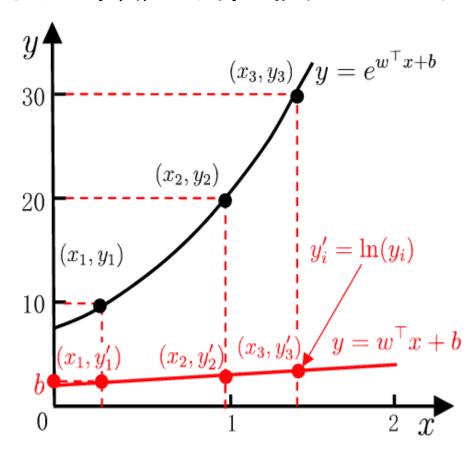
则有
$$w = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

#### 需要用到以下几个矩阵的求导法则:

$$\frac{dX^TX}{dX} = 2X \quad \frac{dAX}{dX} = A^T$$

### 对数线性回归

• 输出标记的对数为线性模型逼近的目标



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

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

### 线性回归 - 广义线性模型

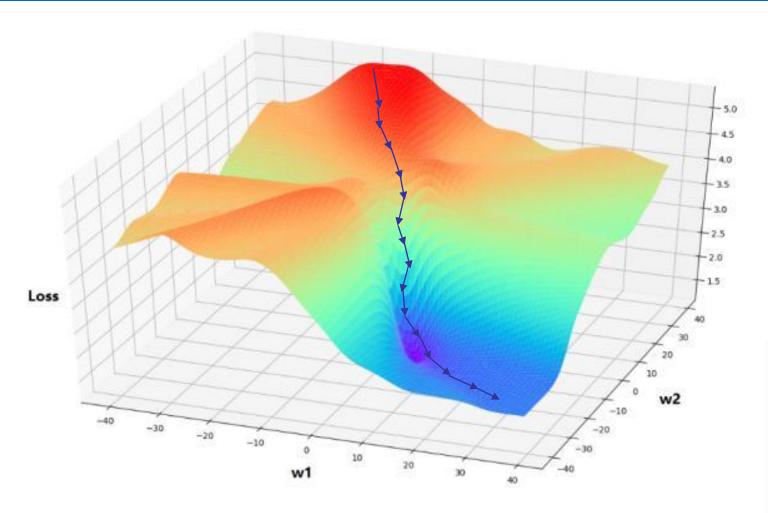
• 一般形式

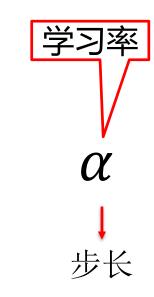
$$y = g^{-1} \left( \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b \right)$$

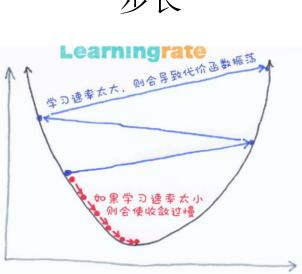
- □ g(·) 称为联系函数 (link function)
  - 单调可微函数

• 对数线性回归是  $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 时广义线性模型的特例

## 1. 2 梯度下降







### 1. 2 梯度下降---梯度下降的三种形式

#### 批量梯度下降(Batch Gradient Descent,BGD)

梯度下降的每一步中,都用到了所有的训练样本

#### 随机梯度下降(Stochastic Gradient Descent,SGD)

梯度下降的每一步中,用到一个样本,在每一次计算之后便更新参数,而不需要首先将所有的训练集求和

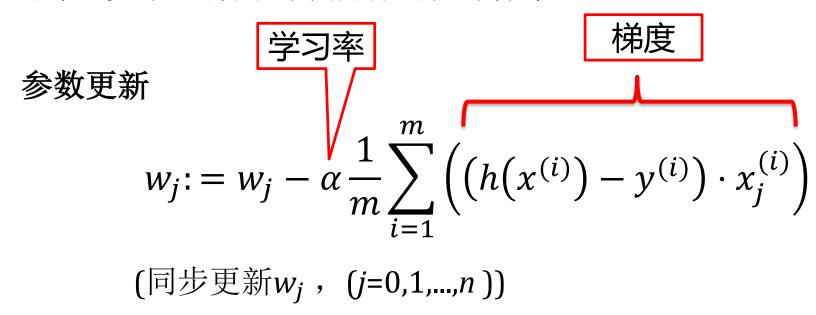
#### 小批量梯度下降(Mini-Batch Gradient Descent, MBGD)

梯度下降的每一步中,用到了一定批量的训练样本

### 1. 2梯度下降---批量梯度下降

#### 批量梯度下降(Batch Gradient Descent)

梯度下降的每一步中,都用到了所有的训练样本



### 1. 2 梯度下降---批量梯度下降

#### 批量梯度下降(Batch Gradient Descent)

#### 优点:

由全体训练集确定的方向能够更好的代表样本总体,从而更准确的朝向极值所在的方向,收敛到全局最小值。

#### 缺点:

当样本数m很大时,每次迭代一步都需要对所有样本进行计算,训练过程会很慢。

### 1. 2 梯度下降---随机梯度下降

#### 随机梯度下降(Stochastic Gradient Descent)

推导 
$$w = w - \alpha \cdot \frac{\partial J(w)}{\partial w}$$
  $h(x) = w^T X = w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n$ 

$$J(w) = \frac{1}{2} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

$$\frac{\partial}{\partial w_j} J(w) = \frac{\partial}{\partial w_j} \frac{1}{2} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 = 2 \cdot \frac{1}{2} (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot \frac{\partial}{\partial w_j} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})$$

$$= (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) \cdot \frac{\partial}{\partial w_j} (\sum_{i=0}^n w_i x_i^{(i)} - y^{(i)})$$

$$= (h(x^{(i)}) - y^{(i)})x_j^{(i)}$$

### 1. 2 梯度下降---随机梯度下降

#### 随机梯度下降(Stochastic Gradient Descent)

梯度下降的每一步中,用到一个样本,在每一次计算之后便更新参数,而不需要首先 将所有的训练集求和

#### 参数更新

$$w_j := w_j - \alpha (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$$
 (同步更新 $w_j$ ,  $(j=0,1,...,n)$ )

### 1.2 梯度下降---随机梯度下降

#### 随机梯度下降(Stochastic Gradient Descent)

#### 优点:

即使是大规模数据集, 随机梯度下降法也会很快收敛。

#### 缺点:

- 不稳定,因为每一次的方向是不确定的,甚至有可能向反方向前进,准确度下降。
- 可能收敛到局部最优。

### 1. 2 梯度下降---小批量梯度下降

#### 小批量梯度下降(Mini-Batch Gradient Descent)

梯度下降的每一步中,用到了一定批量的训练样本

每计算常数b次训练实例,便更新一次参数 w

#### 参数更新

$$w_j$$
: =  $w_j - \alpha \frac{1}{b} \sum_{k=i}^{i+b-1} (h(x^{(k)}) - y^{(k)}) x_j^{(k)}$  (同步更新 $w_j$ ,  $(j=0,1,...,n)$ )

b=1 (随机梯度下降,SGD) b=m (批量梯度下降,BGD) b=batch\_size,通常是2的指 数倍,常见有32,64,128等。 (小批量梯度下降,MBGD)

**优点**:小批量梯度下降法使用一部份样本数据参与计算,既降低了计算复杂度, 又保证了解的收敛性。

# 1. 2 梯度下降

	批量梯度下降 (BGD)	随机梯度下降(SGD)	小批量梯度下降
优点	非凸函数可保证收 敛至全局最优解	计算速度快	计算速度快。收敛稳定
缺点	计算较慢,新样本不能中途加人	计算结果不易收 敛,可能会陷入 局部最优解	

### 1. 2 梯度下降与最小二乘法比较

**梯度下降**:需要选择学习率 $\alpha$ ,需要多次迭代,当特征数量n大时也能较好适用,适用于各种类型的模型。

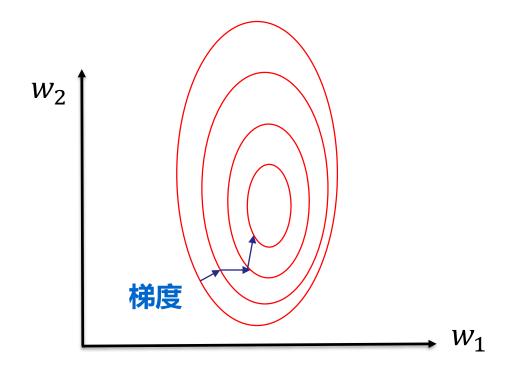
**最小二乘法**:不需要选择学习率 $\alpha$ ,一次计算得出,需要计算 $(X^TX)^{-1}$ ,如果特征数量n较大则运算代价大,因为矩阵逆的计算时间复杂度为 $O(n^3)$ ,通常来说当n小于10000 时还是可以接受的,只适用于线性模型,不适合逻辑回归模型等其他模型。

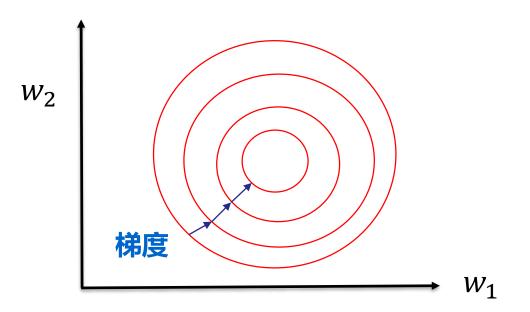
### 数据归一化/标准化

#### 为什么要标准化/归一化?

**提升模型精度**:不同维度之间的特征在数值上有一定比较性,可以大大提高分类器的准确性。

加速模型收敛:最优解的寻优过程明显会变得平缓,更容易正确的收敛到最优解。





### 数据归一化/标准化

#### 归一化(最大-最小规范化)

$$x^* = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

将数据映射到[0,1]区间

数据归一化的目的是使得各特征对目标变量的影响一致,会将特征数据进行伸缩变化,所以数据归一化是会改变特征数据分布的。

#### Z-Score标准化

$$x^* = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

$$\sigma^{2} = \frac{1}{m} \sum_{\substack{i=1\\m}}^{m} (x^{(i)} - \mu)^{2}$$

$$\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} x^{(i)}$$

处理后的数据均值为0,方差为1

数据标准化为了不同特征之间具备可比性,经过标准化变换之后的特征数据分布没有发生改变。

就是当数据特征取值范围或单位差异较大时,最好是做一下标准化处理。

### 数据归一化/标准化

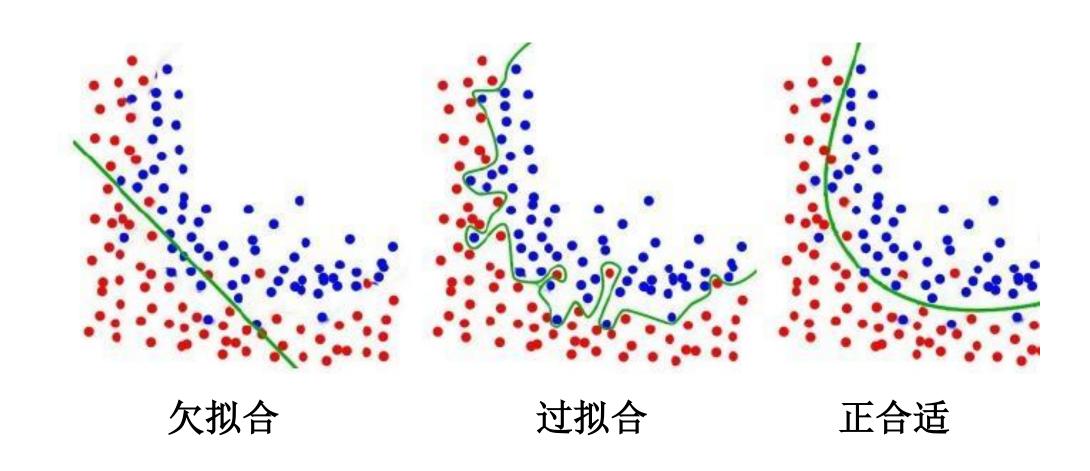
#### 需要做数据归一化/标准化

线性模型,如基于距离度量的模型包括KNN(K近邻)、K-means聚类、感知机和SVM。另外,线性回归类的几个模型一般情况下也是需要做数据归一化/标准化处理的。

#### 不需要做数据归一化/标准化

决策树、基于决策树的Boosting和Bagging等集成学习模型对于特征取值大小并不敏感,如随机森林、XGBoost、LightGBM等树模型,以及朴素贝叶斯,以上这些模型一般不需要做数据归一化/标准化处理。

# 过拟合和欠拟合



# 过拟合的处理

### 1.获得更多的训练数据

使用更多的训练数据是解决过拟合问题最有效的手段,因为更多的样本能够让模型学习到更多更有效的特征,减小噪声的影响。

### 2.降维

即丢弃一些不能帮助我们正确预测的特征。可以是手工选择保留哪些特征,或者使用一些模型选择的算法来帮忙(例如PCA)。

### 3.正则化

正则化(regularization)的技术,保留所有的特征,但是减少参数的大小(magnitude),它可以改善或者减少过拟合问题。

### 4.集成学习方法

集成学习是把多个模型集成在一起,来降低单一模型的过拟合风险。

# 欠拟合的处理

### 1.添加新特征

当特征不足或者现有特征与样本标签的相关性不强时,模型容易出现欠拟合。通过挖掘组合特征等新的特征,往往能够取得更好的效果。

### 2.增加模型复杂度

简单模型的学习能力较差,通过增加模型的复杂度可以使模型拥有更强的拟合能力。例如,在线性模型中添加高次项,在神经网络模型中增加网络层数或神经元个数等。

### 3.减小正则化系数

正则化是用来防止过拟合的,但当模型出现欠拟合现象时,则需要有针对性地减小正则化系数。

### 1.3 正则化

 $L_1$ 正则化: $J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda \sum_{j=1}^{n} |w_j|$  , Lasso Regression (Lasso回归)

 $L_2$ 正则化: $J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda \sum_{j=1}^{n} w_j^2$ ,Ridge Regression (岭回归)

Elastic Net:  $J(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \lambda(\rho \cdot \sum_{j=1}^{n} |w_j| + (1 - \rho) \cdot \sum_{j=1}^{n} w_j^2)$ 

(弹性网络)

#### 其中:

- λ为正则化系数,调整正则化项与训练误差的比例,λ>0。
- 1≥ $\rho$ ≥0为比例系数,调整 $L_1$ 正则化与 $L_2$ 正则化的比例。

均方误差(Mean Square Error, MSE) 指预测值和真实值之差的平方的均值

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$

MSE越小越好,说明该模型描述实验数据具有更好的精度。

缺点:

MSE里面带着平方,会改变量纲;

其中, $y^{(i)}$ 和 $\hat{y}^{(i)}$ 分别表示第i个样本的真实值和预测值,m为样本个数。

### 均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2}$$
 RMSE越小越好

### 优点:

RMSE的存在是开完根号之后,误差的结果就和数据是一个单位级别的,可以更好的描述数据。

#### 缺点:

RMSE/MSE对一组测量中对特大/特小误差反映特别敏感,这种局限性常常发生在短时间内变化比较大的数据上,如风电预测,访问量预测等。

### 平均绝对误差(Mean Absolute Error,MAE)

$$MAE(y,\widehat{y}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{n} \left| y^{(i)} - \widehat{y}^{(i)} \right|$$

预测值和真实值之差的绝对值求平均。 MAE越小越好,但是不常用,因为它不能求导。

### **R方** [RSquared(r2score)]

$$R^{2}(y,\widehat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \widehat{y}^{(i)})^{2}}{\sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \overline{y})^{2}} = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST}$$

$$R^{2}(y,\widehat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \widehat{y}^{(i)})^{2}/m}{\sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \overline{y})^{2}/m} = 1 - \frac{MSE}{Var}$$

越接近于1,说明模型拟合得越好

$$SSR = \sum_{i=0}^{m} (\widehat{y}^{(i)} - \overline{y})^2$$

$$SSE = \sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \widehat{y}^{(i)})^2$$

$$SST = \sum_{i=0}^{m} (y^{(i)} - \overline{y})^2$$

其中, $y^{(i)}$ 和 $\hat{y}^{(i)}$ 分别表示第i个样本的真实值和预测值,m为样本个数。

# 2. 逻辑回归

- 2.1 分类问题
- 2.2 逻辑回归概述
- 2.3 逻辑回归求解

# 2. 1 分类问题

### 监督学习的最主要类型

- ✓ 分类 (Classification)
  - ✓ 身高1.85m, 体重100kg的男人穿什么尺码的T恤?

标签离散

- ✓ 根据肿瘤的体积、患者的年龄来判断良性或恶性?
- ✓ 根据用户的年龄、职业、存款数量来判断信用卡 是否会违约?

输入变量可以是离散的,也可以是连续的。

### 2. 1 分类问题---二分类

### 二分类:

表示分类任务中有两个类别,比如我们想识别一幅图片是不是狗。即训练一个分类器,特征向量x表示输入的图片,输出为y,若y=0表示输出不是狗,y=1表示输出是狗。

二分类是假设每个样本都被设置了一个且仅有一个标签0或者1。



# 2. 1 分类问题---多分类

### 多类分类:

表示分类任务中有多个类别,比如对一堆水果图片分类,它们可能是橘子、苹果、梨等。多类分类是假设每个样本都被设置了一个且仅有一个标签:一个水果可以是苹果或者梨,但是同时不可能是两者。



### 逻辑回归的应用场景:

- 广告点击率
- 是否为垃圾邮件
- 是否患病
- 金融诈骗
- 虚假账号

逻辑回归一般用于解决分类(二分类)问题

■ 预测值与输出标记

$$z = w^T x + b \qquad y \in \{0,1\}$$

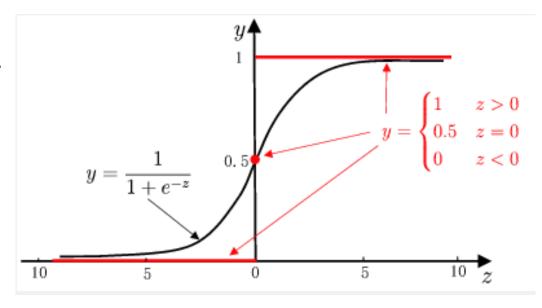
■ 寻找函数将分类标记与线性回归模型输出联系起来

■ 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,小于零则判为反例,预测值为临界值零则可任意判 别

- 单位阶跃函数缺点
  - 不连续
- 替代函数:对数几率函数(是一种Sigmoid函数)
  - 单调可微、任意阶可导

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



单位阶跃函数与对数几率函数的比较

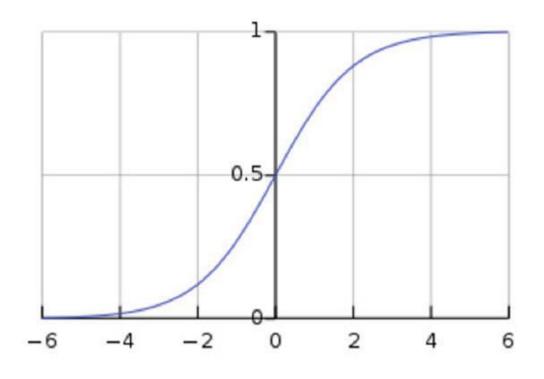
### Sigmoid 函数

 $\sigma(z)$ 代表一个常用的逻辑函数(logistic function)为S形函数(Sigmoid function)

则: 
$$\sigma(z) = g(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$
  $z = w^T x + b$ 

合起来,我们得到逻辑回归模型的假设函数:

$$L(\hat{y}, y) = -y\log(\hat{y}) - (1 - y)\log(1 - \hat{y})$$



当 $\sigma(z)$ 大于等于0.5时,预测 y=1当 $\sigma(z)$ 小于0.5时,预测 y=0

注意:若表达式  $h(x) = z = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + ... + w_n x_n + b = w^T x + b$  , 则b可以融入到 $w_0$  , 即: $z = w^T x$ 

线性回归的函数  $h(x) = z = w^T x$ , 范围是 $(-\infty, +\infty)$ 。

而分类预测结果需要得到[0,1]的概率值。

在二分类模型中,事件的几率odds:事件发生与事件不发生的概率之比为 $\frac{p}{1-p}$ ,

称为事件的发生比 (the odds of experiencing an event )

其中p为随机事件发生的概率,p的范围为[0,1]。

取对数得到:  $\log \frac{p}{1-p}$ , 而 $\log \frac{p}{1-p} = w^T x = z$ 

求解得到:
$$p = \frac{1}{1+e^{-w^Tx}} = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

将z进行逻辑变换:  $g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ 

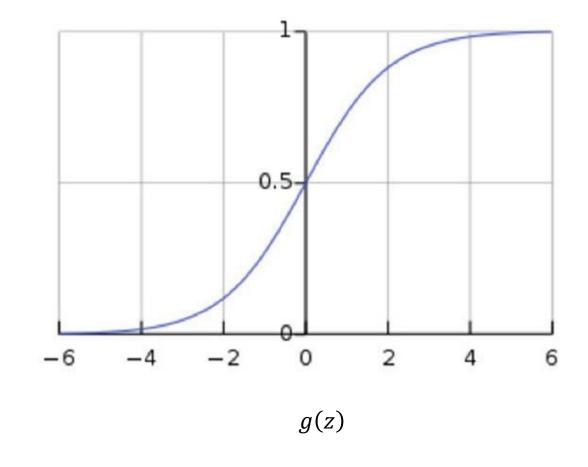
$$g'(z) = \left(\frac{1}{1 + e^{-z}}\right)'$$

$$= \frac{e^{-z}}{(1 + e^{-z})^2}$$

$$= \frac{1 + e^{-z} - 1}{(1 + e^{-z})^2}$$

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

$$= g(z)(1 - g(z))$$



### 假设一个二分类模型:

$$p(y = 1|x; w) = h(x)$$
$$p(y = 0|x; w) = 1 - h(x)$$

则:

$$p(y|x;w) = (h(x))^{y} (1 - h(x))^{1-y}$$

逻辑回归模型的假设是:  $h(x) = g(w^T x) = g(z)$ 

其中 $z = w^T x$  , 逻辑函数 (logistic function)公式为:

$$g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$
,  $g'(z) = g(z)(1-g(z))$ 

### 损失函数

$$L(\hat{y}, y) = -y\log(\hat{y}) - (1 - y)\log(1 - \hat{y})$$

 $\hat{y}$  表示预测值h(x)

y 表示真实值

为了衡量算法在全部训练样本上的表现如何,我们需要定义一个算法的代价函数,算法的代价函数是对m个样本的损失函数求和然后除以m:

### 代价函数

$$J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} L\left(\hat{y}^{(i)}, y^{(i)}\right) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(-y^{(i)} \log \hat{y}^{(i)} - (1 - y^{(i)}) \log(1 - \hat{y}^{(i)})\right)$$

### 求解过程:

似然函数为:  $L(w) = \prod_{i=1}^{m} P(y^{(i)}|x^{(i)};w) = \prod_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}))^{y^{(i)}} (1 - h(x^{(i)}))^{1-y^{(i)}}$ 

似然函数两边取对数,则连乘号变成了连加号:

$$l(w) = \log L(w) = \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} \log(h(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h(x^{(i)})))$$

代价函数为:

$$J(w) = -\frac{1}{m}l(w) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} (y^{(i)}\log(h(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)})\log(1 - h(x^{(i)})))$$

### 梯度下降求解过程:

$$w_j := w_j - \alpha \frac{\partial J(w)}{\partial w}$$

$$J(w) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} \log(h(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h(x^{(i)})))$$
$$\frac{\partial}{\partial w_j} J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$$

则:
$$w_j$$
:= $w_j - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$ 

求解过程:  $\frac{\partial}{\partial w_j} J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$ 的推导过程:

$$J(w) = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} \log(h(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h(x^{(i)})))$$

$$y^{(i)} \log(h(x^{(i)})) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - h(x^{(i)}))$$

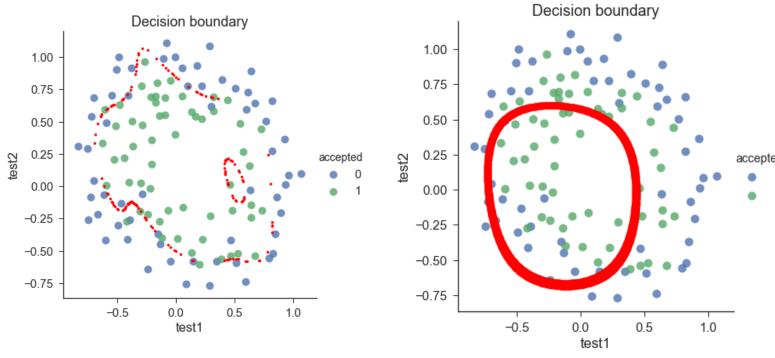
$$= y^{(i)} \log(\frac{1}{1 + e^{-w^{T}x^{(i)}}}) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - \frac{1}{1 + e^{-w^{T}x^{(i)}}})$$

$$= -y^{(i)} \log(1 + e^{-w^{T}x^{(i)}}) - (1 - y^{(i)}) \log(1 + e^{w^{T}x^{(i)}})$$

**求解过程:**  $\frac{\partial}{\partial w_i} J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$ 的推导过程:  $\frac{\partial}{\partial w_j} J(w) = \frac{\partial}{\partial w_j} \left( -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left( -y^{(i)} \log \left( 1 + e^{-w^T x^{(i)}} \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 + e^{w^T x^{(i)}} \right) \right) \right)$  $= -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(-y^{(i)} \frac{-x_j^{(i)} e^{-w^T x^{(i)}}}{1 + e^{-w^T x^{(i)}}} - (1 - y^{(i)}) \frac{x_j^{(i)} e^{w^T x^{(i)}}}{1 + e^{w^T x^{(i)}}}\right)$  $= -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y^{(i)} - h(x^{(i)})) x_j^{(i)}$  $= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)}$ 

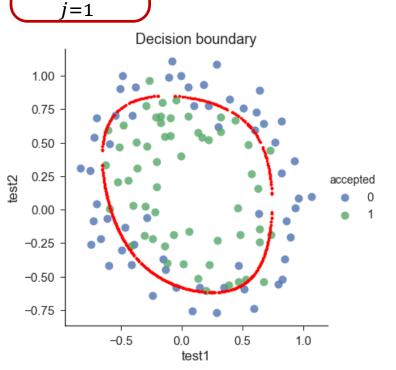
### 正则化:目的是为了防止过拟合

$$J(w) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right] + \frac{\lambda}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left[ -y^{(i)} \log \left( h(x^{(i)}) \right) - \left( 1 - y^{(i)} \right) \log \left( 1 - h(x^{(i)}) \right) \right]$$



没有正则化,过拟合

正则化过度, 欠拟合



当 A 的值开始上升

降低了方差。

正则化项

适当的正则化

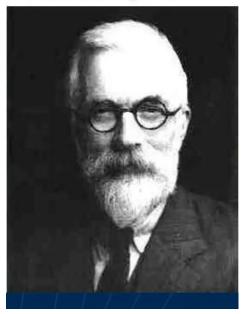
## 线性回归与逻辑回归的区别与联系

- 线性回归用来预测,逻辑回归用来分类。
  - 在线性回归模型中,输出一般是连续的,对于每一个输入的x,都有一个对应的输出y。因此模型的定义域和值域都可以是无穷。
  - 逻辑回归,输入可以是连续的 $[-\infty, +\infty]$ ,但输出一般是离散的,通常只有两个值 $\{0,1\}$ 。
- 线性回归是拟合函数,逻辑回归是预测函数。
- 线性回归和逻辑回归的损失函数:
  - 线性回归中使用的是最小化平方误差损失函数。
  - 逻辑回归使用对数似然函数进行参数估计,使用交叉嫡作为损失函数, 对预测错误的惩罚是随着输出的增大,逐渐逼近一个常数。

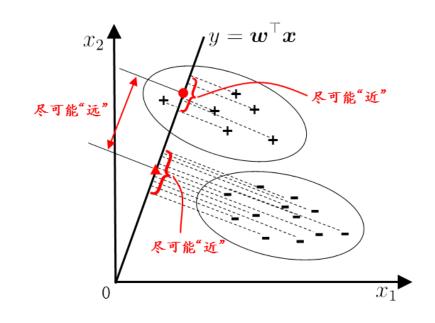
## 3.1线性判别分析概述

• 线性判别分析 (Linear Discriminant Analysis,简称为LDA)也叫Fisher线性判别分析,是特征抽取中最为经典和广泛使用的方法之一。LDA是由R.AFisher于1936年提出来的方法,主要是用来解决生物问题的分类问题。它是在1996年由Belhumeur引入模式识别和人工智能领域的.

Ronald Fisher



- ■LDA的核心思想
  - ●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,可以让不同类中心之间的距离尽可能 大



LDA也可被视为一种监 督降维技术

### ■ 一些变量

- 第i类示例的集合X<sub>I</sub>
- 第i类示例的均值向量µi
- 第i类示例的协方差矩阵  $\sum_{x \in X_i} (x \mu_i)(x \mu_i)^T$
- 两类样本的中心在直线上的投影:  $w^T \mu_0 \pi w^T \mu_1$
- $\bullet$  两类样本投影点的协方差:  $w^T \sum_0 w$  和 $w^T \sum_1 w$

• 最大化目标

$$J = \frac{|w^T \mu_0 - w^T \mu_1|_2^2}{w^T \sum_0 w + w^T \sum_1 w}$$
$$= \frac{w^T (\mu_0 - \mu_1)(\mu_0 - \mu_1)^T w}{w^T (\sum_0 + \sum_1) w}$$

• 类内散度矩阵

$$S_w = (\sum_0 + \sum_1)$$

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

• 类间散度矩阵

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

■ 广义瑞利商 (generalized Rayleigh quotient)

$$J = \frac{w^T S_b w}{w^T S_w w}$$

$$\min -w^T S_b \mathbf{w}$$
$$s. t. w^T S_w \mathbf{w} = 1$$

■ 运用拉格朗日乘子法

$$S_b w = \lambda S_w w$$

# 3. 1 线性判别分析---二分类任务

$$S_b w = \lambda S_w w$$

■ 同向向量

$$S_b w = \lambda S_w (\mu_0 - \mu_1)$$
同向向量

■ 结果

$$w = S_w^{-1}(\mu_0 - \mu_1)$$

- 求解
  - 奇异值分解

$$S_w = U \sum V^T$$

- 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  $S_t = S_b + S_w$ 

$$S_t = S_b + S_w$$

$$= \sum_{x \in X_0} (x_i - \mu)(x_i - \mu)^T$$

• 类内散度矩阵  $S_w = \sum_{i=1}^{N} S_{w_i}$ 

$$S_w = \sum_{i=1}^N S_{w_i}$$

$$S_{w_i} = \sum_{x \in X_i} (x - \mu_1)(x - \mu_1)^T$$

求解得

$$S_{b} = S_{t} - S_{w} = \sum_{x \in X_{0}}^{N} m_{i}(u_{i} - \mu)(u_{i} - \mu)^{T}$$

# LDA推广-多分类任务

• 类内散度矩阵  $S_w = \sum_{i=1}^{N} S_{w_i}$ 

$$\sum_{x \in X_i} (x - \mu_1)(x - \mu_1)^T$$

$$S_b = \sum_{x \in X_0}^N m_i (u_i - \mu) (u_i - \mu)^T$$

$$W = [w_1, w_2 \dots w_p]$$

$$\sum_{j \in p} w_j^T \mathbf{S}_w w_j = tr(\mathbf{W}^T \mathbf{S}_w \mathbf{W})$$

$$-$$
 最小化类内投影协方差之和  $\sum_{j \in p} w_j^T S_w w_j = tr(W^T S_w W)$ 

$$-$$
 最大化类间投影距离之和 
$$\sum_{j \in p} w_j^T S_b w_j = tr(W^T S_b W)$$

# LDA推广-多分类任务

• 优化目标  $\max_{\mathbf{W}} \frac{tr(\mathbf{W}^T S_b \mathbf{W})}{tr(\mathbf{W}^T S_w \mathbf{W})}$ 

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

$$S_b W = \lambda S_w W$$

W的闭式解则是  $S_w^{-1}S_b$ 的前d' ( $d' \le N-1$ )个最大非零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d'维空间, d'通常远小于数据原有的属性数d, 因此LDA也被视为一种监督降维技术

## 3. 1 线性判别分析----算法流程

**输入:**数据集D  $\rightarrow \{(x_1, y_1)......(x_m, y_m)\}$ ,任意样本 $x_i$ 为n维向量,

 $y_1 \rightarrow \{C_1, C_2, ....\}$ , 共k个类别。现在要将其降维到d维;

输出:降维后的数据集D'。

- (1) 计算类内散度矩阵 $S_B$ ;
- (2) 计算类间散度矩阵 $S_w$ ;
- (3) 计算矩阵 $S_W^{-1}S_B$
- (4) 计算 $S_W^{-1}S_B$ 的最大的d个特征值和对应的d个特征向量( $W_1, W_2 ... W_d$ ),得到投影矩阵;
- (5) 对样本集中的每一个样本特征 $x_1$ , 转化为新的样本 $y_i = W^T x_i$ , ;
- (6) 输出样本集。

## 3. 1 线性判别分析---优缺点

LDA算法既可以用来降维,也可以用来分类,但是目前来说,主要还是用于降维。在我们进行图像识别相关的数据分析时,LDA是一个有力的工具。

#### LDA算法的主要优点:

- 在降维过程中可以使用类别的先验知识经验。
- LDA在样本分类信息依赖均值而不是方差的时候,比PCA之类的算法较优

#### 3. 1 线性判别分析——优缺点

#### LDA算法的主要缺点:

- LDA不适合对非高斯分布样本进行降维。
- LDA降维最多降到类别数k-1的维数,如果我们降维的维度大于k-1,则不能使用LDA。当然目前有一些LDA的进化版算法可以绕过这个问题。
- LDA在样本分类信息依赖方差而不是均值的时候,降维效果不好。
- LDA可能过度拟合数据。

# 4. 多分类学习

- 4.1 —对—
- 4.2 一对其余
- 4.3 多对多

# 4. 多分类学习

在逻辑回归中提及,逻辑回归只能解决二分类问题

多分类任务怎么解决呢?



#### 4. 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 )

#### ・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

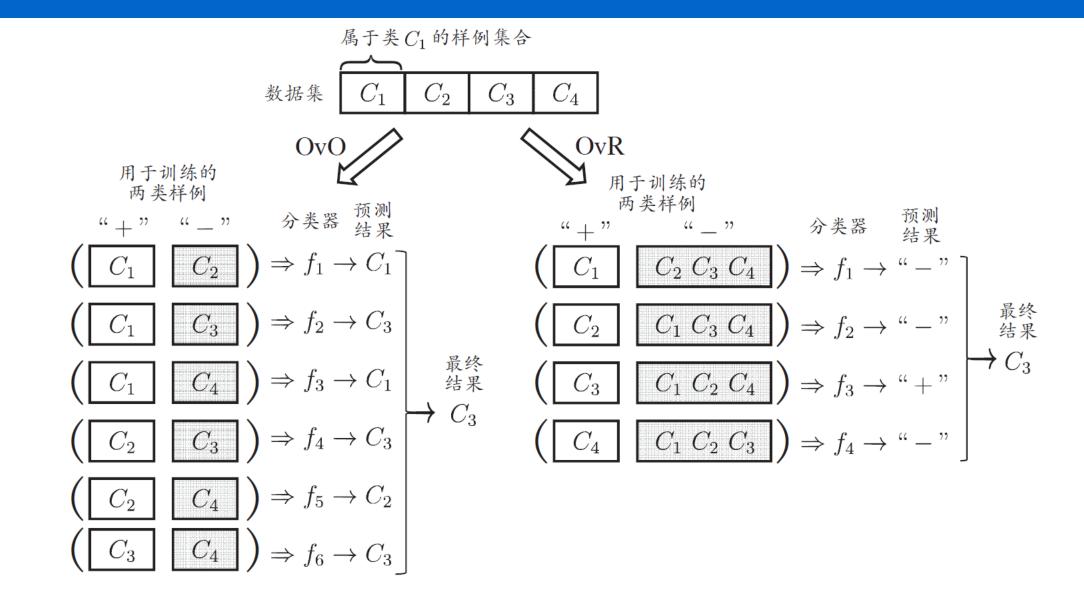
#### • 测试阶段

- 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

## 4. 2 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
    - 置信度最大的类别作为最终类别

## 两种策略比较



# 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

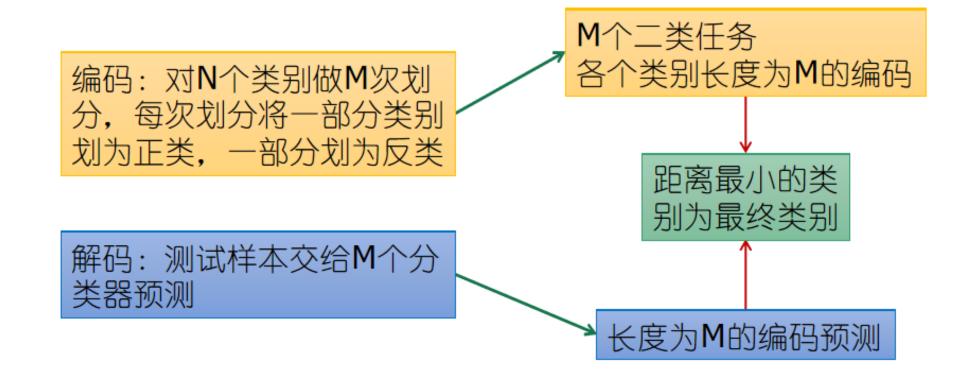
#### 一对其余

- 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

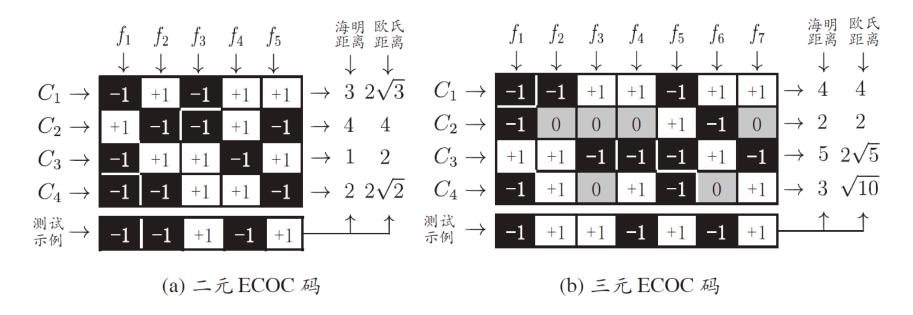
## 4.3 多对多

- 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 Codes, ECOC)



## 4.3 多对多

• 纠错输出码(Error Correcting Output Codes, 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

#### 5. 类别不平衡

- 5.1 类别不平衡概述
- 5.2 类别不平衡导致分类困难的原因
- 5.3 类别不平衡的解决办法

# 5.1 类别不平衡问题概述

- 类别不平衡(class-imbalance)就是指分类任务中不同类别的训 练样例数目差别很大的情况。
- 在现实的分类学习任务中,我们经常会遇到类别不平衡,例如 在通过拆分法解决多分类问题时,即使原始问题中不同类别的 训练样例数目相当,在使用OvR、MvM策略后产生的二分类任 务仍可能出现类别不平衡现象,因此有必要了解类别不平衡性 处理的基本方法。

# 5. 2 类别不平衡导致分类困难的原因

- 正负样本特征区别较大,边界较宽;
- 少数类分布的稀疏性 (sparsity)以及稀疏性导致的拆分多个子概念(sub-concepts,可理解为子clusters)并且每个子概念仅含有较少的样本数量;
- 离群点过多(即过多的少数类样本出现在多数类样本密集的区域);
- 类别之间的分布严重重叠(即不同类别的样本相对密集地出现在特征空间的同一区域);
- 数据中本身存在的噪声,尤其是少数类的噪声。

# 5.3 类别不平衡的解决方法

用 $y = w^T x + b$ 对新样本a进行分类时,事实上是在用预测出的y值与一个阈值进行比较。

#### 例如:

- 通常在g > 0.5时判别为正例,否则为反例
- 阈值设置为 0.5 则表示分类器认为真实正、反例可能性相同。
- y实际上表达了正例的可能性
- 几率 $\frac{y}{1-y}$ 则反映了正例可能性与反例可能性之比值

# 5.3 类别不平衡的解决方法

● 当正反例个数相同时:

若
$$\frac{y}{1-y} > 1$$
 则 预测为正例

●正、反例的个数不同时:

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

其中, $m^+$ 表示正例数目, $m^-$ 表示反例数目, $\frac{m^+}{m^-}$ 表示观测几率,由于我们通常假设训练集是真实样本总体的无偏采样,因此观测几率就代表了真实几率.于是,只要分类器的预测几率高于观测几率就应判定为正例。

对预测值进行调整:

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

这就是类别不平衡学习的一个基本策略——"再缩放"(rescaling).

# 5.3 类别不平衡的解决方法

- 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

## 参考文献

- [1] Andrew Ng. Machine Learning[EB/OL]. Stanford University,2014. https://www.coursera.org/course/ml
- [2] 周志华. 机器学习[M]. 清华大学出版社,2016.
- [3] 李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社,2019.
- [4] WEINBERGER K. Distance metric learning for large margin nearest neighbor classification[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2006, 18.
- [5] HOERL A E, KENNARD R W. Ridge regression: applications to nonorthogonal problems[J]. Technometrics, 1970, 12(1): 69–82.
- [6] TIBSHIRANI R. Regression selection and shrinkage via the lasso[J]. Journal of the Royal Statistical Society Series B, 1996, 58(1): 267–288.
- [7] TIBSHIRANI R, BICKEL P, RITOV Y, et al. Least absolute shrinkage and selection operator[J]. Software: http://www.stat.stanford.edu/ tibs/lasso.html, 1996.



# 谢谢!