## 第2章

## 线性模型

**Linear Models** 

赫然

rhe@nlpr.ia.ac.cn

智能感知与计算研究中心(CRIPAC) 中科院自动化研究所 模式识别国家重点实验室



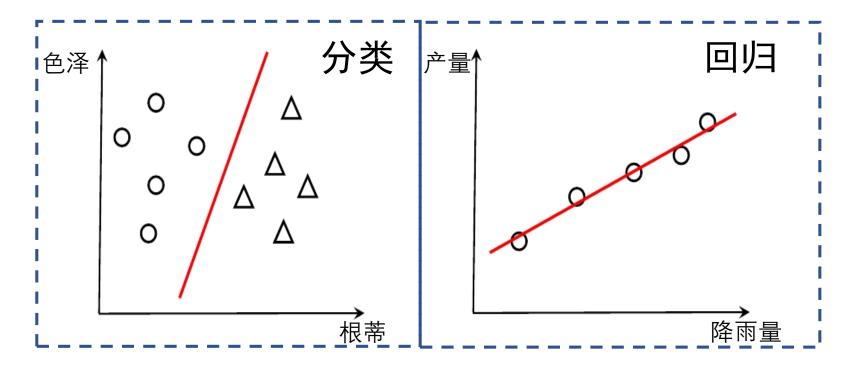


## 内容提要

- 第二章 线性模型
  - 2.1 基本形式
  - 2.2 线性回归
  - 2.3 对数几率回归
  - 2.4 Softmax回归
  - 2.5 线性判别分析
  - 2.6 局部线性判别分析
  - 2.7 多分类学习
  - 2.8 类别不平衡问题



#### 2.1 基本形式



- 给定由 d 个特征描述的示例(样本)  $x = [x_1; x_2; ... x_d]$ ,线性模型的目标是学习如下关于特征的组合函数:

$$f(x) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d + b = w^T x + b$$



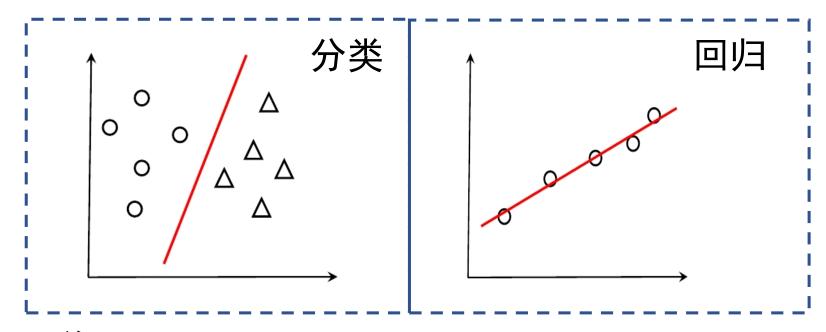
#### 2.1 基本形式

在线性模型中, w直观地表达了各属性在预测中的重要性, 因此线性模型具有很好的可解释性。比如在西瓜问题中:

$$f_{\text{好瓜}} = 0.2x_{\text{色泽}} + 0.5x_{\text{根蒂}} + 0.3x_{\text{敲声}} + 1$$

线性模型简单,易于建模,但却蕴含着机器学习中的一些重要思想。许多非线性模型可在线性模型的基础上通过引入高维映射或者层级结构来得到。



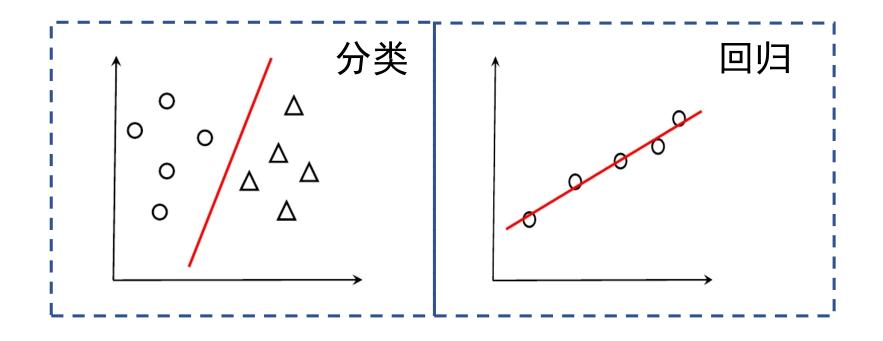


#### 机器学习

[Mitchell, 1997] 对于某类任务T和性能度量P,如果一个计算机程序在T上以P衡量的性能随着经验E而自我完善,那么我们称这个计算机程序在从经验E中学习。



监督学习、无监督学习、半监督学习、强化学习



- 统计机器学习三要素: 方法=模型+策略+算法
  - 模型: 从假设空间中选取最优模型  $\mathcal{F} = \{f | Y = f(X)\}$
  - 策略: 按照什么样的准则学习或选择最优模型
  - 算法: 求解最优化问题找到全局最优解

- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题



## 2.2 线性回归(linear regression)

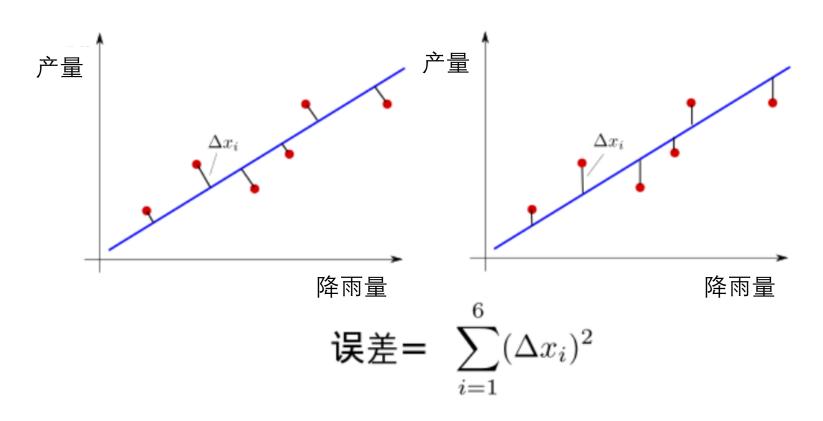
- 样本集 D =  $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_m, y_m)\},$  线性回归试图学得一个线性模型以尽可能地 预测实值输出标记。
- 先考虑输入属性的数目只有1个的情况: (忽略关于属性的下标,  $D = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ )

$$f(x_i) = wx_i + b$$
,使得  $f(x_i) \simeq y_i$ 

如何求w和b 呢?



$$f(x_i) = wx_i + b$$
,使得  $f(x_i) \simeq y_i$ 





$$f(x_i) = wx_i + b$$
, 使得  $f(x_i) \simeq y_i$ 

- 令均方误差最小化,有

$$(w^*, b^*) = \underset{(w,b)}{\operatorname{arg min}} \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i - b)^2$$

均方误差有很好的几何意义,它对应着欧氏距离。 在线性回归中,最小二乘法就是试图找到一条直线, 使所有样本到直线上的欧氏距离之和最小。



目标函数

- 对  $E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i - b)^2$  进行最小二乘估计,求w, b

1. 对w,b分别求导,得到: 
$$w^2 x_i^2$$
  $2w(y_i - b)x_i$   $\frac{\partial E(w,b)}{\partial w} = 2\left[w\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \sum_{i=1}^{m} (y_i - b)x_i\right]$  (1)  $\frac{\partial E(w,b)}{\partial b} = 2\left[mb - \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i)\right]$  (2)

2. 令(1), (2)式为0, 得到w和b的解:

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



- 多元线性回归(multivariable linear regression)
  - 一般的形式如数据集D, 样本由d个属性描述 $(x_i \in \mathbb{R}^d)$ , 类似的,目标函数为:

$$E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^{m} (y_i - w^T x_i - b)^2 = \sum_{i=1}^{m} |w^T x_i + b - y_i|^2$$

- 将w和b吸收入向量形式:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} \in R^{m \times (d+1)}, \hat{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{pmatrix} \in R^{d+1}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in R^m$$

(齐次坐标)

(参数)

(回归目标)



多元线性回归

$$E(\hat{w}) = (X\hat{w} - y)^{T} (X\hat{w} - y) = \hat{w}^{T} X^{T} X \hat{w} - 2\hat{w}^{T} X^{T} y + y^{T} y$$

代价函数:  $\hat{w}^* = \arg\min_{\hat{w}} E(\hat{w})$ 

- 求解一求偏导数:

$$\frac{\partial E(\hat{w})}{\partial \hat{w}} = \frac{\partial \left( (X\hat{w} - y)^T (X\hat{w} - y) \right)}{\partial \hat{w}}$$

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

$$= 2X^T X \hat{w} - 2X^T y$$





#### • 计算问题

-  $X^T X$  可能是不可逆的,此时,可以在 $X^T X$  的主对角线元素上加一个很小的正数 $\lambda$ , 此时有:

$$\hat{w} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T Y$$

- 可以证明, "上式"即为如下结构风险最小化模型(正则化模型)的最优解:

$$\min_{\hat{w}} || X \hat{w} - Y ||_F^2 + \lambda || \hat{w} ||_F^2$$



计算问题

结构风险最小化模型

$$\min_{\hat{w}} \parallel X\hat{W} - Y \parallel_F^2 + \lambda \parallel \hat{W} \parallel_F^2$$

- 从贝叶斯决策的角度进行解释:

$$\max e^{-(\|X\hat{W}-Y\|_F^2 + \lambda \|\hat{W}\|_F^2)} = e^{-\|X\hat{W}-Y\|_F^2} \times e^{-\lambda \|\hat{W}\|_F^2}$$

似然概率(误差分布)

先验概率(参数分布)



#### 求解思路2

$$\min_{w} \frac{1}{2} \|w\|_{2}^{2} \quad s.t. \quad Xw = y$$

$$J(w) = \frac{1}{2}w^T w - \Lambda^T (Xw - y)$$

$$\partial J(w) / \partial w = w - X^T \Lambda = 0 \Rightarrow Xw - XX^T \Lambda = 0$$

$$\Rightarrow y - XX^T \Lambda = 0 \Rightarrow \Lambda = (XX^T)^{-1}y$$

$$w = X^T (XX^T)^{-1} y$$



- 广义线性回归(generalized linear regression)
- 一广义线性回归是为了克服线性回归模型的缺点出现的。
- 线性回归虽然简单,但是输出无法确定。进 行分类时效果也不理想。
- 令预测值逼近y的衍生物,即y的函数?
- 比如,输出标记是在对数尺度上的变化:

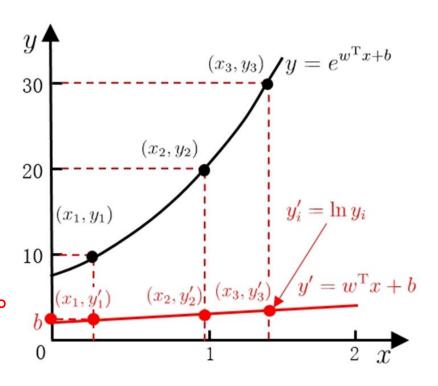
$$\ln y = w^T x + b$$



• 广义线性回归

$$\ln y = w^T x + b$$

- 这就是对数线性回归。



- 其形式上仍然是线性回归但其实质它是采用如下变换逼近y, 因此是非线性的:

$$y = e^{w^T x + b}$$



- 广义线性回归
  - 更一般地(广义线性回归),考虑单调可微函数 $g(\cdot)$ ,将该函数作用于y(待回归的值)。

$$g(y) = (w^T x + b)$$



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

- 这样得到的模型成为"广义线性模型"
- $g(\cdot)$ 称为"<mark>联系函数</mark>",对数线性回归是广义线性回归的特例

$$g(\cdot) = ln(\cdot)$$
  $\Rightarrow$   $ln y = w^T x + b$ 



- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题



## 2.3 对数几率回归(Logistic regression)

 利用广义线性回归的思想,希望找到一个单调可微函数, 利用该函数将分类任务的真实标记与线性回归模型的预测 值联系起来。

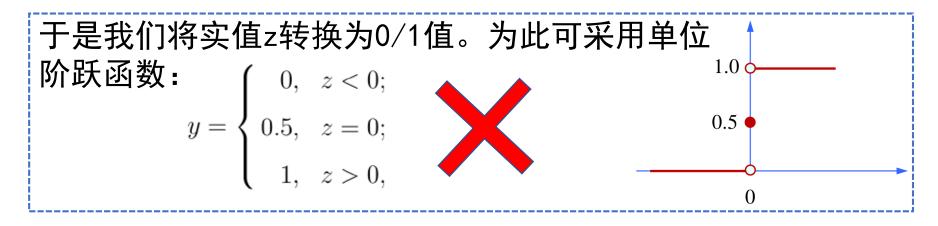
线性回归模型产生的实值输出:  $z = w^T x + b$ 

期望输出:  $y \in (0,1)$ 

于是我们将实值z转换为0/1值。为此可采用单位阶跃函数  $y = \begin{cases} 0, & z < 0; \\ 0.5, & z = 0; \\ 1, & z > 0, \end{cases}$ 

### 2.3 对数几率回归(Logistic regression)

利用广义线性回归的思想,希望找到一个单调可微函数,利用该函数将分类任务的真实标记与线性回归模型的预测值联系起来。



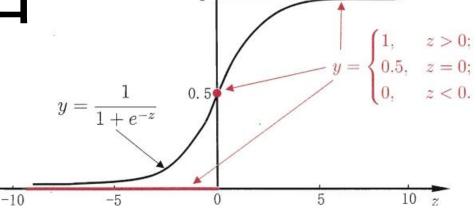
一 阶跃函数不连续,且反函数不存在。需要找到可近似单位 阶跃函数的替换函数

对数几率函数!(logistic function)



• 对数几率函数定义

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



- 以对率函数为联系函数:

$$y = \frac{1}{1 + e^{-z}} \implies y = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x + b)}}$$

联系函数 
$$y=g^{-1}(w^Tx+b)$$

即 
$$\ln \frac{y}{1-y} = w^T x + b$$
 (本质是线性的)

几率(odds): 度量样本x作为正例的相对可能性。

• y视为样本x作为正例的可能性, 1-y就是反例的可能性.



#### 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

#### 分析

- 对数几率回归是一种二分类方法。
- 对数几率回归(logistic regression),亦称logit regression),简称"对率回归"。
- 输出样本分类结果的可能性(软标签)。



- 求解思路
  - 如果将y 视为类后验概率估计p(y=1|x),有:

$$\ln \frac{y}{1-y} = w^T x + b$$
  $\Rightarrow$   $\ln \frac{p(y=1|x)}{p(y=0|x)} = w^T x + b$ 

- 进一步,由变化可获得预测概率:

$$y = \frac{1}{1 + e^{-(w^{T}x + b)}} \implies p(y = 1|x) = \frac{e^{w^{T}x + b}}{1 + e^{w^{T}x + b}}$$
$$p(y = 0|x) = \frac{1}{1 + e^{w^{T}x + b}}$$



- 求解思路
  - 通过"极大似然法"来估计w和b
    - 1. 对率回归模型最大化"对数似然":

$$l(w,b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i|x_i; w, b)$$
 (1)

- 2. 令  $\beta = (w;b), \hat{x} = (x;1)$  则 $w^T x + b$ 可简写为 $\beta^T \hat{x}$
- 3. 再令  $p_1 = p(y = 1 | \hat{x}; \beta)$ ,  $p_0 = p(y = 0 | \hat{x}; \beta) = 1 p_1(\hat{x}; \beta)$
- 4. 则(1)式中的似然项可写为

$$p(y_i|x_i; w, b) = y_i p_1(\hat{x}_i; \beta) + (1 - y_i) p_0(\hat{x}_i; \beta)$$
 (2)



- 通过"极大似然法"来估计w和b

$$l(w,b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i|x_i; w, b)$$
 (1)

$$p(y_i|x_i; w, b) = y_i p_1(\hat{x}_i; \beta) + (1 - y_i) p_0(\hat{x}_i; \beta)$$
 (2)

(为了方便, 我们将 $p_1(\hat{x}_i; \beta)$  直接用 $p_1$ 表示,  $p_0(\hat{x}_i; \beta)$ 用 $p_0$ 表示)

$$p_1 = \frac{e^{\beta^T \hat{x}_i}}{1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}} \qquad p_0 = \frac{1}{1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}}$$

5. 将(2)代入(1) 可得

$$l(\beta) = \sum_{i=1}^{\infty} \ln(y_i p_1 + (1 - y_i) p_0)$$
 (3)



- 通过"极大似然法"来估计w和b

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

$$p_1 = \frac{e^{\beta^T \hat{x}_i}}{1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}} \qquad p_0 = \frac{1}{1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}}$$

6. 将 $p_1$ ,  $p_0$ 带入(3)式,得

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



- 通过"极大似然法"来估计w和b

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

7. 由于*y<sub>i</sub>*=0 或1 则

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

两式综合可得  $l(\beta) = \sum_{i=1}^{m} \left( y_i \beta^T \hat{x}_i - \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x}_i}) \right)$ 



- 通过"极大似然法"来估计w和b

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

8.最大化似然函数等价于最小化似然函数的相反数

$$\max l(\beta) \quad | \quad \min(-l(\beta))$$

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

可采用梯度法或牛顿法进行求解。比如采用牛顿法



- 求解思路(牛顿法、梯度下降、随机梯度下降)
- 用牛顿法求  $l(\beta) = \sum_{i=1}^{m} (-y_i \beta^T \hat{x}_i + \ln(1 + e^{\beta^T x_i}))$ 最优解
- 第t+1轮迭代解的更新公式为:

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

- 其中关于*β*的一阶,二阶导数分别为:

$$\frac{\partial l(\beta)}{\partial \beta} = -\sum_{i=1}^{m} \hat{x}_{i} (y_{i} - p_{1}(\hat{x}_{i}; \beta)),$$

$$\frac{\partial^{2} l(\beta)}{\partial \beta \partial \beta^{T}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{x}_{i} \hat{x}_{i}^{T} p_{1}(\hat{x}_{i}; \beta) (1 - p_{1}(\hat{x}_{i}; \beta))$$



#### 小结

- Logistic 回归适用于二分类任务。
- 给定m个训练样本 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_m, y_m)$ ,其中  $x_i \in \mathbb{R}^d, i = 1, ..., m$ ,为d维样本特征, $y_i \in \{0,1\}$ 其 对应的类别标签。
- Logistic 回归采用的假设函数:

$$h(x|w,b) = \frac{1}{1 + e^{w^T x + b}}$$

- 目标:训练模型参数(w,b),最小化代价函数:
  - 采用最大似然估计:

$$l(w,b) = -\sum_{i=1}^{m} (y_i h(x_i \mid w,b) + (1-y_i)(1-h(x_i \mid w,b)))$$

• 也可采用交叉熵损失:

$$l(w,b) = -\sum_{i=1}^{m} (y_i \log(h(x_i \mid w,b)) + (1-y_i) \log(1-h(x_i \mid w,b)))$$



- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题



#### 2.4 Softmax回归

#### • 问题的背景

- Logistic回归利用后验概率最大化去计算权重*w*, 但它不方便处理多类分类问题。
- Softmax Regression是Logistic回归的推广,能以 更加紧凑的方式来处理Logistic回归中所面临的 多类分类问题。
- 也就是说, Softmax适用于解决y∈ {1, •••, k}分
   类的问题。



#### 2.4 Softmax回归

- Softmax函数
  - 一 设 $z = [z_1, z_2, \cdots, z_c]^T$ 为一个c维空间中的一个向量,Softmax函数 $\sigma$ 是一个[0, 1]上的一个c维映射函数:

$$[\sigma(z)_j] = \frac{e^{z_j}}{\sum_{i=1}^c e^{z_i}}, \quad j = 1, 2, \dots, c$$

- Softmax函数的输出可以用来描述关于类别的分

市:
$$P(y=j \mid x) = \frac{e^{w_j^T x + b_j}}{\sum_{i=1}^{c} e^{w_i^T x + b_i}}$$



#### 2.4 Softmax回归

# $[\sigma(z)_j] = \frac{e^{z_j}}{\sum_{\alpha} e^{z_i}}$

#### Softmax函数

$$C_1$$
:  $w^1$ ,  $b_1$   $z_1 = w^1 \cdot x + b_1$ 

$$C_2$$
:  $w^2$ ,  $b_2$   $z_2 = w^2 \cdot x + b_2$ 

$$C_3$$
:  $w^3$ ,  $b_3$   $z_3 = w^3 \cdot x + b_3$ 

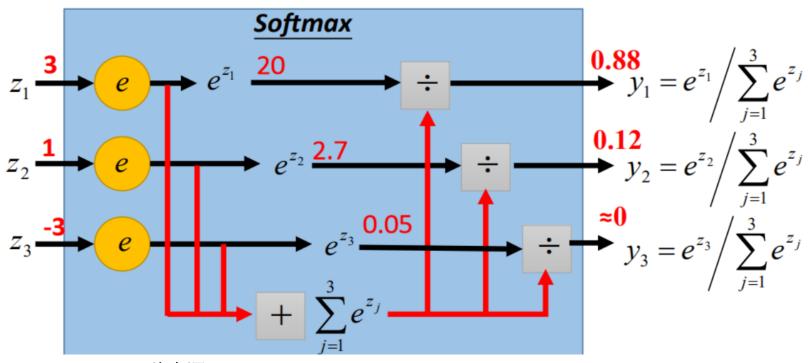
#### **Probability**:

■ 
$$1 > y_i > 0$$

$$\blacksquare \sum_i y_i = 1$$

$$y_i = P(C_i \mid x)$$

i=1





- Softmax函数
  - 假定数据x是采用齐次坐标表示的,即x的维数是 d+1维。齐次坐标则对应着平移量b。
- 假设函数的具体形式(概率形式):

$$h(x;W) = \begin{pmatrix} P(y=1 \mid x;W) \\ P(y=2 \mid x;W) \\ \vdots \\ P(y=c \mid x;W) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{c} e^{w_{i}^{T}x}} \begin{pmatrix} e^{w_{1}^{T}x} \\ e^{w_{2}^{T}x} \\ \vdots \\ e^{w_{c}^{T}x} \end{pmatrix} \neq \mathbb{R}^{c}$$

$$\not \exists \psi, W = [w_{1}, w_{2}, \dots, w_{c}] \in \mathbb{R}^{(d+1) \times d}$$

- 假设函数会对每一个i = 1, ..., c,给出 $p(y = i \mid x; W)$ . 概率的估计值

• 代价函数: 从两类到多类

采用交叉熵损失

$$l(w,b) = -\sum_{i=1}^{m} (y_i \log(h(x_i | w,b)) + (1-y_i) \log(1-h(x_i | w,b)))$$

$$= -\sum_{i=1}^{m} \left[ \sum_{j=0}^{1} \delta(y_i = j) \log P(y_i = j \mid x_i; w, b) \right]_{\delta(\cdot) \text{hirms}}$$

多类

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \left[ \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} \right]$$
  $\delta(\cdot)$ 为指示函数



求解

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \left| \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} \right|$$

$$\frac{\partial l(W)}{\partial w_j} = -\sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i}} \right) = -\left( \sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - P(y_i = j \mid x; W) \right) \right)$$

$$j = 1, 2, \dots, c$$



• 求解

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \left[ \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} \right]$$

$$\frac{\partial l(W)}{\partial w_j} = -\sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i}} \right) = -\left( \sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - P(y_i = j \mid x; W) \right) \right)$$

$$j = 1, 2, \dots, c$$

$$\delta(y_i = j) \log e^{w_j^T x_i} = \delta(y_i = j) w_j^T x_i$$



求解

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \left[ \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} \right]$$

$$\frac{\partial l(W)}{\partial w_j} = -\sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i}} \right) = -\left( \sum_{i=1}^m x_i \left( \delta(y_i = j) - P(y_i = j \mid x; W) \right) \right)$$

$$j = 1, 2, \dots, c$$

$$\delta(y_i = j) \log \frac{1}{\sum_{c}^{c} e^{w_k^T x_i}} = -\delta(y_i = j) \log \sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}$$



求解

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \left[ \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} \right]$$

$$\frac{\partial l(W)}{\partial w_j} = -\sum_{i=1}^m x_i \left( \mathcal{S}(y_i = j) - \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i}} \right) = -\left( \sum_{i=1}^m x_i \left( \mathcal{S}(y_i = j) - P(y_i = j \mid x; W) \right) \right)$$

$$j = 1, 2, \dots, c$$

采用梯度下降法:  $w_j^{t+1} = w_j^t - \eta \frac{\partial l(W)}{\partial w_j^t}, j = 1, 2, \dots, c$ 



• 参数化的特点

对任意 $\theta \in \mathbb{R}^{d+1}$ :

$$P(y = j \mid x; W) = \frac{e^{(w_j - \theta)^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{(w_k - \theta)^T x_i}} = \frac{e^{w_j^T x_i} e^{-\theta^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i} e^{-\theta^T x_i}} = \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^c e^{w_k^T x_i}}$$

- 这表明softmax回归中的参数是"冗余"的。即Softmax 模型被过度参数化。"对于任意一个用于拟合数据的假设函数,可以求出多组参数值,这些参数得到的是结果完全相同的假设函数h(x; W)"。



#### • 参数化的特点

- 因此,使l(W)最小化求得的参数并不是唯一的。
- 海塞矩阵通常是奇异的/不可逆的,因此采用牛顿法 优化会遇到数值计算的问题
- 注意,当 $\theta = w_1$ 时,总可以将 $w_1$  替换为 $w_1 \theta$ ,并且这种变换不会影响假设函数
  - 因此,可以去掉参数 $w_1$ (或者其他任意一个),但不影响假设函数的表达能力
  - 可以令 $w_1 = 0$ ,只优化剩余的c 1个参数。
  - 但是,实际中我们很少这样做!



• 权重衰减:新的学习模型(结构风险最小化)

$$l(W) = -\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{c} \delta(y_i = j) \log \frac{e^{w_j^T x_i}}{\sum_{k=1}^{c} e^{w_k^T x_i}} + \lambda ||W||_F^2$$

$$\frac{\partial l(w)}{\partial w_j} = -\left(\sum_{i=1}^{m} x_i \left(\delta(y_i = j) - P(y_i = j \mid x; W)\right) + 2\lambda w_j\right)$$

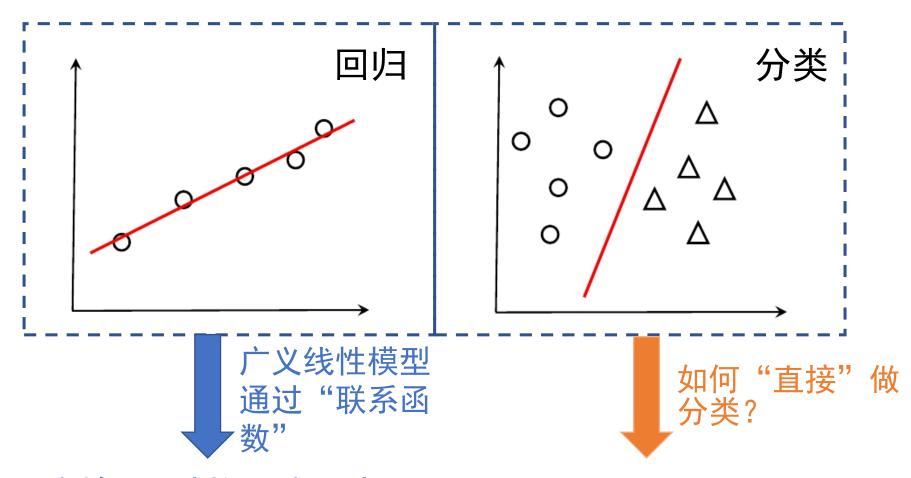


- Softmax regression VS 多个Logistic regression
  - 将图像分到三个不同类别中。
    - 类型一:假设这三个类别分别是:室内场景、户 外城区场景、户外荒野场景。
    - 类型二:假设这三个类别分别是:室内场景、黑白图像、包含人物的图像。
    - 在第一个例子中,三个类别是互斥的,因此更适于选择softmax回归分类器。
    - 在第二个例子中,建立三个独立的logistic回归 分类器可能更加合适。



- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题





例如:对数几率回归



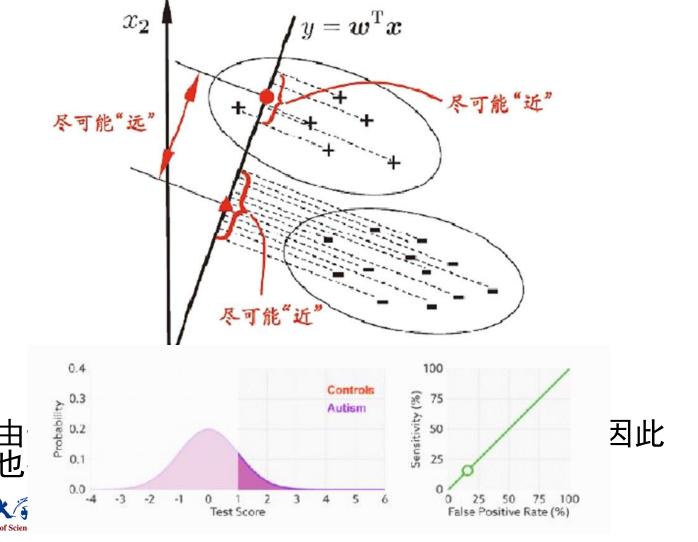
引用: 周志华《机器学习》课件

#### • 算法思想

- 线性判别分析(Linear Discriminant Analysis, LDA)是一种经典的线性学习方法。
- LAD的思想较直观:对于二类分类问题,给定训练集, 设法将样例投影到一条直线上,使得同类样例的投影 点尽可能接近,不同类样例的投影点尽可能相互远离。
- 在对新样本进行分类时, 奖其投影到这条直线上, 再 根据投影点的位置来判断其类别。



• 算法思想



#### • 算法思想

- 给定数据集 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ ,其 i 类示例的集和-- $X_i$ ,均值向量-- $\mu_i$ ,协方差矩阵 -- $\sum_i$
- 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:  $w^T \sum_0 w$  和  $w^T \sum_1 w$

同类样例的投影点尽可能接近:

让 
$$w^T \sum_0 w + w^T \sum_1 w$$
 尽可能小

异类样例的投影点尽可能远离:

让 
$$\|w^T \mu_0 - w^T \mu_1\|^2$$
 尽可能大



• 算法思想

同类样例的投影点尽可能接近  $\rightarrow w^T \sum_0 w + w^T \sum_1 w$  尽可能小 异类样例的投影点尽可能远离  $\rightarrow ||w^T \mu_0 - w^T \mu_1||_2^2$  尽可能大

目标函数:

$$J = \frac{\|w^{T} \mu_{0} - w^{T} \mu_{1}\|_{2}^{2}}{w^{T} \sum_{0} w + w^{T} \sum_{1} w}$$

$$= \frac{w^{T} (\mu_{0} - \mu_{1})(\mu_{0} - \mu_{1})^{T} w}{w^{T} (\sum_{0} + \sum_{1}) w}$$

两个类的中 心尽可能远

两类的类内协 方差尽可能小



- LDA (Linear Discriminant Analysis)
  - 类内散度矩阵(within-class scatter matrix):

$$\begin{split} S_w &= \sum_0 + \sum_1 \\ &= \sum_{x \in X_0} (x - \mu_0)(x - \mu_0)^T + \sum_{x \in X_1} (x - \mu_1)(x - \mu_1)^T \end{split}$$

- 类间散度矩阵(between-class scatter matrix):

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

- 目标函数重写为:  $J(w) = \frac{w^T S_b w}{w^T S_w w}$  (最大化广义Rayleigh商)

注意: J(w) 的值与向量的长度无关,只与其方向有关。一般可令w为单位长度的向量。



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

- LDA算法
  - 求解思路:(求使J最大的w)
  - 1. 令  $w^T S_w w = 1$  ,最大化广义瑞利商等价形式为:  $\min_{w} w^T S_b w \quad s.t. \quad w^T S_w w = 1$
  - 2. 运用拉格朗日乘子法,得拉格朗日函数为:

$$L(w,\lambda) = -w^T S_b w + \lambda (w^T S_w w - 1)$$

- 3. 对 w 求偏导: 
$$\frac{\partial L(w,\lambda)}{\partial \lambda} = -(S_b + S_b^T)w + \lambda(S_w + S_w^T)w$$



- LDA算法
  - 求解思路:(求使J最大的w)

$$\frac{\partial L(w, \lambda)}{\partial \lambda} = -(S_b + S_b^T)w + \lambda(S_w + S_w^T)w$$

- 4. 由于  $S_b = S_b^T, S_w = S_w^T$ ,

所以: 
$$\frac{\partial L(w,\lambda)}{\partial w} = -2S_b w + 2\lambda S_w w$$

- 5. 令上式等于0即可得:

$$S_b w = \lambda S_w w \implies S_w^{-1} S_b w = \lambda w$$



- · 多类LDA算法
- 假定有N个类,且第i类示例数为m:
- 全局散度矩阵:  $S_t = S_b + S_w = \sum_{i=1}^m (x_i \mu)(x_i \mu)^T$ ,  $\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$
- 类内散度矩阵:  $S_w = \sum_{i=1}^N S_{w_i}, S_{w_i} = \sum_{x \in X_i} (x \mu_i)(x \mu_i)^T, \mu_i = \frac{1}{n_i} \sum_{x \in X_i} x$
- 类间散度矩阵: $S_b = S_t S_w = \sum_{i=1}^{N} m_i (\mu_i \mu) (\mu_i \mu)^T$

 ${}^{L}$ 多分类LDA有多种实现方法:采用 $S_{b}$ , $S_{w}$ , $S_{t}$ 中的任意两个 ${}^{L}$ 



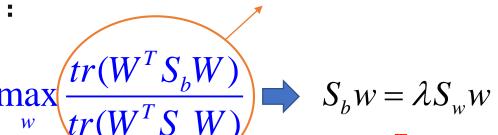
$$\begin{split} S_B &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{C} \sum_{j=1}^{C} p(i) p(j) (\mu_i - \mu_j) (\mu_i - \mu_j)^T \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{C} \sum_{j=1}^{C} p(i) p(j) (\mu_i \mu_i^T - \mu_i \mu_j^T - \mu_j \mu_i^T + \mu_j \mu_j^T) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu_i^T \sum_{j=1}^{C} p(j) - p(i) \mu_i \sum_{j=1}^{C} p(j) \mu_j^T - p(i) (\sum_{j=1}^{C} p(j) \mu_j) \mu_i^T - p(i) \sum_{j=1}^{C} p(j) \mu_j \mu_j^T \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu_i^T - p(i) \mu_i \mu^T - p(i) \mu \mu_i^T - p(i) \sum_{j=1}^{C} p(j) \mu_j \mu_j^T \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu_i^T - \mu \mu^T - \mu \mu^T - \sum_{j=1}^{C} p(j) \mu_j \mu_j^T \\ &= \sum_{i=1}^{C} p(i) (\mu_i \mu_i^T - \mu \mu^T) \\ &= \sum_{i=1}^{C} p(i) (\mu_i \mu_i^T - \mu \mu^T) + 2 \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu^T - \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu^T - \sum_{i=1}^{C} p(i) \mu_i \mu_i^T \\ &= \sum_{i=1}^{C} p(i) (\mu_i \mu_i^T - \mu_i \mu^T - \mu \mu_i^T + \mu \mu^T) \\ &= \sum_{i=1}^{C} p(i) (\mu_i - \mu) (\mu_i - \mu)^T \end{split}$$

#### · 多类LDA算法

- 常见的优化目标为:

Problem 1:

(迹比值最大化)



最大化投影后的距离

- Problem 1的求解较复杂,可以参考如下文献:

Shiming Xiang, Feiping Nie, Changshui Zhang. Learning a Mahalanobis distance metric for data clustering and classification. Pattern Recognition, 41(12), Pages 3600 – 3612, 2008

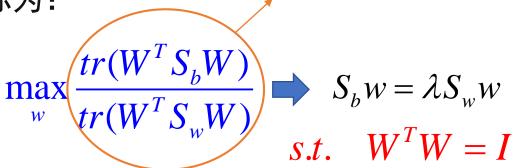


· 多类LDA算法

$$tr(A) = \sum_{t} A_{tt} \rightarrow \sum_{t} w_{t}^{T} S_{b} w_{t} = tr(W^{T} S_{b} W)$$

- 常见的的优化目标为:

Problem 1: (迹比值最大化)

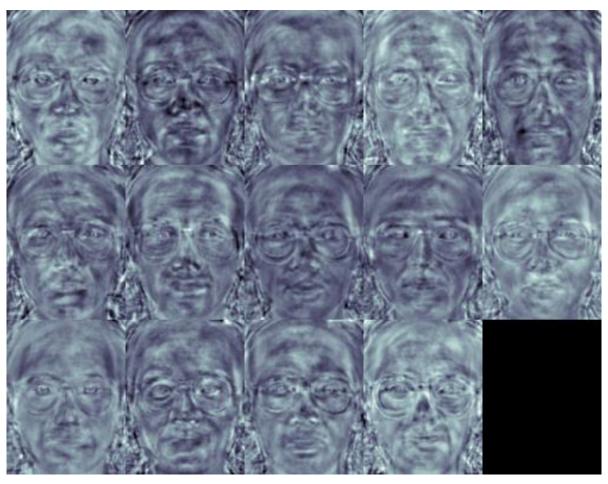


- Problem 1的求解较复杂,可以参考如下文献:

Shiming Xiang, Feiping Nie, Changshui Zhang. Learning a Mahalanobis distance metric for data clustering and classification. Pattern Recognition, 41(12), Pages 3600 – 3612, 2008



特征向量的物理意义Fisher Faces



https://blog.csdn.net/smartempire/article/details/23377385

- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题



• The re-computation of  $S_w$  and  $S_b$ 

$$S_{w} = \sum_{i=1}^{c} \sum_{j:y_{j}=i} (x_{j} - \mu_{i})(x_{j} - \mu_{i})^{T}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij}^{(w)}(x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} A_{ij}^{(b)}(x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} A_{ij}^{(b)}(x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

$$\sum_{i=1}^{c} \sum_{j:y_{j}=i} (x_{j} - \mu_{i})(x_{j} - \mu_{i})^{T} \qquad S_{b} = \sum_{i=1}^{c} n_{i} (\mu_{i} - \mu)^{T} (\mu_{i} - \mu)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij}^{(w)} (x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T} \qquad = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} A_{ij}^{(b)} (x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

$$\mu_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j: y_i = i} x_j$$

$$\mathbf{A}_{ij}^{(w)} = \begin{cases} \frac{1}{n_k}, & \text{if } y_i = y_j = k\\ 0, & \text{if } y_i \neq y_j \end{cases}$$

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{m} x_j$$

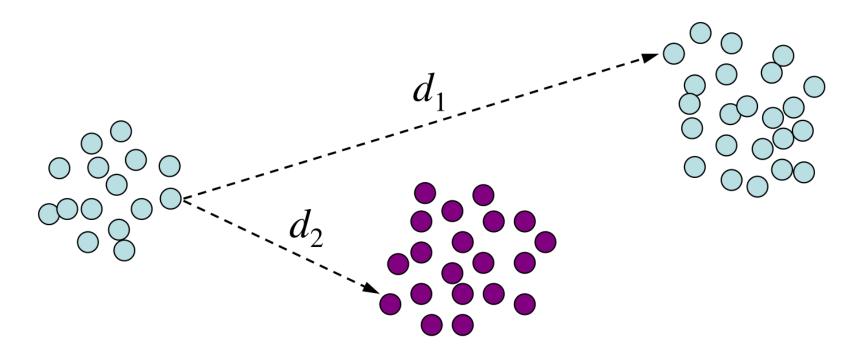
$$A_{ij}^{(b)} = \begin{cases} \frac{1}{n} - \frac{1}{n_k}, & \text{if } y_i = y_j = k\\ \frac{1}{n}, & \text{if } y_i \neq y_j \end{cases}$$

下标 $y_i$ 表示样本 $x_i$ 的类别标签,即 $y_i \in \{1,2,...c\}$ 。另外, $k \in \{1,2,...c\}$ 



#### • 局限性

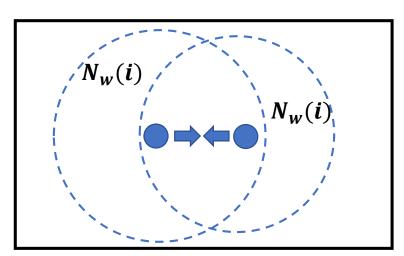
In each class, the distribution of data is Gaussian



We hope  $d_1 < d_2$ . But difficult, or impossible!

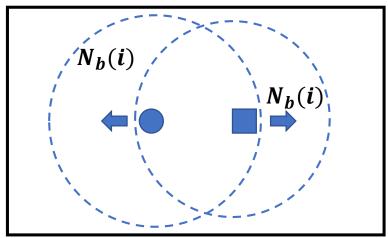


- Techniques of Local Analysis
  - Neighborhood constraints (方法一)
  - Locally weighting (方法二)
    - Weighting for 1-NN
    - Local Fisher discriminant analysis



Within class

#### Motivation



Between class



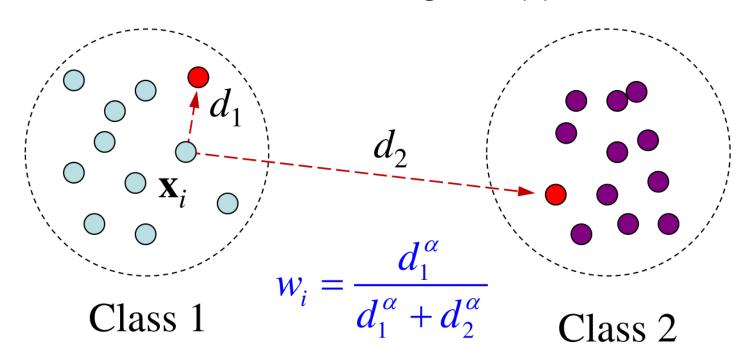
- Modify S<sub>w</sub> and S<sub>b</sub>
  - Neighborhood Constraints:

$$S_{w} = \sum_{\substack{y_{i} = y_{j} \\ x_{i} \in N(x_{i}), x_{i} \in N(x_{i})}} (x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

$$S_b = \sum_{\substack{y_i \neq y_j \\ x_i \in N(x_i), x_i \in N(x_i)}} (x_i - x_j)(x_i - x_j)^T$$

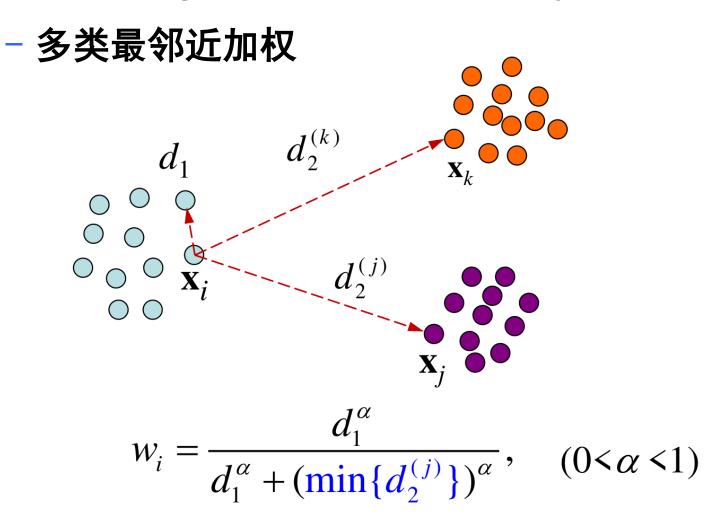


- Nearest Neighbor Discriminant Analysis, NNDA
  - 最邻近加权
    - A problem in neighborhood constraints is the selection of the number of nearest neighbors (k)





Nearest Neighbor Discriminant Analysis, NNDA





Nearest Neighbor Discriminant Analysis, NNDA

$$S_{w} = \sum_{\substack{y_{i} = y_{j} \\ x_{j} \in N_{1-nm}(x_{i}), i=1,2,\dots,n}} w_{i}(x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

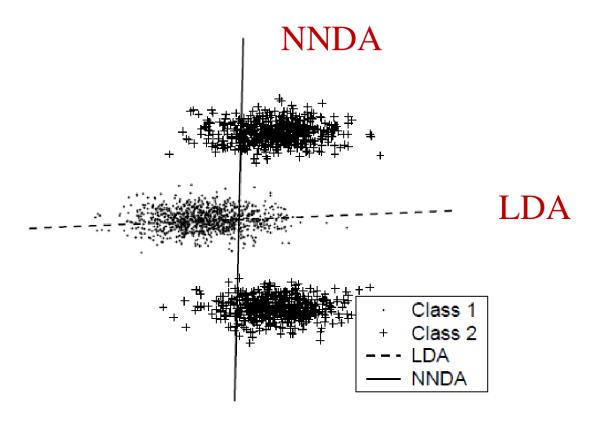
$$S_{b} = \sum_{\substack{y_{i} \neq y_{j} \\ x_{i} \in N_{1-nm}(x_{i}), i=1,2,\dots,n}} w_{i}(x_{i} - x_{j})(x_{i} - x_{j})^{T}$$

Xipeng Qiu, Lide Wu: Stepwise Nearest Neighbor Discriminant

Analysis . IJCAI 2005: 829-834



Nearest Neighbor Discriminant Analysis, NNDA



NNDA finds the correct projection direction, but LDA failed!



- Local Fisher Discriminant Analysis, LFDA
  - Motivation
    - LFDA does not impose far-apart data pairs
       of the same class to be close, by which local
       structure of the data tends to be preserved.
    - 邻域加权(Locally Weighting)

Masashi Sugiyama, Local Fisher Discriminant Analysis for Supervised Dimensionality Reduction, ICML, 2006



Step1:Construct an affine matrix for n data points:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } \mathbf{x}_j \text{ is a neighbor of } \mathbf{x}_i \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}, \text{ or }$$

$$A_{ij} = \begin{cases} \exp(-\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2 / (2\sigma^2)), & \text{if } \mathbf{x}_j \text{ is a neighbor of } \mathbf{x}_i \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$



• Step2: Modify  $S_w$  and  $S_b$ :

$$S_{w} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} A_{ij}^{(w)} (x_{i} - x_{j}) (x_{i} - x_{j})^{T} S_{b} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} A_{ij}^{(b)} (x_{i} - x_{j}) (x_{i} - x_{j})^{T}$$





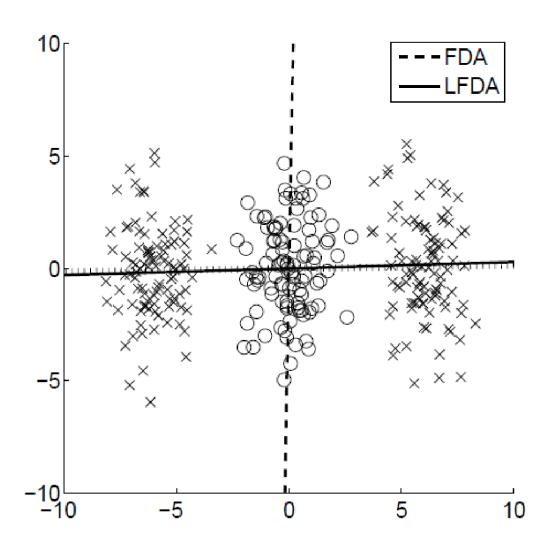
$$S_{w} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \overline{A}_{ij}^{(w)} (x_{i} - x_{j}) (x_{i} - x_{j})^{T} \left| S_{b} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} \overline{A}_{ij}^{(b)} (x_{i} - x_{j}) (x_{i} - x_{j})^{T} \right|$$

$$\overline{A}_{ij}^{(w)} = \begin{cases} A_{ij}/n_c, & \text{if } y_i = y_j = c \\ 0, & \text{if } y_i \neq y_j \end{cases} \qquad \overline{A}_{ij}^{(b)} = \begin{cases} A_{ij}\left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n_c}\right), & \text{if } y_i = y_j = c \\ \frac{1}{n}, & \text{if } y_i \neq y_j \end{cases}$$



# 2.6 局部线性判别分析

Demo





- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题

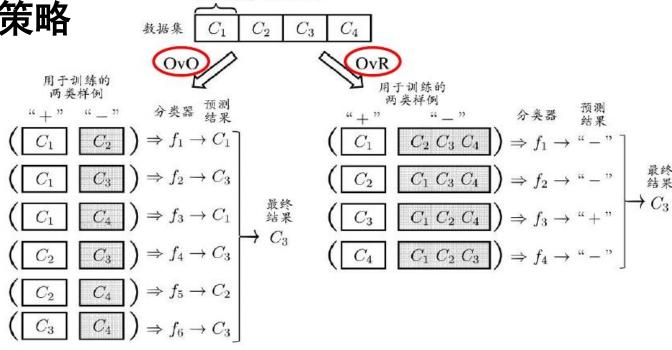


#### 引言

- 现实应用中,通常需要处理多分类问题。一些二分类方法可以直接推广到多分类问题。有此则难以从形式上一次性得到推广。
  - 一个基本策略是:利用二分类学习器的组合来解决 多分类问题。
  - 基本技术思路是"拆解法":在分类器构造(训练阶段),即将多分类任务拆为多个二分类任务。
     在测试阶段,对这些分类器的结果进行集成以获得最终的分类结果。



• 拆分策略



- 一对一(0v0):
  - N个类别两两配对,产生N(N-1)/2个分类器

属于类C1 的样例集合

- 一对其余(0vR):
  - 每次将一个类的样例作为正例,所有其他类的样 例作为反例来训练N个分类器

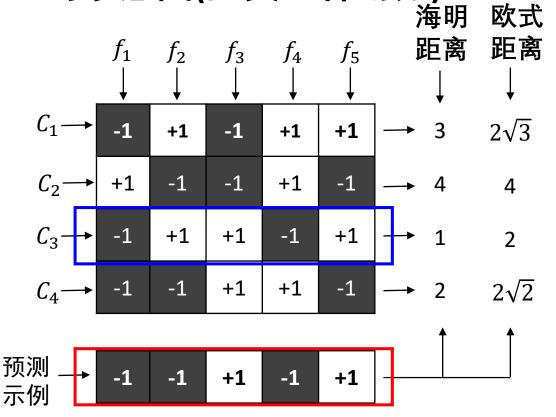


引用: 周志华《机器学习》课件

- 拆分策略
  - 多对多(MvM):
  - 每次将若干个类作为正例,若干个其它类 作为反例。
  - 一种常见方法"纠错输出码"(Error Correcting Output Codes, ECOC
  - 类别划分通过"编码矩阵" (coding matrix)指定。编码矩阵有多种形式,常见的主要有二元码, 三元码。



· 二元ECOC码示意图(四类五种划分)



计算海明距离的一种方法,就是对两个位串进行异或(xor)运算,并计算出异或运算结果中1的个数。



- 拆分策略
  - 多对多(MvM):
    - 每次将若干个类作为正例,若干个其它类作为反例。
    - 一种常见方法"纠错输出码"(Error Correcting Output Codes, ECOC

编码:对N个类别做M次划分,每次将一部分类别划分正类,一部分划为反类



产生M个训练集,可训练M 个分类器;每类分类器对 应一个长为M的编码(真实)



解码: M个分类器对测试 样本进行预测,这些预测 标记组成一个编码



产生长度为M的预 测结果编码



#### • ECOC码为什么会纠错?

- 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
- 但并不是编码的理论性能越好,分类性能就越好, 因为机器学习问题涉及很多因素。
- 编码越长,则分类器越多,训练时间越长。



- 2.1 基本形式
- 2.2 线性回归
- 2.3 对数几率回归
- 2.4 Softmax回归
- 2.5 线性判别分析
- 2.6 局部线性判别分析
- 2.7 多分类学习
- 2.8 类别不平衡问题



## 2.8 类别不平衡问题

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

- 基本策略——再缩放:

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

然而精确估计 $m^+/m^-$ 通常很难!

常见类别不平衡学习方法:

- 过采样
- 欠采样
- 國值移动



# 2.8 类别不平衡问题

- 过采样
  - 去除一些反例,来调整正反例比例(比如接近)
  - 缺点: 丢失了一些训练样本
  - 利用集成学习机制,将反例划分为若干不同的子 集合,训练、集成不同的学习器
- 欠采样
  - 增加一些正例,控制正反比例
  - 不能简单对正例进行重复采样, 否则会过拟合
- 阈值移动
  - 用原始数据集,决策时,用缩放的阈值

## 参考文献及其他资料

- 周志华. 《机器学习》. 清华大学出版社, 2015. 北京
- 李航. 《统计学习方法》. 清华大学出版社, 2012年3月出版
- 阿斯顿 · 张, 李沐《动手学深度学习》. 人民邮电出版, 社 2019年6月出版
- 李宏毅《机器学习》课程网站
  http://speech.ee.ntu.edu.tw/~tlkagk/courses\_ML20.html

#### 致谢

- 感谢向世明老师的20版PPT作为原始材料
- 感谢徐雨婷与段俊贤对本PPT的制作与修改

# Thank All of You! (Questions?)

赫然

rhe@nlpr.ia.ac.cn

智能感知与计算研究中心(CRIPAC) 中科院自动化研究所・模式识别国家重点实验室





### **竹录**: - 用牛顿法求最优解

**Newton's Method:** Solving a system of nonlinear equations F(x) = 0

- > We can not solve arbitrary "nonlinear equations" very easily.
- ➤ We can solve "linear equations" using the techniques from linear algebra.
- We linearize the system of "nonlinear equations" with a first-order Taylor and solve the obtained "linear system", and then iterate.
  - (0) k=0,
  - (1) Linear approximation at point  $x_k$ :

$$y = F(x_k) + \nabla F(x_k)^T (x - x_k)$$

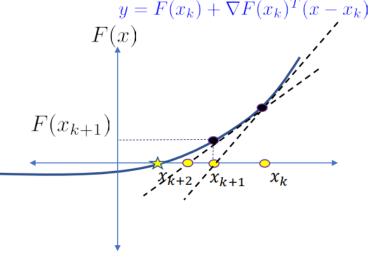
(2) Solve linear system:

$$y = 0 \longrightarrow F(x_k) + \nabla F(x_k)'(x - x_k) = 0$$

$$\Rightarrow (x - x_k) = -(\nabla F(x_k))^{-1} F(x_k)$$

$$\Rightarrow x_{k+1} = x_k - (\nabla F(x_k))^{-1} F(x_k)$$

(3) Go to Step (1)



二阶泰  
勒展开 
$$f\left(x\right) = f\left(x^{(k)}\right) + g_k^T\left(x - x^{(k)}\right) + \frac{1}{2}\left(x - x^{(k)}\right)^T H\left(x^{(k)}\right)\left(x - x^{(x)}\right)$$

