第五章

线性判别函数

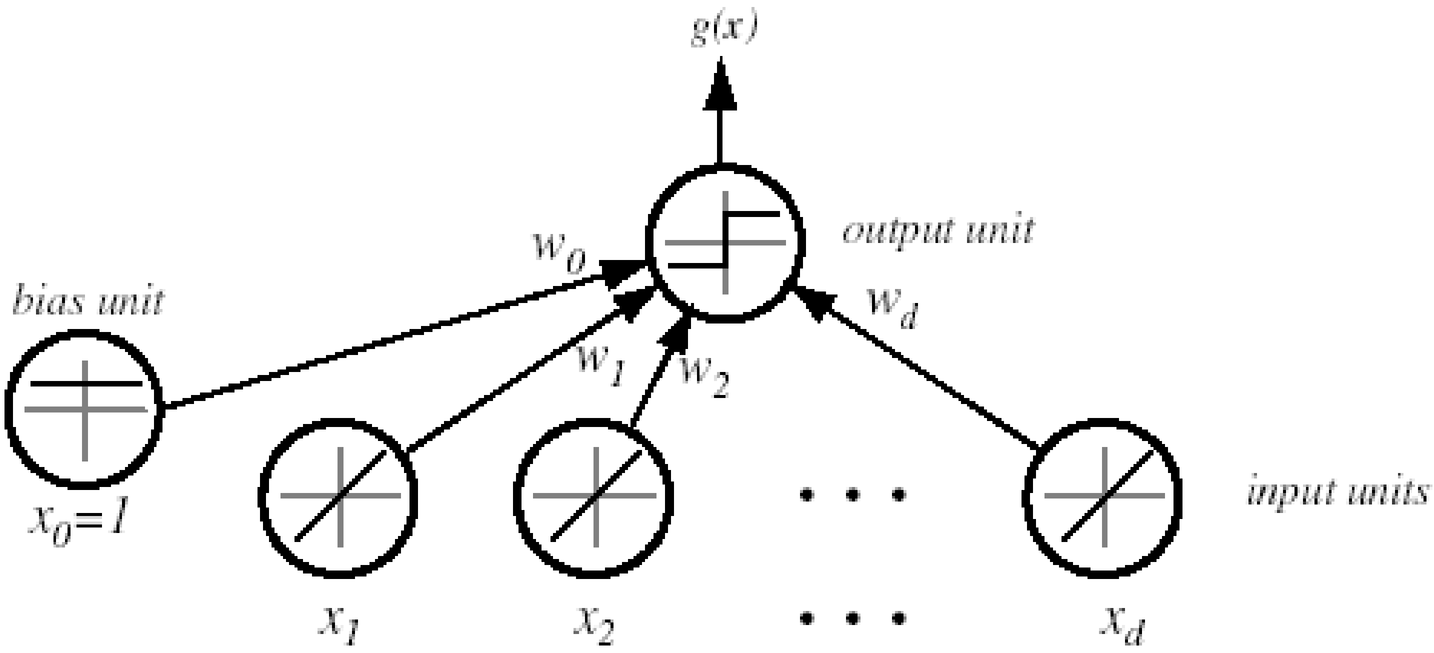
线性判别函数

- 已知判别函数的参数形式，用训练的方法来估计判别函数的参数值；
- 不要求知道有关的概率密度函数的确切的参数形式，注意在高斯模型且协方差相等情形下判别函数形式为线性；
- 判别函数形式为线性（即样本分量的某种线性函数）；
- 特点是简单，然而判别结果未必为最优。
- 寻找线性判别函数的问题将被形式化为极小化准则问题，通常采用梯度下降法来求解。

两类情况的线性判别函数

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^t\mathbf{x} + \mathbf{w}_0$$

$\mathbf{w}$称为权向量，$\mathbf{w}_0$为偏置



而c类问题将有c个线性判别函数。

判定面：

如果 $\mathbf{x}_1$ 和 $\mathbf{x}_2$ 都在判定面 $g(\mathbf{x})=0$上,则

$$\mathbf{w}^t(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)=0 \quad (正交)$$

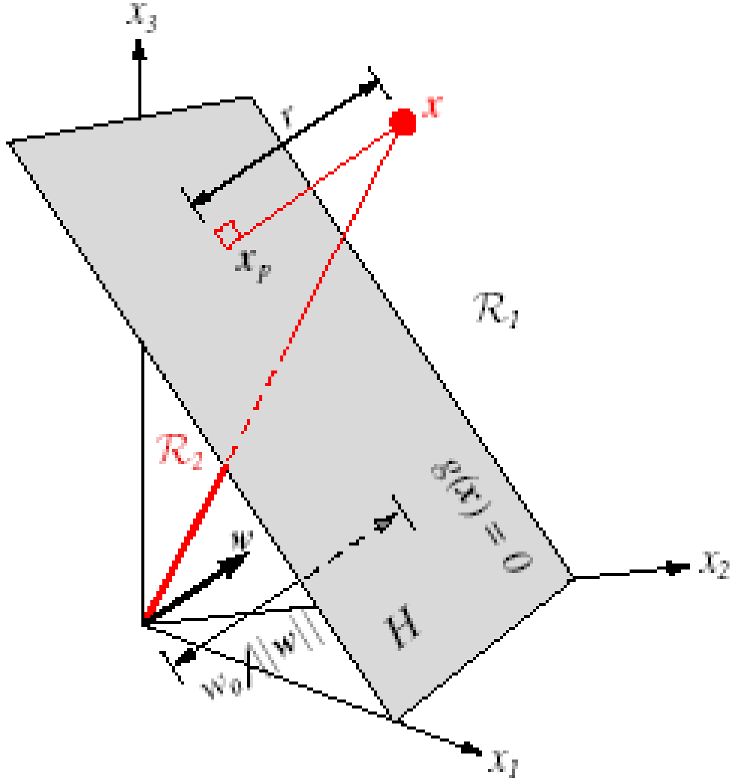
$$\mathbf{x}=\mathbf{x}_p+r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$$

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^t(\mathbf{x}_p+r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|})+w_0$$

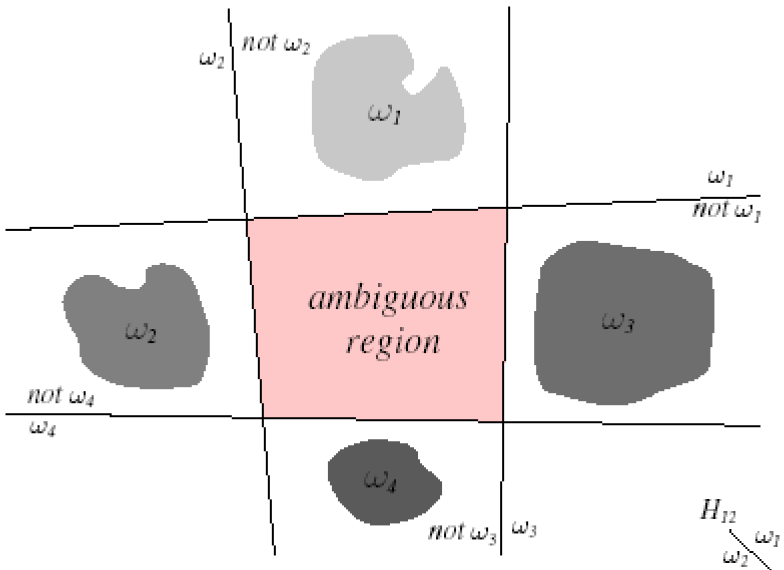
$$=r\|\mathbf{w}\|$$

$$r=\frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$$

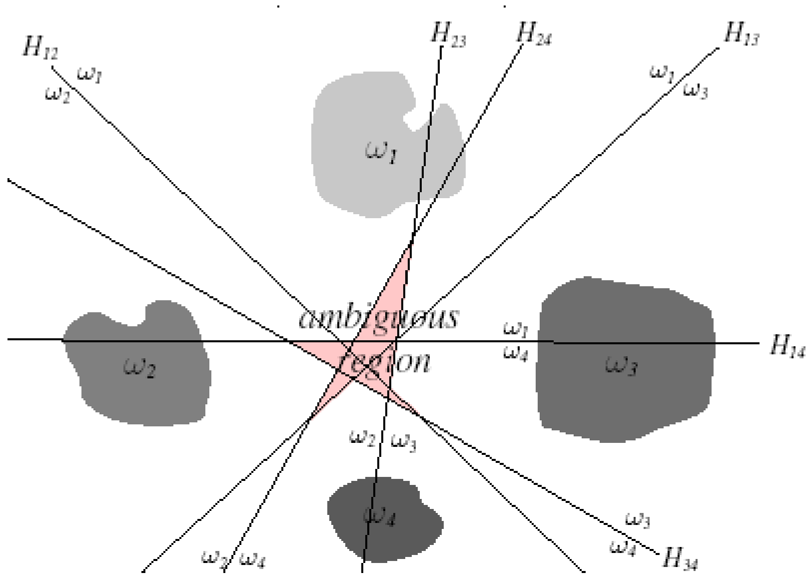
$r>0$, 正侧； $r<0$为负侧。



多类情况

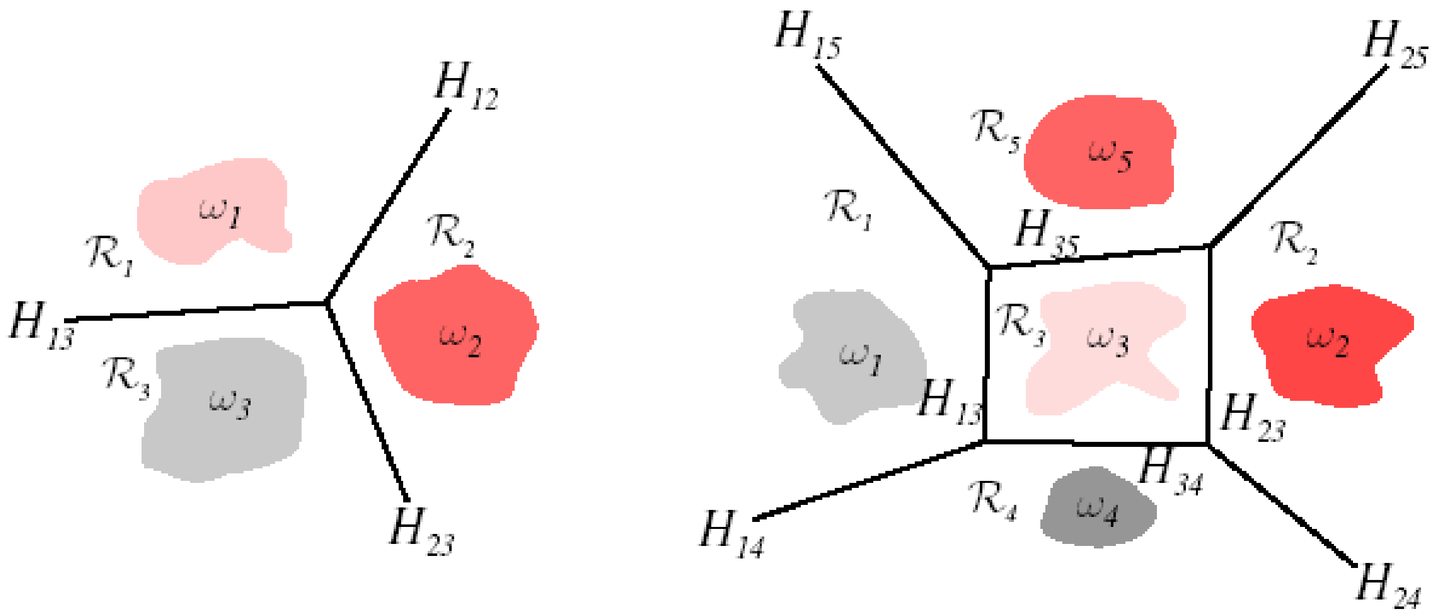


not ω_2
ω_2
ω_1
ω_1
not ω_1
ambiguous region
ω_2
ω_3
not ω_4
ω_4
ω_4
not ω_3
ω_3



H_{12}
H_{23}
H_{24}
H_{13}
H_{14}
H_{34}
ambiguous region
ω_1
ω_2
ω_3
ω_4

线性机



$$g_i(x) = w_i^t x + w_{i0}, \quad i = 1, \cdots, c$$

如果对所有的$j \neq i$有 $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x})$,则判定

$x \in \omega_i$

相邻区域的分界是超平面H_{ij}的一部分:

$$g_i(\mathbf{x}) = g_j(\mathbf{x}) \quad \text{or} \quad (\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j)^t x + (w_{i0} - w_{j0}) = 0$$

线性机

- 线性机的判别区域是凸的
  - 限制了分类器的适应性和精确性
- 每个判别区域是单连通
  - 适应条件概率密度 $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ 为单峰的问题

二次、广义线性判别函数

二次判别函数

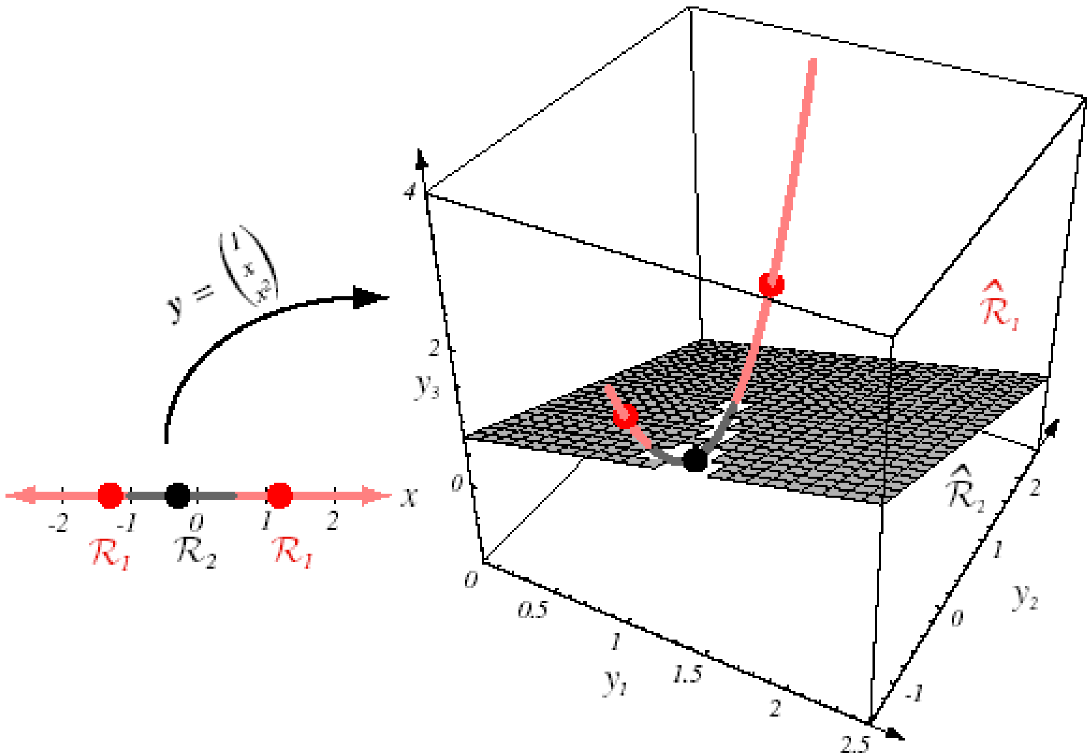
$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} w_{ij} x_i x_j$$

广义线性判别函数

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i y_i(\mathbf{x}) \text{ or } g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^t \mathbf{y}$$

例子

$$g(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2, \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}$$



广义判别函数的优缺点

- 优点
  - 在高维空间，能得到简单的判定面
- 缺点
  - 维数灾难
  - 例如，一个完整的二次型判别函数包含项的个数是 $(d+1)(d+2)/2$
  - 要求大量训练样本，

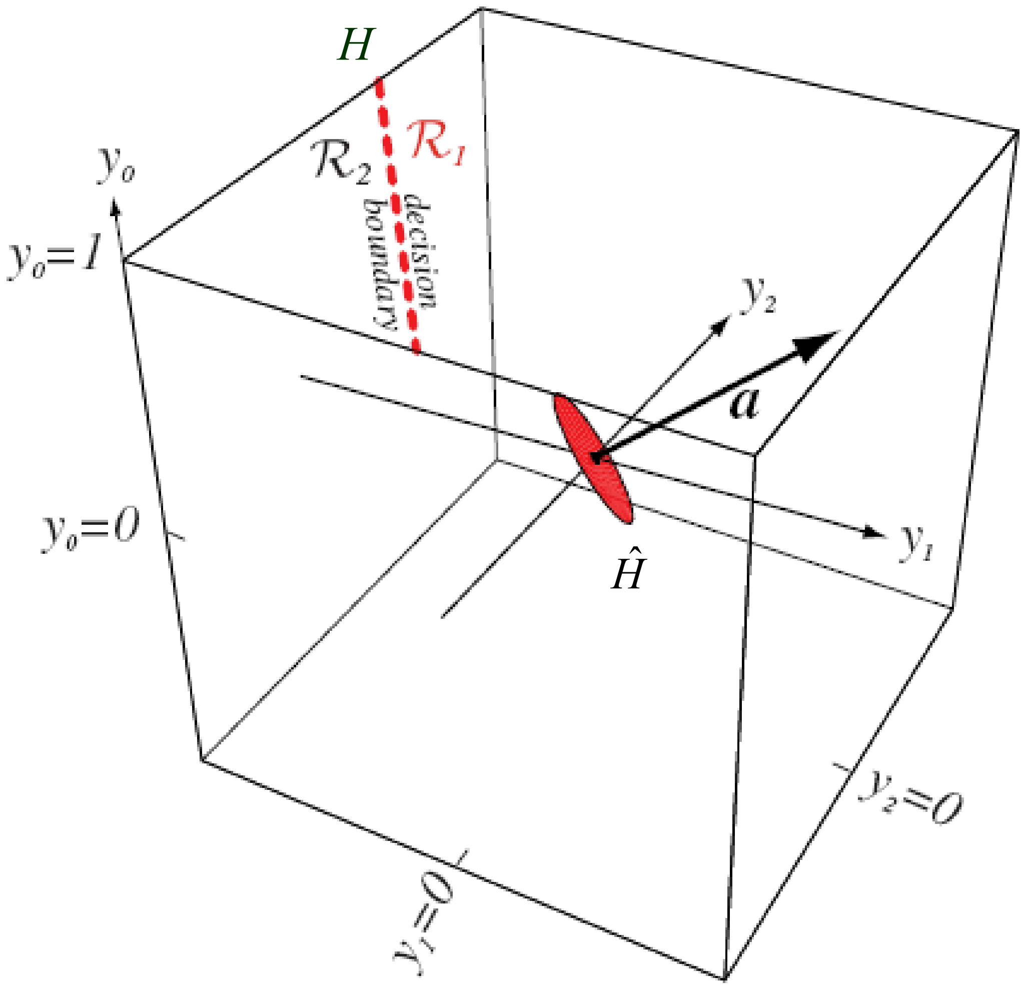
$\hat{d} > d$, 代表自由度

增广向量（Augmented Vectors）

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i = \sum_{i=0}^{d} w_i x_i, \quad x_0 = 1$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{bmatrix}$$

增广空间的判别面



y 到超平面 $\hat{H}$的距离：

$$|\mathbf{a}^t\mathbf{y}|/\|\mathbf{a}\| = |g(\mathbf{x})|/\|\mathbf{a}\|$$

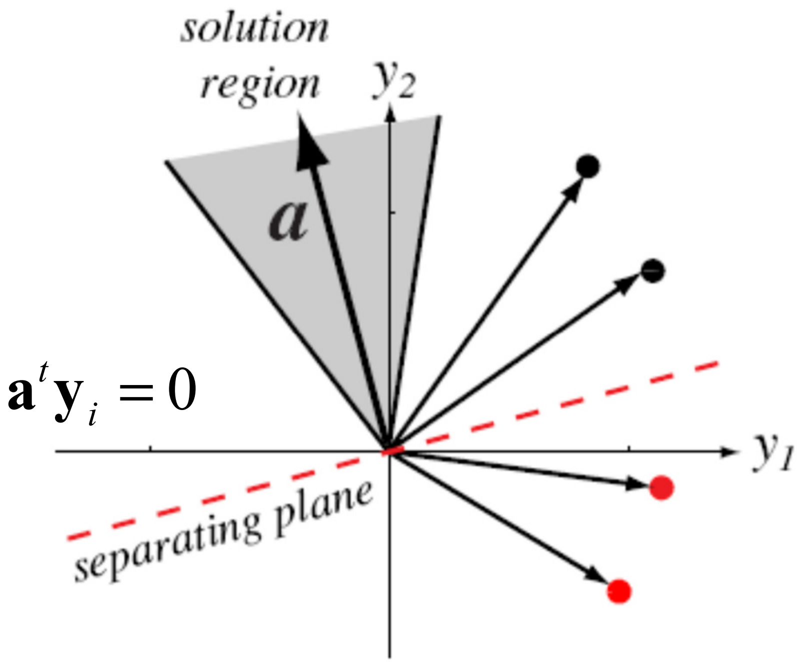
x 到 H的距离：

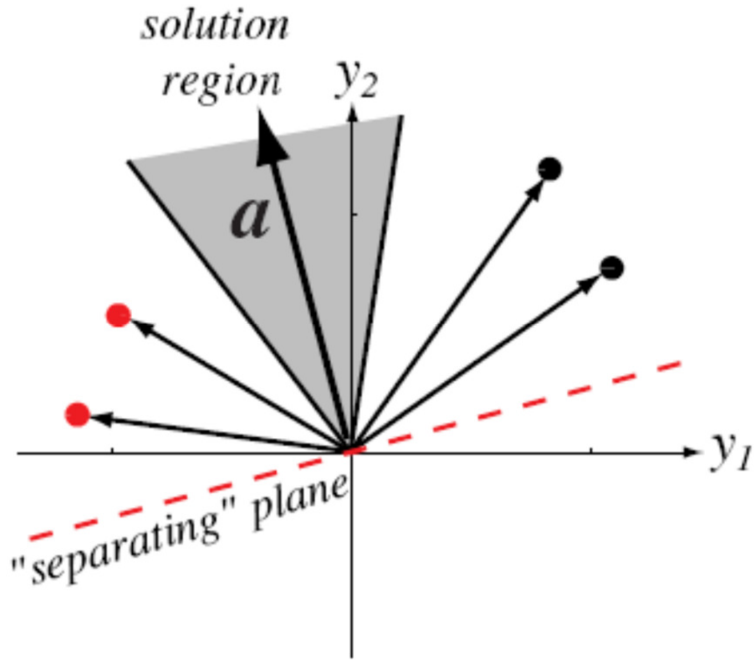
$$|g(\mathbf{x})|/\|\mathbf{w}\| \geq |g(\mathbf{x})|/\|\mathbf{a}\|$$

两类线性可分的情况

- N个样本: $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$
- 类标: ω_1, ω_2
- 目标：确定判别函数 $g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^t\mathbf{y}$ 的权向量$\mathbf{a}$
- 线性可分
  - 存在能将所有样本正确分类的权向量
- 规范化
- 分离向量 (解向量)

权空间 和 解区域



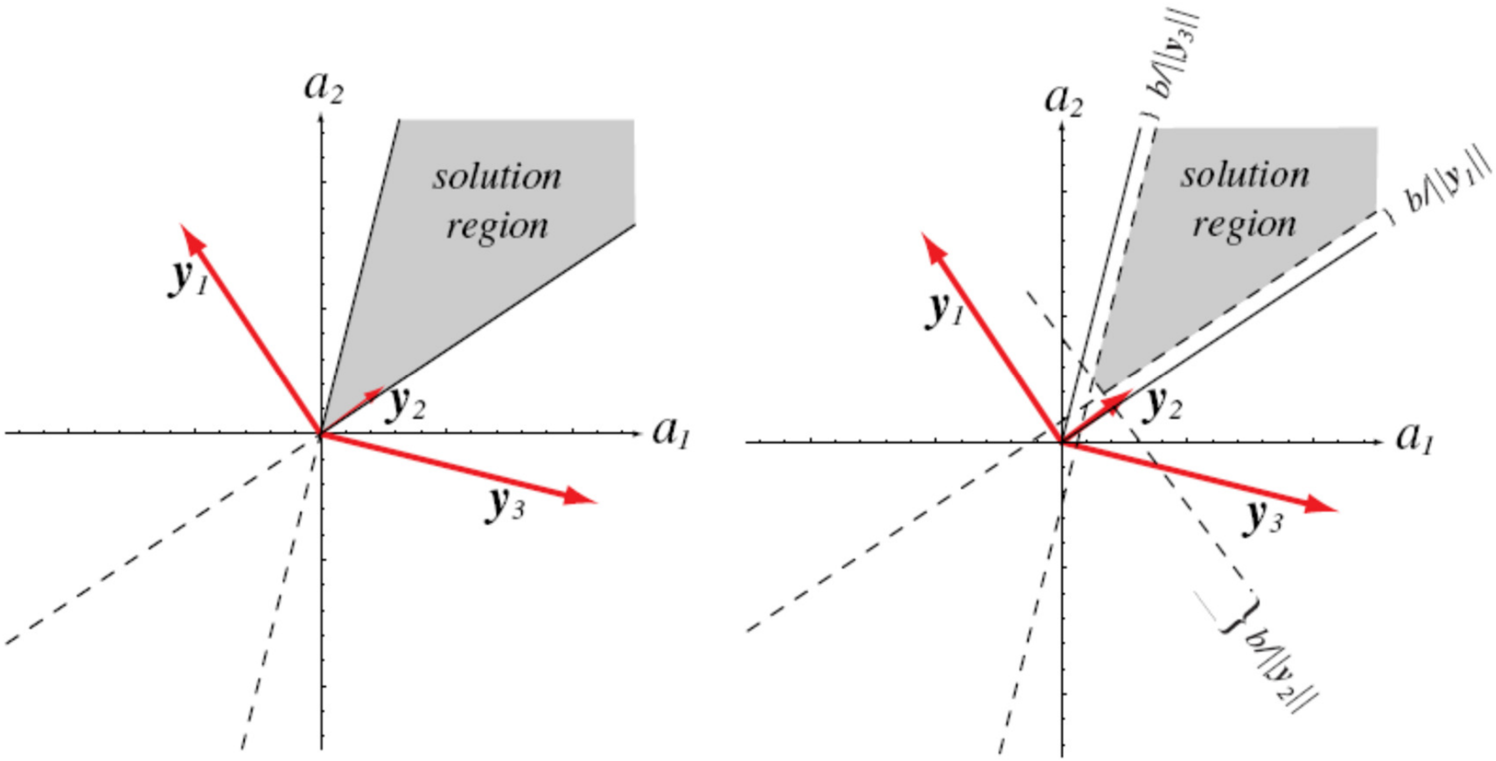


$$\omega_1 : \mathbf{a}^t\mathbf{y}_i > 0$$

$$\omega_2 : \mathbf{a}^t\mathbf{y}_i < 0$$

for all $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i > 0$

边沿裕量的作用



$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{y} \geq b > 0$$

基本梯度下降算法

定义准则函数 $J(\mathbf{a})$

如果**a**是解向量，则$J(\mathbf{a})$达到最小化

a(k+1)=a(k)-η(k)∇J(a(k))

初始化 $\mathbf{a}$ 以及阈值 $\theta, \eta(\bullet), k \leftarrow 0$

do $k \leftarrow k+1$

$a \leftarrow a - \eta(k)\nabla J(\mathbf{a})$

until $|\eta(k)\nabla J(\mathbf{a})| < \theta$

return **a**

end

学习率的选择：最小二阶逼近

$$J(\mathbf{a}) \approx J(\mathbf{a}(k)) + \nabla J^t (\mathbf{a} - \mathbf{a}(k)) + \frac{1}{2}(\mathbf{a} - \mathbf{a}(k))^t \mathbf{H}(\mathbf{a} - \mathbf{a}(k))$$

$$\mathbf{H}: \text{Hessian矩阵}, H_{ij} = \left.\frac{\partial^2 J}{\partial a_i \partial a_j}\right|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}(k)}$$

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) - \eta(k)\nabla J(\mathbf{a}(k))$$

$$J(\mathbf{a}(k+1)) \approx J(\mathbf{a}(k)) - \eta(k)\|\nabla J\|^2 + \frac{1}{2}\eta^2(k)\nabla J^t \mathbf{H} \nabla J$$

$$\text{选择}\,\eta(k) = \frac{\|\nabla J\|^2}{\nabla J^t \mathbf{H} \nabla J}\,\text{使得}\,J(\mathbf{a}(k+1))\,\text{最小化}$$

牛顿下降法

$$J(\mathbf{a}) \approx J(\mathbf{a}(k)) + \nabla J^t(\mathbf{a}-\mathbf{a}(k)) + \frac{1}{2}(\mathbf{a}-\mathbf{a}(k))^t \mathbf{H}(\mathbf{a}-\mathbf{a}(k))$$

$\mathbf{H}$: Hessian矩阵, $H_{ij} = \left.\dfrac{\partial^2 J}{\partial a_i \partial a_j}\right|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}(k)}$

选择 $\mathbf{a} = \mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) - \mathbf{H}^{-1}\nabla J$ 使得 $J(\mathbf{a})$ 最小化

初始化 $\mathbf{a}$ 和阈值 θ

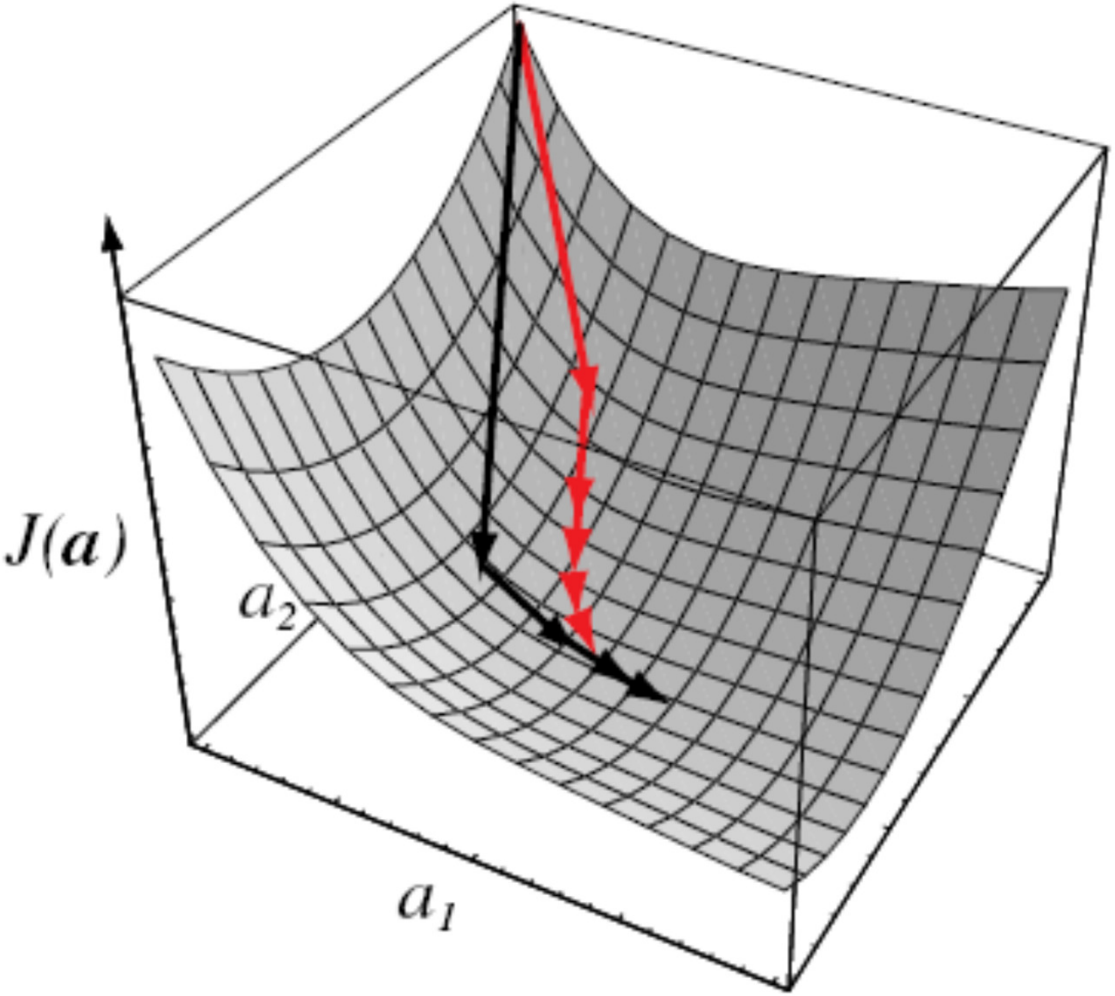
do $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} - \mathbf{H}^{-1}\nabla J(\mathbf{a})$

until $\left|\mathbf{H}^{-1}\nabla J(\mathbf{a})\right| < \theta$

return $\mathbf{a}$

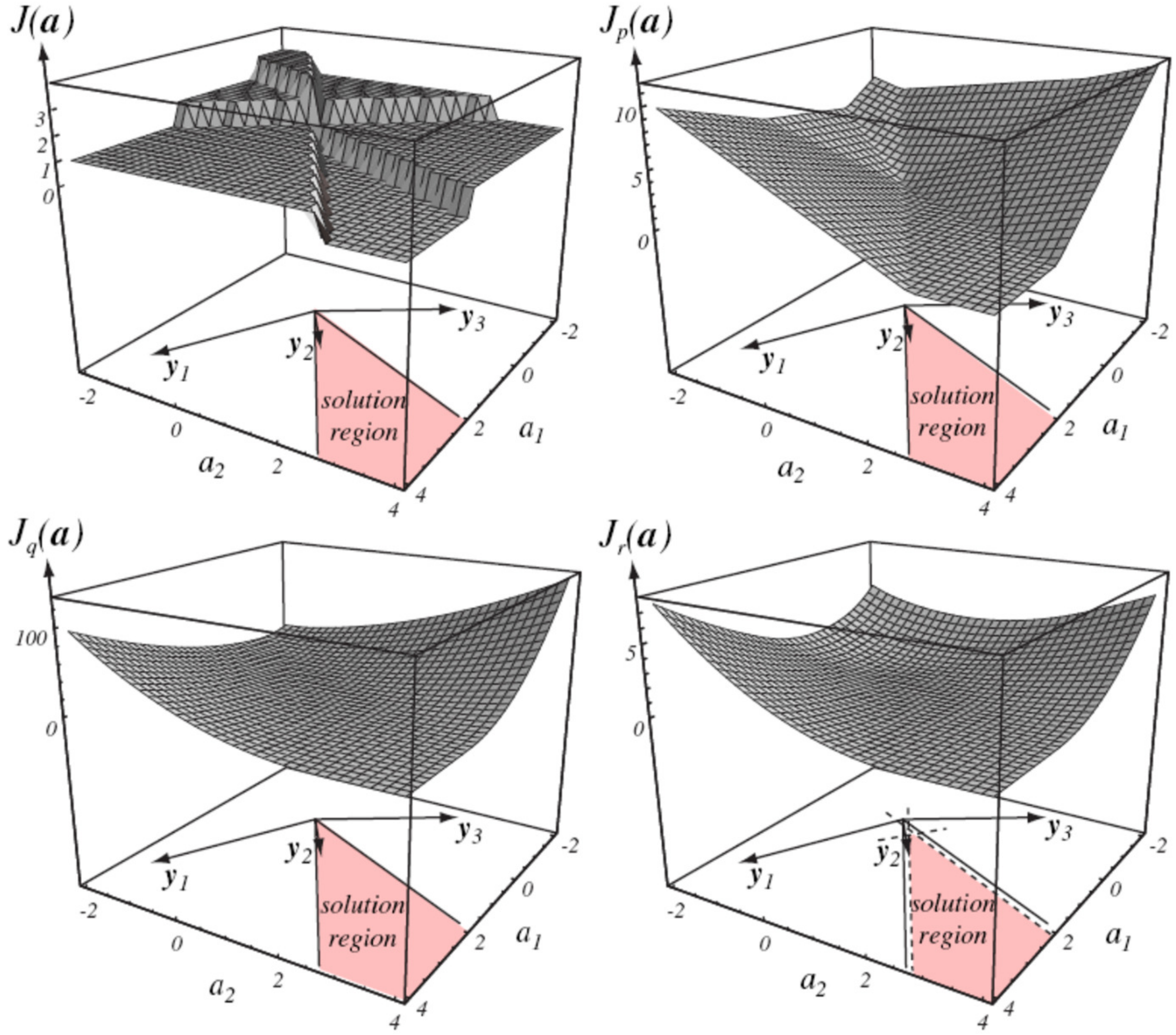
end

梯度下降 vs. 牛顿算法



牛顿算法计算H逆矩阵的时间开销大

四种学习准则



批处理感知器算法

$$J_p(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y}\left(-\mathbf{a}^t\mathbf{y}\right),\quad Y: 被\mathbf{a}错分的样本集$$

$$\nabla J_p=\sum_{\mathbf{y}\in Y}(-\mathbf{y}),\quad \mathbf{a}(k+1)=\mathbf{a}(k)+\eta(k)\sum_{\mathbf{y}\in Y}\mathbf{y}$$

初始化 $\mathbf{a},\ \eta(\bullet)$, 准则 $\theta,\ k\leftarrow 0$

　　do $k\leftarrow k+1$

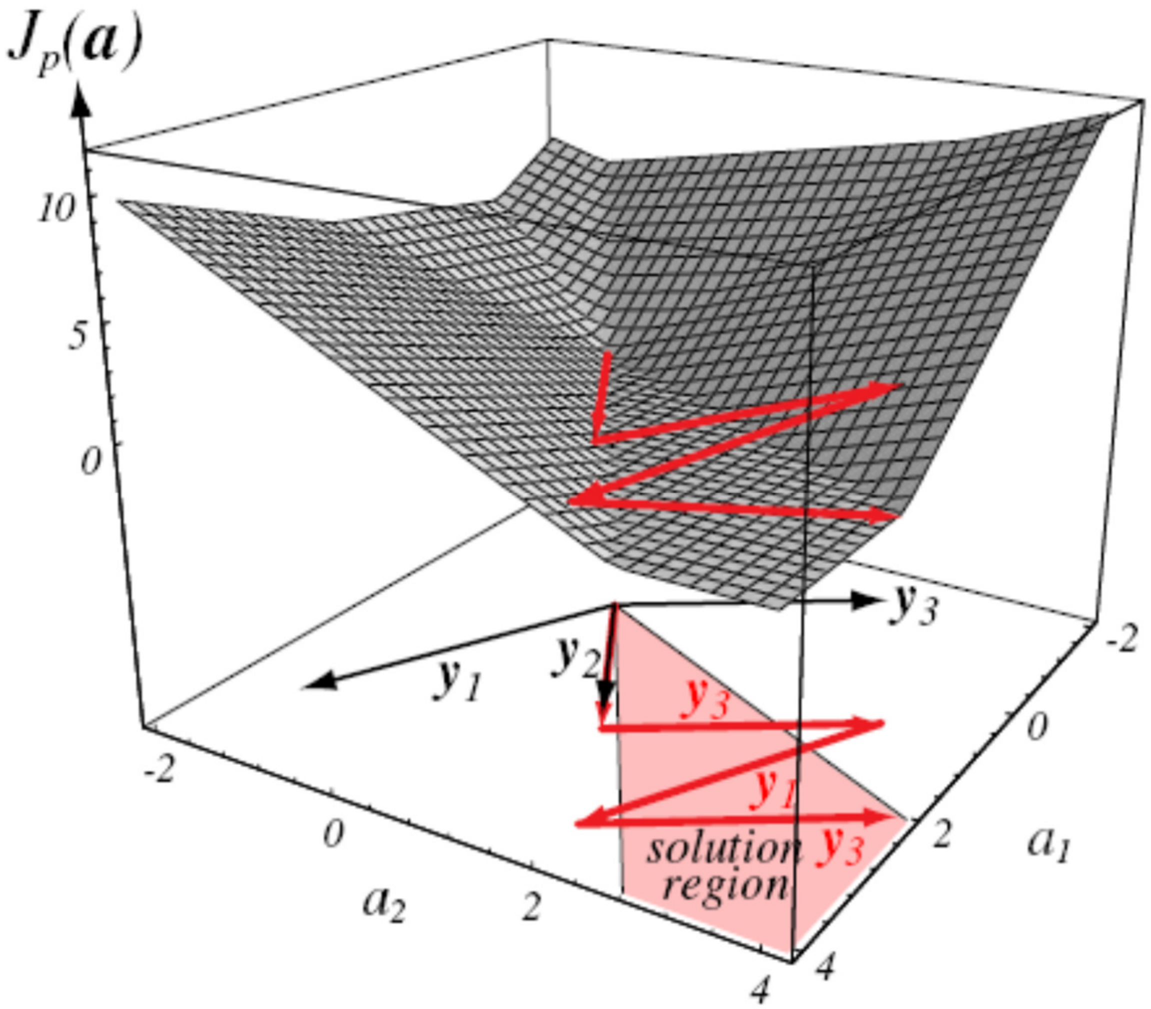
　　$\mathbf{a}\leftarrow\mathbf{a}+\eta(k)\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}$

　　until $\left|\eta(k)\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}\right|<\theta$

　　return $\mathbf{a}$

end

批处理感知器



固定增量单样本感知器

begin

初始化 $\mathbf{a}, k \leftarrow 0$

do $k \leftarrow (k+1) \bmod n$

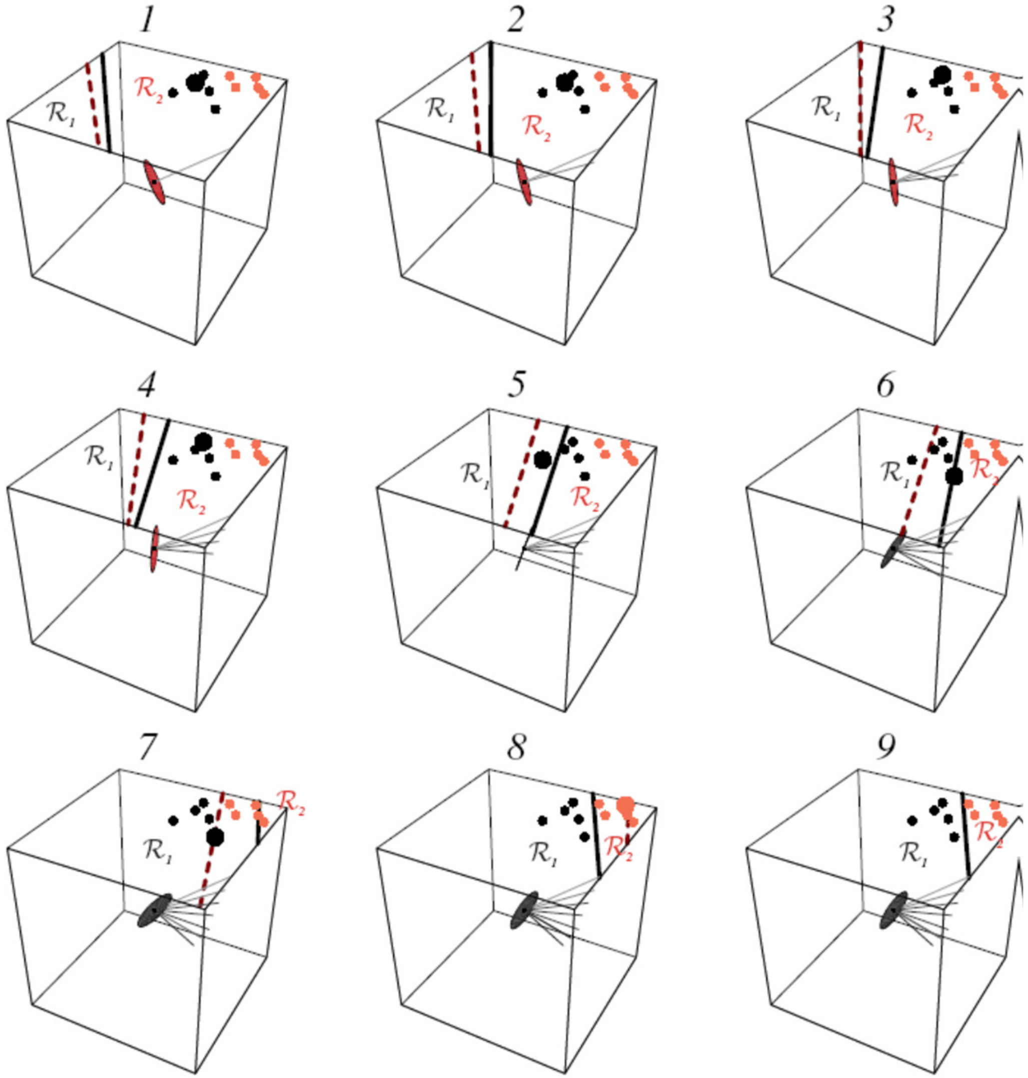
if $\mathbf{y}_k$ 被 $\mathbf{a}$ 错分， then $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \mathbf{y}_k$

until 所有模式被正确分类

return $\mathbf{a}$

end

固定增量单样本感知器



定理 5.1：如果训练样本是线性可分，则固定增量单样本感知器算法给出的权向量序列必定终止于某个解向量。

设$\hat{\mathbf{a}}$为任意的解向量，则对任何的i有$\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i > 0$

设α为一正的比例因子，则有

$$\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}} = \left(\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right)+\mathbf{y}^k$$

$$\left\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right\|^2 = \left\|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right\|^2 + 2\left(\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right)^t\mathbf{y}^k + \left\|\mathbf{y}^k\right\|^2$$

由于$\mathbf{y}^k$为被错分，固$\mathbf{a}(k)^t\mathbf{y}^k < 0$，所以

$$\left\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right\|^2 \le \left\|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\right\|^2 - 2\alpha\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}^k + \left\|\mathbf{y}^k\right\|^2$$

设β为模式向量的最大长度，即

$\beta^2 = \max_i \left\|\mathbf{y}_i\right\|^2$，并令$\gamma$为解向量与所有模式向量最小的内积，即

$$\gamma = \min_i\left[\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i\right] > 0$$

定理 5.1

得到不等式

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 \le \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - 2\alpha\gamma + \beta^2$$

选择$\alpha = \dfrac{\beta^2}{\gamma}$，就有

$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 \le \|\mathbf{a}(k)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - \beta^2$，过了k步矫正后

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 \le \|\mathbf{a}(1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2 - k\beta^2$$

平方距离非负，经过不超k_0次矫正后矫正将终止，其中

$$k_0 = \frac{\|\mathbf{a}(1)-\alpha\hat{\mathbf{a}}\|^2}{\beta^2}$$

难点：

- 取决于与解向量接近正交的样本

$$\mathbf{a}(1) = 0$$

$$k_0 = \frac{\alpha^2 \|\hat{\mathbf{a}}\|^2}{\beta^2} = \frac{\beta^2 \|\hat{\mathbf{a}}\|^2}{\gamma^2} = \frac{\max_i \|\mathbf{y}_i\|^2 \|\hat{\mathbf{a}}\|^2}{\min_i \left[\mathbf{y}_i^t \hat{\mathbf{a}}\right]^2}$$

- 样本几乎共面

带裕量的变增量感知器

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y} \left(b - \mathbf{a}^t\mathbf{y}\right),\quad Y:\text{被}\mathbf{a}\text{错分的样本集}$$

可以证明当样本线性可分，如果

$$\eta(k) \geq 0,\quad \lim_{m\to\infty} \sum_{k=1}^{m} \eta(k) = \infty,\quad \lim_{m\to\infty} \frac{\sum_{k=1}^{m} \eta^2(k)}{\left(\sum_{k=1}^{m} \eta(k)\right)^2} = 0$$

$$e.g.,\quad \eta(k) \sim 1/k$$

则$a(k)$收敛于一个解向量。_

初始化 $\mathbf{a}$ 、阈值 θ, 裕量 $b, \eta(\bullet), k \leftarrow 0$

  do $k \leftarrow (k+1) \bmod n$

    if $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_k \leq b$ then $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \eta(k)\mathbf{y}_k$

  until $\mathbf{a}^t\mathbf{y}_i > b$ for all $i = 1, \cdots, n$

  return $\mathbf{a}$

end

批处理变增量感知器

initialize $\mathbf{a}$, $\eta(\bullet)$, $k \leftarrow 0$

　do $k \leftarrow (k+1) \bmod n$

　　$Y_k = \{\ \}$

　　$j \leftarrow 0$

　　do $j \leftarrow j+1$

　　　if $\mathbf{y}_j$ 被错分类 then 把 $\mathbf{y}_j$ 加进 Y_k

　　until $j = n$

　　$\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \eta(\mathrm{k}) \sum_{\mathbf{y} \in Y_k} \mathbf{y}$

　until $Y_k = \{\ \}$

　return $\mathbf{a}$

end

理论与实践

- 理论
  - 对任何有限的可分样本集，对任意的初始权向量，对任意非负的裕度，对任意符合条件的比例因子，都能得到解。
- 实践
  - 边沿裕度 b 最好选择接近 $\eta(k)\|\mathbf{y}^k\|^2$
  - $\mathbf{y}^k$ 分量的比例因子对算法会产生很大的影响

平衡 Winnow 算法

initialize $\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^-, \eta(\bullet), k \leftarrow 0, \alpha > 1$

$z_k = \mathrm{Sgn}[\mathbf{a}^{+t}\mathbf{y}_k - \mathbf{a}^{-t}\mathbf{y}_k]$---（判别模式是否被错分）

if $z_k = 1$ then $a_i^+ \leftarrow \alpha^{+y_i} a_i^+, a_i^- \leftarrow \alpha^{-y_i} a_i^-$ for all i

if $z_k = -1$ then $a_i^+ \leftarrow \alpha^{-y_i} a_i^+, a_i^- \leftarrow \alpha^{+y_i} a_i^-$ for all i

return $\mathbf{a}^+, \mathbf{a}^-$

end

其中，α^{+y_i}表示增加因子，$\alpha^{+y_i} > 1;$

α^{-y_i}表示减少因子，$1 > \alpha^{+y_i} > 0.$

平衡 Winnow 算法的优点

- 在训练过程中，两个候选权向量分别朝各自的恒定方向运动
  - 两个向量的“间隔”始终不会变大
  - 收敛性比感知器收敛性定理还要更加一般化
- 通常比感知器算法收敛得更快
  - 在有大量不相关或冗余特征的情况下尤其明显

松弛算法：

$$J_q(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y} \left(\mathbf{a}^t \mathbf{y}\right)^2$$

$$J_r(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{y}\in Y} \frac{\left(\mathbf{a}^t \mathbf{y} - b\right)^2}{\|\mathbf{y}\|^2}$$

$$\nabla J_r = \sum_{\mathbf{y}\in Y} \frac{\mathbf{a}^t \mathbf{y} - b}{\|\mathbf{y}\|^2} \mathbf{y}$$

批处理理裕量松弛算法

$$\text{initialize}\ \mathbf{a}, \eta(\bullet), b, k \leftarrow 0$$

$$\quad \text{do}\ k \leftarrow (k+1) \bmod n$$

$$\qquad Y_k = \{\ \}, \quad j \leftarrow 0$$

$$\quad \text{do}\ j \leftarrow j+1$$

$$\qquad \text{if}\ \mathbf{a}^t \mathbf{y}^j \le b\ \text{then 把}\ \mathbf{y}^j\ \text{加进}\ Y_k$$

$$\quad \text{until}\ j = n$$

$$\quad \mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \eta(k) \sum_{\mathbf{y} \in Y_k} \frac{b - \mathbf{a}^t \mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|^2} \mathbf{y}$$

$$\quad \text{until}\ Y_k = \{\ \}$$

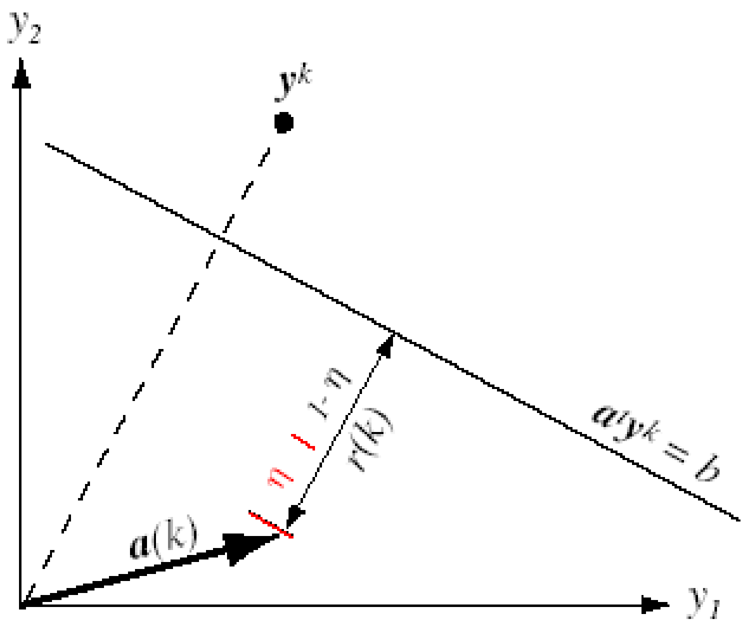
$$\quad \text{return}\ \mathbf{a}$$

$$\text{end}$$

单样本裕量松弛算法

$$
\begin{aligned}
&\text{initialize } \mathbf{a}, \eta(\bullet), k \leftarrow 0 \\
&\quad \text{do } k \leftarrow (k+1) \bmod n \\
&\qquad \text{if } \mathbf{a}^t \mathbf{y}^k \le b \text{ then } \mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \eta(k) \frac{b - \mathbf{a}^t \mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}\|^2} \mathbf{y}^k \\
&\quad \text{until } \mathbf{a}^t \mathbf{y}^k > b \text{ for all } \mathbf{y}^k \\
&\quad \text{return } \mathbf{a} \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

几何解释

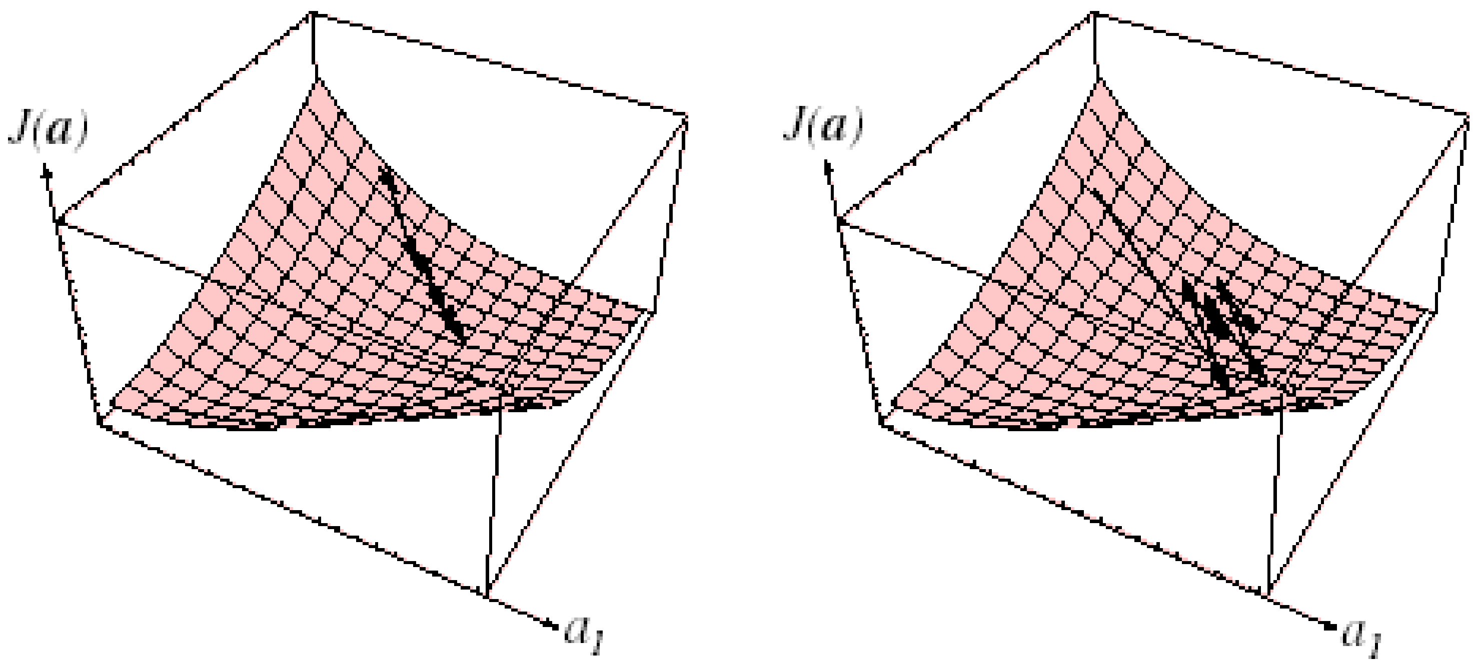


$$r(k) = \frac{b - \mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}\|^2}$$

$$\mathbf{a}^t(k+1)\mathbf{y}^k - b = (1-\eta)\left[\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k - b\right]$$

其中, $\eta < 1$称为欠松弛, $\eta > 1$称为过松弛.

欠松弛 和 过松弛



收敛性证明

$$\mathbf{a}(k+1)=\mathbf{a}(k)+\eta\frac{[b-\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k]}{\|\mathbf{y}^k\|^2}\mathbf{y}^k$$

因为

$$\|\mathbf{a}(k+1)-\hat{\mathbf{a}}\|^2$$

$$=\|\mathbf{a}(k)-\hat{\mathbf{a}}\|^2-2\eta\frac{[b-\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k]}{\|\mathbf{y}^k\|^2}[\hat{\mathbf{a}}-\mathbf{a}(k)]^t\mathbf{y}^k$$

$$+\eta^2\frac{[b-\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k]^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}$$

又$[\hat{\mathbf{a}}-\mathbf{a}(k)]^t\mathbf{y}^k > b-\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k \geq 0 \quad (\because \hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}^k > b)$

所以$\|\mathbf{a}(k+1)-\hat{\mathbf{a}}\|^2 \leq \|\mathbf{a}(k)-\hat{\mathbf{a}}\|^2-\eta(2-\eta)\dfrac{[b-\mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}^k]^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}$

收敛性证明

限制$0<\eta<2$

当$k\to\infty$, $\|\mathbf{a}(k)-\hat{\mathbf{a}}\|$ 到达一个有限的距离 $r(\hat{\mathbf{a}})$

对解区域内的所有 $\hat{\mathbf{a}}$

假设 $\mathbf{a}'$ 和 $\mathbf{a}''$ 为公共交集上的点

则对解区域上的所有 $\hat{\mathbf{a}}$都有$\|\mathbf{a}'-\hat{\mathbf{a}}\|=\|\mathbf{a}''-\hat{\mathbf{a}}\|$

i.e., $\hat{\mathbf{a}}$ 位于一个 d - 1维的超球面上（解区域为 d维）

如果对所有i都有 $\hat{\mathbf{a}}^t\mathbf{y}_i>0$，那么对都有 d维向量 $\mathbf{v}$,

当ε 足够小时

对所有$i=1,\cdots,n$,都有$(\hat{\mathbf{a}}+\varepsilon\mathbf{v})^t\mathbf{y}_i>0$

不可分的情况

- 数目少于 $2^{\hat{d}}$ 的样本集很可能是线性可分的（第九章会再次讨论）
- 对足够多数据的情况，往往线性不可分
- 每个矫正过程产生一个无穷权向量序列
- 很多启发式规则被用于修改误差矫正算法，修改的目的是在不可分的问题中得到令人接受的结果，同时保持它对可分问题的处理能力

最小平方误差方法

$$\begin{pmatrix} y_{10} & y_{11} & \cdots & y_{1d} \\ y_{20} & y_{21} & \cdots & y_{2d} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n0} & y_{n1} & \cdots & y_{nd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$J_s(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{a}^t \mathbf{y}_i - b_i\right)^2 = \left\|\mathbf{Ya} - \mathbf{b}\right\|^2$$

最小平方误差方法

$$\nabla J_s = \sum_{i=1}^{n} 2\left(\mathbf{a}^t \mathbf{y}_i - b_i\right)\mathbf{y}_i = 2\mathbf{Y}^t\left(\mathbf{Ya}-\mathbf{b}\right) = 0$$

$$\mathbf{Y}^t\mathbf{Ya} = \mathbf{Y}^t\mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} = \left(\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^t\mathbf{b} = \mathbf{Y}^{+}\mathbf{b}$$

伪逆 $\mathbf{Y}^{+} = \left(\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^t$

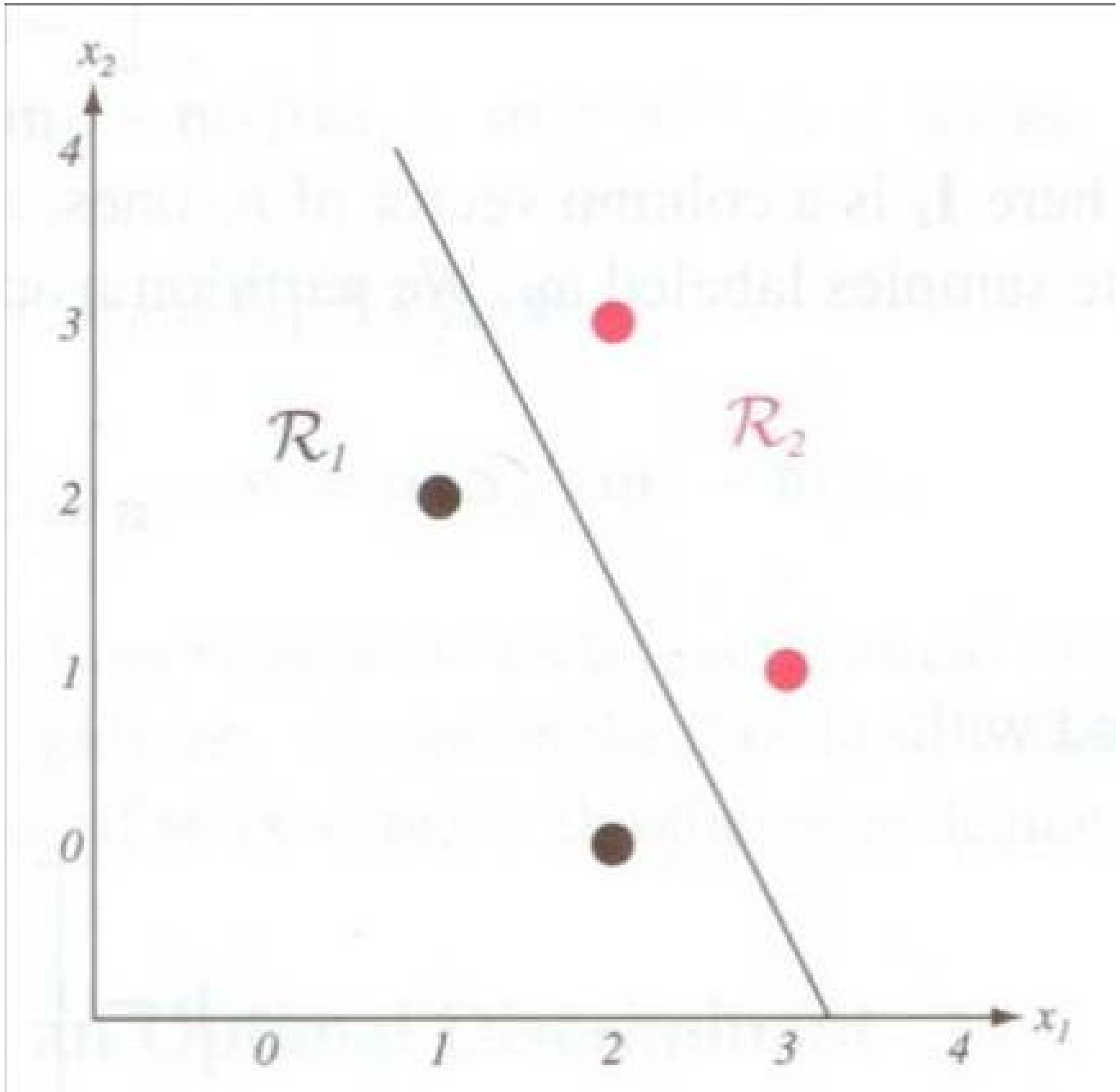
例子

$$\omega_1:(1,2)^t,(2,0)^t;\quad \omega_2:(3,1)^t,(2,3)^t$$

$$判别边界:\mathbf{a}^t\begin{pmatrix}1\\x_1\\x_2\end{pmatrix}=0$$

$$\mathbf{Y}=\begin{pmatrix}1&1&2\\1&2&0\\-1&-3&-1\\-1&-2&-3\end{pmatrix},\mathbf{b}=\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix},\mathbf{a}=\mathbf{Y}^+\mathbf{b}=\begin{pmatrix}11/3\\-4/3\\-2/3\end{pmatrix}$$

例子



MSE与 Fisher 线性判别的关系

$$D_1 = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_{n_1}\},\ D_2 = \{\mathbf{x}_{n_1+1}, \cdots, \mathbf{x}_{n_1+n_2}\}$$

增量模式: $\mathbf{y}_i = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{x}_i \end{bmatrix}$

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_1 & \mathbf{X}_1 \\ -\mathbf{1}_2 & -\mathbf{X}_2 \end{pmatrix},\ \mathbf{a} = \begin{pmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{pmatrix},\ \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \frac{n}{n_1}\mathbf{1}_1 \\ \frac{n}{n_2}\mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

与 Fisher 线性判别的关系

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1}_1^t & -\mathbf{1}_2^t \\ \mathbf{X}_1^t & -\mathbf{X}_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1}_1 & \mathbf{X}_1 \\ -\mathbf{1}_2 & -\mathbf{X}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_1^t & -\mathbf{1}_2^t \\ \mathbf{X}_1^t & -\mathbf{X}_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{n}{n_1}\mathbf{1}_1 \\ \dfrac{n}{n_2}\mathbf{1}_2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}\mathbf{x}, \quad \mathbf{S}_W = \sum_{i=1}^{2}\sum_{\mathbf{x}\in D_i}(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)(\mathbf{x}-\mathbf{m}_i)^t$$

$$\begin{pmatrix} n & (n_1\mathbf{m}_1 + n_2\mathbf{m}_2)^t \\ (n_1\mathbf{m}_1 + n_2\mathbf{m}_2) & S_W + n_1\mathbf{m}_1\mathbf{m}_1^t + n_2\mathbf{m}_2\mathbf{m}_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ \mathbf{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ n(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) \end{pmatrix}$$

与 Fisher 线性判别的关系

$$w_0 = -\mathbf{m}^t \mathbf{w}$$

$$\left[\frac{1}{n}\mathbf{S}_W + \frac{n_1 n_2}{n^2}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t\right]\mathbf{w} = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$$

$$\frac{n_1 n_2}{n^2}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^t \mathbf{w} = (1-\alpha)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$$

$$\mathbf{w} = \alpha n \mathbf{S}_W^{-1}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$$

最优判别的渐近逼近

$B=I_n$时，MSE的解等同于以最小均方误差逼近Bayes 判别函数：

$$g_0(\mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

证明：按照概率定律

$$p(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x} \mid \omega_1)P(\omega_1) + p(\mathbf{x} \mid \omega_2)P(\omega_2)$$

独立同分布抽取样本，得到

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^t\mathbf{y}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x})$$

定义均方逼近误差为

$$\varepsilon^2 = \int \left[\mathbf{a}^t\mathbf{y} - g_0(\mathbf{x})\right]^2 p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

最优判别的渐近逼近

当$\mathbf{b}=\mathbf{1}_n$时，最小均方误差准则函数为：

$$J_s(\mathbf{a})=\sum_{\mathbf{y}\in Y_1}\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1\right)^2+\sum_{\mathbf{y}\in Y_2}\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1\right)^2$$

$$=n\left[\frac{n_1}{n}\frac{1}{n_1}\sum_{\mathbf{y}\in Y_1}\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1\right)^2+\frac{n_2}{n}\frac{1}{n_2}\sum_{\mathbf{y}\in Y_2}\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1\right)^2\right]$$

利用大数定理，n趋向无穷大时

$$J(\mathbf{a})=\frac{1}{n}J_s(\mathbf{a})=P(\omega_1)E_1\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1\right)^2\right]+P(\omega_2)E_2\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1\right)^2\right]$$

其中，$E_1\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1\right)^2\right]=\int\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}-1\right)^2 p(\mathbf{x}\mid\omega_1)d\mathbf{x}$

$$E_2\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1\right)^2\right]=\int\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y}+1\right)^2 p(\mathbf{x}\mid\omega_2)d\mathbf{x}$$

最优判别的渐近逼近

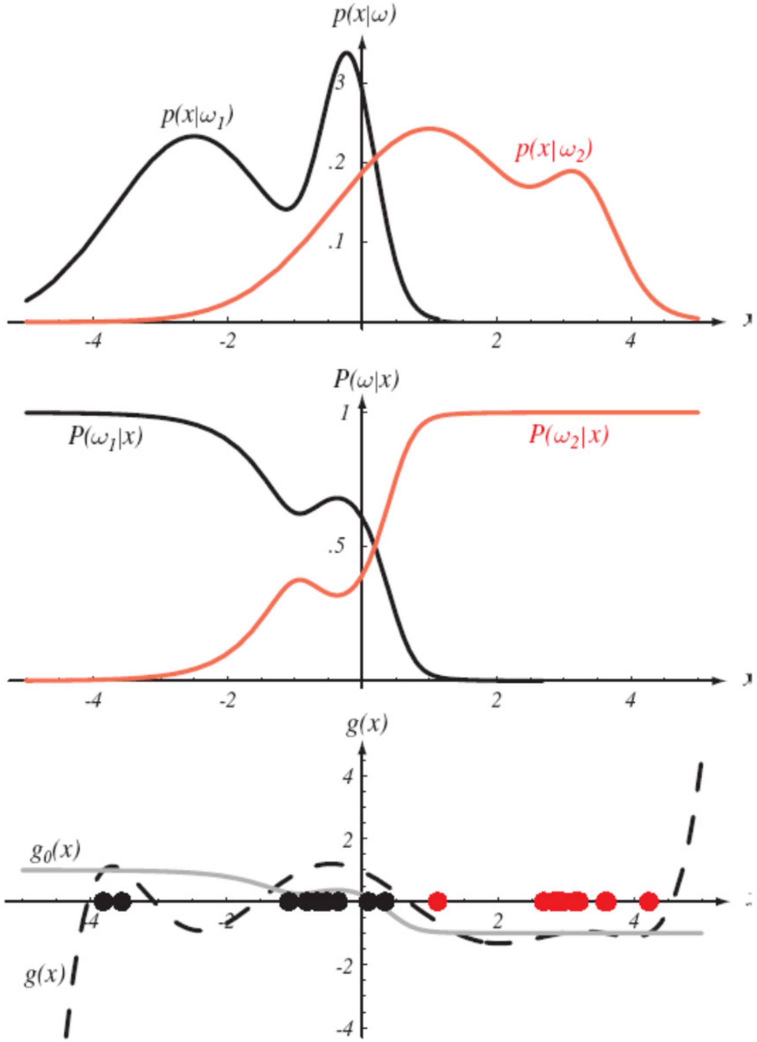
$$g_0(\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}, \omega_1) - p(\mathbf{x}, \omega_2)}{p(\mathbf{x})}$$

$$\begin{aligned}
\bar{J}(\mathbf{a}) &= \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} - 1)^2 p(\mathbf{x}, \omega_1) d\mathbf{x} + \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y} + 1)^2 p(\mathbf{x}, \omega_2) d\mathbf{x} \\
&= \int (\mathbf{a}^t\mathbf{y})^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - 2\int \mathbf{a}^t\mathbf{y} g_0(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + 1 \\
&= \int [\mathbf{a}^t\mathbf{y} - g_0(\mathbf{x})]^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \left[1 - \int g_0^2(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}\right] \\
&= \varepsilon^2 + \text{独立于}\mathbf{a}\text{的成分}
\end{aligned}$$

于是，MSE的解等同于以最小均方误差逼近Bayes 判别函数：

$$g_0(\mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

MSE 解和 Bayes 判别函数



Widrow-Hoff 或最小均方算法

$$J_s(\mathbf{a}) = \|\mathbf{Ya}-\mathbf{b}\|^2, \ \nabla J_s = 2\mathbf{Y}^t(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})$$

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) - \eta(k)\mathbf{Y}^t(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})$$

LMS 算法

initialize $\mathbf{a},\ \mathbf{b}$, 阈值 $\theta, \eta(\bullet), k \leftarrow 0$

  do $k \leftarrow (k+1) \bmod n$

    $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \eta(k)\left(b_k - \mathbf{a}^t\mathbf{y}^k\right)\mathbf{y}^k$

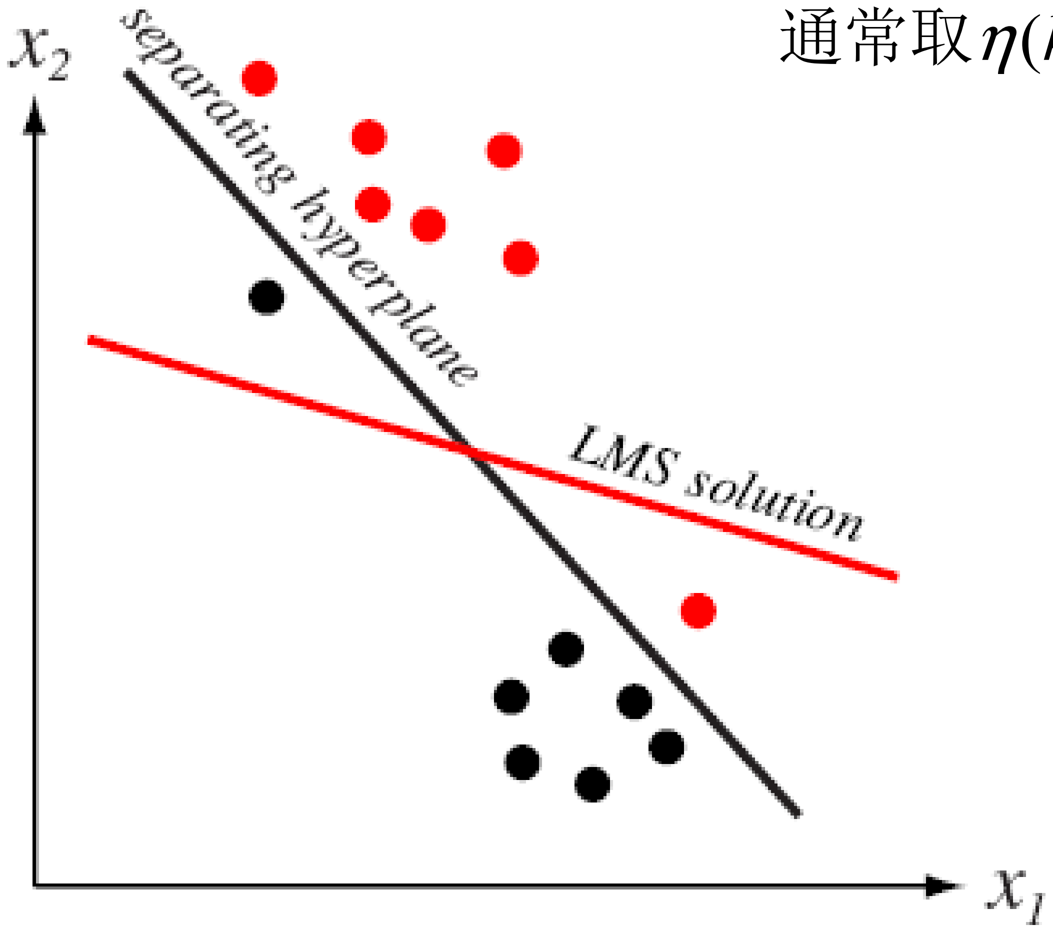
  until $\left|\eta(k)\left(b_k - \mathbf{a}^t\mathbf{y}^k\right)\mathbf{y}^k\right| < \theta$

  return $\mathbf{a}$

end

LMS算法未必收敛于分类超平面

通常取$\eta(k)=\eta(1)/k$



类标可变—Bayes判别函数的带噪声版本

根据 $p(\mathbf{x} \mid \omega_i), i = 1, 2$选择x

标记 $\theta = +1$ ，如果 $\mathbf{x}$ 属于 ω_1

标记 $\theta = -1$，如果 $\mathbf{x}$ 属于 ω_2

$$P(\theta = 1 \mid \mathbf{x}) = P(\omega_1 \mid \mathbf{x}),$$

$$P(\theta = -1 \mid \mathbf{x}) = P(\omega_2 \mid \mathbf{x})$$

$$E_{\theta|\mathbf{x}}[\theta] = \sum_{\theta} \theta P(\theta \mid \mathbf{x})$$

$$= P(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - P(\omega_2 \mid \mathbf{x}) = g_0(\mathbf{x})$$

随机逼近法

用有限级数展开来逼近的$g(\mathbf{x})$来逼近 $g_0(\mathbf{x})$

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^t\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i y_i(\mathbf{x})$$

选择一个权向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 来最小化

$$\varepsilon^2 = E\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - g_0(\mathbf{x})\right)^2\right]$$

$$J_m(\mathbf{a}) = E\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - \theta\right)^2\right]$$

最优判别的渐进逼近.

$$\nabla J_m = 2E\left[\left(\mathbf{a}^t\mathbf{y} - \theta\right)\mathbf{y}\right]$$

MSE 解:$\hat{\mathbf{a}} = E\left[\mathbf{y}\mathbf{y}^t\right]^{-1} E[\theta\mathbf{y}]$

Widrow-Hoff 算法和收敛条件

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) + \eta(k)\left[\theta_k - \mathbf{a}^t\mathbf{y}_k\right]\mathbf{y}_k$$

$E\left[\mathbf{y}\mathbf{y}^t\right]$ 非奇异和 对$\eta(k)$ 满足

$$\lim_{m\to\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\eta(k) = \infty$$

$$\lim_{m\to\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\eta^2(k) < \infty$$

$$\Rightarrow \lim_{k\to\infty} E\left[\left\|\mathbf{a}(k) - \hat{\mathbf{a}}\right\|^2\right] = 0$$

牛顿算法:

取J_m的二阶偏导矩阵

$$D = 2E\left[\mathbf{y}\mathbf{y}^t\right]$$

得到J_m极小化的牛顿算法:

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) + E\left[\mathbf{y}\mathbf{y}^t\right]^{-1} E\left[\left(\theta - \mathbf{a}^t\mathbf{y}\right)\mathbf{y}\right]$$

用样本估计代替期望，得到迭代算法:

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) + \mathbf{R}_{k+1}\left(\theta - \mathbf{a}^t(k)\mathbf{y}_k\right)\mathbf{y}_k$$

其中 $\mathbf{R}_{k+1}^{-1} = \mathbf{R}_k^{-1} + \mathbf{y}_k\mathbf{y}_k^t$

或得到等价的结果$\mathbf{R}_{k+1} = \mathbf{R}_k - \dfrac{\mathbf{R}_k\mathbf{y}_k}{1+\mathbf{y}_k^t\mathbf{R}_k\mathbf{y}_k}$

Ho-Kashyap 算法

$$\min_{\mathbf{a},\mathbf{b}} J_s(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \|\mathbf{Ya}-\mathbf{b}\|^2 \text{ subject to } \mathbf{b} > 0$$

$$\nabla_{\mathbf{a}} J_s = 2\mathbf{Y}^t(\mathbf{Ya}-\mathbf{b}), \quad \nabla_{\mathbf{b}} J_s = -2(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})$$

$$\mathbf{a}(k) = \mathbf{Y}^+\mathbf{b}(k)$$

---

start with $\mathbf{b} > 0$ and let

$$\mathbf{b}(k+1) = \mathbf{b}(k) - \eta(k)\left[\nabla_{\mathbf{b}} J_s - |\nabla_{\mathbf{b}} J_s|\right]$$

$$= \mathbf{b}(k) + 2\eta(k)[(\mathbf{Ya}-\mathbf{b}) + |(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})|]$$

Ho-Kashap rule:

$$\mathbf{b}(1) > 0, \quad \mathbf{b}(k+1) = \mathbf{b}(k) + 2\eta(k)\mathbf{e}^+(k)$$

$$\mathbf{e}^+(k) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{e}(k) + |\mathbf{e}(k)|\right), \ \mathbf{e}(k) = \mathbf{Ya}(k) - \mathbf{b}(k)$$

$$\mathbf{a}(k) = \mathbf{Y}^+\mathbf{b}(k)$$

收敛性证明

$$\mathbf{e}(k) = (\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\mathbf{b}(k)$$ 将(82)式代入(80)式

$$\mathbf{e}(k+1) = (\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\left(\mathbf{b}(k) + 2\eta\mathbf{e}^+(k)\right)$$

$$= \mathbf{e}(k) + 2\eta(\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\mathbf{e}^+(k)$$

$$\frac{1}{4}\left\|\mathbf{e}(k+1)\right\|^2 = \frac{1}{4}\left\|\mathbf{e}(k)\right\|^2 + \eta\mathbf{e}^t(k)(\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\mathbf{e}^+(k)$$

$$+\left\|\eta(\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\mathbf{e}^+(k)\right\|^2$$

$$\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\mathbf{a}(k) = \mathbf{Y}^t\mathbf{b}(k) \Rightarrow \mathbf{Y}^t\mathbf{e}(k) = 0$$

$$\eta\mathbf{e}^t(k)(\mathbf{YY}^+ - \mathbf{I})\mathbf{e}^+(k) = -\eta\mathbf{e}^t(k)\mathbf{e}^+(k) = -\eta\left\|\mathbf{e}^+(k)\right\|^2$$

其中， $\mathbf{Y}^+ = (\mathbf{Y}^t\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{Y}^t$

收敛性证明

$$\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+} = \mathbf{Y}\left(\mathbf{Y}^{t}\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^{t}$$

$$\left(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+}\right)^{t}\left(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+}\right) = [\mathbf{Y}\left(\mathbf{Y}^{t}\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^{t}][\mathbf{Y}\left(\mathbf{Y}^{t}\mathbf{Y}\right)^{-1}\mathbf{Y}^{t}] = \mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+}$$

$$\left\|\eta\left(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+} - \mathbf{I}\right)\mathbf{e}^{+}(k)\right\|^{2} = \eta^{2}\mathbf{e}^{+t}(k)\left(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+} - \mathbf{I}\right)^{t}\left(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+} - \mathbf{I}\right)\mathbf{e}^{+}(k)$$

$$= \eta^{2}\left\|\mathbf{e}^{+t}(k)\right\|^{2} - \eta^{2}\mathbf{e}^{+t}(k)\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+}\mathbf{e}^{+}(k)$$

$$\frac{1}{4}\left(\left\|\mathbf{e}(k)\right\|^{2} - \left\|\mathbf{e}(k+1)\right\|^{2}\right)$$

$$= \eta(1-\eta)\left\|\mathbf{e}^{+t}(k)\right\|^{2} + \eta^{2}\mathbf{e}^{+t}(k)\mathbf{Y}\mathbf{Y}^{+}\mathbf{e}^{+}(k) > 0$$

$$0 < \eta < 1$$

收敛性证明

$\|\mathbf{e}(k)\|^2$ 单调递减且收敛到一个有限的值 $\|\mathbf{e}\|^2$

$\Rightarrow \mathbf{e}^+(k)$ 收敛到0

$[\because \mathbf{b}(k+1)=\mathbf{b}(k)+2\eta(k)\mathbf{e}^+(k), \mathbf{e}(k)=(\mathbf{YY}^+-\mathbf{I})\mathbf{b}(k)]$

$\Rightarrow$ $\mathbf{e}(k)$ 的正分量收敛到0

对线性可分的样本,

$$\mathbf{Y}\hat{\mathbf{a}}=\hat{\mathbf{b}},\ \hat{\mathbf{b}}>0$$

$\mathbf{e}^t(k)\mathbf{Y}\hat{\mathbf{a}}=\left(\mathbf{Y}^t\mathbf{e}(k)\right)^t\hat{\mathbf{a}}=0 \Rightarrow$ 对所有的k，有$\mathbf{e}^t(k)\hat{\mathbf{b}}=0$

$\Rightarrow$ $\mathbf{e}(k)$的负分量收敛到0

$\because (\mathbf{e}^+(k)-\mathbf{e}^-(k))^t\hat{\mathbf{b}}=0 \Rightarrow \mathbf{e}^{-t}(k)\hat{\mathbf{b}}=\mathbf{e}^{+t}(k)\hat{\mathbf{b}}=0$

不可分情况

$$\mathbf{e}(k+1)=\mathbf{e}(k)+2\eta(\mathbf{YY}^{+}-\mathbf{I})\mathbf{e}^{+}(k)$$

$$\frac{1}{4}\left(\|\mathbf{e}(k)\|^2-\|\mathbf{e}(k+1)\|^2\right)$$

$$=\eta(1-\eta)\|\mathbf{e}^{+}(k)\|^2+\eta^2\mathbf{e}^{+t}(k)\mathbf{YY}^{+}\mathbf{e}^{+}(k)$$

$\|\mathbf{e}(k)\|^2$ 仍然收敛到$\|\mathbf{e}\|^2$

$\mathbf{e}^{+}(k)$ 收敛到0

但是如果$\mathbf{e}^{t}(k)\hat{\mathbf{b}}=0, \hat{\mathbf{b}}>0$ 不成立，

就不能证明$\mathbf{e}(k)$的负成分收敛到0

亦即，当一个非零误差向量没有正分量，问题为不可分情况

一个改进算法

$\mathbf{b}(1) > 0, \quad \mathbf{a}(1)$ 任意

$$\mathbf{b}(k+1) = \mathbf{b}(k) + \left(\mathbf{e}(k) + \left|\mathbf{e}(k)\right|\right)$$

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) + \eta \mathbf{Y}^{+} \left|\mathbf{e}(k)\right| \quad (\because \mathbf{a}(k) = \mathbf{Y}^{+}\mathbf{b}(k), \text{将上式代入})$$

$$\mathbf{e}(k) = \mathbf{Y}\mathbf{a}(k) - \mathbf{b}(k)$$

改进算法变形:

$$\mathbf{b}(1) > 0, \quad \mathbf{a}(1)\ \text{任意}$$

$$\mathbf{b}(k+1) = \mathbf{b}(k) + \left(\mathbf{e}(k) + \left|\mathbf{e}(k)\right|\right)$$

$$\mathbf{a}(k+1) = \mathbf{a}(k) + \eta \mathbf{R}\mathbf{Y}^t \left|\mathbf{e}(k)\right|$$

$\mathbf{R}$: 任意, 常量, 正定, 对称, $\hat{d} \times \hat{d}$ 矩阵

$$\because \mathbf{Y}^+ = (\mathbf{Y}^t\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{Y}^t$$

收敛性证明

$$\mathbf{e}(k+1) = \mathbf{Ya}(k+1) - \mathbf{b}(k+1)$$

$$= \left(\eta \mathbf{YRY}^t - \mathbf{I}\right)\left|\mathbf{e}(k)\right| \quad (\because \text{由(89)式,(90)式})$$

$$\left\|\mathbf{e}(k+1)\right\|^2 = \left|\mathbf{e}(k)\right|^t \left(\eta^2 \mathbf{YRY}^t\mathbf{YRY}^t - 2\eta \mathbf{YRY}^t + \mathbf{I}\right)\left|\mathbf{e}(k)\right|$$

$$\left\|\mathbf{e}(k)\right\|^2 - \left\|\mathbf{e}(k+1)\right\|^2 = \left(\mathbf{Y}^t\left|\mathbf{e}(k)\right|\right)^t \mathbf{A}\left(\mathbf{Y}^t\left|\mathbf{e}(k)\right|\right)$$

$$\mathbf{A} = 2\eta \mathbf{R} - \eta^2 \mathbf{RY}^t\mathbf{YR}$$

其中 η 足够小, $\mathbf{A}$ 正定

$$\left\|\mathbf{e}(k)\right\|^2 > \left\|\mathbf{e}(k+1)\right\|^2$$

线性情况

$\|\mathbf{e}(k)\|$ 收敛到 $\|\mathbf{e}\|$

$\mathbf{Y}^t\mathbf{e}(k)$ 必收敛到0

假设存在 $\hat{\mathbf{a}}$ 和 $\hat{\mathbf{b}}$, 使得

$$\mathbf{Y}\hat{\mathbf{a}} = \hat{\mathbf{b}}$$

$$|\mathbf{e}(k)|^t\mathbf{Y}\hat{\mathbf{a}} = |\mathbf{e}(k)|^t\hat{\mathbf{b}} \geq 0$$

$\therefore |\mathbf{e}(k)|^t\mathbf{Y}$ 收敛到0

$\Rightarrow |\mathbf{e}(k)|$ 收敛到0

不可分情况

$\mathbf{Y}^t \left|\mathbf{e}(k)\right|$ 收敛到0

但 $\mathbf{e}(k)$ 既不为0，也不收敛到0

对 $\mathbf{R}$ 和 η 的最简单选择

$$\mathbf{R} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A} = 2\eta\mathbf{I} - \eta^2\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}$$

如果$0 < \eta < 2/\lambda_{\max}$， 则$\mathbf{A}$正定

$\lambda_{\max}$: $\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}$的最大特征值

$\lambda_{\max}$的最差边界: $\lambda_{\max} \leq \sum_i \|\mathbf{y}_i\|^2 / \hat{d}$

η 的最优选择

$$\|\mathbf{e}(k)\|^2 - \|\mathbf{e}(k+1)\|^2 = |\mathbf{e}(k)|^t \mathbf{Y}(2\eta\mathbf{R} - \eta^2\mathbf{R}\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\mathbf{R})\mathbf{Y}^t |\mathbf{e}(k)|$$

对上式求关于η的微分,得到最优 η:

$$\eta(k) = \frac{|\mathbf{e}(k)|^t \mathbf{Y}\mathbf{R}\mathbf{Y}^t |\mathbf{e}(k)|}{|\mathbf{e}(k)|^t \mathbf{Y}\mathbf{R}\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\mathbf{R}\mathbf{Y}^t |\mathbf{e}(k)|}$$

当 $\mathbf{R} = \mathbf{I}$,

$$\eta(k) = \frac{\left\|\mathbf{Y}^t |\mathbf{e}(k)|\right\|^2}{\left\|\mathbf{Y}\mathbf{Y}^t |\mathbf{e}(k)|\right\|^2}$$

R 的最优选择

用对称的$\mathbf{R}+\delta\mathbf{R}$,来代替$\mathbf{R}$，并忽略第二项，得到

$$\delta\left(\|\mathbf{e}(k)\|^2-\|\mathbf{e}(k+1)\|^2\right)$$

$$=|\mathbf{e}(k)|\mathbf{Y}\left[\delta\mathbf{R}^t(\mathbf{I}-\eta\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\mathbf{R})+(\mathbf{I}-\eta\mathbf{R}\mathbf{Y}^t\mathbf{Y})\delta\mathbf{R}\right]\mathbf{Y}^t|\mathbf{e}(k)|$$

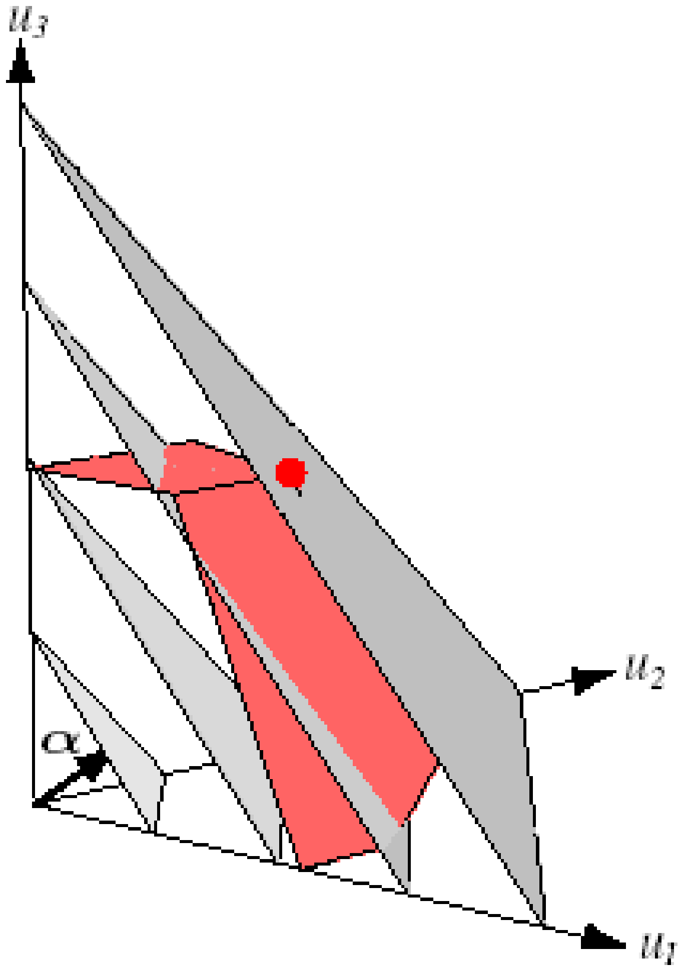
可通过选择

$$\mathbf{R}=\frac{1}{\eta}\left(\mathbf{Y}^t\mathbf{Y}\right)^{-1}$$

使得平方误差向量下降达到最大

（因为$\eta\mathbf{R}\mathbf{Y}^t=\mathbf{Y}^+$：实际上就是Ho-Kashap algorithm）

线性规划



$$\min_{\mathbf{u}} \boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{u}$$

$$\text{s.t. } \mathbf{A}\mathbf{u} \geq \boldsymbol{\beta}$$

常用求解方法:

单纯形法

其中额外要求$\mathbf{u} \geq 0$

分离向量分解

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}^{+} - \mathbf{a}^{-}$$

$$\mathbf{a}^{+} = \frac{1}{2}(|\mathbf{a}| + \mathbf{a})$$

$$\mathbf{a}^{-} = \frac{1}{2}(|\mathbf{a}| - \mathbf{a})$$

$$\mathbf{a}^{+} \geq 0, \quad \mathbf{a}^{-} \geq 0$$

线性可分情形:

假设有n个样本$y_1, y_2, \ldots, y_n$,

我们希望a对所有的i都满足:

$$a^t y_i \geq b_i > 0$$

在线性规划中表达的表达方法为:

引入$\tau \geq 0$，满足:

$$a^t y_i + \tau \geq b_i$$

导出问题为:

求解a和极小化的τ，满足

$\tau \geq 0$和$a^t y_i \geq b_i$

如果所求得$\tau = 0$，样本就是线性可分的且可得到一解;

如果所求得τ为正数，可以证明样本不可分;

公式表达

$$\min_{\mathbf{u}} z = \boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{u} \quad \text{subject to } \mathbf{A}\mathbf{u} \geq \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u} \geq 0$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \\ \tau \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1^t & -\mathbf{y}_1^t & 1 \\ \mathbf{y}_2^t & -\mathbf{y}_2^t & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{y}_n^t & -\mathbf{y}_n^t & 1 \end{bmatrix}$$

在有限步可以求得$z=\tau$的极小值。

如果所求得$\tau = 0$，样本就是线性可分的且可得到一解；

如果所求得τ为正数，解没有用，但可以证明样本非线性可分；

极小化感知器准则函数

$$\min J_p'(\mathbf{a}) = \sum_{i \in Y'} \left(b_i - \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i \right), \quad Y' = \left\{ i \mid \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i \le b_i \right\}$$

等价问题:

$$\min_{\tau} \ z = \sum_{i=1}^{n} \tau_i \text{ subject to } \tau_i \ge 0, \mathbf{a}^t \mathbf{y}_i + \tau_i \ge b_i$$

等价问题:

$$\min_{\mathrm{u}} \ \boldsymbol{\alpha}^t \mathbf{u} \text{ subject to } \mathbf{A}\mathbf{u} \ge \boldsymbol{\beta}, \mathbf{u} \ge 0$$

其中

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{a}^- \\ \boldsymbol{\tau} \end{bmatrix}, \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1^t & -\mathbf{y}_1^t & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \mathbf{y}_2^t & -\mathbf{y}_2^t & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{y}_n^t & -\mathbf{y}_n^t & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{1}_n \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

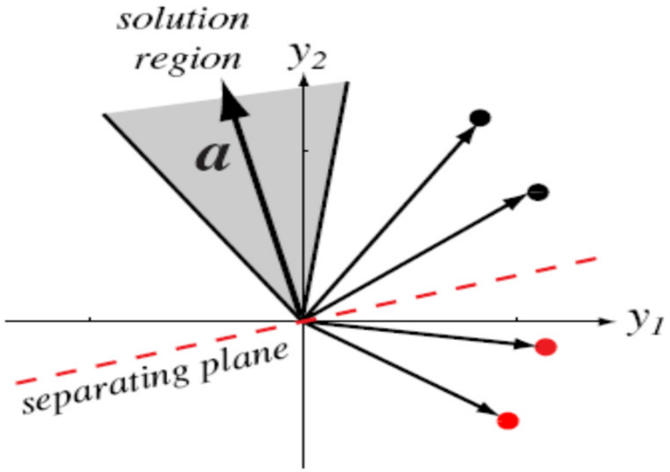
支持向量机
Support Vector Machines （SVM）

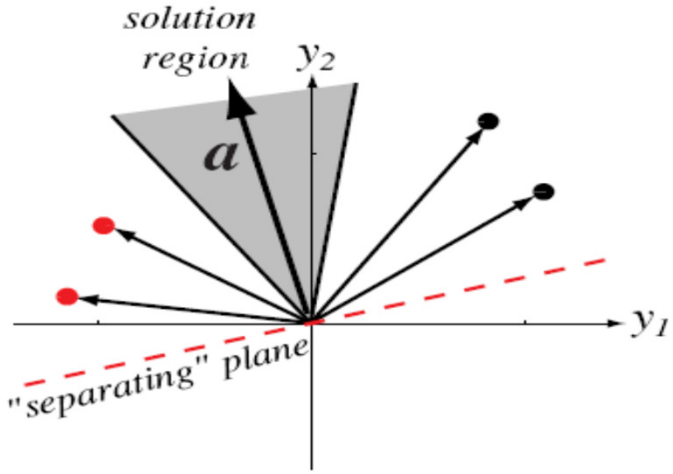
$$\mathbf{y}_k = \varphi(\mathbf{x}_k), \quad z_k = \pm 1$$

$g(\mathbf{y}) = \mathbf{a}^t \mathbf{y}$, $\mathbf{y}$ 属于增量空间

分隔超平面保证

$$z_k g(\mathbf{y}_k) \geq 0, \quad k = 1, \cdots, n$$





SVM

$\mathbf{y}$到超平面的距离 : $\dfrac{|g(\mathbf{y})|}{\|\mathbf{a}\|}$

正值边沿裕度 b,

$$\frac{z_k g(\mathbf{y}_k)}{\|\mathbf{a}\|} \geq b,\ k = 1, \cdots, n$$

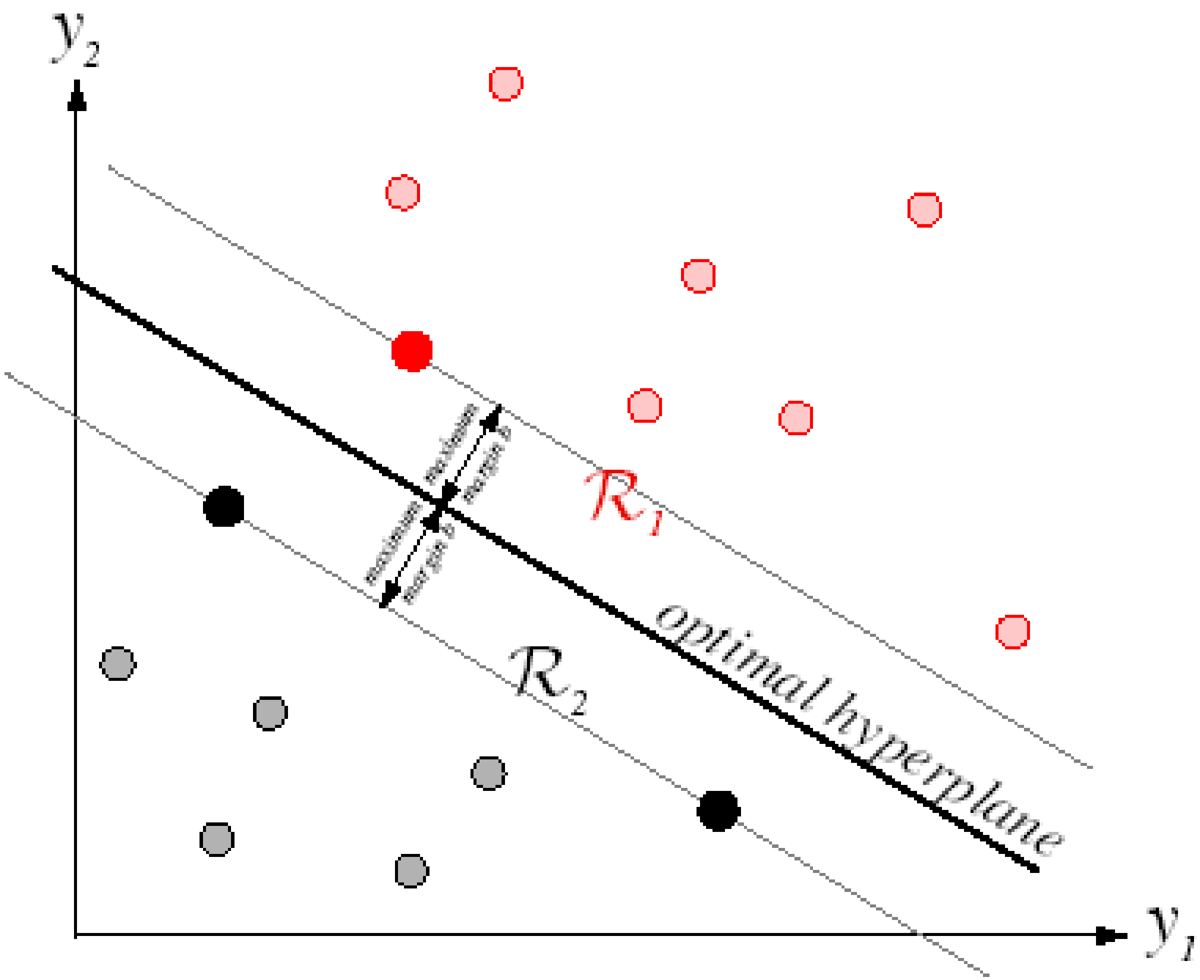
等价形式 :

$$\frac{z_k (g(\mathbf{y}_k) - b)}{\|\mathbf{a}\|} \geq 0$$

目标: 找到一个 $\mathbf{a}$ 使得 :

$$\min_{\mathbf{a}} \|\mathbf{a}\|^2 \ \text{ subject to } z_k (g(\mathbf{y}_k) - b) \geq 0, k = 1, \cdots, n$$

SVM



SVM 的训练方法

- 对感知器训练方法进行改进。
- 通过选择当前最坏分类的模式来更新权向量达到训练目的。
- 在训练的结束阶段，该模式将成为一个支持向量。
- 寻找最坏分类的模式，计算量很大。

最优化学习

$$\min_{\mathbf{a}} L(\mathbf{a}, b, \boldsymbol{\alpha})$$

$$L(\mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|^2 - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left[z_k (\mathbf{a}^t \mathbf{y}_k - b) \right],$$

$$\boldsymbol{\alpha} \geq 0$$

Kuhn-Tucker 定理

$$\min_{\mathbf{a}} L(\mathbf{a}, b, \boldsymbol{\alpha})$$

$$L(\mathbf{a}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|^2 - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left[z_k (\mathbf{a}^t \mathbf{y}_k - b) \right] \quad (*)$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{a}, b, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{a}} = 0, \quad \frac{\partial L(\mathbf{a}, b, \boldsymbol{\alpha})}{\partial b} = 0$$

$$\mathbf{a} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k z_k \mathbf{y}_k, \quad \sum_{k=1}^{n} \alpha_k z_k = 0$$

代入公式（*），得

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_{k,j}^{n} \alpha_k \alpha_j z_k z_j \mathbf{y}_j^t \mathbf{y}_k$$

满足: $\sum_{k=1}^{n} \alpha_k z_k = 0$

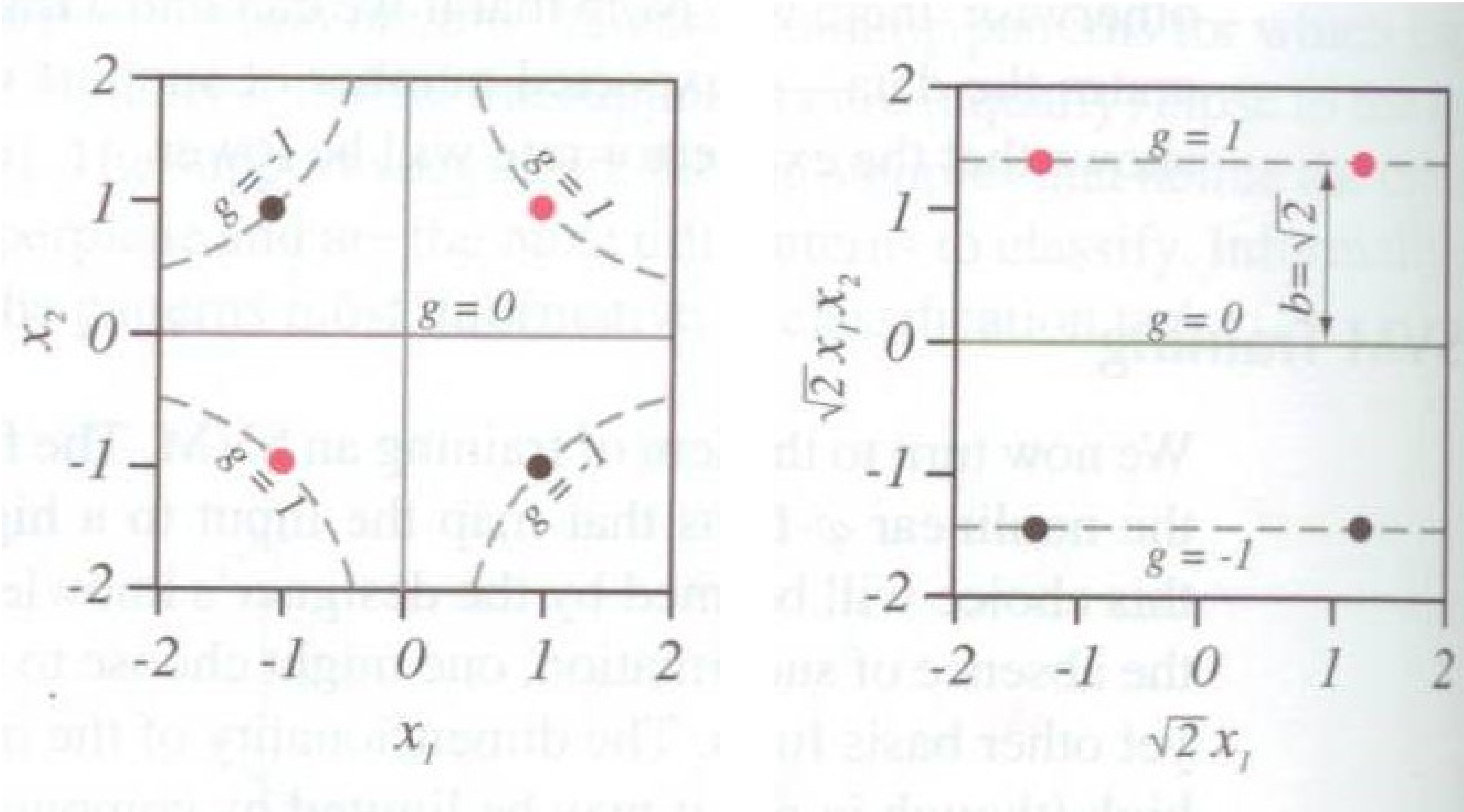
由Kuhn-Tucker 定理

等价于二次规划问题

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} L(\boldsymbol{\alpha}) \text{ subject to } \sum_{k=1}^{n} z_k \alpha_k = 0, \boldsymbol{\alpha} \geq 0$$

$$L(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_{k,j}^{n} \alpha_k \alpha_j z_k z_j \mathbf{y}_j^t \mathbf{y}_k$$

例子: XOR 问题的 SVM



例子: XOR 问题的 SVM

$$\omega_1 : \mathbf{x}_1 = (1 \quad 1)^t, \mathbf{x}_3 = (-1 \quad -1)^t$$

$$\omega_2 : \mathbf{x}_2 = (1 \quad -1)^t, \mathbf{x}_4 = (-1 \quad 1)^t$$

$$\varphi \text{ functions } : 1, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2, \sqrt{2}x_1x_2, x_1^2, x_2^2$$

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} \sum_{k=1}^{4} \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_{k,j} \alpha_k \alpha_j z_k z_j \mathbf{y}_j^t \mathbf{y}_k$$

$$\text{subject to } \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_4 = 0, \text{ and } \alpha_k \geq 0$$

例子: XOR 问题的 SVM

解$:\alpha_k^* = 1/8, k = 1, \cdots, 4$

这四个训练样本都是支持向量

$$\mathbf{a}^* = \sum_{k=1}^{4} \alpha_k^* z_k \mathbf{y}_k$$

最终判别函数$:g(\mathbf{x}) = x_1 x_2$

判定超平面$:g = 0$

裕度$:b^* = 1/\|\mathbf{a}^*\| = \sqrt{2}$

核方法和非线性SVM

上述例子具有典型性:

1. 需要非线性映射将Φ, 将x映射到高维空间的特征y=$\Phi(x)$, 使得样本线性可分;

2. 支持向量机求解方法仅涉及内积

$$y_i \cdot y_j = \Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j)$$

如果能找到函数: $K(x_i, x_j) = \Phi(x_i) \cdot \Phi(x_j)$,

就可以简化计算,避免维数问题.

$K(x_i, x_j)$通常要求满足Mercer条件:

对$\int g^2(u)du < \infty, g \neq 0$,有

$$\iint k(u, v) g(u) g(v) du dv > 0$$

核方法和非线性SVM

这时,由泛函分析相关理论,有

$$k(u, v) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varphi_k(u) \varphi_k(v)$$

其中，$a_k > 0$

通常称k(u, v)为Mercer核。

于是,由Mercer核可以构造非线性SVM

SVM 的优点

- 所获得的分类器的复杂度可以采用支持向量的个数，而不是变换空间的维数来刻画
- 不像一些别的方法一样容易发生过拟合（overfitting）现象

多类问题的推广

广义线性判别函数

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^t \mathbf{y}(\mathbf{x}), i = 1, \cdots, c$$

如果存在一组$\hat{\mathbf{a}}_1, \cdots, \hat{\mathbf{a}}_c$使得

如果$\mathbf{y}_k \in Y_i$,则对$j \neq i$，有$\hat{\mathbf{a}}_i^t \mathbf{y}_k > \hat{\mathbf{a}}_j^t \mathbf{y}_k$

那么称样本线性可分

Kesler 构造法

让 $\mathbf{y}_k \in Y_1$，则

$$\hat{\mathbf{a}}_1^t \mathbf{y}_k - \hat{\mathbf{a}}_j^t \mathbf{y}_k > 0, \quad j = 2, \cdots, c$$

$\Rightarrow$

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_c \end{bmatrix}, \boldsymbol{\eta}_{12} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ -\mathbf{y} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \cdots, \boldsymbol{\eta}_{1c} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ -\mathbf{y} \end{bmatrix}$$

要求 $\hat{\boldsymbol{\alpha}}^t \boldsymbol{\eta}_{1j} > 0, j = 2, \cdots, c$

Kesler 构造法

- 将数据的维数乘以 c,且将样本数目乘以 c-1;
- 为了证明收敛性，可通过将多类误差矫正法转化为两类问题来实现;

固定增量规则的收敛性

令 L_k 表示权向量为 $\mathbf{a}_1(k),\cdots,\mathbf{a}_c(k)$ 的线性机

令 $\mathbf{y}^k$ 为需要矫正的第k个样本, $\mathbf{y}^k \in Y_i$

则至少存在一个 $j \neq i$，使得 $\mathbf{a}_i^t(k)\mathbf{y}^k \leq \mathbf{a}_j^t(k)\mathbf{y}^k$

固定增量矫正:

$$\mathbf{a}_i(k+1) = \mathbf{a}_i(k) + \mathbf{y}^k$$

$$\mathbf{a}_j(k+1) = \mathbf{a}_j(k) - \mathbf{y}^k$$

$$\mathbf{a}_l(k+1) = \mathbf{a}_l(k), \quad l \neq i \text{ 且 } l \neq j$$

证明： 有限步后必收敛

$$\boldsymbol{\alpha}(k)=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1(k)\\ \vdots\\ \mathbf{a}_c(k)\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\eta}_{ij}^k=\begin{bmatrix}\vdots\\ \mathbf{y}^k\\ \vdots\\ -\mathbf{y}^k\\ \vdots\end{bmatrix}\begin{matrix} \\ i\\ \\ j\\ \\ \end{matrix},\quad \boldsymbol{\alpha}^t(k)\boldsymbol{\eta}_{ij}^k\le 0$$

$$\boldsymbol{\alpha}(k+1)=\boldsymbol{\alpha}(k)+\boldsymbol{\eta}_{ij}^k$$

此时，多类情况与两类的情况对应。对两类问题, $\boldsymbol{\alpha}(k)$ 在有限步矫正后必终止在一个解向量上

MSE 算法推广

对于多类问题：

$a_i^t y = 1, \quad$ 对所有$y \in Y_i$

$a_i^t y = 0, \quad$ 对所有$y \notin Y_i$

的最小均方误差解确保$a_i^t y$以

最小均方误差逼近$\mathrm{P}(\omega_\mathrm{i} | \mathrm{x})$

MSE 算法推广

$$\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}\mathbf{Y}_1\\ \mathbf{Y}_2\\ \vdots\\ \mathbf{Y}_c\end{bmatrix},\ \mathbf{A}=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \cdots & \mathbf{a}_c\end{bmatrix},\ \mathbf{B}=\begin{bmatrix}\mathbf{B}_1\\ \mathbf{B}_2\\ \vdots\\ \mathbf{B}_c\end{bmatrix},$$

其中: B_i的第i列为1,其余的列为0.

平方误差矩阵 $(\mathbf{YA}-\mathbf{B})^t(\mathbf{YA}-\mathbf{B}),\ \mathbf{A}=\mathbf{Y}^+\mathbf{B}$