机器学习

Machine learning

第三章 线性分类

Linear Classifier

授课人：周晓飞
zhouxiaofei@iie.ac.cn
2023-10-15

课件放映 PDF-〉视图-〉全屏模式

第三章 线性分类

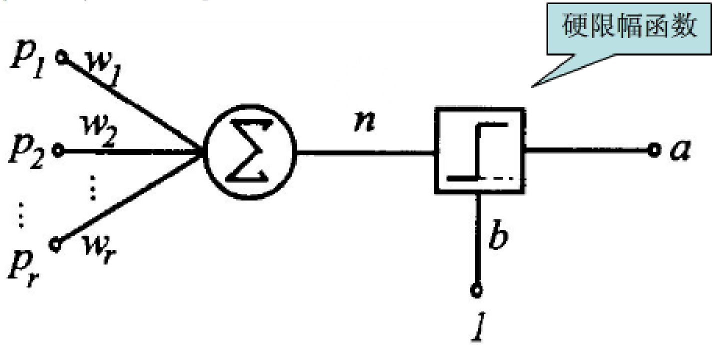
感知机

基本知识

1. 神经网络形成阶段（1943-1958），开拓性的贡献：

- McCulluch & Pitts（1943）引入神经网络的概念作为计算工具；

McCulloch和**Pitts** 1943年，发表第一个系统的ANN研究——阈值加权和（M-P）数学模型.
1947年，开发出感知器.



- Hebb（1949）提出自组织学习的第一个规则；
- Rosenblatt（1957）提出感知器作为有教师学习的一个模型。

感知机

基本知识

2. 线性分类

- 决策函数

$$g(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \boldsymbol{w}_i \boldsymbol{x}_i + w_0 = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x} + w_0$$

- 增广表示

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{i}=0}^{\boldsymbol{m}} \boldsymbol{w}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{x}_{\boldsymbol{i}} = \tilde{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{T}} \tilde{\boldsymbol{x}}$$

其中，$\tilde{\boldsymbol{w}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w} \\ w_0 \end{pmatrix}$，$\tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x} \\ 1 \end{pmatrix}$

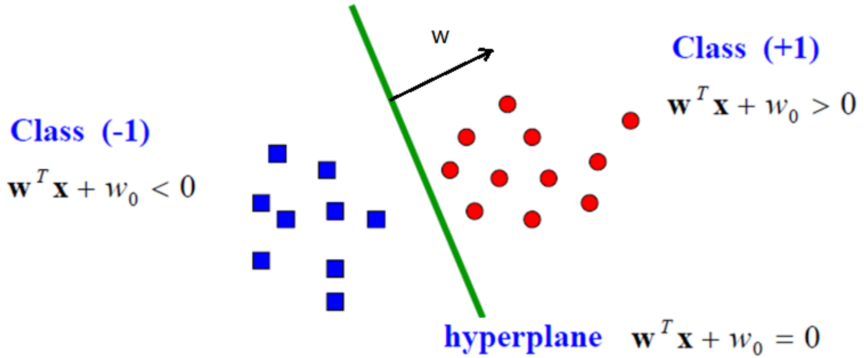
感知机

基本知识

- 决策超平面 $g(x) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = 0$
- 分类判别

$$If \quad \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 > 0 \quad assign \quad \mathbf{x} \quad to \quad \omega_1$$

$$If \quad \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 < 0 \quad assign \quad \mathbf{x} \quad to \quad \omega_2$$



感知机

基本知识

- 决策函数几何含义

  刻画了样本到超平面的距离 $g(\mathbf{x}) = \|\mathbf{w}\| \cdot \mathbf{z}$

- 验证函数： $y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0)$

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0 \geq 0 \qquad For\ all\ i, such\ that \quad y_i = +1$$

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0 \leq 0 \qquad For\ all\ i, such\ that \quad y_i = -1$$

$$Together: \qquad y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + w_0) \geq 0$$

基本知识

3. 优化方法 — 梯度下降

$$\min_{w} \; J(w) = \sum_i J_i(w)$$

- 梯度下降（GD）

$$w = w - \eta \frac{\partial J(w)}{\partial w} = w - \eta \nabla J(w)$$

基本知识

3. 优化方法 — 梯度下降

$$\min_{w} \ J(w) = \sum_{i} J_i(w)$$

- 梯度下降（GD）

$$w = w - \eta \frac{\partial J(w)}{\partial w} = w - \eta \nabla J(w) \ = w - \eta \sum_{i} \frac{\partial J_i(w)}{\partial w} = \ w - \eta \sum_{i} \nabla J_i(w)$$

感知机

基本知识

3. 优化方法 — 梯度下降

$$\min_{w} \ J(w)=\sum_{i} J_i(w)$$

- 梯度下降（GD）

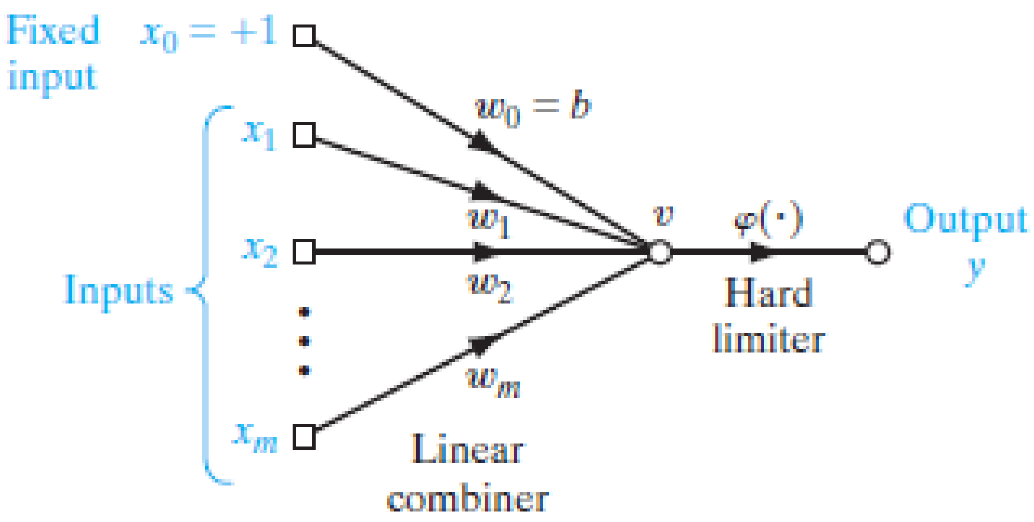
$$w=w-\eta\frac{\partial J(w)}{\partial w}=w-\eta\nabla J(w) \ =w-\eta\sum_{i}\frac{\partial J_i(w)}{\partial w}= \ w-\eta\sum_{i}\nabla J_i(w)$$

- 随机梯度下降（SGD）

$$w=w-\eta\frac{\partial J_i(w)}{\partial w}$$

感知机

感知机结构



信号流

- 输入

$$\mathbf{x}(n) = [+1, x_1(n), x_2(n), \ldots, x_m(n)]^T$$

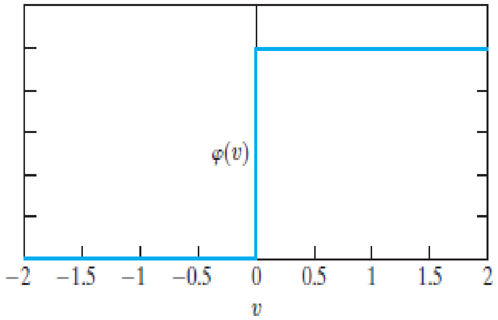
- 神经元连接权

$$\mathbf{w}(n) = [b, w_1(n), w_2(n), \ldots, w_m(n)]^T$$

- 神经元局部感受域

$$v(n) = \sum_{i=0}^{m} w_i(n) x_i(n)$$
$$= \mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n)$$

- 硬激活函数



感知机

感知机学习准则

1. **目标：最小化 错分样本的 误差代价**

- 代价函数（错分样本的误差函数）：

$$J(\boldsymbol{w}) = \sum_{\boldsymbol{x}(n)\in E} -\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}(n) d(n) \tag{1.1}$$

或者

$$J(\boldsymbol{w}) = \sum_{\boldsymbol{x}(n)} -\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}(n)\big(d(n) - y(n)\big) \tag{1.2}$$

其中，E 为错误分类样本集；$d(n)\in\{-1,+1\}$为$\boldsymbol{x}(n)$的已知类别标签；$y(n)\in\{-1,+1\}$为感知器的输出类别

感知机

感知机学习准则

问题：(d(n)-y(n))能否替代“错误分类样本集筛选”、(d(n)-y(n))能否替代 d(n) ？

答 1：当样本被正确分类时$(d(n)-y(n))=0$，正确分类样本被忽略，

$(d(n)-y(n))$可替代 “错误分类样本集筛选”；

答 2：当样本被错误分类时，$(d(n)-y(n))\neq 0$，两种情况

$$d(n)=+1,\ y(n)=-1\text{时},(d(n)-y(n))=+2,$$

$$(d(n)-y(n))\text{与}d(n)\text{符号相同}$$

$$d(n)=\text{-}1,\ y(n)=+1\text{时},(d(n)-y(n))=\text{-}2,$$

$$(d(n)-y(n))\text{与}d(n)\text{符号相同}$$

$(d(n)-y(n))$能替代$d(n)$；

感知机学习准则

2. J(w)的含义：错分样本到分类超平面误差距离的总和

样本到超平面的距离：

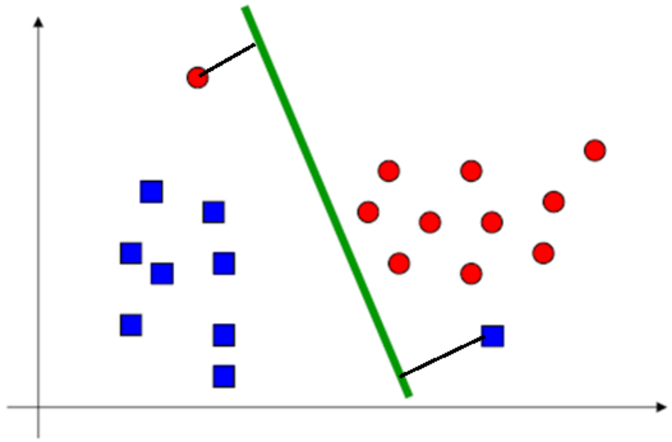
$$\left|z\right| = \frac{|\mathbf{w}^T \mathbf{x}|}{\|\mathbf{w}\|}$$

正确分类样本：

$$\left|z\right| = \frac{|\mathbf{w}^T \mathbf{x}|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{d\mathbf{w}^T \mathbf{x}}{\|\mathbf{w}\|}$$

错误分类样本：

$$\left|z\right| = \frac{|\mathbf{w}^T \mathbf{x}|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{-d\mathbf{w}^T \mathbf{x}}{\|\mathbf{w}\|}$$



感知机优化

Batch Perception

$$\nabla J(\boldsymbol{w}) = \sum_{x} -(d(n) - y(n))\boldsymbol{x}(n)$$

$$\boldsymbol{w}(n+1) = \boldsymbol{w}(n) - \eta(n)\sum_{x} -(d(n) - y(n))\boldsymbol{x}(n)$$

$$\nabla J(\boldsymbol{w}) = \sum_{\boldsymbol{x}(n)\in E} -\boldsymbol{x}(n)d(n)$$

$$\boldsymbol{w}(n+1) = \boldsymbol{w}(n) - \eta(n)\sum_{\boldsymbol{x}(n)\in E} -\boldsymbol{x}(n)d(n)$$

感知机

感知机优化

Online Perception

$$\nabla J(\mathbf{w}) = -(d(n) - y(n))\mathbf{x}(n)$$

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) - \eta(n)[-(d(n) - y(n))]\mathbf{x}(n)$$

$$\nabla J(\mathbf{w}) = -\mathbf{x}(n)d(n)_{|\mathbf{x}(n)\in E}$$

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) - \eta(n)(-\mathbf{x}(n)d(n))_{|\mathbf{x}(n)\in E}$$

感知机

感知器算法流程

Variables and Parameters:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}(n) &= (m+1)\text{-by-1 input vector} \\
&= [+1, x_1(n), x_2(n), \ldots, x_m(n)]^T \\
\mathbf{w}(n) &= (m+1)\text{-by-1 weight vector} \\
&= [b, w_1(n), w_2(n), \ldots, w_m(n)]^T \\
b &= \text{bias} \\
y(n) &= \text{actual response (quantized)} \\
d(n) &= \text{desired response} \\
\eta &= \text{learning-rate parameter, a positive constant less than unity}
\end{aligned}
$$

1. *Initialization.* Set $\mathbf{w}(0) = \mathbf{0}$. Then perform the following computations for time-step $n = 1, 2, \ldots$.
2. *Activation.* At time-step n, activate the perceptron by applying continuous-valued input vector $\mathbf{x}(n)$ and desired response $d(n)$.
3. *Computation of Actual Response.* Compute the actual response of the perceptron as

$$y(n) = \operatorname{sgn}[\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n)]$$

where $\operatorname{sgn}(\cdot)$ is the signum function.

4. *Adaptation of Weight Vector.* Update the weight vector of the perceptron to obtain

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) + \eta[d(n) - y(n)]\mathbf{x}(n)$$

where

$$d(n) = \begin{cases} +1 & \text{if } \mathbf{x}(n) \text{ belongs to class } \mathscr{C}_1 \\ -1 & \text{if } \mathbf{x}(n) \text{ belongs to class } \mathscr{C}_2 \end{cases}$$

5. *Continuation.* Increment time step n by one and go back to step 2.

误差修正基本规则

1. 固定增量的感知机修正

- 固定增量感知器收敛定理（Rosenblatt，1962）

若训练样本是线性可分，则感知器训练算法在有限次迭代后可以收敛到正确的解向量 w。

感知机

误差修正基本规则

2. **误差修正自适应规则**

- 增量自适应调整

设 $\eta(n)$ 满足下式： $\eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \ge \left|\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n)\right|$

对于错误分类样本来说，上式等价于：

$$\eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \ge -d(n)\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n)$$

$$\begin{array}{l} if\ \ \mathrm{d(n)=+1},\ \eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \ge -\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n),\ \ 0 \ge -\mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n) - \eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \\ if\ \ \mathrm{d(n)=-1},\ \eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \ge \mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n),\ \ 0 \ge \mathbf{w}^T(n)\mathbf{x}(n) - \eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n) \end{array}$$

误差修正基本规则

- **增量自适应调整的证明：**

修正准则：$\mathbf{w}(n+1)=\mathbf{w}(n)+\eta(n)\mathbf{x}(n)d(n)_{|\mathbf{x}(n)\in E}$

两边同乘$-\mathbf{x}^T(n)d(n)$，计算损失函数（错分代价）：$-\mathbf{x}^T(n)w(n)d(n)$

$$-d(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n+1)=-d(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n)-\eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n)_{|x\in E}$$

当错分样本的正确标签为 d=+1，损失函数（错分代价）：

$$-\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n+1)=\underbrace{-\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n)}_{>0}\boxed{\underbrace{-\eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n)}_{<0}}_{|x\in E}\quad<=0$$

当错分样本的正确标签为 d=-1，损失函数（错分代价）：

$$\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n+1)=\underbrace{\mathbf{x}^T(n)\mathbf{w}(n)}_{>0}\boxed{\underbrace{-\eta(n)\mathbf{x}^T(n)\mathbf{x}(n)}_{<0}}_{|x\in E}\quad<=0$$

- 基本规则可以保证误差变小，
- 自适应规则保证误差为 0。

误差修正基本规则

- 自适应修正的几何过程：

Online Perception 为例

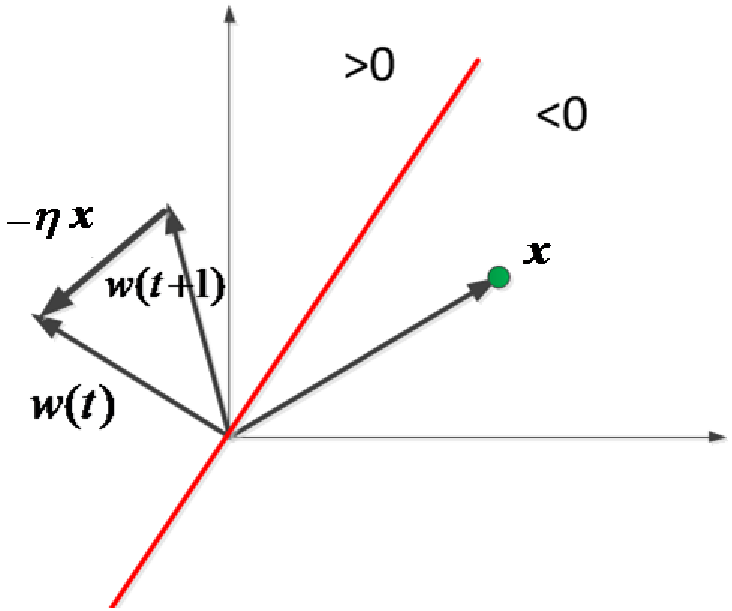
d=+1， $\boldsymbol{w}(n+1)=\boldsymbol{w}(n)+\eta(n)\boldsymbol{x}(n)_{|x\in E}$

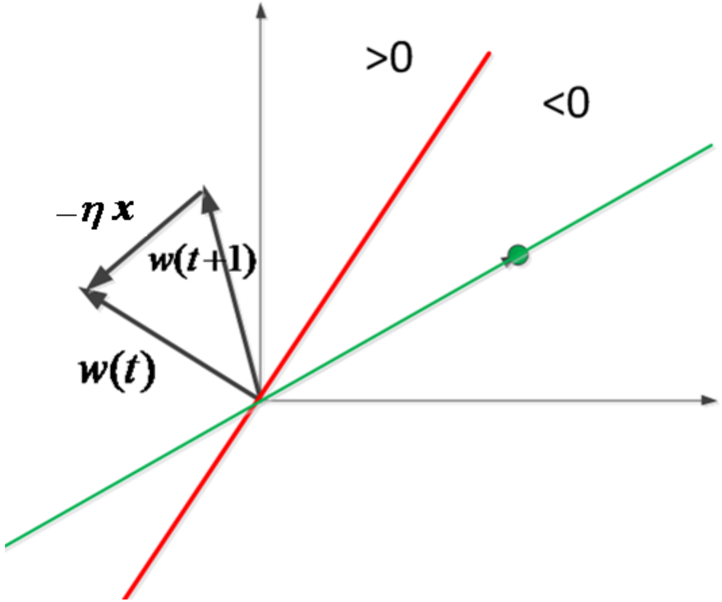
d=-1， $\boldsymbol{w}(n+1)=\boldsymbol{w}(n)-\eta(n)\boldsymbol{x}(n)_{|x\in E}$

感知机

误差修正基本规则

当 d=+1， $\mathbf{w}(n+1)=\mathbf{w}(n)-(-\eta(n)\mathbf{x}(n))_{|x\in E}$



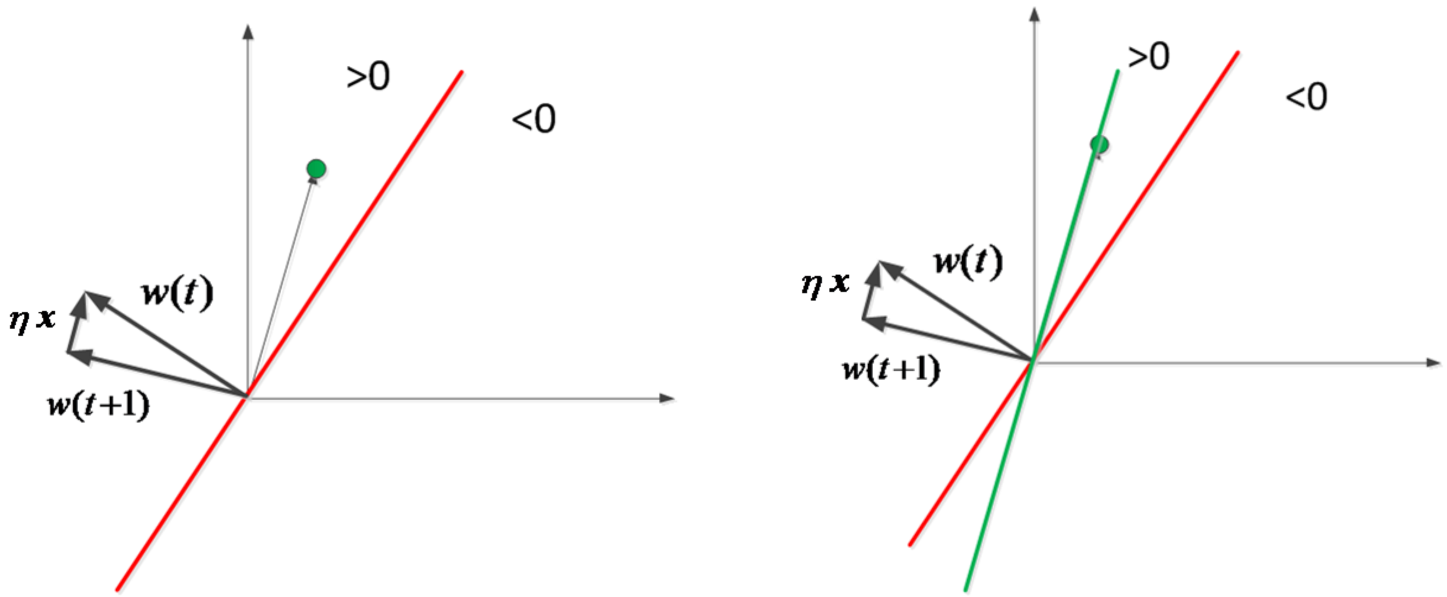


修正后的分类面（绿线）

感知机

误差修正基本规则

当 d = -1， $\mathbf{w}(n+1)=\mathbf{w}(n)-\eta(n)\mathbf{x}(n)_{|x\in E}$

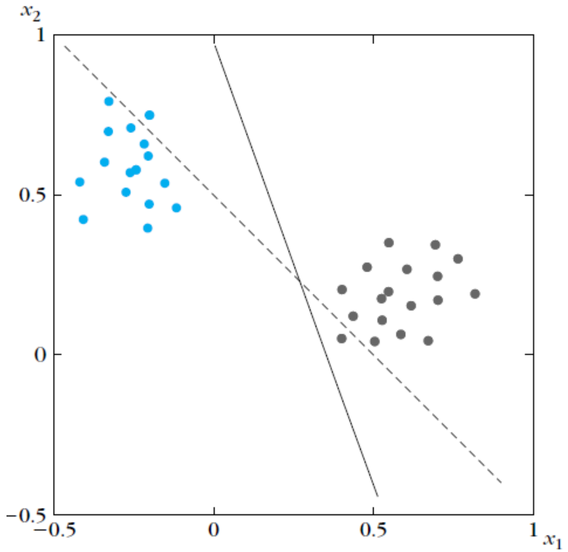


修正后的分类面（绿线）

感知机

例子--1

Initial: the dashed line $x_1 + x_2 - 0.5 = 0$



corresponding to the weight vector $[1, 1, -0.5]^T$, $\rho_t = \rho = 0.7$

感知机

例子--1

Optimization (GD)： $\boldsymbol{w}(n+1)=\boldsymbol{w}(n)-\eta(n)\sum_{x\in E}-d(n)\boldsymbol{x}(n)$

all the vectors except $[0.4, 0.05]^T$ and $[-0.20, 0.75]^T$.

$$\boldsymbol{w}(t+1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -0.5 \end{bmatrix} - 0.7(-1)\begin{bmatrix} 0.4 \\ 0.05 \\ 1 \end{bmatrix} - 0.7(+1)\begin{bmatrix} -0.2 \\ 0.75 \\ 1 \end{bmatrix}$$

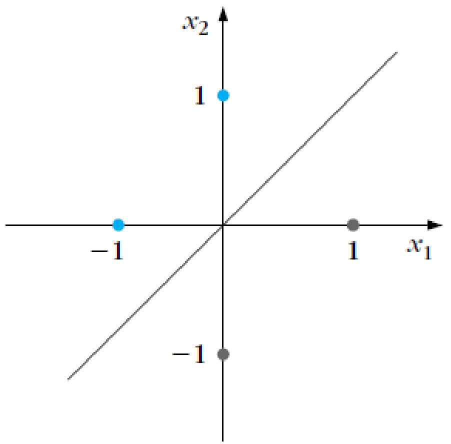
or

$$\boldsymbol{w}(t+1) = \begin{bmatrix} 1.42 \\ 0.51 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

The resulting new (solid) line $1.42x_1 + 0.51x_2 - 0.5 = 0$ classifies all vectors correctly, and the algorithm is terminated.

感知机

例子--2



$(-1,0)$, $(0,1)$ *belong to* C1

$(0,-1)$, $(1,0)$ *belong to* C2

Initial: $\boldsymbol{w}(0)=(0,0,0)^T$

The parameter η is set equal to one.

Data:

$$(-1,0,1),\quad (0,1,1) \quad \in \mathrm{C1},\ \mathrm{d}=+1,\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}>0$$

$$(0,-1,1),\quad (1,0,1) \quad \in \mathrm{C2},\ \mathrm{d}=-1,\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\le 0$$

例子--2

Optimization (SGD):

$$\mathbf{w}(n+1)=\mathbf{w}(n)-\eta(n)\left(-d(n)\mathbf{x}(n)\right)_{|x\in E}=\mathbf{w}(n)+\eta(n)\left(d(n)\mathbf{x}(n)\right)_{|x\in E}$$

Step 1.

$$\boldsymbol{w}^T(0)\begin{bmatrix}-1\\0\\1\end{bmatrix}=0,\quad \boldsymbol{w}(1)=\boldsymbol{w}(0)+\begin{bmatrix}-1\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\0\\1\end{bmatrix}$$

Step 2.

$$\boldsymbol{w}^T(1)\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}=1>0,\quad \boldsymbol{w}(2)=\boldsymbol{w}(1)$$

Step 3.

$$\boldsymbol{w}^T(2)\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix}=1>0,\quad \boldsymbol{w}(3)=\boldsymbol{w}(2)-\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\1\\0\end{bmatrix}$$

感知机

例子--2

Step 4.

$$w^T(3)\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix} = -1 < 0, \quad w(4) = w(3)$$

Step 5.

$$w^T(4)\begin{bmatrix}-1\\0\\1\end{bmatrix} = 1 > 0, \quad w(5) = w(4)$$

Step 6.

$$w^T(5)\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix} = 1 > 0, \quad w(6) = w(5)$$

Step 7.

$$w^T(6)\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix} = -1 < 0, \quad w(7) = w(6)$$

Have a beak !

第三章 线性分类

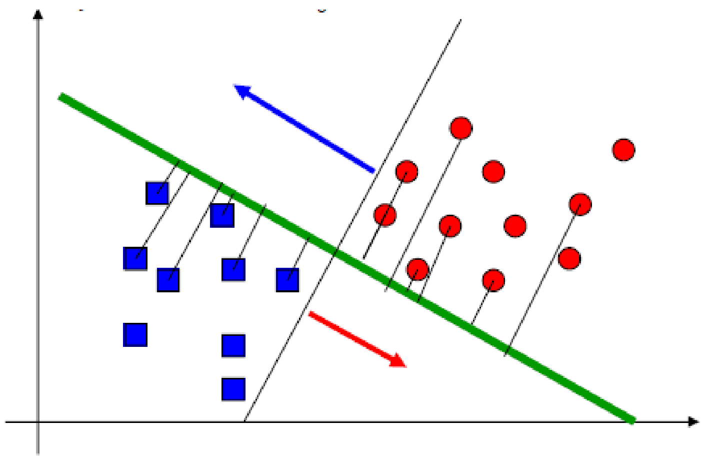
线性鉴别分析

基本思想

求线性变换

$$y = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}$$

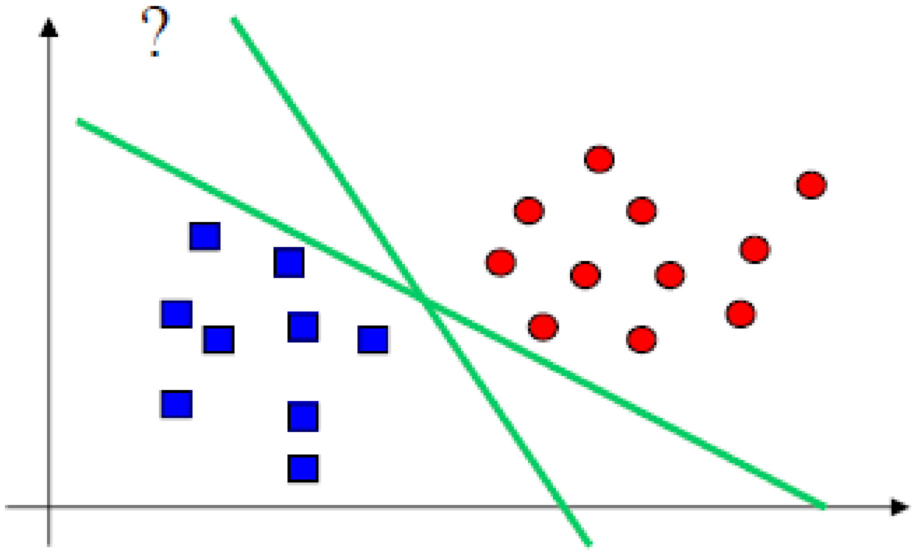
使得样本集$\{x_i\}$线性变换成一维变量$\{y_i\}$后，类别间距大，类内间距小，



线性鉴别分析

基本思想

怎么找到这个方向?

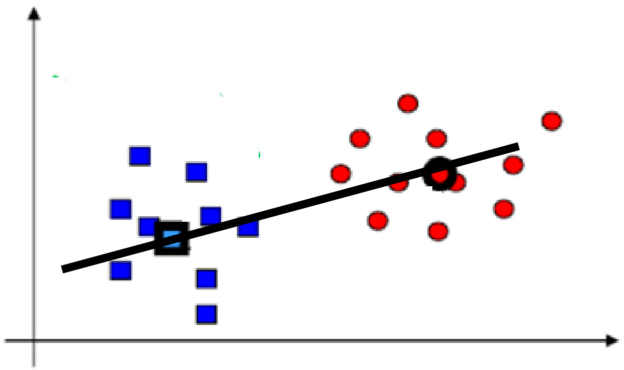


线性鉴别分析

基本思想

假设：　如果用各类的均值代表类别，类别间最大的方向

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{N_1}\sum_{i\in C_1}^{N_1} \boldsymbol{x}_i, \qquad \boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{N_2}\sum_{i\in C_2}^{N_2} \boldsymbol{x}_i$$

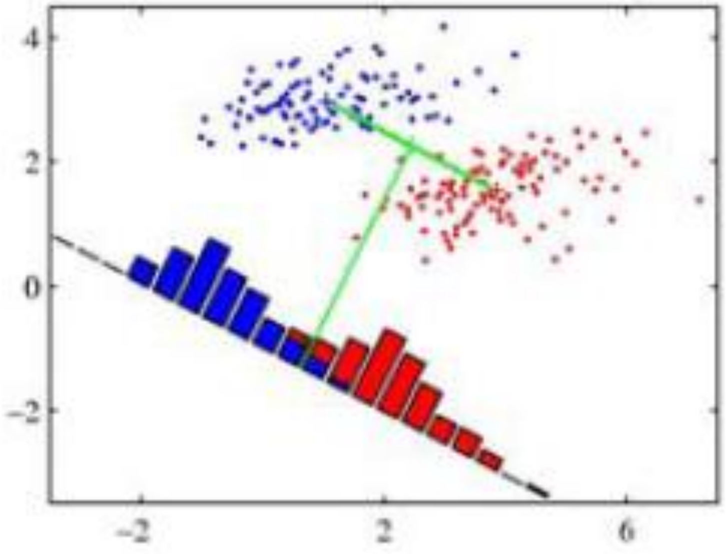


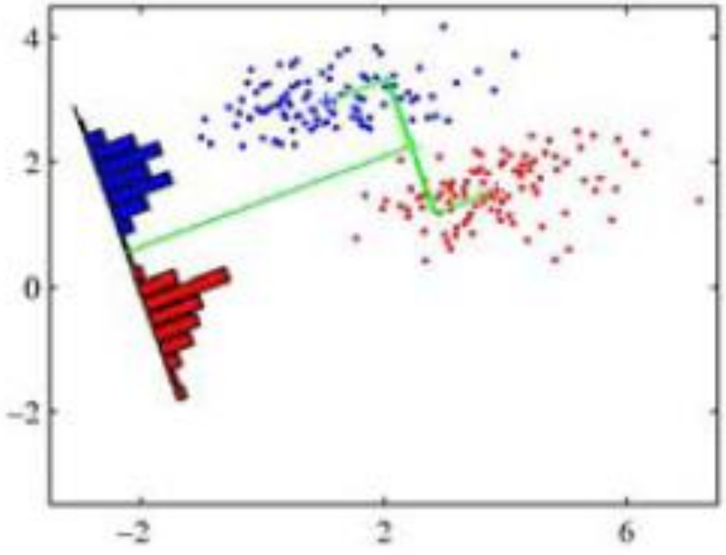
类间最大方向

线性鉴别分析

基本思想

问题：只考虑类间，有可能线性不可分





线性鉴别分析

目标函数（Fisher Criterion）

$$\max\ J(\boldsymbol{w})=\frac{(\boldsymbol{m}_1-\boldsymbol{m}_2)^2}{\boldsymbol{S}_1^2+\boldsymbol{S}_2^2}$$

$$\boldsymbol{J}=\frac{\text{类别间距}}{\text{类内的平均距离}}$$

线性鉴别分析

类别间距离

样本投影后的类别间距离：$(\boldsymbol{m}_1-\boldsymbol{m}_2)^2$； 其中，$\boldsymbol{m}_{\mathrm{i}}$表示第 i 类样本投影后的均值。

第 k 类样本平均值（类心）：

$$\boldsymbol{u}_k=\frac{1}{|C_k|}\sum_{\boldsymbol{x}_i\in C_k}\boldsymbol{x}_i$$

线性鉴别分析

类别间距离

样本投影后的类别间距离：$(\boldsymbol{m}_1-\boldsymbol{m}_2)^2$； 其中，$\boldsymbol{m}_{\mathrm{i}}$表示第 i 类样本投影后的均值。

第 k 类样本平均值（类心）:

$$\boldsymbol{u}_k=\frac{1}{|C_k|}\sum_{\boldsymbol{x}_i\in C_k}\boldsymbol{x}_i$$

两个类别的类心：

$$\boldsymbol{u}_1=\frac{1}{|C_1|}\sum_{\boldsymbol{x}_i\in C_1}\boldsymbol{x}_i\quad,\qquad \boldsymbol{u}_2=\frac{1}{|C_2|}\sum_{\boldsymbol{x}_i\in C_2}\boldsymbol{x}_i$$

线性鉴别分析

类别间距离

样本投影后的类别间距离：$(\boldsymbol{m}_1 - \boldsymbol{m}_2)^2$； 其中，$\boldsymbol{m}_\text{i}$表示第 i 类样本投影后的均值。

样本 x_i 投影到 w 方向后，为 y_i： $y_i = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i$

投影后的类心：

$$
\begin{aligned}
m_k &= \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_k} y_i \\
&= \frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_k} \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i \\
&= \boldsymbol{w}^T \left(\frac{1}{|C_k|} \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_k} \boldsymbol{x}_i \right) \\
&= \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{u}_k
\end{aligned}
$$

线性鉴别分析

类别间距离

样本投影后的类别间距离：$(m_1-m_2)^2$； 其中，m_i表示第 i 类样本投影后的均值。

投影后两类的类心：

$$m_1=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{u}_1 \quad , \quad m_2=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{u}_2$$

$\boldsymbol{w}$ 方向投影后，类间距 ： $m_1-m_2=\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)$

$$\begin{aligned}(m_1-m_2)^2&=(m_1-m_2)(m_1-m_2)^T\\&=\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)^T\boldsymbol{w}\\&=\boldsymbol{w}^T S_b\boldsymbol{w}\end{aligned}$$

其中，类间散度矩阵：$S_b=(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)^T$

若考虑先验可以定义： $S_b=p(\omega_1)p(\omega_2)(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)(\boldsymbol{u}_1-\boldsymbol{u}_2)^T$

线性鉴别分析

类别内的距离

样本投影后的类别内距离：投影后的各类样本方差 $S_1^{\ 2} + S_2^{\ 2}$

样本均方差（类别内松散程度）

$$\sigma_k^{\ 2} = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_k} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{u}_k)^2 = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_k} \tilde{\boldsymbol{x}}_i^{\ 2}$$

两类的均方差：

$$\sigma_1^{\ 2} = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_1} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{u}_1)^2 = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_1} \tilde{\boldsymbol{x}}_i^{\ 2},$$

$$\sigma_2^{\ 2} = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_2} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{u}_2)^2 = \sum_{\boldsymbol{x}_i \in C_2} \tilde{\boldsymbol{x}}_i^{\ 2}$$

线性鉴别分析

类别内的距离

样本投影后的类别内距离：投影后的各类样本方差 $S_1^{\;2}+S_2^{\;2}$

样本 x_i 投影到 $\boldsymbol{w}$ 方向后为 y_i：　$y_i=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_i$

在投影方向 $\boldsymbol{w}$ 上，第 k 类别内，样本距离

$$S_k^{\;2}=\sum_{x_i\in C_k}(y_i-m_k)^2=\sum_{x_i\in C_k}(\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{u}_k))^2=\sum_{x_i\in C_k}(\boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_i)^2$$

$$=\sum_{x_i\in C_k}\left(\boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_i\right)\left(\boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_i\right)^T=\sum_{x_i\in C_k}\boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_i\tilde{\boldsymbol{x}}_i^{\;T}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}^T\Big(\sum_{x_i\in C_k}\tilde{\boldsymbol{x}}_i\tilde{\boldsymbol{x}}_i^{\;T}\Big)\boldsymbol{w}$$

$$=\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{X}_{\mathrm{k}}\boldsymbol{X}_{\mathrm{k}}^{\;T})\boldsymbol{w}$$

其中，$\boldsymbol{X}_k=[\tilde{x}_1,\tilde{x}_2,\ldots\tilde{x}_i,\ldots]_{C_k}$ 第 k 类样本矩阵（$\tilde{x}_i$ 是列向量）

线性鉴别分析

类别内的距离

样本投影后的类别内距离：投影后的各类样本方差 $S_1^{\,2}+S_2^{\,2}$

在投影方向 $\boldsymbol{w}$ 上，类别内距离

$$
\begin{aligned}
S_1^{\,2}+S_2^{\,2} &= \boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_1^{\,T})\boldsymbol{w}+\boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{X}_2\boldsymbol{X}_2^{\,T})\boldsymbol{w} \\
&= \boldsymbol{w}^T(\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_1^{\,T}+\boldsymbol{X}_2\boldsymbol{X}_2^{\,T})\boldsymbol{w} \\
&= \boldsymbol{w}^T S_w \boldsymbol{w}
\end{aligned}
$$

其中，类内散度矩阵：

$$\boldsymbol{S}_w=\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_1^{\,T}+\boldsymbol{X}_2\boldsymbol{X}_2^{\,T}$$

若考虑先验可以定义： $\boldsymbol{S}_w=p(\omega_1)\boldsymbol{X}_1\boldsymbol{X}_1^{\,T}+p(\omega_2)\boldsymbol{X}_2\boldsymbol{X}_2^{\,T}$

线性鉴别分析

求解过程

$$\max\ J(\boldsymbol{w})=\frac{(\boldsymbol{m}_1-\boldsymbol{m}_2)^2}{S_1^2+S_2^2}=\frac{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}}$$

- 广义的 Rayleigh 商，可用 Lagrange 乘子求解， 假设：$\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}=c$

$$L(\boldsymbol{w},\lambda)=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}-\lambda(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}-c)$$

$$\frac{\partial L(\boldsymbol{w},\lambda)}{\partial \boldsymbol{w}}=2\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}-2\lambda\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{w}=0$$

$$\boldsymbol{S}_w^{-1}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{w}=\lambda\boldsymbol{w}$$

- 最优解 $\boldsymbol{w}$ 是 $S_w^{-1}S_b$ 的特征向量

线性鉴别分析

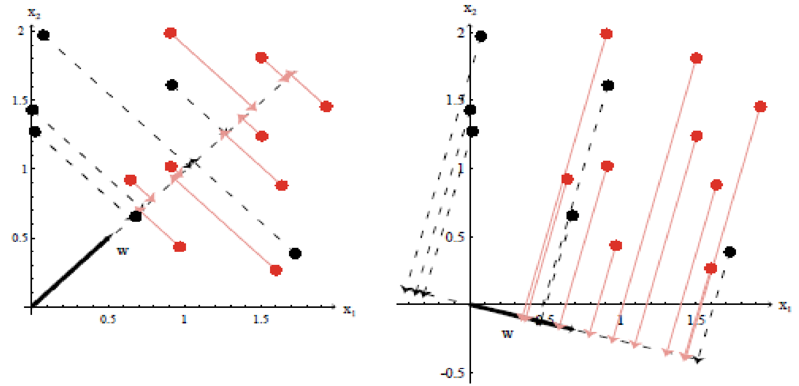
求解过程

实际并没有求特征值，因为 $S_b w$ 在 $u_1 - u_2$ 方向上

$$S_b w = (u_1 - u_2)(u_1 - u_2)^T w = \beta(u_1 - u_2)$$

$$S_w^{-1} S_b w = \lambda w \quad \Longrightarrow \quad S_w^{-1} \beta(u_1 - u_2) = \lambda w$$

$$w = S_w^{-1}(u_1 - u_2)$$



Have a break!

第三章 线性分类

3.1 概述

3.2 基础知识

3.3 感知机

3.4 线性鉴别分析

3.5 logistic 模型

logistic 模型

基本思想

假设 likelihood ratio 的对数为线性判别函数

$$\log\left(\frac{p(\boldsymbol{x}|\omega_i)}{p(\boldsymbol{x}|\omega_M)}\right)=\beta_{i,0}+\boldsymbol{\beta}_i^T\boldsymbol{x},\quad i=1,2,\ldots,M\text{-}1$$

$$\Rightarrow\quad \log\left(\frac{p(\omega_i|\boldsymbol{x})}{p(\omega_M|\boldsymbol{x})}\right)=w_{i,0}+\boldsymbol{w}_i^T\boldsymbol{x},\quad i=1,2,\ldots,M\text{-}1$$

基本思想

多类问题

$$\ln\left(\frac{p(\omega_i \mid \boldsymbol{x})}{p(\omega_M \mid \boldsymbol{x})}\right) = w_{i,0} + \boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x}, \quad i = 1, \ldots, M-1$$

$$\sum_{i=1}^{M} p(\omega_i \mid \boldsymbol{x}) = 1$$

$$\Rightarrow \begin{cases} p(\omega_M \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1 + \sum_{i=1}^{M-1} \exp(w_{i,0} + \boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x})} & (1) \\ p(\omega_i \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{\exp(w_{i,0} + \boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x})}{1 + \sum_{i=1}^{M-1} \exp(w_{i,0} + \boldsymbol{w}_i^T \boldsymbol{x})}, i = 1, \ldots, M-1 & (2) \end{cases}$$

logistic 模型

基本思想

两类问题：

$$\begin{cases} p(\omega_2 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} \\ p(\omega_1 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})}{1+\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} = \dfrac{1}{1+\exp(-(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}))} \end{cases}$$

令 $v=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+w_0$，则

$$\begin{cases} p(\omega_2|\boldsymbol{x})=\dfrac{1}{1+\exp(v)} \\ p(\omega_1|\boldsymbol{x})=\dfrac{1}{1+\exp(-v)} \end{cases}$$

logistic 模型

基本思想

两类问题：

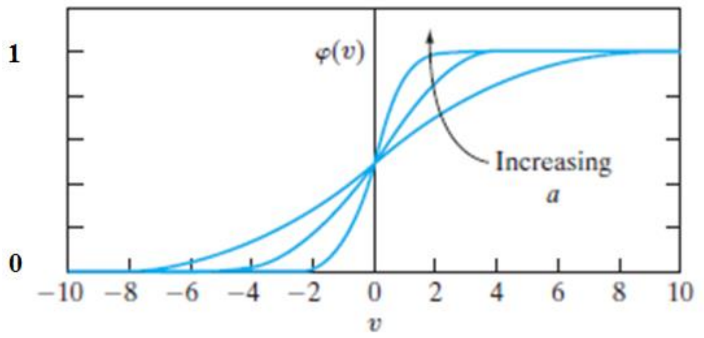
$$\begin{cases} p(\omega_2 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} \\ p(\omega_1 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})}{1+\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} = \dfrac{1}{1+\exp(-(w_0 + \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}))} \end{cases}$$

令 $v=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+w_0$，则

$$\begin{cases} p(\omega_2|\boldsymbol{x})=\dfrac{1}{1+\exp(v)} \\ p(\omega_1|\boldsymbol{x})=\dfrac{1}{1+\exp(-v)} \end{cases}$$

Logistic 函数（Sigmoid 函数）

$$\varphi(v) = \frac{1}{1+\exp(-av)}$$



基本思想

两类问题:

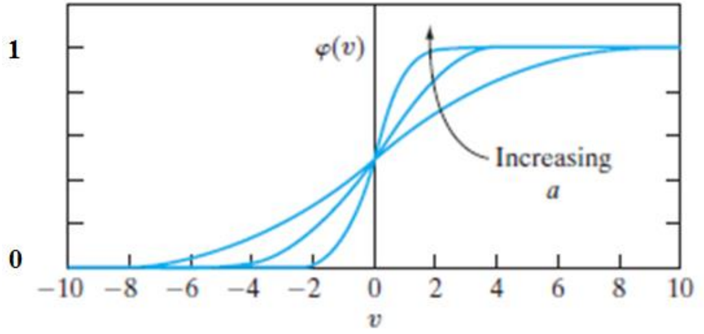
$$
\begin{cases}
p(\omega_2 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})} \\
p(\omega_1 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})}{1+\exp(w_0 + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x})} = \dfrac{1}{1+\exp(-(w_0 + \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}))}
\end{cases}
$$

令 $v=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+w_0$，则

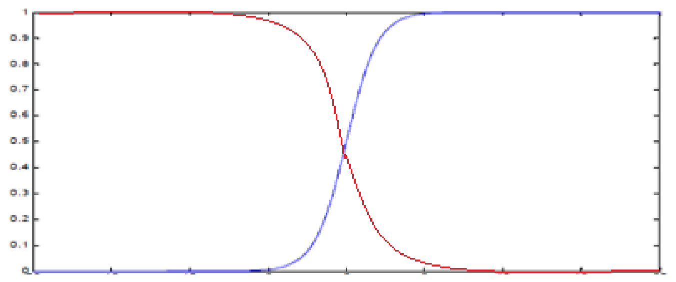
$$
\begin{cases}
p(\omega_2 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(v)} \\
p(\omega_1 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(-v)}
\end{cases}
$$

Logistic 函数（Sigmoid 函数）

$$\varphi(v) = \frac{1}{1+\exp(-av)}$$



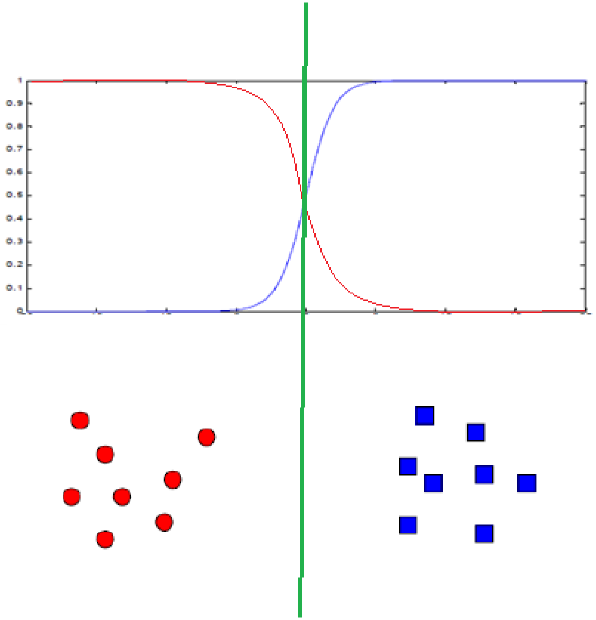
是两个对称函数



logistic 模型

基本思想

求参数 $\boldsymbol{w}$ 和 w_0，相当于确定了一个线性判别函数 $g(x)=\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}+w_0$



$$\begin{cases} p(\omega_2 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{1}{1+\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} \\ p(\omega_1 \mid \boldsymbol{x}) = \dfrac{\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})}{1+\exp(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x})} = \dfrac{1}{1+\exp(-(w_0+\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}))} \end{cases}$$

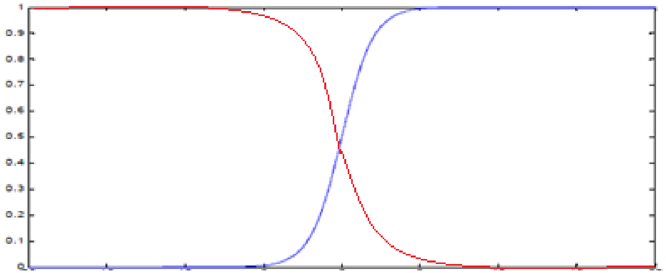
logistic 模型

学习过程

学习目标：

标签ω_1类， $p(\omega_1|\mathbf{x})$越大， $p(\omega_2|\mathbf{x})$越小，

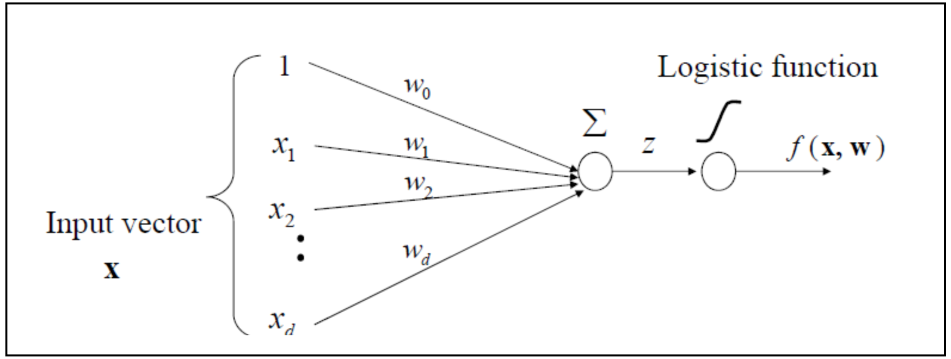
标签ω_2类， $p(\omega_2|\mathbf{x})$越大， $p(\omega_1|\mathbf{x})$越小，



等价于

标签ω_1类， $p(\omega_1|\mathbf{x})$越大，$1-p(\omega_1|\mathbf{x})$越小，

标签ω_2类，$1-p(\omega_1|\mathbf{x})$越大， $p(\omega_1|\mathbf{x})$越小，



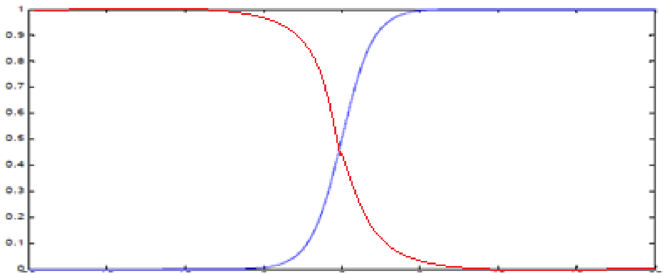
logistic 模型

学习过程

优化准则：

标签 ω_1 类， $p(\omega_1|\mathbf{x})$ 越大

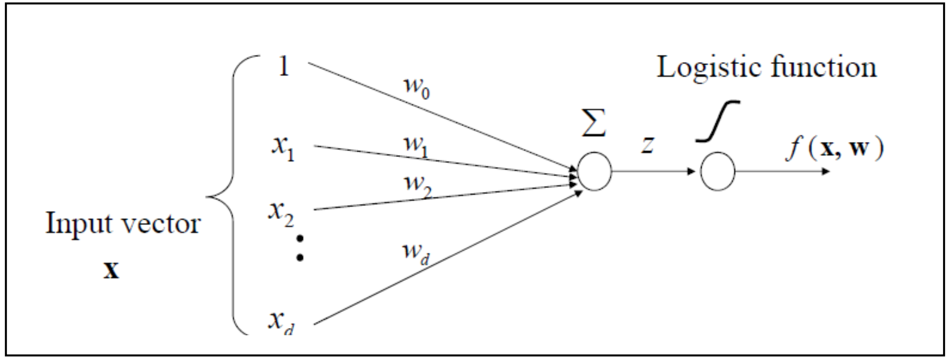
标签 ω_2 类， $p(\omega_2|\mathbf{x})$ 越大



等价于

标签 ω_1 类， $p(\omega_1|\mathbf{x})$ 越大

标签 ω_2 类， $1-p(\omega_1|\mathbf{x})$ 越大



学习过程

最大似然求取参数 $\theta=\{w_i, w_{i,0}\}_{i=1,\ldots,M-1}$

$$L(\theta)=\ln\left\{\prod_{k=1}^{N_1} p(x_k^{(1)}|\omega_1;\theta)\prod_{k=1}^{N_2} p(x_k^{(2)}|\omega_2;\theta)\ldots\prod_{k=1}^{N_M} p(x_k^{(M)}|\omega_M;\theta)\right\}$$

$$p(x_k^{(m)}|\omega_m;\theta)=\frac{p(x_k^{(m)})P(\omega_m|x_k^{(m)};\theta)}{P(\omega_m)}$$

将(1)(2)带入后

$$L(\theta)=\sum_{k=1}^{N_1}\ln P(\omega_1|x_k^{(1)})+\sum_{k=1}^{N_2}\ln P(\omega_2|x_k^{(2)})+\ldots+\sum_{k=1}^{N_M}\ln P(\omega_M|x_k^{(M)})+C$$

,

$$C=\ln\frac{\prod_{k=1}^{N} p(x_k)}{\prod_{m=1}^{M} P(\omega_m)^{N_m}}$$

忽略先验的最大后验估计，就是最大似然估计

logistic 模型

学习过程

最大 $L(\theta)$ 问题转化为最小 $-L(\theta)$

求得 $\nabla L(\theta) = \dfrac{-\partial L(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}}$，采用梯度下降方法，

求解 $\boldsymbol{\theta} = \{\mathbf{w}_i, w_{i,0}\}_{i=1,\ldots,M-1}$；　**m** 类与其他 **m-1** 类别的线性决策函数。

Have a break!

模型理解

两类问题，

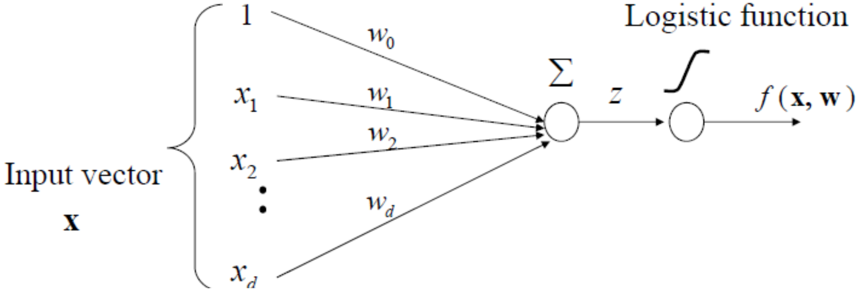
Discriminant functions:

$$g_1(\mathbf{x}) = g(\mathbf{w}^T\mathbf{x}) \qquad g_0(\mathbf{x}) = 1 - g(\mathbf{w}^T\mathbf{x})$$

Sigmoid function:

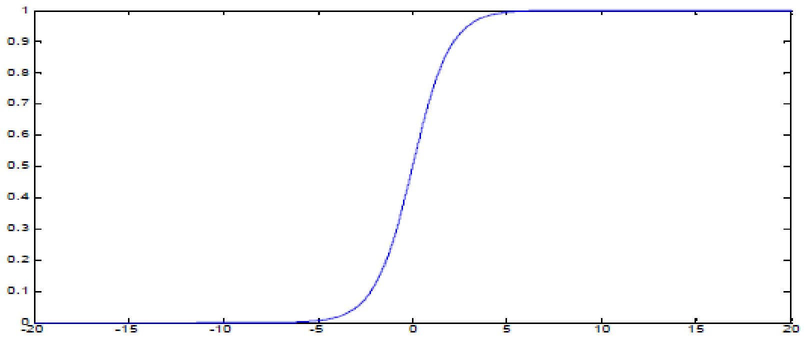
$$g(z) = 1/(1+e^{-z})$$

单层神经元、Logistic 激活函数



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

- Is also referred to as a **sigmoid function**
- Replaces the threshold function with smooth switching
- takes a real number and outputs the number in the interval [0,1]



logistic 模型

模型理解

– **Probabilistic interpretation**

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = p(y = 1 \mid \mathbf{w}, \mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) = g(\mathbf{w}^T \mathbf{x})$$

$$p(y = 0 \mid \mathbf{x}, \mathbf{w}) = 1 - p(y = 1 \mid \mathbf{x}, \mathbf{w})$$

Decision boundary: $g_1(\mathbf{x}) = g_0(\mathbf{x})$

the boundary it must hold:

$$\log \frac{g_o(\mathbf{x})}{g_1(\mathbf{x})} = \log \frac{1 - g(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x})}{g(\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x})} = 0$$

logistic 模型

模型理解

线性决策界:

$$\log\frac{g_o(\mathbf{x})}{g_1(\mathbf{x})}=\log\frac{\dfrac{\exp-(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})}{1+\exp-(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})}}{\dfrac{1}{1+\exp-(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})}}=\log\exp-(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x})=\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}=0$$

logistic 模型

模型优化

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

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

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

或者 $$p(y_i \mid \boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}, b) = y_i p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) + (1-y_i)(1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}))$$

最大化的似然估计：

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

小结

1．掌握基础知识：

线性模型的基本表达、向量相似计算、常用的统计量；

2.重点掌握线性分类模型：感知器、线性鉴别；

了解logistic鉴别；

3．掌握随机梯度下降优化方法.

参考文献

1. Pattern Recognition 2nd.《模式识别》(第二版), 边肇祺, 张学工等,清华大学出版社，2000.1。
2. Pattern Classification, 2nd.模式分类，第二版。
3. 周志华，机器学习，清华大学出版社，2016.