第3章 线性模型

王博：自动化（人工智能）学院
wangbo@hdu. edu. cn

目录

线性回归

- 最小二乘法

二分类任务

- 对数几率回归
- 线性判别分析

多分类任务

- 一对一
- 一对其余
- 多对多

类别不平衡问题

基本形式

线性模型一般形式

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

$$\boldsymbol{x} = (x_1; x_2; \ldots; x_d)$$

是由属性描述的示例，其中x_i是$\boldsymbol{x}$在第 i 个属性上的取值

向量形式

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

其中 $\boldsymbol{w} = (w_1; w_2; \ldots; w_d)$

线性模型优点

形式简单、易于建模

可解释性

非线性模型的基础

- 引入层级结构或高维映射

一个例子

$$f_{\text{好瓜}}(\boldsymbol{x}) = 0.2 \cdot x_{\text{色泽}} + 0.5 \cdot x_{\text{根蒂}} + 0.3 \cdot x_{\text{敲声}} + 1$$

- 综合考虑色泽、根蒂和敲声来判断西瓜好不好
- 其中根蒂的系数最大，表明根蒂最要紧；而敲声的系数比色泽大，说明敲声比色泽更重要

线性回归

给定数据集 $D=\{(\boldsymbol{x}_1,y_1),(\boldsymbol{x}_2,y_2),\ldots,(\boldsymbol{x}_m,y_m)\}$

其中 $\boldsymbol{x}_i=(x_{i1};x_{i2};\ldots;x_{id})$ $y_i\in\mathbb{R}$

线性回归（linear regression）目的

- 学得一个线性模型以尽可能准确地预测实值输出标记

离散属性处理

- 有“序”关系
  - 连续化为连续值
- 无“序”关系
  - 有k个属性值，则转换为k维向量

线性回归

单一属性的线性回归目标

$$f(x) = wx_i + b \quad \text{使得} \quad f(x_i) \simeq y_i$$

参数/模型估计：最小二乘法（least square method）

$$\begin{aligned}(w^*, b^*) &= \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(f(x_i) - y_i\right)^2 \\ &= \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - wx_i - b\right)^2\end{aligned}$$

线性回归 – 最小二乘法

最小化均方误差

$$E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i - b)^2$$

分别对 w 和 b 求导，可得

$$\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w} = 2\left(w\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \sum_{i=1}^{m} (y_i - b)\, x_i\right)$$

$$\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b} = 2\left(mb - \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i)\right)$$

线性回归 – 最小二乘法

闭式（closed-form）解

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

$$b = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i)$$

其中

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

多元线性回归

给定数据集

$$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$$

$$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1}; x_{i2}; \ldots; x_{id}) \quad y_i \in \mathbb{R}$$

多元线性回归目标

$$f(\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_i + b \text{ 使得 } f(\boldsymbol{x}_i) \simeq y_i$$

多元线性回归

把 $\boldsymbol{w}$和 b吸收入向量形式 $\hat{\boldsymbol{w}} = (\boldsymbol{w}; b)$ 数据集表示为

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} & 1 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{y} = (y_1; y_2; \ldots; y_m)$$

多元线性回归 – 最小二乘法

最小二乘法（least square method）

$$\hat{\boldsymbol{w}}^{*}=\underset{\hat{\boldsymbol{w}}}{\arg\min}\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)$$

令 $E_{\hat{\boldsymbol{w}}}=\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)$，对 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 求导得到

$$\frac{\partial E_{\hat{\boldsymbol{w}}}}{\partial\hat{\boldsymbol{w}}}=2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\boldsymbol{y}\right)$$

令上式为零可得 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 最优解的闭式解

多元线性回归–满秩讨论

$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 是满秩矩阵或正定矩阵，则

$$\hat{\boldsymbol{w}}^* = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

其中 $\left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}$ 是 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 的逆矩阵。

令 $\hat{x}_i = (x_i;1)$，线性回归模型为

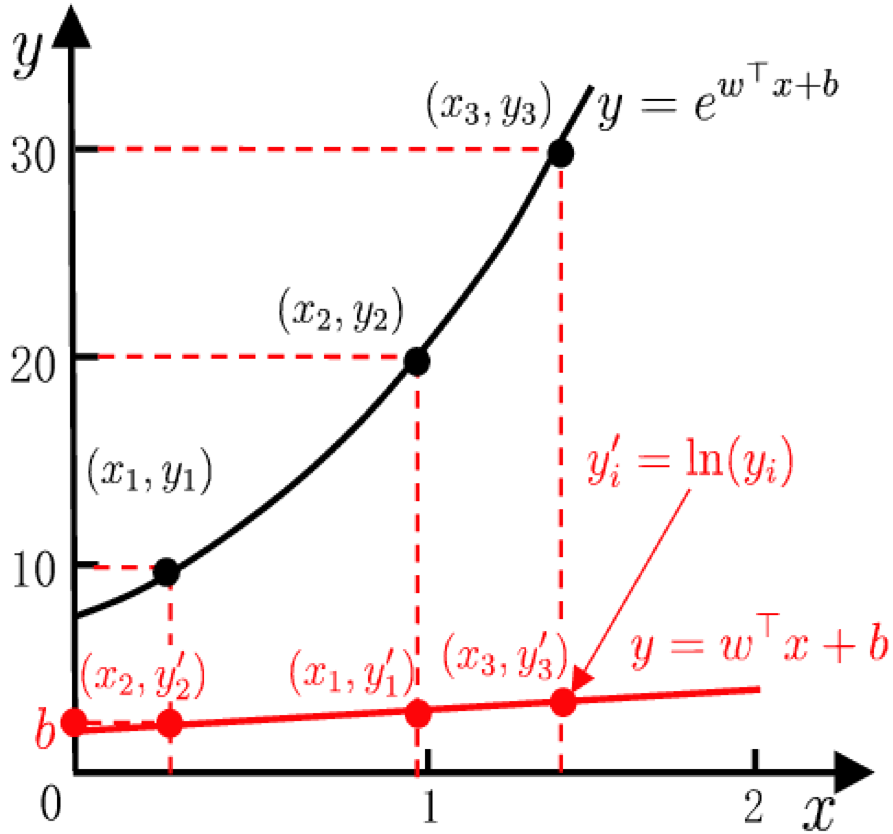
$$f\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i\right) = \hat{\boldsymbol{x}}_i^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

$\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$不是满秩矩阵

- 根据归纳偏好选择解
- 引入正则化

对数线性回归

输出标记的对数为线性模型逼近的目标



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

$$\Updownarrow$$

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

线性回归-广义线性模型

一般形式

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

$g(\cdot)$称为联系（联结）函数（link function）

- 单调可微函数

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

二分类任务

预测值与输出标记

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

寻找函数将分类标记与线性回归模型输出联系起来

最理想的函数——单位阶跃函数

$$y = \begin{cases} 0, & z < 0; \\ 0.5, & z = 0; \\ 1, & z > 0, \end{cases}$$

- 预测值大于零就判为正例，小于零就判为反例，预测值为临界值零则可任意判别

二分类任务

单位阶跃函数缺点

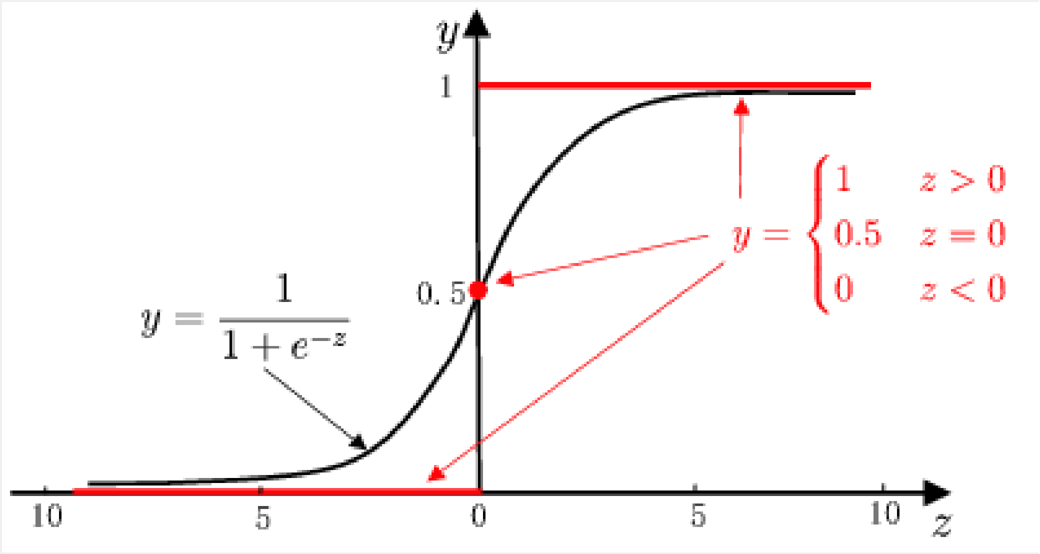
- 不连续

替代函数——对数几率函数（logistic function）Sigmoid函数

单调可微、任意阶可导

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

单位阶跃函数与对数几率函数的比较



对数几率回归

运用对数几率函数

$$y = \frac{1}{1+e^{-z}} \quad \text{变为} \quad y = \frac{1}{1+e^{-(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b)}}$$

对数几率（log odds）

- 样本作为正例的相对可能性的对数

$$\ln\frac{y}{1-y} = z = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b$$

对数几率回归优点

- 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

对数几率回归–极大似然法

对数几率

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

显然有

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

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

对数几率回归 – 极大似然法

极大似然法（maximum likelihood）

- 给定数据集

$$\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$$

- 最大化样本属于其真实标记的概率
  - 最大化对数似然函数

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

对数几率回归 – 极大似然法

转化为最小化负对数似然函数求解

- 令$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{w}; b), \hat{\boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{x}; 1)$，则$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$ 可简写为$\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}$

- 再令 $p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) = p(y = 1 \mid \hat{\boldsymbol{x}}; \boldsymbol{\beta})$

$$p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) = p(y = 0 \mid \hat{\boldsymbol{x}}; \boldsymbol{\beta}) = 1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})$$

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

则似然项可重写为

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

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

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

对数几率回归

求解得

$$\boldsymbol{\beta}^* = \underset{\boldsymbol{\beta}}{\arg\min}\, \ell(\boldsymbol{\beta})$$

牛顿法第t+1轮迭代解的更新公式

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

其中关于 β 的一阶、二阶导数分别为

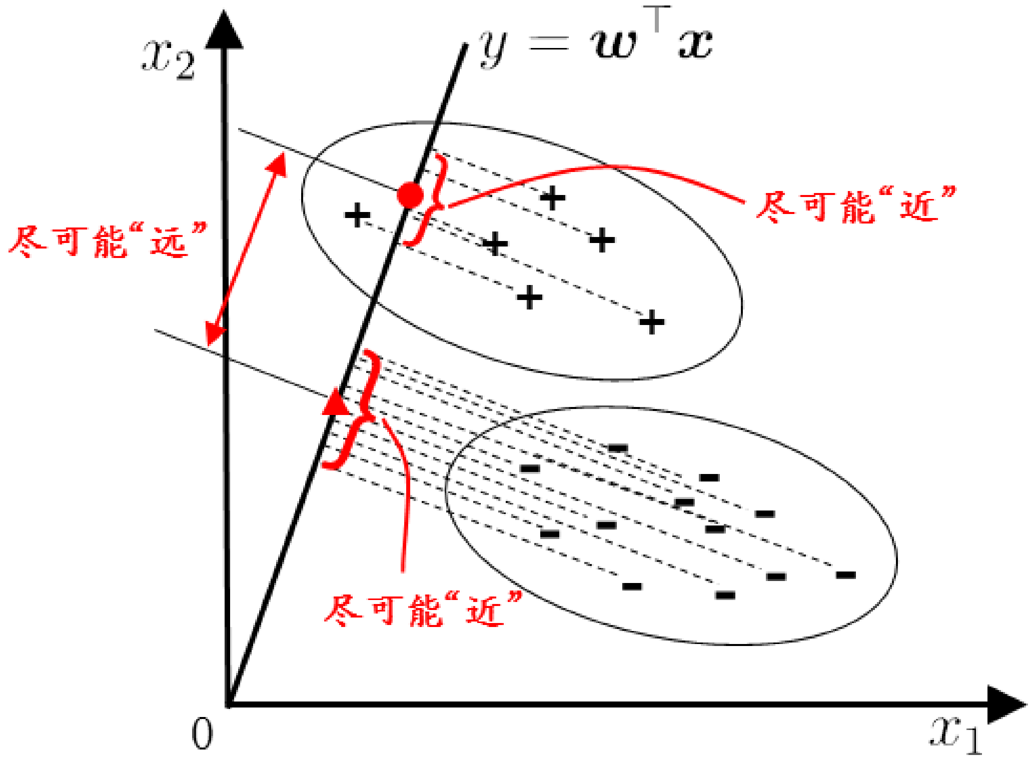
$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\sum_{i=1}^{m} \hat{\boldsymbol{x}}_i \left(y_i - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})\right)$$

$$\frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{\boldsymbol{x}}_i \hat{\boldsymbol{x}}_i^{\mathrm{T}} p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) \left(1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})\right)$$

高阶可导连续凸函数，梯度下降法/牛顿法 [Boyd and Vandenberghe, 2004]

二分类任务 – 线性判别分析

线性判别分析（**Linear Discriminant Analysis**）**[Fisher, 1936]**



LDA也可被视为一种监督降维技术

二分类任务 - 线性判别分析

n维随机向量X的协方差

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix}$$

并且μ_i是X_i的期望值，即，$\mu_i = \mathrm{E}(X_i)$。协方差矩阵的第(i,j)项（第(i,j)项是一个协方差）被定义为如下形式：

$$\Sigma_{ij} = \mathrm{cov}(X_i, X_j) = \mathrm{E}[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)]$$

而协方差矩阵为：

$$\Sigma = \mathrm{E}\left[(\mathbf{X} - \mathrm{E}[\mathbf{X}])(\mathbf{X} - \mathrm{E}[\mathbf{X}])^{\mathrm{T}}\right]$$

$$= \begin{bmatrix} \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_n-\mu_n)] \\ \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_n-\mu_n)] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_n-\mu_n)] \end{bmatrix}$$

二分类任务 – 线性判别分析

样本实现协方差的估计

设 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 为一组随机变量, 记 $X = (X_1, X_2, \cdots, X_n)^T$ 为由这 n 个随机变量构成的随机向量. 假设每个随机变量有 m 个样本, 将所有样本拼在一起可得如下**样本矩阵**

$$S = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,m} \\ & & \ddots & \\ x_{n,1} & x_{n,2} & \cdots & x_{n,m} \end{bmatrix}_{n\times m}$$

列表示样本数目

$$E(X_i) = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} x_{i,k}, \quad E(X_j) = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} x_{j,k},$$

二分类任务 – 线性判别分析

样本实现协方差的估计

$$Y_k = (x_{ik} - E(X_i))(x_{jk} - E(X_j)),\ k = 1, 2, \cdots, m.$$

$$\begin{aligned} c_{i,j} &= E(Y) = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} Y_k \\ &= \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}(x_{i,k} - E(X_i))(x_{j,k} - E(X_j)) \\ &= \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m}\left[(x_{i,k} - \frac{1}{m}\sum_{p=1}^{m} x_{i,p})(x_{j,k} - \frac{1}{m}\sum_{q=1}^{m} x_{j,q})\right]. \end{aligned}$$

多元高斯分布

$$f_{\mathbf{x}}(x_1, \ldots, x_k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^k |\boldsymbol{\Sigma}|}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})},$$

注意这里的$|\Sigma|$表示协方差矩阵的行列式。

二分类任务 – 线性判别分析

LDA的思想

- 欲使同类样例的投影点尽可能接近，可以让同类样例投影点的协方差尽可能小
- 欲使异类样例的投影点尽可能远离，可以让类中心之间的距离尽可能大

一些变量

- 第i类示例的集合 X_i
- 第i类示例的均值向量 $\boldsymbol{\mu}_i$
- 第i类示例的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_i$
- 两类样本的中心在直线上的投影： $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_0$ 和 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1$
- 两类样本的协方差： $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_0\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{w}$

二分类任务 – 线性判别分析

最大化目标（不同类中心尽可能远，同类尽可能近）

$$
\begin{aligned}
J &= \frac{\left\|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1\right\|_2^2}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_0\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{w}} \\
&= \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1\right)\left(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{\Sigma}_0 + \boldsymbol{\Sigma}_1\right)\boldsymbol{w}}
\end{aligned}
$$

类内散度矩阵：类内散度矩阵用于表示样本点围绕均值的散步情况

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S}_w &= \boldsymbol{\Sigma}_0 + \boldsymbol{\Sigma}_1 \\
&= \sum_{\boldsymbol{x}\in X_0}\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_0\right)\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_0\right)^{\mathrm{T}} + \sum_{\boldsymbol{x}\in X_1}\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1\right)\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_1\right)^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
$$

类间散度矩阵

$$
\mathbf{S}_b = \left(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1\right)\left(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1\right)^{\mathrm{T}}
$$

二分类任务－ 线性判别分析

广义瑞利商（generalized Rayleigh quotient）

$$J = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_b \boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w \boldsymbol{w}}$$

令 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w \boldsymbol{w} = 1$，最大化广义瑞利商等价形式为

$$\min_{\boldsymbol{w}} \; -\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_b \boldsymbol{w}$$

$$\text{s.t.} \; \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w \boldsymbol{w} = 1$$

运用拉格朗日乘子法

$$\mathbf{S}_b \boldsymbol{w} = \lambda \mathbf{S}_w \boldsymbol{w}$$

二分类任务－ 线性判别分析

同向向量

$$\underbrace{\mathbf{S}_b \boldsymbol{w}}_{\text{同向向量}} = \lambda \underbrace{(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)}_{\text{同向向量}}$$

结果

$$\boldsymbol{w} = \mathbf{S}_w^{-1} (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$$

求解

- 奇异值分解 $\mathbf{S}_w = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T$

LDA推广 – 多分类任务

全局散度矩阵

$$\mathbf{S}_t = \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{m} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

类内散度矩阵

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_{w_i} \qquad \mathbf{S}_{w_i} = \sum_{\boldsymbol{x} \in X_i} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i) (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T$$

求解得

$$\mathbf{S}_b = \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} m_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}) (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

LDA推广 – 多分类任务

优化目标

$$\max_{\mathbf{W}} \frac{\operatorname{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b\mathbf{W}\right)}{\operatorname{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\mathbf{W}\right)} \qquad \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d\times(N-1)}$$

求解 $\mathbf{S}_b\mathbf{W} = \lambda\mathbf{S}_w\mathbf{W}$

$\mathbf{W}$ 闭式解则是 $\mathbf{S}_w^{-1}\mathbf{S}_b$ 的N-1个最大广义特征值所对应的特征向量组成的矩阵

多分类LDA将样本投影到N-1维空间，N-1通常远小于数据原有的属数，因此LDA也被视为一种监督降维技术

多分类学习

多分类学习方法

- 二分类学习方法推广到多类
- 利用二分类学习器解决多分类问题（常用）
  - 对问题进行拆分，为拆出的每个二分类任务训练一个分类器
  - 对于每个分类器的预测结果进行集成以获得最终的多分类结果

拆分策略

- 一对一（One vs. One，OvO）
- 一对其余（One vs. Rest，OvR）
- 多对多（Many vs. Many，MvM）

多分类学习－一对一

拆分阶段

- N个类别两两配对
  - $N(N-1)/2$ 个二类任务
- 各个二类任务学习分类器
  - $N(N-1)/2$ 个二类分类器

测试阶段

- 新样本提交给所有分类器预测
  - $N(N-1)/2$ 个分类结果
- 投票产生最终分类结果
  - 被预测最多的类别为最终类别

多分类学习 – 一对其余

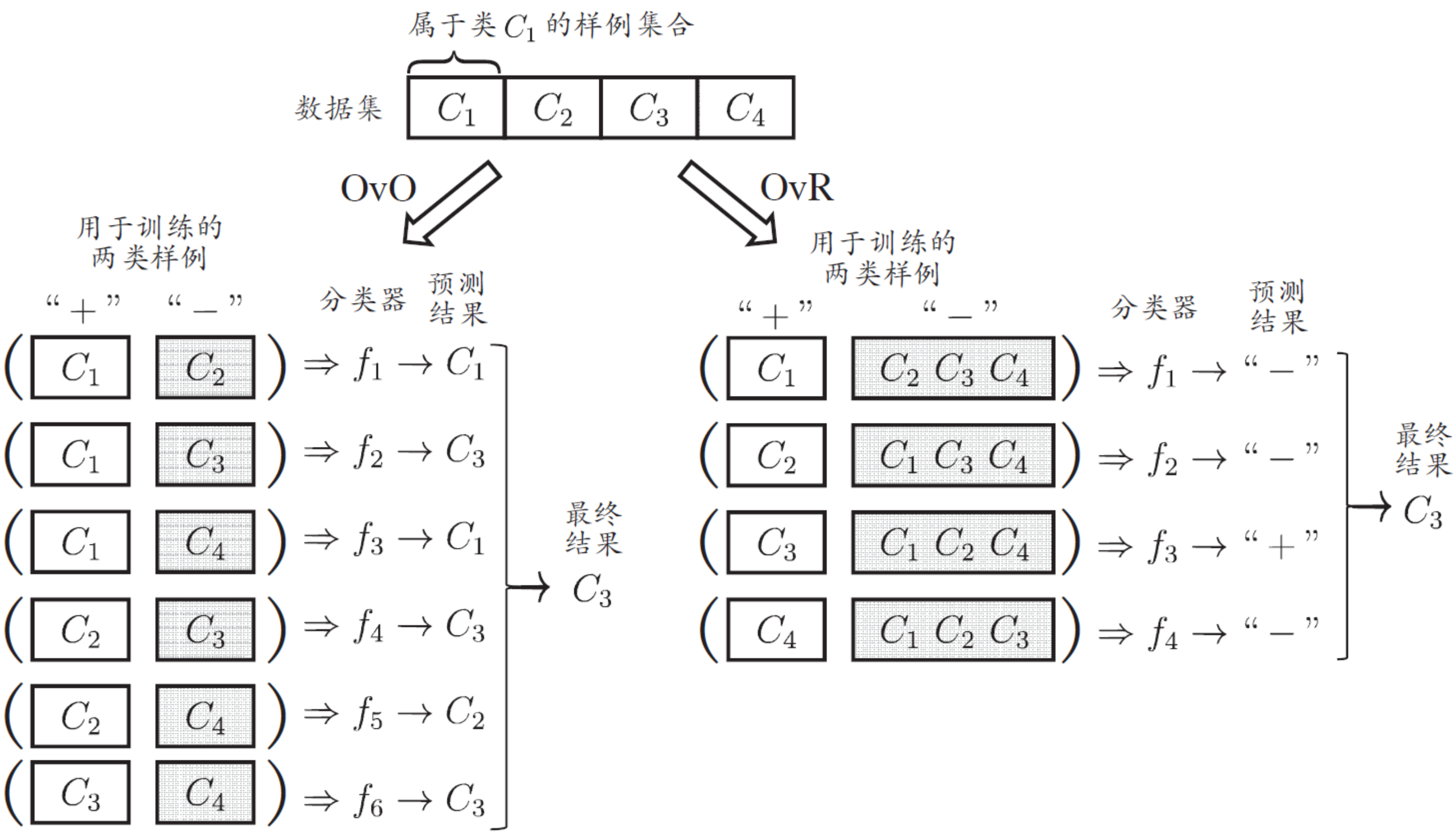
任务拆分

- 某一类作为正例，其他反例
  - N 个二类任务
- 各个二类任务学习分类器
  - N 个二类分类器

测试阶段

- 新样本提交给所有分类器预测
  - N 个分类结果
- 比较各分类器预测置信度
  - 置信度最大类别作为最终类别

多分类学习 – 两种策略比较



多分类学习－ 两种策略比较

一对一

- 训练N(N-1)/2个分类器，存储开销和测试时间大
- 训练只用两个类的样例，训练时间短

一对其余

- 训练N个分类器，存储开销和测试时间小
- 训练用到全部训练样例，训练时间长

预测性能取决于具体数据分布，多数情况下两者差不多

多分类学习－ 多对多

多对多（Many vs Many, MvM）

- 若干类作为正类，若干类作为反类
- 纠错输出码（Error Correcting Output Code, ECOC）

编码：对N个类别做M次划分，每次划分将一部分类别划为正类，一部分划为反类

M个二类任务
各个类别长度为M的编码

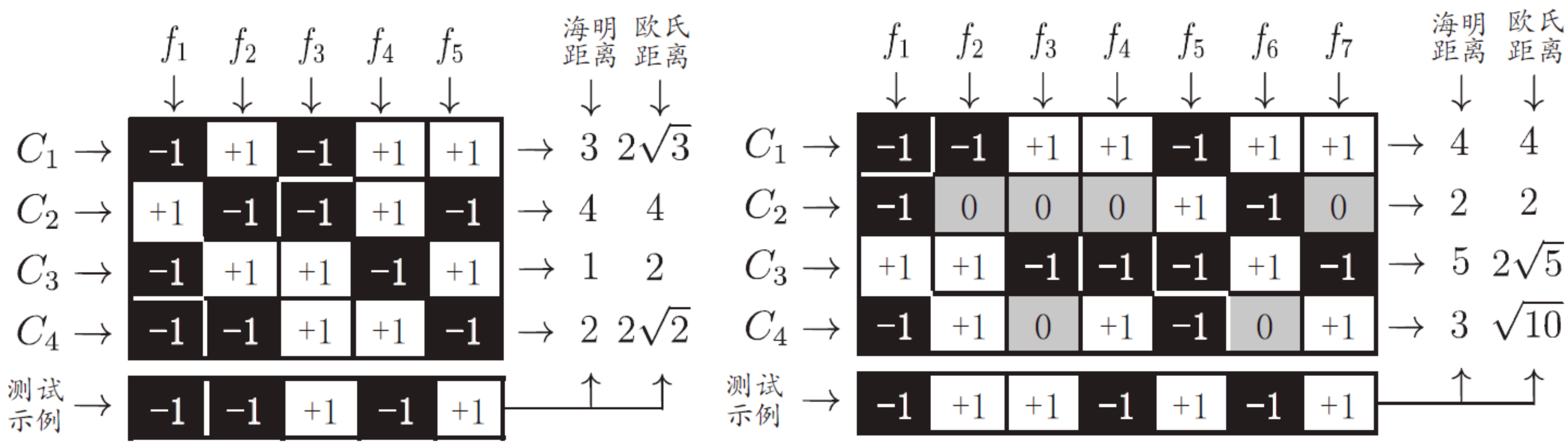
距离最小的类别为最终类别

解码：测试样本交给M个分类器预测

长度为M的编码预测

多分类学习 - 多对多

纠错输出码(Error Correcting Output Code, ECOC)



(a) 二元 ECOC 码 [Dietterich and Bakiri,1995]

(b) 三元 ECOC 码 [Allwein et al. 2000]

- 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

类别不平衡问题

类别不平衡（class imbalance）

- 不同类别训练样例数相差很大情况（正类为小类）

类别平衡正例预测 $\frac{y}{1-y} > 1$ ⇨ $\frac{y}{1-y} > \frac{m^+}{m^-}$ 正负类比例

再缩放

- 欠采样（undersampling）
  - 去除一些反例使正反例数目接近（EasyEnsemble [Liu et al.,2009]）
- 过采样（oversampling）
  - 增加一些正例使正反例数目接近（SMOTE [Chawla et al.2002]）
- 阈值移动（threshold-moving）

优化提要

各任务下（回归、分类）各个模型优化的目标

- 最小二乘法：最小化均方误差
- 对数几率回归：最大化样本分布似然
- 线性判别分析：投影空间内最小（大）化类内（间）散度

参数的优化方法

- **最小二乘法：线性代数**
- **对数几率回归：凸优化梯度下降、牛顿法**
- **线性判别分析：矩阵论、广义瑞利商**

总结

线性回归

- 最小二乘法（最小化均方误差）

二分类任务

- 对数几率回归
  - 单位阶跃函数、对数几率函数、极大似然法
- 线性判别分析
  - 最大化广义瑞利商

多分类学习

- 一对一
- 一对其余
- 多对多
  - 纠错输出码

类别不平衡问题

- 基本策略：再缩放