> 少量点无法确定高维模型，需要引入归纳偏好
> 数据太多用最小二乘
> 处理离散属性，有序就连续化，没有就转为k维向量

一、回归问题

线性回归的前提假设之一是残差必须服从独立正态分布

最小二乘

- 均方误差（欧氏距离）最小化

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

- 求导得闭式解

分别对 w 和 b 求导:

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

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

令导数为 0, 得到闭式(closed-form)解:

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

多元表示

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

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} & 1 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{y} = (y_1; y_2; \ldots; y_m)$$

- 矩阵表示

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

$E_{\hat{\boldsymbol{w}}} = (\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}})$，对 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 求导：

$$\frac{\partial E_{\hat{\boldsymbol{w}}}}{\partial \hat{\boldsymbol{w}}} = 2\mathbf{X}^{\mathrm{T}}(\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}-\boldsymbol{y}) \qquad \text{令其为零可得 } \hat{\boldsymbol{w}}$$

- 求逆讨论

□ 若 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 满秩或正定，则 $\hat{\boldsymbol{w}}^* = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$

□ 若 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 不满秩，则可解出多个 $\hat{\boldsymbol{w}}$

此时需求助于归纳偏好，或引入 正则化 (regularization) ⟶ 第6、11章

- 把高维当作多元：如通过多项式变换进行增广，等价于高阶多项式的线性模型

模型推广

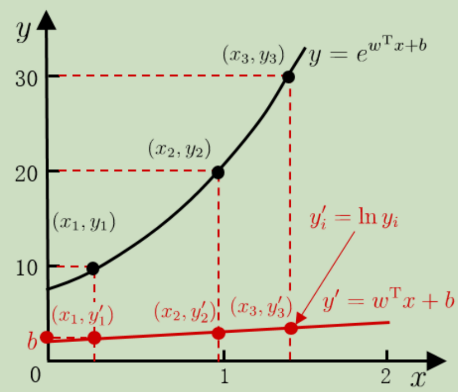
令预测值逼近 y 的衍生物？

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

则得到对数线性回归

(log-linear regression)

实际是在用 $e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}$ 逼近 y



- 广义形式

一般形式：$y = g^{-1}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b)$

单调可微的 联系函数 (link function)

令 $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 则得到 对数线性回归

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

正则化项

对比岭回归和原始线性回归的解, 能够发现这两个模型权重 $\boldsymbol{w}$ 有所不同, 偏移项 b 的形式是一致的, 但会基于对应的 $\boldsymbol{w}$ 的最优解进行计算. 在岭回归的最优解中, 主要的区别在于公式 (23)的第一项在矩阵求逆的过程中增加了 $2\lambda \boldsymbol{I}_d$. 新增的一项能够避免矩阵的特征值趋于 0, 使得 $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{H} \boldsymbol{X} + 2\lambda \boldsymbol{I}_d$ 矩阵的特征值至少大于 2λ, 从而方便矩阵的求逆操作. 岭回归方法也能够看做具有高斯先验的线性回归模型, 在第 7 章中将进一步讨论.

实际应用中, 正则化 $\Omega(\cdot)$ 一般用于对模型的复杂度进行约束, 防止过拟合. 除了本例所示的 $\Omega = \|\boldsymbol{w}\|_2^2$ 外, 也可以设置为其他的范数, 例如 L_1 范数 $\Omega = \|\boldsymbol{w}\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |w_i|$, 即权重 $\boldsymbol{w}$ 各元素绝对值之和. 使用 L_1 范数正则化能够使权重 $\boldsymbol{w}$ 的元素稀疏（有大量元素为 0）.

在线性回归模型中, 正则化一般只用于权重 $\boldsymbol{w}$ 而不施加于偏移项 b. 观察线性回归模型对于训练样例和测试样例的预测结果, 偏移项 b 刻画了残差的均值, 当对样例进行中心化之后, 目标函数中将不包含 b. 因此, 一般保留 b 的实际语义, 使 b 能够直接刻画一种" 截距", 而不对 b 进行大小的约束. 从这一处理也能够看出, 在求解岭回归模型中, 将偏移项并入权重项合并求解和单独求解得到的结果有所不同.

二、分类问题--对数几率回归

> 从建模到优化，是标准过程，麻雀五脏俱全

- 名字叫回归，实际是分类，是分类学习算法

单位阶跃函数：

- 把实质转化为0/1

> 预测值大于0判为正例，为0随意

- 缺点：不可导，不连续

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

对数几率函数（Sigmoid）：

- 平滑可导

> 替代函数surrogate function，简称为对率函数logistic function

以对率函数为联系函数:

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

> y：样本x正例的概率
> y/1-y：几率，反映x是正例的相对可能性
> ln（y/1-y）：对数几率

优点

- 无需假设数据分布，直接对分类可能性建模

> （避免假设不准确的误差）

- 得到近似概率预测

> （不仅仅预测类别，适用于概率辅助决策任务）

- 凸函数，任意阶可导

> 好算（数值优化算法求解最优解）

和一般回归的区别

- 可以预测事件可能性
- 度量模型拟合程度
- 估计回归系数

求解思路

1、把样本正例概率用后验概率描述

若将 y 看作类后验概率估计 $p(y=1 \mid \boldsymbol{x})$，则

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

2、极大似然法

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

最大化"对数似然"(log-likelihood)函数

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

3、似然项重写

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 $p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})=p(y=1\mid\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})=\dfrac{e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}{1+e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$

$p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})=p(y=0\mid\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta})=1-p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})=\dfrac{1}{1+e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$

则似然项可重写为 $p(y_i\mid\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{w}_i,b)=y_ip_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})+(1-y_i)p_0(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta})$

- 似然项整合形式(可重写为指数形式，把yi和1-yi拿上去，便于计算)
- 似然函数高阶可导凸

4、等价问题

于是，最大化似然函数 $\ell(\boldsymbol{w},b)=\sum_{i=1}^{m}\ln p(y_i\mid\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{w},b)$

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

高阶可导连续凸函数，可用经典的数值优化方法
如梯度下降法/牛顿法 [Boyd and Vandenberghe, 2004]

梯度下降

- 步长η设置：可用二阶导的倒数

牛顿法

- 需要求二阶导的逆，高维不好求，求逆O（n^3）
- 没有高阶法不能用

三、线性判别分析LDA

> Linear Discriminant Analysis
>
> 别名Fisher判别分析
>
> 一大类方法

思想：将所有样例投影到一条直线上，使同类的尽量近，异类的尽量远

- 需要在直线上找到点，距离同类最短。画阈值，投影结果大于则正
- 降维可以反映性质

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

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 Σ_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：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_0\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_1\boldsymbol{w}$

同类样例的投影点尽可能接近 → $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_0\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_1\boldsymbol{w}$ 尽可能小

异类样例的投影点尽可能远离 → $\|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1\|_2^2$ 尽可能大

> 用均值投影表示一堆样本
> 同类近：协方差刻画散度，越小越好
> 异类远：均值远

于是，最大化

$$J = \frac{\left\|\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1\right\|_2^2}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_0\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\Sigma_1\boldsymbol{w}} = \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}(\Sigma_0+\Sigma_1)\boldsymbol{w}}$$

- 最大化广义瑞利商，求w最优解，先变形转化：

定义“类内散度矩阵”(within-class scatter matrix)

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

以及“类间散度矩阵”(between-class scatter matrix)

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

则式(3.32)可重写为

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

> 可以规定w长度，因为w长度无所谓，只和方向有关
> 拉格朗日乘子可用：并不严格凸，但问题和限制都是二次型
> 拉格朗日得出广义特征值

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

$$\boxed{\begin{aligned}&\min_{\boldsymbol{w}} \; -\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b\boldsymbol{w}\\&\text{s.t.}\; \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\boldsymbol{w}=1\end{aligned}}$$

运用拉格朗日乘子法，有 $\mathbf{S}_b\boldsymbol{w}=\lambda\mathbf{S}_w\boldsymbol{w}$

由 $\mathbf{S}_b$ 定义，有 $\mathbf{S}_b\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}$

注意到 $(\boldsymbol{\mu}_0-\boldsymbol{\mu}_1)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}$ 是标量，令其等于 λ

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

实践中通常是进行奇异值分解 $\mathbf{S}_w=\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$ $\longrightarrow$ 附录A

然后 $\mathbf{S}_w^{-1}=\mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$

- tr：把矩阵信息转化为标量

推广到多类：

- 不能无穷维度，Sb的秩有限制
- 多个w，是矩阵，投影到低维空间中
- 还是用散度评估近和远

可以将 LDA 推广到多分类任务中. 假定存在 N 个类, 且第 i 类示例数为 m_i. 我们先定义"全局散度矩阵"

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_t &= \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w \\ &= \sum_{i=1}^{m}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} ,\end{aligned} \tag{3.40}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}$ 是所有示例的均值向量. 将类内散度矩阵 $\mathbf{S}_w$ 重定义为每个类别的散度矩阵之和, 即

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_{w_i} , \tag{3.41}$$

其中

$$\mathbf{S}_{w_i} = \sum_{\boldsymbol{x} \in X_i} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^{\mathrm{T}} . \tag{3.42}$$

由式(3.40)~(3.42)可得

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_b &= \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w \\ &= \sum_{i=1}^{N} m_i(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} .\end{aligned} \tag{3.43}$$

显然, 多分类 LDA 可以有多种实现方法: 使用 $\mathbf{S}_b$, $\mathbf{S}_w$, $\mathbf{S}_t$ 三者中的任何两个即可. 常见的一种实现是采用优化目标

$$\max_{\mathbf{W}} \frac{\operatorname{tr}(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b\mathbf{W})}{\operatorname{tr}(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\mathbf{W})} , \tag{3.44}$$

其中 $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d\times(N-1)}$, $\operatorname{tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹(trace). 式(3.44)可通过如下广义特征值问题求解:

$$\mathbf{S}_b\mathbf{W} = \lambda\mathbf{S}_w\mathbf{W} . \tag{3.45}$$

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

若将 $\mathbf{W}$ 视为一个投影矩阵, 则多分类 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性数. 于是, 可通过这个投影来减小样本点的维数, 且投影过程中使用了类别信息, 因此LDA也常被视为一种经典的监督降维技术.

当假设各类样例的协方差矩阵相同时，FDA 退化为线性判别分析 LDA。

四、多分类学习

> 使用策略，让2分类解决多分类

- 拆解法：拆成多个二分类

OvO一对一

- 两两配对产生N（N-1）/2个二分类任务
- 得到N（N-1）/2个分类结果，最终结果可通过投票产生

OvR一对其余

- 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
- N次中选结果为正里面置信度最大的

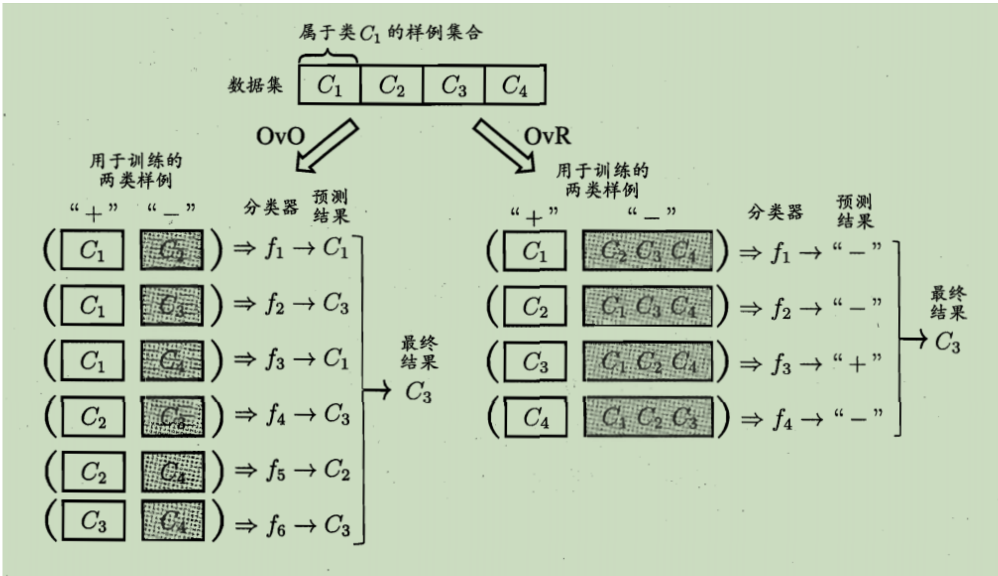
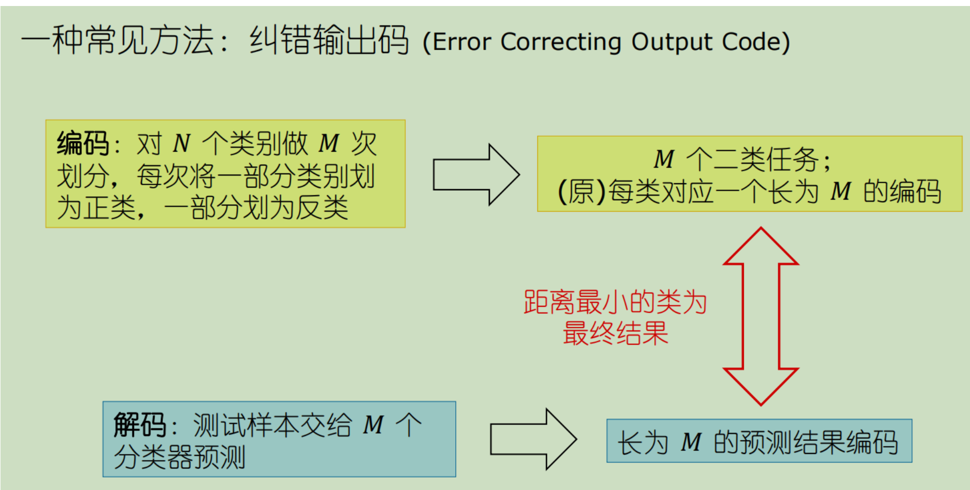


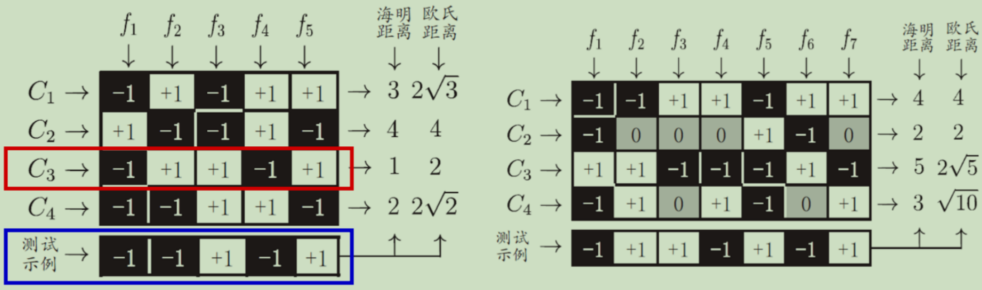
图 3.4 OvO 与 OvR 示意图

MvM多对多

> OvO和OvR是 MvM的特例

- 每次将若干个类作为正类，若干个其他类作为反类





(a) 二元 ECOC 码 (b) 三元 ECOC 码

[Dietterich and Bakiri,1995] [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

优缺点

- OvO的存储开销和测试时间开销通常比 OvR 更大
- 类别很多时，OvO的训练时间开销通常比OvR 更小

> OvR的每个分类器均使用全部训练样例、而 QvO 的每个分类器仅用到两个类的样例

- 预测性能则取决于具体的数据分布，在多数情形下两者差不多

难以处理的情况

- OvO 中, 可能存在多个分类器的投票相等
- OVR 中, 可能存在所有分类器均判断为负类, 或多个分类器预测为正类