

# Review Notes: Data Mining

Zejiang Zhang

2021 年 7 月 22 日

# 目录

<b>1 统计学基础</b>	<b>4</b>
1.1 Scaling of the data . . . . .	4
1.2 Evaluation of univariate data & single features . . . . .	4
1.3 Evaluation of multivariate data . . . . .	7
<b>2 聚类分析</b>	<b>8</b>
2.1 Hierarchical Clustering . . . . .	9
2.1.1 Agglomerative clustering(自底向上) . . . . .	9
2.1.2 Divisive clustering(自顶向下) . . . . .	10
2.2 Partitional Clustering . . . . .	10
2.3 Fuzzy cluster analysis . . . . .	12
2.4 Neuronal clustering . . . . .	13
<b>3 数据可视化与降维</b>	<b>14</b>
3.1 Principal component analysis (PCA) . . . . .	14
3.2 Multi dimensional scaling . . . . .	15
3.3 $t$ -Distributed Stochastic Neighbor Embedding . . . . .	16
<b>4 关联规则</b>	<b>17</b>
4.1 A priori Algorithm . . . . .	17
<b>5 分类</b>	<b>18</b>
5.1 Decision tree . . . . .	18
5.2 Prototype based classifiers . . . . .	19
5.3 Linear classification . . . . .	19
5.4 Evaluation . . . . .	21

目录	3
<b>6 回归</b>	<b>22</b>
6.1 Linear regression . . . . .	22
6.2 Nonlinear regression . . . . .	23
6.3 Regression based classification . . . . .	23

# 1 统计学基础

## 1.1 Scaling of the data

- Nominal scale

大小无意义

- Ordinal scale

大小有意义，可以进行比较，但数据的差值无意义，因此不能进行加减。

- Interval scale

数据的差值有意义，可以进行加减。但无绝对零点，因此不能进行乘除。

- Ratio scale

有绝对零点，可以进行乘除。

## 1.2 Evaluation of univariate data & single features

- 频数 (Absolute frequency) 和频率 (Relative frequency).

- 众数 (mode): 频数最大的特征。一个数据集可以有多个众数。

- 经验分布函数 (empirical distribution function):  $F(x) = \frac{\text{小于 } x \text{ 的数据个数}}{\text{总数}}$

经验分布函数是递增的阶跃函数。

- 分位数 (Quantiles):

- 中位数 (median):  $x_{\frac{1}{2}}$

- 四分位数 (quartile):  $x_{\frac{1}{4}}, x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{4}}$

- Boxplot

Median inside the box.

1. and 3. quartil defining the box.

注意 outliers.

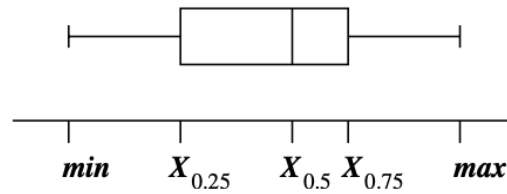


图 1: Boxplot

- 计算数据的位置:

- 算数平均值 (arithmetic mean):  $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$
- 加权平均值 (weighted mean):  $\bar{x}_w = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i * w_i$

- 计算数据的偏离程度:

- 方差 (Variance):  $s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$
- 标准差 (standard deviation):  $s$
- 与中位数的平均偏差 (Mean absolute deviation from median):  
 $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - \tilde{x}_{0.5}|$
- 平均偏差 (Mean difference):  $\frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |x_i - x_j|$
- Quartil difference:  $\tilde{x}_{0.75} - \tilde{x}_{0.25}$
- Range:  $\max_i x_i - \min_i x_i$

记住英文名字和计算公式。注意 Quartil difference 不受极端值的影响, Range 易受极端值影响。

- 偏度 (Skewness):

- Skewness:  $g = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{x_i - \bar{x}}{s} \right)^3$
- Quartile skewness:  $g_Q = \frac{(\tilde{x}_{0.75} - \tilde{x}_{0.5}) - (\tilde{x}_{0.5} - \tilde{x}_{0.25})}{\tilde{x}_{0.75} - \tilde{x}_{0.25}}$

- Skewness 的公式不用记, Quartile skewness 的公式最好记一下。
- $g > 0$  (or  $g_Q > 0$ ): right-skewed;  $g < 0$  (or  $g_Q < 0$ ): left-skewed。
- 对称 (Symmetric) 一定  $g = 0$  (or  $g_Q = 0$ ), 但是  $g = 0$  (or  $g_Q = 0$ ) 不一定对称。

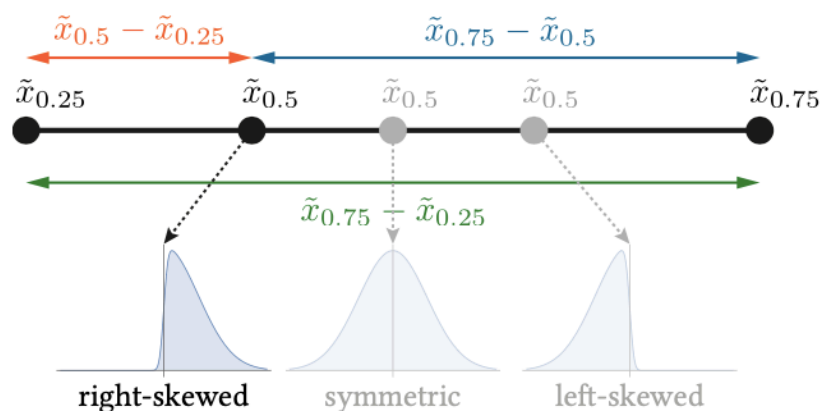


图 2: 偏度

- (Assignment01) Measure 和需要的 scaling:

表 1: Measure & Required scaling	
Measure	Required scaling
Mode	Nominal
Arithmetic mean $\bar{x}$	Interval
Quantile $\tilde{x}_{0.25}$	Ordinal
Median $\tilde{x}_{0.5}$	Ordinal
Range $R$	Interval
Interquartile range $Q$	Interval
Variance $s^2$	Interval
Skewness $g$	Interval
Quartile skewness $g_Q$	Interval

### 1.3 Evaluation of multivariate data

- 协方差 (Covariance):  $S_{XY} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$ 
  - 协方差取值可以为任意实数。
  - $S_{XY} > 0$  正相关;  $S_{XY} < 0$  负相关。
- 相关系数 (Correlation coefficient):  $r_{XY} = \frac{S_{XY}}{S_X S_Y}$ 
  - 相关系数取值范围  $[-1, 1]$ 。
  - $r_{XY} > 0$  正相关;  $r_{XY} < 0$  负相关。  $r_{XY}$  越大, 相关性越强。
  - $X$  和  $Y$  成一次函数关系时  $r_{XY} = 1$ 。
- Contingency table: 表示变量的频率分布。

假设  $X$  变量有  $J$  种取值,  $Y$  变量有  $K$  种取值, 则 Contingency table 为一个  $J \times K$  的表格, 其中  $n_{jk}$  表示  $X$  变量取第  $j$  个值,  $Y$  变量取第  $k$  个值的数据的个数 (或频率)。

通过该表格可以计算边缘分布 (marginal frequencies), 条件分布 (conditional distribution)。

- 独立性 (Independency):  $X$  和  $Y$  独立 (descriptive independent), 若  $f_{jk} = f_j \cdot f_k$ 。

独立可以推导出  $r_{XY} = 0$ , 反之不成立。即独立一定不相关, 不相关不一定独立。

- Rank order correlation coefficient 和 Correlation of nominal scaled data  
应该不会考? 没时间就不用看 (slides: 69-72)。

## 2 聚类分析

- Data matrix and distance matrix:
  - Data matrix: data list
  - Proximity (distance or similarity) matrix: where distances or similarities between pairs of units are given
- Distance:
  - Manhattan metric:  $d_r(x, y) = \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|$
  - Euclidean metric:  $d_r(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$  (即几何距离)
  - Hamming distance: Manhattan metric for Boolean space. (即对于两个布尔类型的数据, Hamming distance 是两个数相应位数上的不同数字的个数)



- Matching coefficients (slides 84)(这个要记住公式):
  - Simple-matching-coefficient (SMC) =  $\frac{n_{00}+n_{11}}{n}$  (相同的数字的概率)
  - Jaccard-coefficient (JC) =  $\frac{n_{11}}{n-n_{00}}$  (全 1 的数字占有 1 的数字之比)
  - Rao-Russel-coefficient (RRC) =  $\frac{n_{11}}{n}$  (全 1 的数字的概率)
- 处理缺失的数据 (slides 87)

## 2.1 Hierarchical Clustering

### 2.1.1 Agglomerative clustering(自底向上)

- 算法：给定一个数据集
  1. 计算距离矩阵 (data matrix)
  2. 找到有最小距离的两个聚类，将它们合并成一个新的聚类
  3. 计算新的聚类与其他聚类的距离，更新距离矩阵
  4. 重复执行，直到所有的数据合并成一个聚类
- 因此，重点问题在于如何定义两个聚类之间的距离：
  - Single linkage clustering (SCL)

新聚类与其他聚类的距离为原两个聚类与其他聚类的距离的较小者，即：

$$d_c(C_F, C_r) = \min\{d_c(C_{i^*}, C_r), d_c(C_{j^*}, C_r)\}$$

Chaining-effect: 对于 SCL，如果两个距离较远类别的数据中间有数据连接，这两个类别的数据很可能被划分为同一类。(示意图和解释: slides 102)

- Complete-Linkage-Clustering (CLC) 新聚类与其他聚类的距离为原两个聚类与其他聚类的距离的较大者，即：

$$d_c(C_F, C_r) = \max\{d_c(C_{i^*}, C_r), d_c(C_{j^*}, C_r)\}$$

SCL 和 CLC 的对比：判断两类是否会合并时，SCL 关注两类间的最小距离，CLC 关注两类间的最大距离。(slides 104：判断哪种情况是 SLC，哪种情况是 CLC，及原因。或给定树状图，判断哪个来自 SCL，哪个来自 CLC。)

- Group average algorithm:

新聚类与其他聚类的距离为两个聚类里所有元素距离的加权平均：

$$d_c(C_F, C_r) = \frac{m_{i^*}}{m_{i^*} + m_{j^*}} d_c(C_{i^*}, C_r) + \frac{m_{j^*}}{m_{i^*} + m_{j^*}} d_c(C_{j^*}, C_r)$$

- Unweighted average algorithm

Group average algorithm 的近似。

$$d_c(C_F, C_r) = \frac{1}{2} d_c(C_{i^*}, C_r) + \frac{1}{2} d_c(C_{j^*}, C_r)$$

- Centroid algorithm:

计算两个聚类的距离，先计算两个聚类的中心（所有点的平均值），然后再计算两个中心的距离。新聚类的中心是两个原聚类的加权平均。

- Median algorithm:

Centroid algorithm 的近似。新聚类的中心是两个原聚类的算数平均（即假设两个原聚类有相同数目的点）。

### 2.1.2 Divisive clustering(自顶向下)

## 2.2 Partitional Clustering

- Variance criterion:

寻找一种聚类方式，使得方差之和最小（因此每一个聚类内部数据的差异最小）。(slides 113)

- k-means clustering

1. 首先随机选取聚类的中心点
2. 将数据分配到最近的聚类中心点
3. 对于每一个聚类，根据分配的数据重新计算中心点
4. 重复执行上述算法，直到不再改变

- ANOVA:

- $T = W + B$ ,  $T$  是 total scatter matrix,  $W$  是 within scatter matrix,  $B$  是 between scatter matrix。
- 取矩阵的迹，得  $tr(T) = tr(W) + tr(B)$ 。可以理解为  $tr(T)$  是数据总体的方差， $tr(W)$  是每一个聚类内部的方差， $tr(B)$  是聚类与聚类之间的方差。
- 数据总体的方差  $tr(T)$  是定值，因此，减小每一个聚类内部的方差  $tr(W)$  就是要增大聚类与聚类之间的方差  $tr(B)$ 。(即每一类里的数据尽可能相似，类与类之间的数据尽可能不同。)

- Exchange Clustering Algorithm

1. 初始化聚类。
2. 选一个点，改变这个点所属的聚类。如果改变之后与改变之前相比，方差之和减小了，就接受改变，否则拒绝改变。
3. 重复执行第二步直到算法结束。
4. 如果重复足够多次，每个点都会属于距离自己最近的聚类中心。

## 2.3 Fuzzy cluster analysis

- Crisp clustering 和 Fuzzy clustering:
  - Crisp clustering: 每一个数据都确定的分给某一个聚类中心
  - Fuzzy clustering: 每一个数据在一定程度上属于每一个聚类中心, 可以理解为概率。

例如如果有三个聚类中心  $C_1, C_2, C_3$ , 数据  $x$  属于  $C_1$  即为 Crisp clustering, 数据  $x$  对于三个聚类点的归属程度分别为  $[0.8, 0.1, 0.1]$  即为 Fuzzy clustering。Crisp clustering 可视为 Fuzzy clustering 的一种特殊情况 (即归属程度为  $[1, 0, 0]$ )。

- Constraints for fuzzifier: (概率约束)
  1.  $f_{\mu,j} \in [0, 1]$
  2.  $\sum_j f_{\mu,j} = 1$
- (Slides 137) 已知数据和 fuzzy matrix, 如何计算聚类中心: 思路类似于加权平均数。
- (Slides 138-140) 已知数据和聚类中心, 对于每一个数据, 如何计算 fuzzifier: 这是一个约束条件的最优化问题, Slides 中用拉格朗日乘数法计算。应该不用记公式, 也不用看懂推导过程。
- 通过上两步, 我们得到了更新聚类中心和更新 fuzzifier 的方法。因此我们可以执行 Fuzzy-k-means 算法:
  - 首先随机选取聚类的中心点。
  - 根据聚类中心, 分配数据 (计算 fuzzifier)。
  - 根据 fuzzy matrix, 更新聚类中心。
  - 重复执行上述算法。

## 2.4 Neuronal clustering

- Competitive learning:

1. 初始化聚类。
2. 选择一个点，计算这个点离得最近的聚类中心 ( $j$ )。
3. 更新离这个点最近的聚类中心 ( $j$ )。
4. 重复执行上述算法。

- Kohonen algorithm:

大致流程与 Competitive learning 相同，不同地方在于选择一个点，并且计算这个点离得最近的聚类中心 ( $j$ ) 之后，下一步不仅仅更新 ( $j$ )，而是更新所有的聚类中心。每一个聚类中心的更新幅度与该聚类中心和聚类中心  $j$  的距离有关。例如：

- Neural Gas:

1. 选择一个点，计算这个点与所有聚类中心的距离，并且进行排序。
2. 根据排序，更新所有的聚类中心。

- LVQ1 Algorithm: 带有标签的监督学习

1. 初始化聚类。
2. 选择一个点，计算这个点离得最近的聚类中心 ( $j$ )。
3. 更新离这个点最近的聚类中心 ( $j$ ): 如果分类是正确的，就 +；分类错误，就-。
4. 重复执行上述算法。

**这一章的重点是：**

1. Agglomerative clustering 中 SCL 和 CLC 的计算、绘制树状图、判断树状图属于哪种算法。SCL 和 CLC 的区别，SCL 的 chaining effect。
2. Partitional clustering 中理解 Variance criterion。k-means clustering 的计算过程。
3. Fuzzy cluster: 理解 fuzzy cluster, fuzzy cluster 和 crisp clustering 的区别, fuzzifier 的约束条件。

## 3 数据可视化与降维

### 3.1 Principal component analysis (PCA)

PCA 的想法是找到一个方向，使得该方向上数据的方差最大（因此该方向上数据分得更开，即保留了原始数据集的更多信息）。

1. 给定一个数据集  $X(n \times d)$ 。假定数据集每个维度上的均值都是 0, 否则用数据集减去均值得到新的数据集。
2. 对于一个  $d$  维基向量  $v$  ( $v$  的模长为 1, 即  $\|v\|_2 = 1$ )，将  $x_i$  向  $v$  投影，有  $\alpha_i = v^T x_i$ 。
3. 因为  $X$  在每一个维度上的均值为 0，因此有  $\bar{\alpha} = 0$ 。我们的目的是寻找一个方向  $v$ ，使得  $\alpha$  的方差最大。

4.  $\alpha$  的方差计算公式为:

$$\begin{aligned}\sigma_v^2 &= \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \bar{\alpha})^2 = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 = \sum_{i=1}^n (v^T x_i)^2 \\ &= \sum_{i=1}^n v^T x_i x_i^T v = v^T \left( \sum_{i=1}^n x_i x_i^T \right) v = v^T \mathbf{C} v\end{aligned}$$

5. 因此现在的问题是寻找  $v$ , 使得  $v^T \mathbf{C} v$  最小, 约束条件是  $v^T v = 1$ 。我们可以使用拉格朗日乘数法。

6. (slides: 181) 计算发现  $v$  是  $\mathbf{C}$  的特征向量, 而  $\sigma_v^2$  是对应的特征值。

因此, PCA 算法为:

1. 将数据集减去数据集的均值, 使得数据集每个维度均值为 0。
2. 计算  $\mathbf{C} = X^T X$ ,
3. 计算  $\mathbf{C}$  的特征向量和特征值, 并按照特征值从大到小排序。
4. 将数据集投影到前  $d'$  个特征向量。

### 3.2 Multi dimensional scaling

MDS 的想法是, 对于一个数据集  $X$ , 计算数据集的距离矩阵  $D^X$ 。将  $X$  映射到可视化空间  $Y$  后, 计算新空间中的距离矩阵  $D^Y$ 。寻找一种映射方式使得  $D^X$  尽可能接近  $D^Y$  (因此这种方法会保留数据点之间的距离信息)。

$D^X$  与  $D^Y$  的差异用 stress function 来描述, 定义为:

$$S = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\Phi[d^X(x_i, x_j)] - \Phi[d^Y(y_i, y_j)])^2$$

, 其中  $\Phi$  是单调递增函数。

因此, 可以用 incremental update rule 来更新  $\mathbf{y}$ , 即:

$$y'_i = y_i - l \cdot \frac{\partial S}{\partial y_i}$$

其中  $l$  是 learning rate。

如果  $Y$  是二维空间, 距离使用欧拉距离, 即  $d^Y(y_i, y_j) = d^2(y_i, y_j) = (y_i - y_j)^2$ , 那么:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial y_i} &= 2 \sum_{i=1}^n (\Phi[d^X(x_i, x_j)] - \Phi[d^2(y_i, y_j)]) \cdot (-\Phi'[d^2(y_i, y_j)]) \cdot (-2(y_i - y_j)) \\ &= -4 \sum_{i=1}^n \Phi'[d^2(y_i, y_j)] (\Phi[d^X(x_i, x_j)] - \Phi[d^2(y_i, y_j)]) \cdot (y_i - y_j)\end{aligned}$$

(4 放在了  $l$ , 即 186 页的公式的推导。应该不用记, 理解这里的计算方法是 incremental update rule。)

### 3.3 $t$ -Distributed Stochastic Neighbor Embedding

$t$ -SNE 的目的是保留相对位置信息 (即相邻关系)。计算方法与 MDS 基本相同, 不同的是在  $t$ -SNE, 我们计算的不是距离矩阵, 而是相对位置关系。定义

$$p_{j|i} = \frac{e^{-\frac{\|x_i - x_j\|_2}{2\sigma_i^2}}}{\sum_{k \neq i} e^{-\frac{\|x_i - x_k\|_2}{2\sigma_i^2}}}, \quad p_{ij} = \frac{p_{i|j} + p_{j|i}}{2}$$

- $p_{j|i}$  可以理解为  $j$  是  $i$  的邻居点的概率。
- $\sigma_i$  控制的是  $i$  数据点考虑的范围, 与 Perplexity 有关。Perplexity 可以理解为考虑的周围数据点的个数。因此 Perplexity 是一个确定的数, 而对于每一个数据点, 根据 Perplexity 我们可以确定相应的  $\sigma_i$ 。

$P$  和  $Q$  的距离用 KL 散度来计算, 即:

$$D_Q(P) = \sum_i \sum_j \log_2 \left( \frac{p_{ij}}{q_{ij}} \right)$$

**这一章的重点是:**

- PCA、MDS 和  $t$ -SNE 三种算法及区别 (2018 考试题)。



1. 目的不同。PCA 目的是寻找方差最大的方向，MDS 试图在投影空间保持距离信息， $t$ -SNE 试图在投影空间保持相邻信息。
2. PCA 是确定的算法，MDS 和  $t$ -SNE 有随机性（每次运行结果可能不同）。
3. 计算方法不同。PCA 通过计算矩阵特征值和特征向量，MDS 和  $t$ -SNE 通过 incremental update rule。

## 4 关联规则

- Support 和 Confidence:

- Support: item 或关联规则的频率

$$* \text{Support}(Y) = \frac{\text{物品}Y\text{出现的次数}}{n}$$

$$* \text{Support}(Y \rightarrow Z) = \text{Support}(Y \cup Z) = \frac{\text{物品}Y\text{和}Z\text{同时出现的次数}}{n}$$

- Confidence: 关联规则成立的概率

$$* \text{Confidence}(Y \rightarrow Z) = \frac{\text{Support}(Y \cup Z)}{\text{Support}(Y)}$$

### 4.1 A priori Algorithm

1. 寻找 item sets  $X$ ，使得  $\text{support}(X) \geq s_{\min}$ 。
  - (a)  $H_1 = \{Y: \text{the item sets with 1 elements}\}$
  - (b)  $I_n = \{Y \in H_n : \text{support}(Y) \geq s_{\min}\}$
  - (c) 若  $I_n$  为空集，结束；若  $I_n$  不为空集， $H_{n+1} = \{Y \cup Y' : Y \in I_n \text{ and } Y' \notin I_n \text{ with } |Y'| = 1\}$
  - (d) 重复执行上述算法。

2. 确定关联规则  $X \rightarrow Y$ , 使得  $\text{confidence}(X \rightarrow Y) \geq k_{\min}$ 。
  - 先从  $|Y| = 1$  开始, 如果满足条件就逐步增加  $|Y|$ 。

## 5 分类

### 5.1 Decision tree

决策树的思路是每次根据单个的特征进行分组, 下一步继续考虑其它特征再次分组, 直到每一组标签都可以被确定。描述一种分类好或者不好的指标是 Impurity measures, 每次分组所使用的指标为可以带来最大 Impurity gain 的指标。

- Impurity measures:

- Breiman' s conditions:

1. 若对所有的  $j$ ,  $p_j = \frac{1}{L}$ ,  $Q(P)$  取得最大值。
2. 若集合中只有一类数据,  $Q(P)$  取得最小值。
3. 对称性: 交换数据标签的顺序,  $Q(P)$  不变。

- 常用的 impurity measures:

- \* misclassification index:  $Q_m(p) = 1 - \max_j p_j$
- \* Gini index:  $Q_g(p) = 1 - \sum_{i=1}^L p_i^2$
- \* entropy index:  $Q_e(p) = - \sum_{i=1}^L p_i \log_2 p_i$

- Impurity gain:

当使用一个特征将一个集合  $R$  分成  $B$  个子集合  $R_1, R_2, \dots, R_B$  后, Impurity gain 定义为:

$$\Delta Q = Q(R) - \sum_{i=1}^B p_{R_i} Q(R_i)$$

其中,  $p_{R_i}$  是  $R_i$  的频率。

- Pruning(剪枝):
  - 为什么要剪枝:

为了避免过拟合 (overfitting)。数据集中的错误数据可能导致模型对新数据分类准确性下降。
  - 怎样剪枝:

限制决策树节点的个数或者深度。

## 5.2 Prototype based classifiers

- $k$ -nearest-neighbour( $k$ -NN):

对于一个给定的新数据点，计算该数据点与训练集中所有数据点的距离，找到最近的  $k$  个数据点（通常  $k$  为奇数）。这  $k$  个数据点中标签的众数就是新数据点的标签。

  - $k$ -NN 算法无须训练。
  - $k$ -NN 算法计算过程花费较高（因为每次都要算新数据点和所有数据点的距离）。

## 5.3 Linear classification

线性分类器： $z = f(w^T x + w_0)$ 。 $w$  和  $w_0$  是参数， $f$  是一个二值函数。例如  $w^T x + w_0 > 0, z = 1; w^T x + w_0 < 0, z = -1$ 。把  $w_0$  扩展到  $w$  里面，并且把  $x$  扩展一维 1，可以写成  $z = f(w^T x)$

- Perceptron:
  1. 初始化  $w$ 。
  2. 对于每一个数据，判断分类器是否正确分类： $\delta = (y - f(w^T x))$ 。
  3. 如果分类错误，就更新分类器参数： $w := w + \delta x$ 。

(slides 241-242 在证明只要数据集可分，这个算法可以在有限次数内收敛。不用管他。)

- Support Vector Learning:

SVM 算法是 Perceptron 算法的特例。在 Perceptron 算法中，我们找到了一条直线将数据集分开，在 SVM 算法中，我们不仅希望找到这么一条直线，还希望这条直线距离我们的数据点最远。如图所示，分类器的表达式

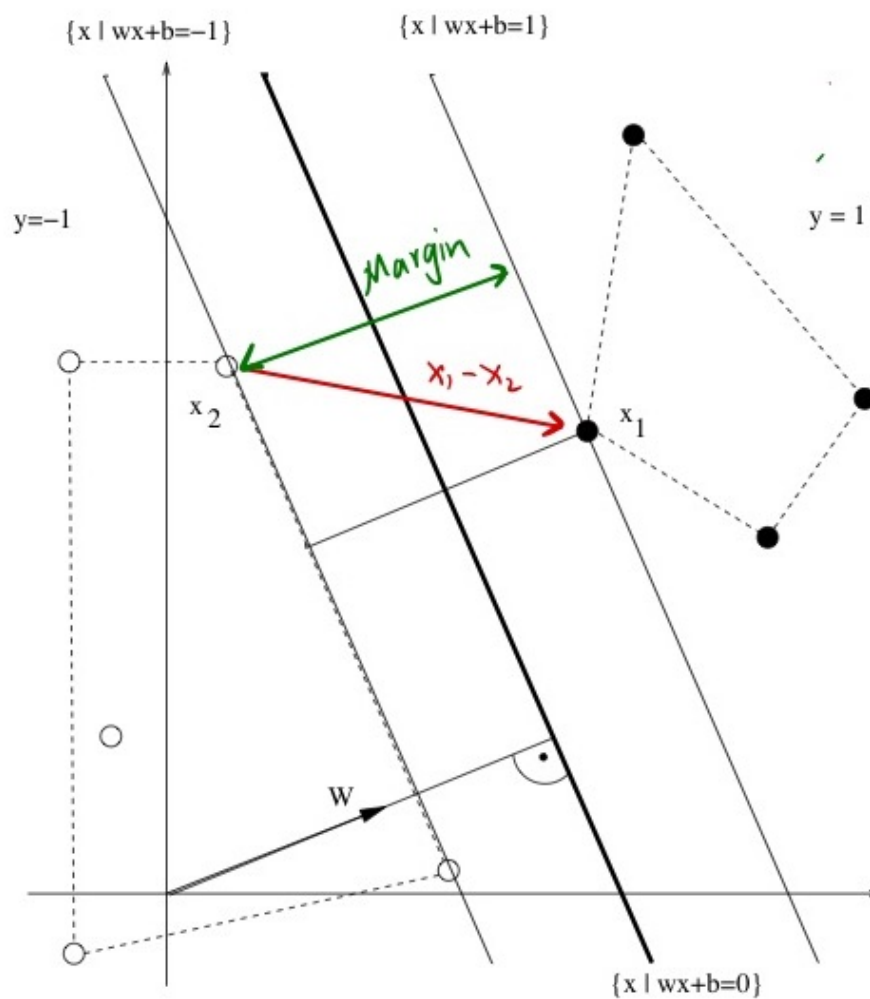


图 3: SVM

为  $w^T x + w_0$ ，其中  $w^T$  表示分界线的斜率， $w_0$  表示分界线的位置。我们总能找到一个  $w_0$ ，使得分界线处于正中间的位置。因此我们现在希望确定分界线的斜率，使得中间的间隔尽可能的大。

假设我们现在已经有了一个  $w$ ，如图所示， $x_1$  和  $x_2$  是离分界线最近的点，我们有  $w^T x_1 + w_0 = \delta$ ， $w^T x_2 + w_0 = -\delta$ 。我们将  $w$  替换为  $\frac{w}{\delta}$ ， $w_0$  替换为  $\frac{w_0}{\delta}$ ，就有了  $w^T x_1 + w_0 = 1$ ， $w^T x_2 + w_0 = -1$ 。

两式相减，得  $w^T(x_1 - x_2) = 2$ 。对于直线方程  $w^T x + w_0 = 0$ ，它的法向量的方向为  $w$ ，因此法向量为  $\frac{w}{\|w\|}$ 。所以间隔为  $x_1 - x_2$  在直线方程法向量方向的投影，即  $\frac{w^T}{\|w\|}(x_1 - x_2) = \frac{2}{\|w\|}$ 。因此我们的目标是最大化  $\frac{2}{\|w\|}$ 。

即：最小化

$$\varphi(w) = \frac{\|w\|^2}{2}$$

约束条件是对于任意的  $\mu$ ，有

$$y^\mu(w^T x^\mu + w_0) \geq 1$$

同样地，这是一个有约束的最优化问题，可以用拉格朗日乘数法计算。计算结果在 (slides 247)。支持向量 (support vectors) 是位于间隔边界上的点，它们将对分类器产生影响。 $w$  是支持向量的线性组合。(slides 248-249 是  $w$  和  $w_0$  的计算过程，不用看。) SVM 的特点在于：

- 分类的间隔更大。
- 只需要考虑支持向量。

不可分问题：应该不会考。(引入新的优化量，目的是让间隔尽可能地大，同时不可分的点尽可能靠近间隔边缘。)

## 5.4 Evaluation

- 为了验证算法的有效性，需要将数据集划分为训练集和测试集。在训练集上训练算法，在测试集上验证算法。但是对于规模较小的数据集，不适合

这么做。

- Cross-Validation method: 将数据集平均分成  $k$  份, 计算  $k$  个分类器, 每一次其中一份作为测试集, 其余作为训练集, 最后综合  $k$  次的结果来评估算法。

### 这一章的重点是:

- 决策树比较重要: 如何计算 impurity measures, impurity gain; 绘制决策树。
- $k$ -NN 算法比较简单。
- 线性分类器 Perceptron 比较好算, 可以出计算题。SVM 不会出计算题, 理解 SVM 的目的和 Support Vector 的作用就可以。
- 验证, 测试集和训练集, 理解 Cross-Validation method 方法。(回归的验证方式类似)

## 6 回归

有一个未知的映射  $X \rightarrow Y$ 。回归算法的目的是寻找一个函数, 来模拟这个映射。即寻找  $f(x)$ , 使得误差  $\|f(x) - y\|$  最小。

### 6.1 Linear regression

- 一维线性回归 (最小二乘法):

拟合误差为:

$$E = \sum_{i=1}^n (ax_i + b - y_i)^2$$

$E$  对  $a$  和  $b$  求偏导, 可得:

$$a = \frac{s_{xy}}{s_x^2}, b = \bar{y} - a\bar{x}$$

拟合直线经过点  $(\bar{x}, \bar{y})$ 。

- 多维问题:

拟合误差为:  $E = \|Y - Xw\|$

- 如果  $X$  是可逆的,  $w = X^{-1}Y$ , 此时  $E = 0$ 。
- 如果  $X$  不可逆, 求  $X$  的伪逆矩阵, 即  $X^+ = (X^T X)^{-1} X^T$ 。  $w = X^+ Y$ 。
- 如果  $X^T X$  是奇异矩阵: slides 263.

- 带有基函数的线性回归:

$f(x)$  是基函数的线性组合, 即  $f(x) = \sum_k w_k h_k(x)$ 。相当于从  $X$  根据基函数计算新的数据集  $H$ , 拟合参数  $w = H^+ Y$ 。

## 6.2 Nonlinear regression

$f(x) = \sum_k w_k h_{c_k}(x)$ 。与带有基函数的线性回归区别在于函数  $h(x)$  中带有未知参数  $c$ 。可用梯度下降算法求解。

## 6.3 Regression based classification

可以用回归方法解决分类问题。(例如有  $L$  个类别, 我们拟合  $L$  个函数  $f_1(x), f_2(x), \dots, f_L(x)$ , 其中  $f_i(x)$  的值域是  $[0, 1]$ 。  $f_i(x)$  可以视为  $x$  与类别  $i$  的关系强度。)

**这一章的重点是:** 线性回归及带有基函数的线性回归。

- 一维情况下的计算。

- 判断什么是带有基函数的线性回归，什么是非线性回归。(如果基函数是确定的，就是带有基函数的线性回归，如果函数里有参数，就是非线性回归。)
- 带有基函数的线性回归的  $H$  矩阵。