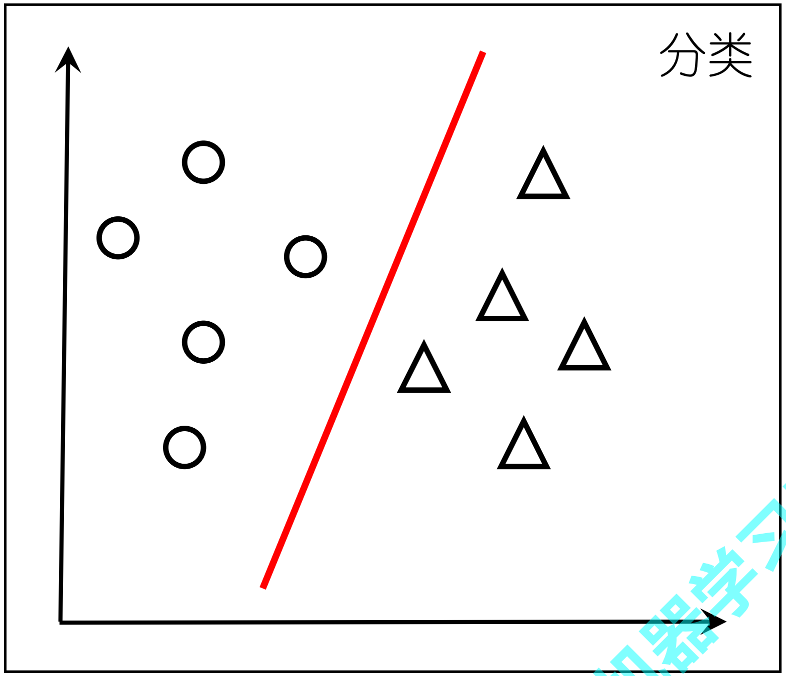
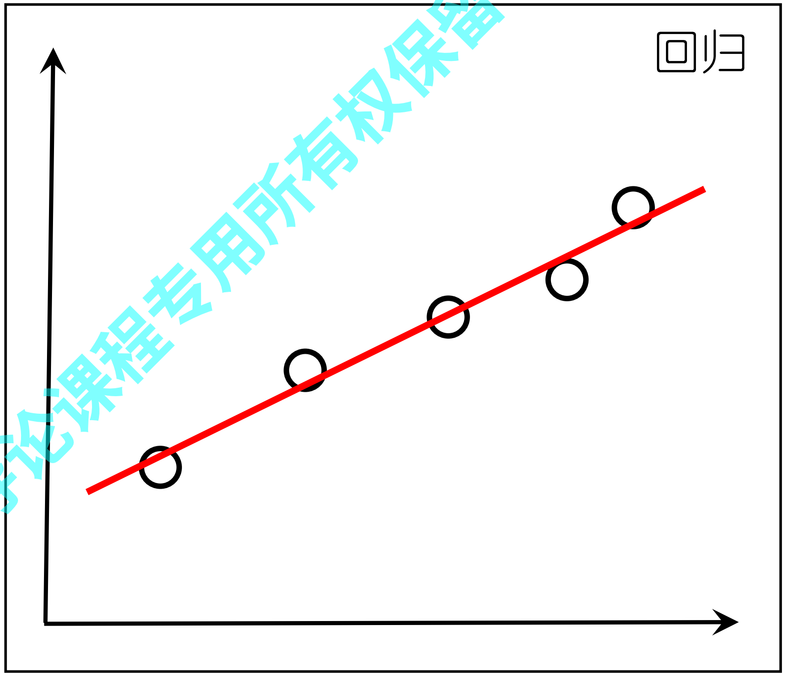
三、线性模型

主讲教师：周志华

线性模型





线性模型(linear model)试图学得一个通过属性的线性组合来进行预测的函数

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

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

简单、基本、可理解性好

线性回归 (linear regression)

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

离散属性的处理：若有“序”(order)，则连续化；
否则，转化为 k 维向量

令均方误差最小化，有 $(w^*, b^*) = \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(f\left(x_i\right) - y_i\right)^2$

$$= \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - wx_i - b\right)^2$$

对 $E_{(w,b)} = \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - wx_i - b\right)^2$ 进行最小二乘参数估计

线性回归

分别对 w 和 b 求导：

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

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

令导数为 0，得到闭式(closed-form)解：

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

多元(multi-variate)线性回归

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

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

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

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

多元线性回归

同样采用最小二乘法求解，有

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

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：

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

令其为零可得 $\hat{\boldsymbol{w}}$

然而，麻烦来了：涉及矩阵求逆！

- 若 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 满秩或正定，则 $\hat{\boldsymbol{w}}^* = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$
- 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) $\longrightarrow$ 第6、11章

线性模型的变化

对于样例 $(\boldsymbol{x}, y)$，$y \in \mathbb{R}$，若希望线性模型的预测值逼近真实标记，

则得到线性回归模型 $y = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$

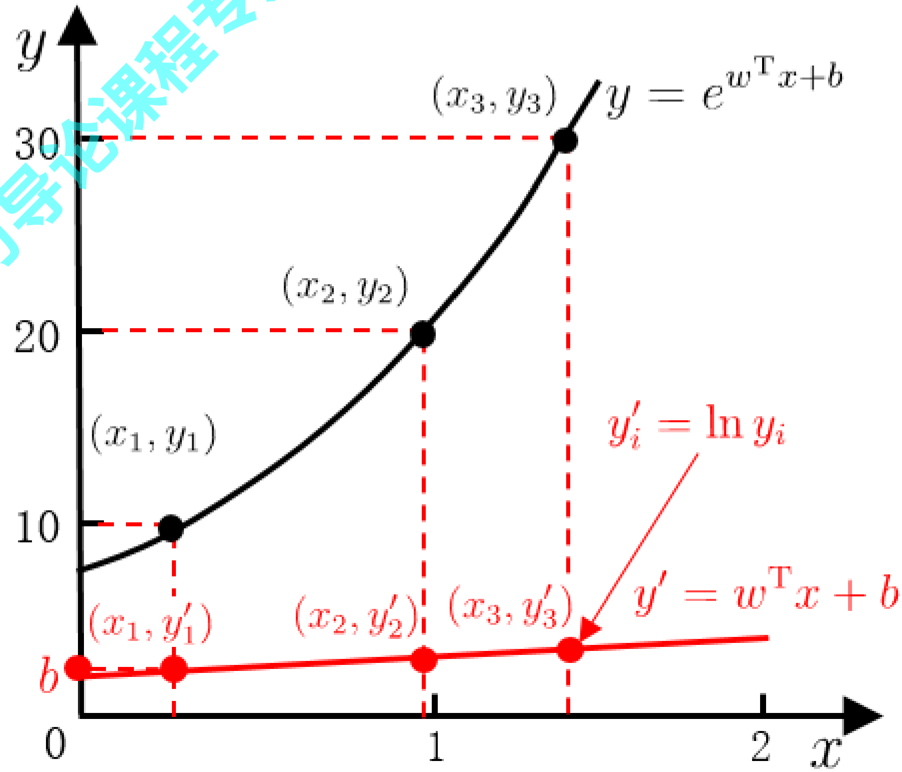
令预测值逼近 y 的衍生物？

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(generalized)线性模型

一般形式： $y = \underbrace{g^{-1}}_{\text{单调可微的 联系函数 (link function)}} \left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} + b \right)$

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

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

... ...

二分类任务

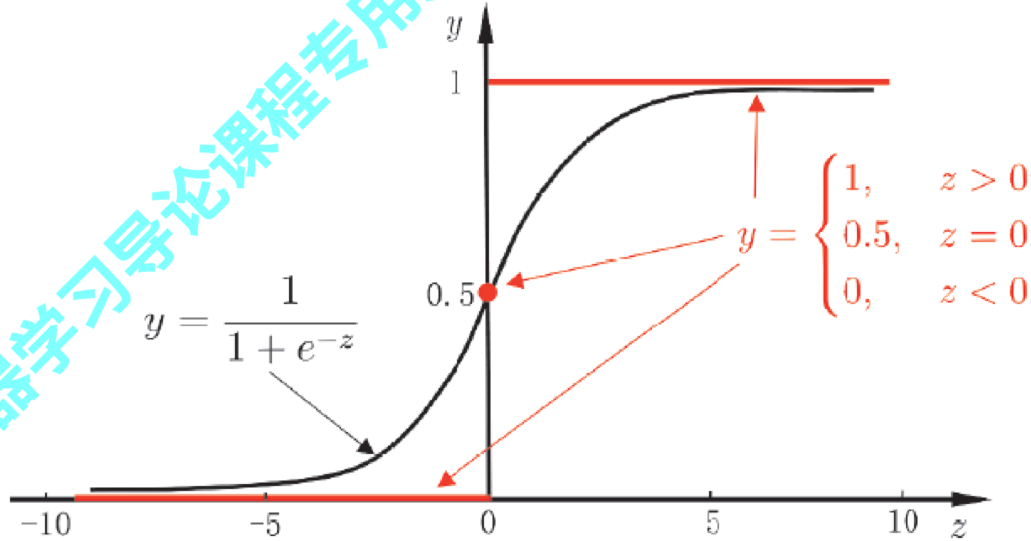
线性回归模型产生的实值输出 $z = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b$

期望输出 $y \in \{0, 1\}$

找 z 和 y 的联系函数

理想的"单位阶跃函数"
(unit-step function)

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



常用
单调可微、任意阶可导

性质不好，
需找"替代函数"
(surrogate function)

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

对数几率函数
(logistic function)
简称"对率函数"

对率回归

以对率函数为联系函数:

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

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

几率(odds), 反映了 $\boldsymbol{x}$ 作为正例的相对可能性

"对数几率"
(log odds, 亦称 logit)

"对数几率回归" (logistic regression)
简称 "对率回归"

- 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

注意: 它是
分类学习算法!

求解思路

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

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

于是，可使用“极大似然法” → 第7章
(maximum likelihood method)

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

最大化“对数似然”(log-likelihood)函数

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

求解思路

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

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

则似然项可重写为 $p\left(y_i \mid \boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}_i, b\right) = y_i p_1\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}\right) + \left(1 - y_i\right) p_0\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}\right)$

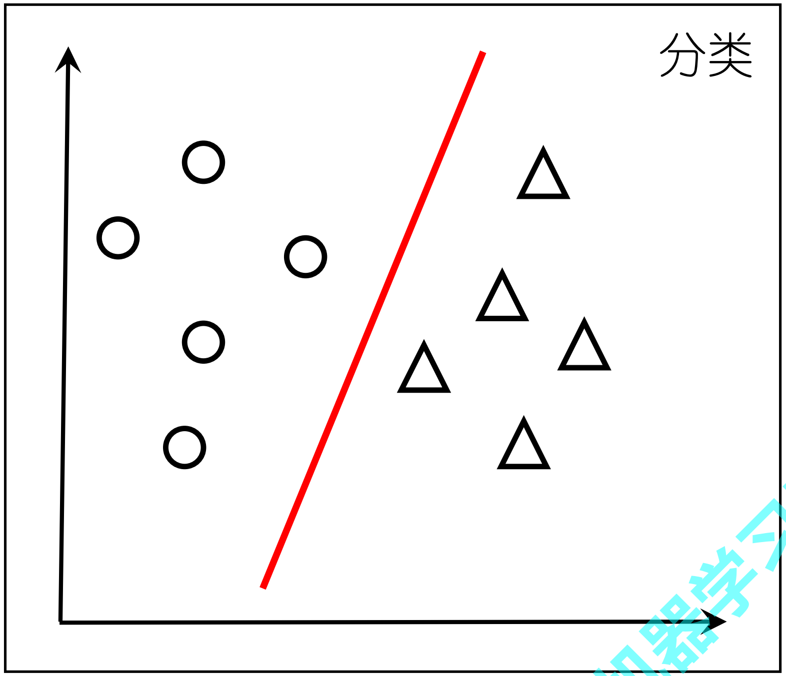
于是，最大化似然函数 $\ell(\boldsymbol{w}, b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i \mid \boldsymbol{x}_i; \boldsymbol{w}, b)$

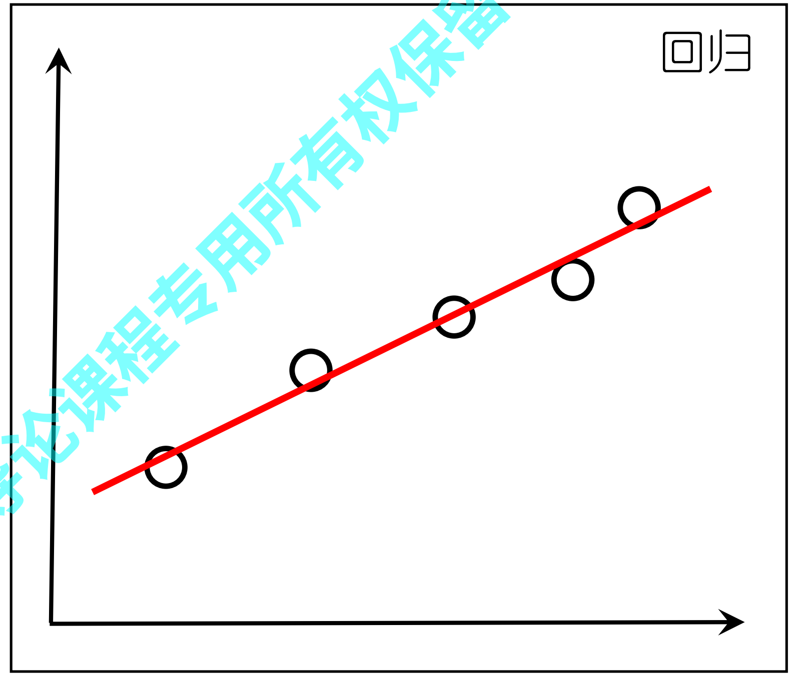
等价为最小化 $\ell\left(\boldsymbol{\beta}\right) = \sum_{i=1}^{m} \left(-y_i \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}_i + \ln\left(1 + e^{\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}_i}\right)\right)$

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]

线性模型做“分类”



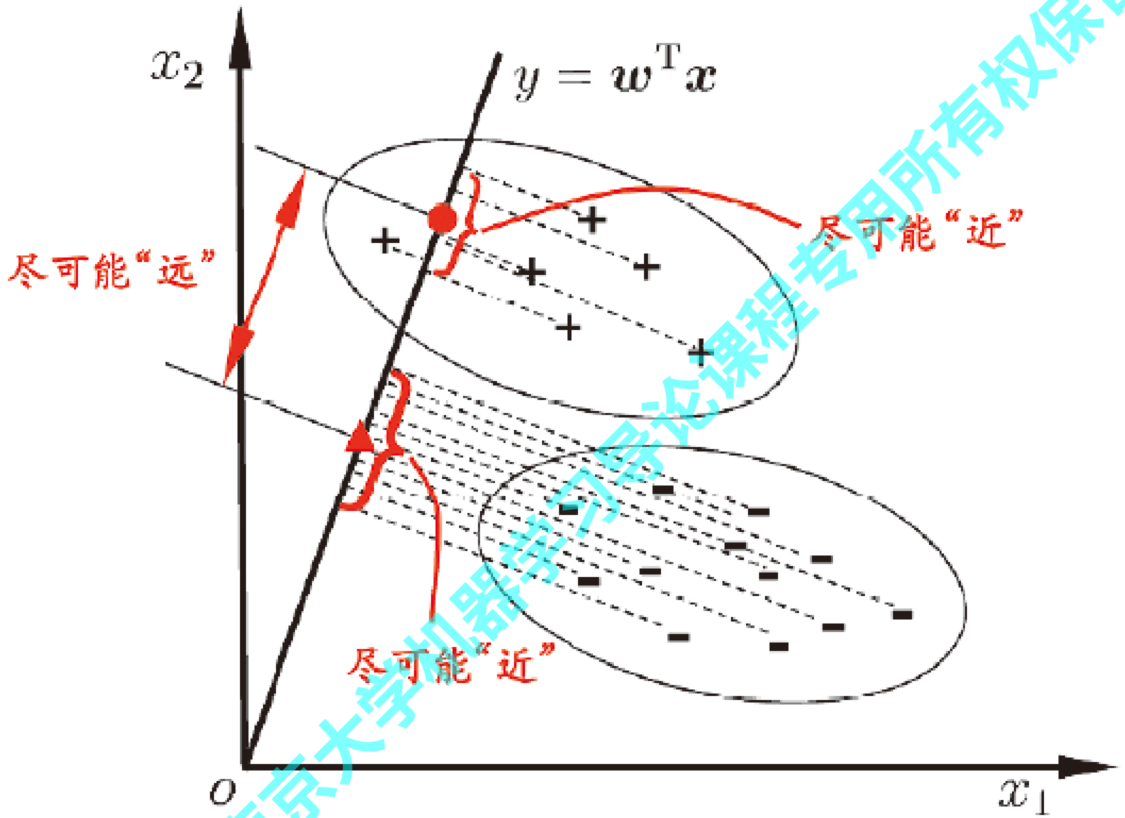


广义线性模型；
通过“联系函数”

如何“直接”做分类？

例如，对率回归

线性判别分析 (Linear Discriminant Analysis)



由于将样例投影到一条直线（低维空间），因此也被视为一种"监督降维"技术　降维 ⟶ 第10章

LDA的目标

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 $\boldsymbol{\Sigma}_i$

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 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{w}$

同类样例的投影点尽可能接近 → $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_0\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{w}$ 尽可能小

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

于是，最大化

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

LDA的目标

类内散度矩阵 (within-class scatter matrix)

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

类间散度矩阵 (between-class scatter matrix)

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

LDA的目标：最大化广义瑞利商 (generalized Rayleigh quotient)

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

$\boldsymbol{w}$ 成倍缩放不影响 J 值
仅考虑方向

求解思路

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

$\mathbf{S}_b\boldsymbol{w}$ 的方向恒为 $\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1$，不妨令 $\mathbf{S}_b\boldsymbol{w} = \lambda(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$

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 $\mathbf{S}_w = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$ ⟶ 附录 A

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

推广到多类

假定有 N 个类

- 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 $\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_{w_i}$ $\quad \mathbf{S}_{w_i} = \sum_{\boldsymbol{x} \in X_i} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T$
- 类间散度矩阵 $\mathbf{S}_b = \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} m_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T$

多分类LDA有多种实现方法：采用 $\mathbf{S}_b$，$\mathbf{S}_w$，$\mathbf{S}_t$ 中的任何两个

例如，$\max_{\mathbf{W}} \frac{\operatorname{tr}(\mathbf{W}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_b \mathbf{W})}{\operatorname{tr}(\mathbf{W}^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w \mathbf{W})} \Longrightarrow \mathbf{S}_b \mathbf{W} = \lambda \mathbf{S}_w \mathbf{W}$

$\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d \times (N-1)}$

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

To be continued