第5章
线性判别函数
Linear Discriminant Functions

向 世 明
smxiang@nlpr.ia.ac.cn

助教： 杨学行(xhyang@nlpr.ia.ac.cn); 吴一超(yichao.wu@nlpr.ia.ac.cn)

5.1 引言

- **前面几章主要介绍：**
  - 贝叶斯决策理论
  - 概率密度估计——函数已知情形时，参数估计
  - 非参数估计——密度函数未知
- **本章的主要任务：**
  - 假定用于分类的**判别函数的参数形式已知，直接从样本来估计判别函数的参数**。
  - 优点：
    - **不需要有关概率密度函数的确切的参数形式**。因此，属于无参数估计方法。

5.1 引言

- **模式分类的途径**
  - **估计类条件概率密度函数**
    - 利用贝叶斯公式求出后验概率，然后决策
    - 概率密度参数估计和非参数估计
  - **直接估计后验概率**
    - 不需要估计类条件概率密度函数
    - K－近邻分类器
  - **直接计算判别函数**
    - 不需要估计类条件概率密度函数
    - **直接找到可用于分类的判别函数**

5.1 引言

- **回顾Bayes分类器**
  - 已知：类先验概率 $p(\omega_i)$ 和类条件密度函数 $p(\mathbf{x}|\omega_i)$
  - 任务：估计一个决策函数，借此进行分类
  - 主要方法：参数估计与非参数估计
  - 特点：需要大量的样本，需要知道某些概率及其形式
- **可否利用样本直接设计分类器？**

5.1 引言

- **本章利用样本直接设计分类器的基本思想**
  - 给定一个判别函数，且已知该函数的参数形式
  - 采用样本来训练判别函数的参数
  - 对于新样本，采用判别函数对样本进行决策，并按照一些准则来完成分类

5.1 引言

- **本章学习判别函数的基本技术路线：**
  - 假定有 n 个 d 维空间中的样本，每个样本的类别标签已知，且一共有 c 个不同的类别。
  - 假定判别函数的形式已知，寻找一个判别函数。
  - 对于给定的新样本 $\mathbf{x}\in\mathrm{R}^d$，判定它属于$\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_c$中的哪个类别。
- **方法分类**
  - **线性判别函数、支持向量机、Fisher线性判别函数**
  - **非线性判别函数**
    - **广义线性判别函数**
    - 非线性判别函数，比如核学习机

5.1 引言

- **基于判别函数的分类器**
  - 采用已知类别标签的训练样本进行学习，获得若干个代数界面，这些界面将样本所在的空间分成若干个相互不重叠的区域。每个区域包含属于同一类的样本。
  - 表示界面的函数称为判别函数。
  - 判别函数是分类器最常用的表述形式

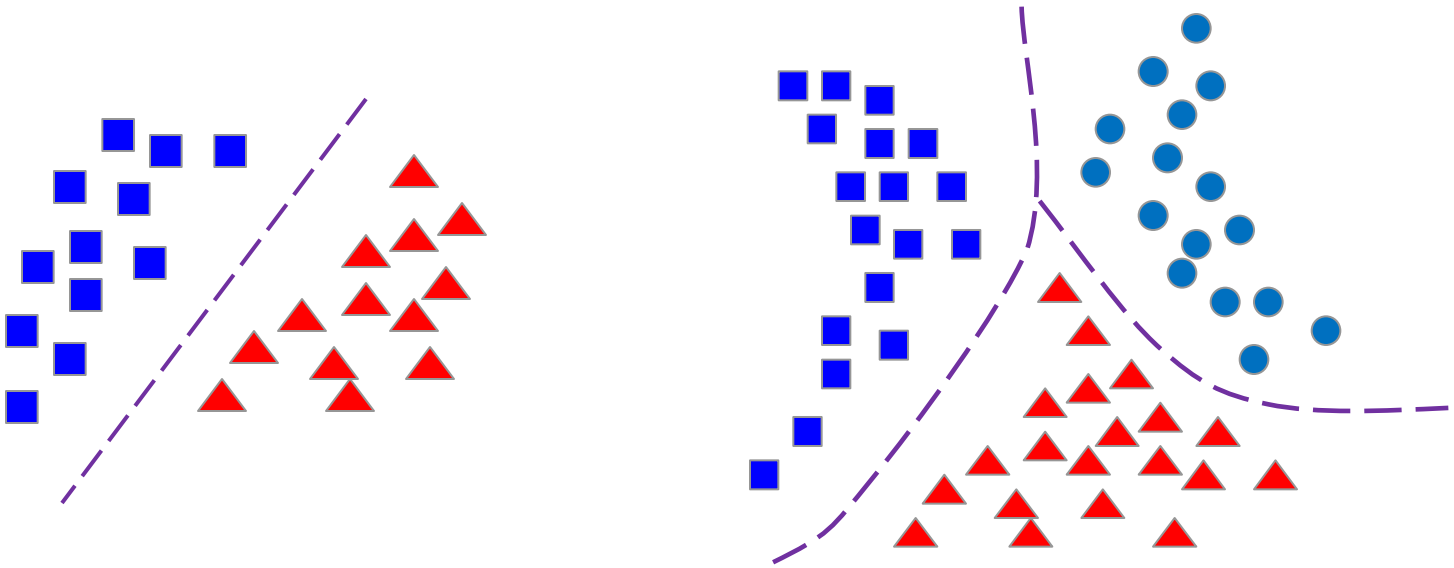
5.1 引言

- **基于判别函数的判别准则**
  - 对于c 类分类问题:
    - 设 $g_i(\mathbf{x}),\ i = 1,2,\ldots, c,$ 表示每个类别对应的判别函数
    - 决策规则：
      - 如果 $g_i(\mathbf{x}) \geq g_j(\mathbf{x}), \forall\ j \neq i,$ 则 $\mathbf{x}$ 被分为第 ω_i 类。
  - **对于两类分类问题**
    - **可以只用一个判别函数：** $g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x}),$
    - 判别准则：$g(\mathbf{x}) > 0$，分为第一类；否则为第二类。

比如：$g(\mathbf{x}) = p(\omega_1 \mid \mathbf{x}) - p(\omega_2 \mid \mathbf{x}),\ \ g(\mathbf{x}) = \log \dfrac{p(\mathbf{x} \mid \omega_1)}{p(\mathbf{x} \mid \omega_2)} + \log \dfrac{p(\omega_1)}{p(\omega_2)}$

5.1 引言

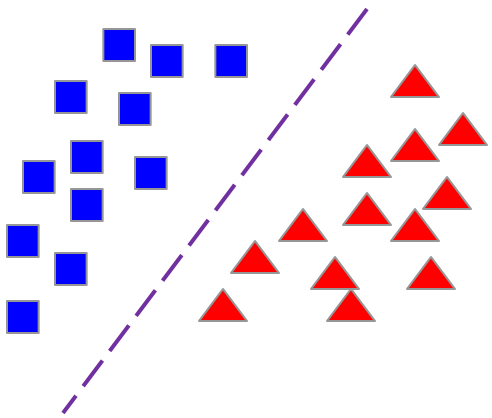
- 判别函数示例



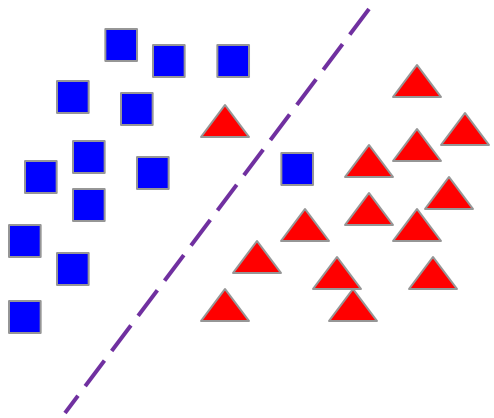
图中，边界线即为一个判别函数

5.1 引言

- **线性可分**
  - 对于 n 个 d 维空间中的样本有$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n$，假定这些样本来自于两个不同的类别 ω_1 或 ω_2。**如果存在一个线性判别函数能对这些样本正确地分类，则称这些样本是线性可分的；**否则是线性不可分的。



线性可分



线性不可分

5.2 线性判别函数与决策面

- 假定$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^d$为一个样本，$g(\mathbf{x})$为关于样本的一个属性。可以将$g(\mathbf{x})$理解为样本 $\mathbf{x}$ 的类别标签。
- 线性判别函数：

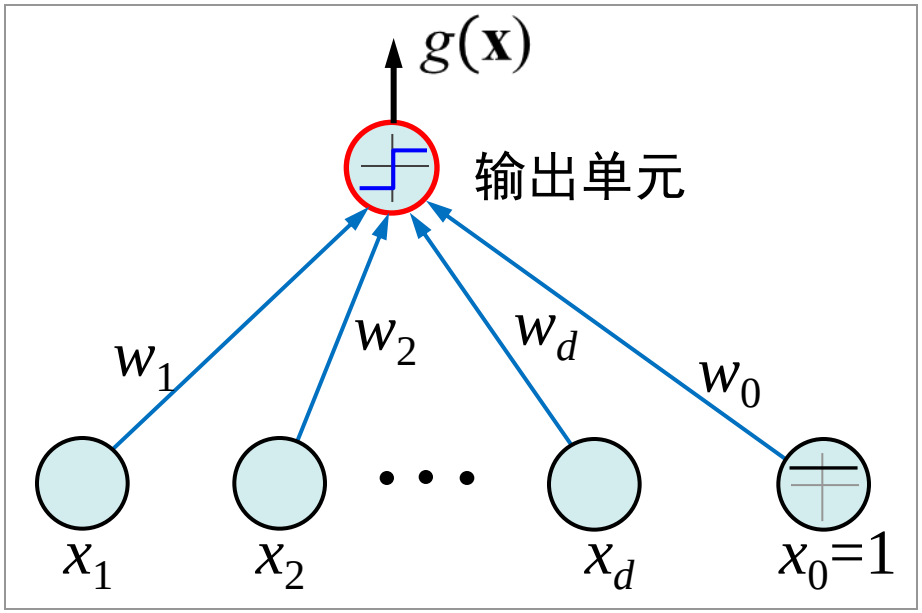
$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 \tag{1}$$

权重向量　　偏移(阈值)

5.2 线性判别函数与决策面

- 两类情形的决策函数：

$$\begin{cases} \mathbf{x} \in \omega_1, & \text{if } g(\mathbf{x}) > 0 \\ \mathbf{x} \in \omega_2, & \text{if } g(\mathbf{x}) < 0 \\ \text{uncertain}, & \text{if } g(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \tag{2}$$

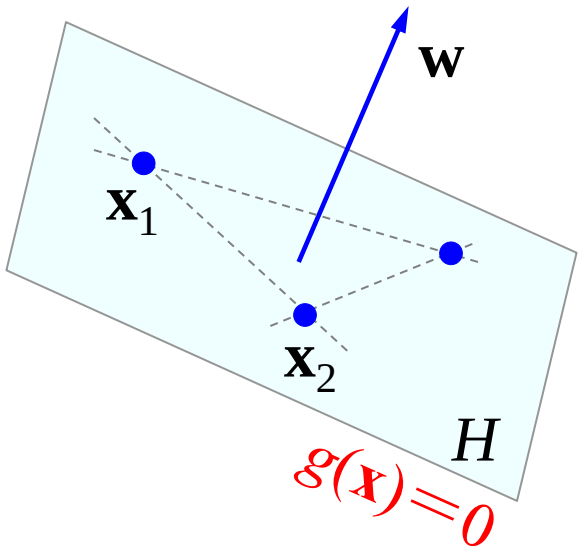


线性分类器

5.2 线性判别函数与决策面

- 两类情形的决策面
  - $g(\mathbf{x})=0$定义了一个决策面，它是类 ω_1 和 ω_2 的分界面。
  - $g(\mathbf{x})=0$ 是一个超平面，记为 H。位于该平面的任意向量均与 $\mathbf{w}$ 垂直：
    - 如果 $\mathbf{x}_1$ 和 $\mathbf{x}_2$ 位于该超平面内，于是有：

$$g(\mathbf{x}_1) - g(\mathbf{x}_1) = \mathbf{w}^T(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2) = 0$$

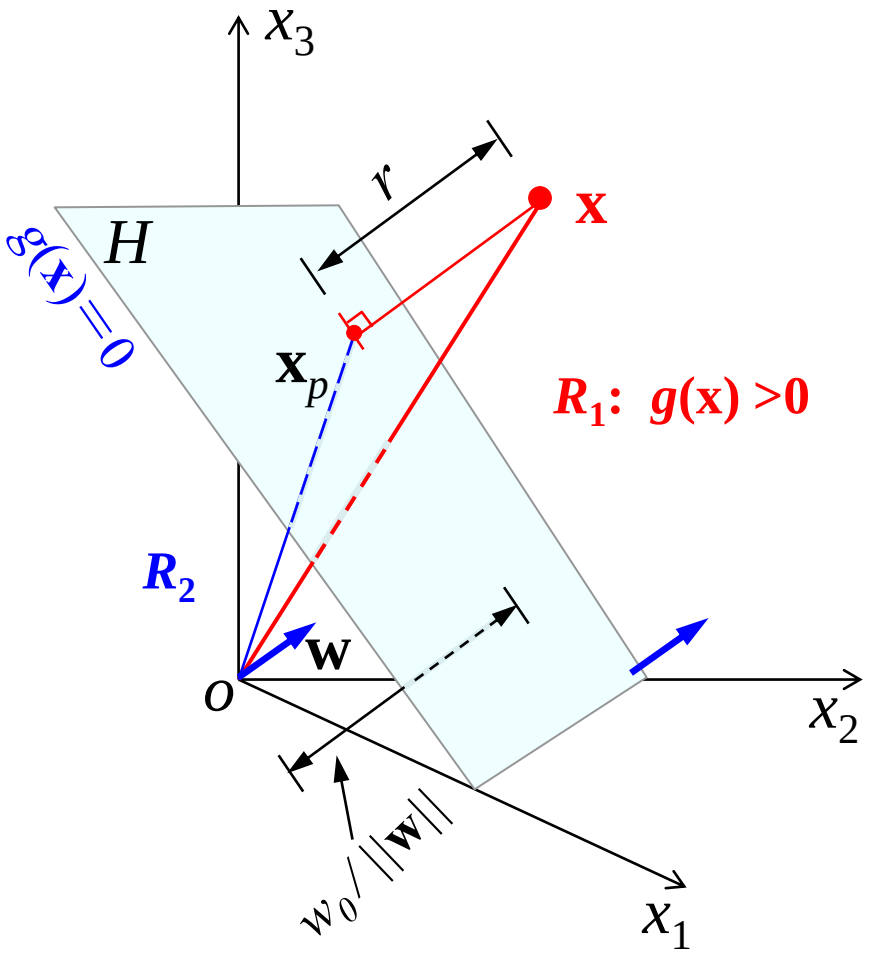


5.2 线性判别函数与决策面

- 两类情形的决策面
  - 对于任意样本 **x**，将其向决策面内投影，并写成两个向量之和：

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}$$

其中，$\mathbf{x}_p$为 **x** 在超平面H上的投影，r 为点 **x** 到超平面H的代数距离。如果 **x** 在超平面正侧，则 $r > 0$; 反之 $r < 0$ 。



5.2 线性判别函数与决策面

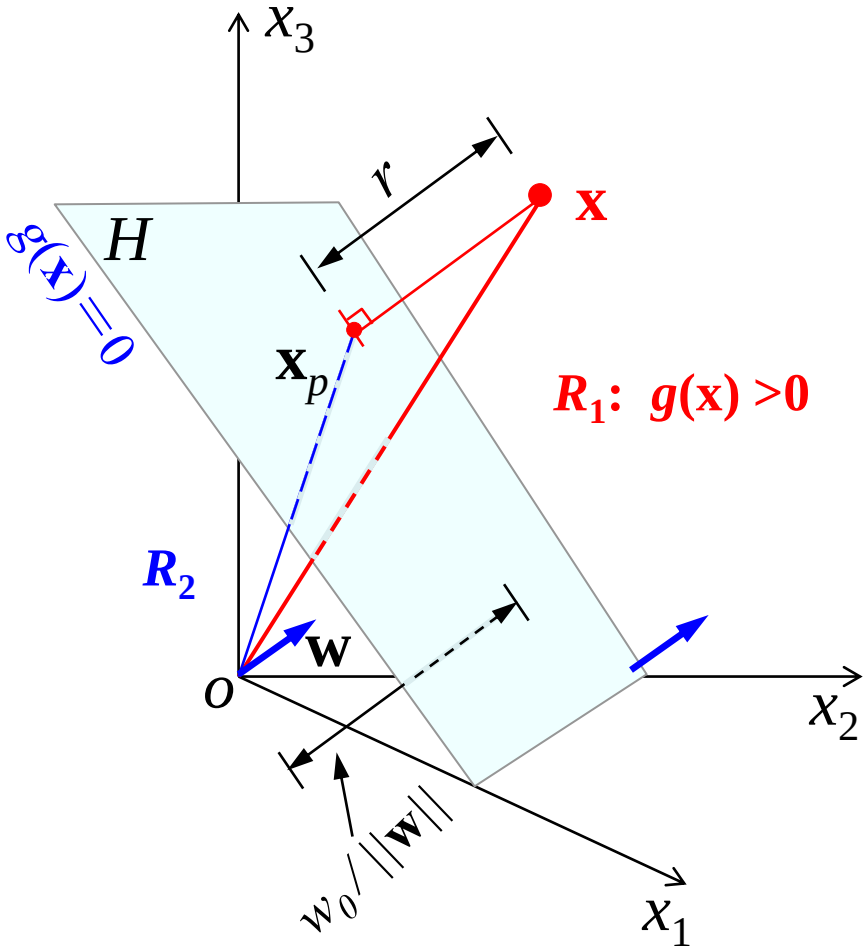
- 两类情形的决策面
  - 注意 $g(\mathbf{x}_p) = 0$，于是有：

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\left(\mathbf{x}_p + r\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}\right) + w_0$$

$$= r\|\mathbf{w}\|$$

$$\Rightarrow \quad r = \frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$$

此外，可得坐标原点到超平面的距离为：$w_0 / \|\mathbf{w}\|$



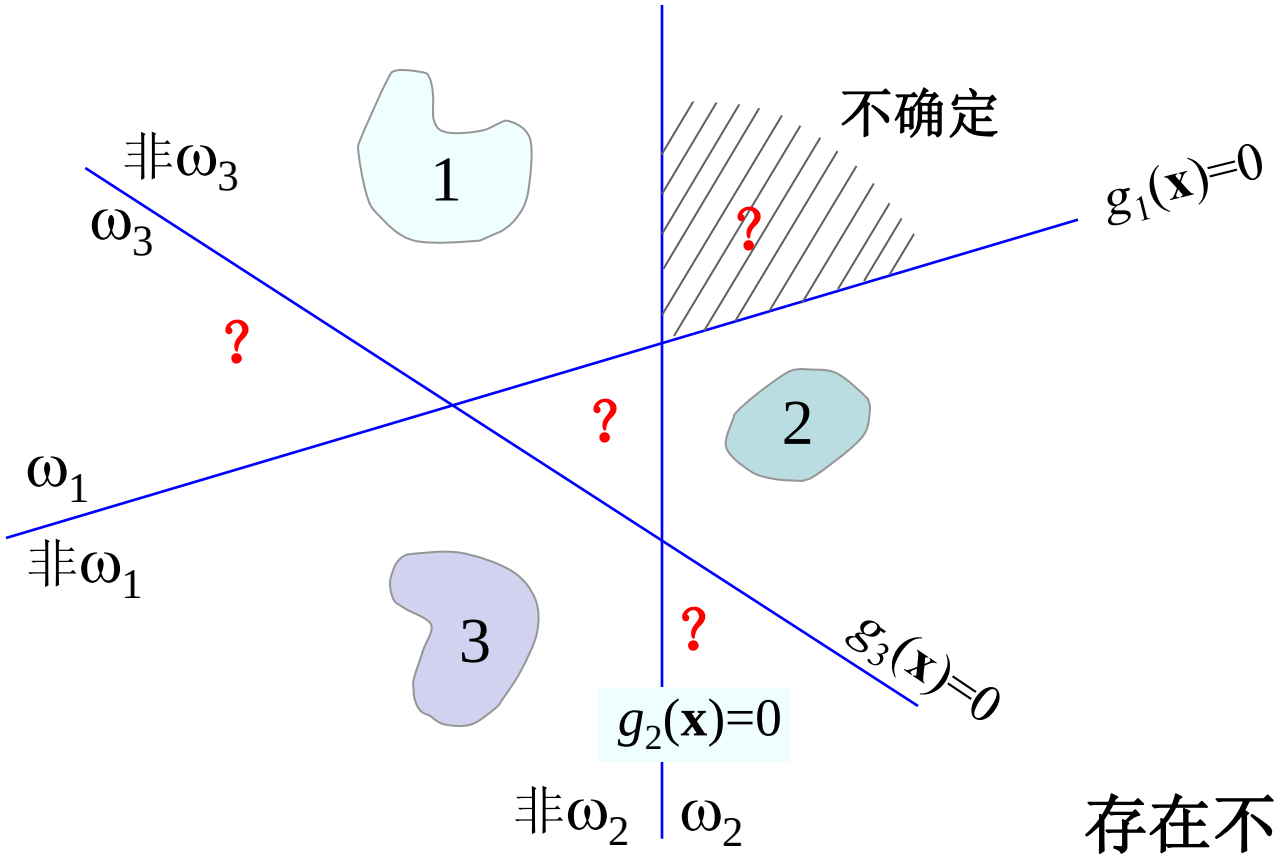
5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形 $(c > 2)$
  - One-vs-all：逐一与所有的其它类进行配对，可以构造 c 个两类分类器。
  - One-vs-one：两两(类-类）配对，可以构造$c(c-1)/2$ 个两类分类器。
  - **逐步一对多：**将c类问题逐步转化个两类分类问题。第一个分类器将其中一个类样本与其余各类样本分开，在其余各类中设计第二个分类器，直至仅剩下两个分类器为止。
- 多个两类分器：

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + w_{i0}, \quad i = 1, 2, ..., k$$

5.2 线性判别函数与决策面

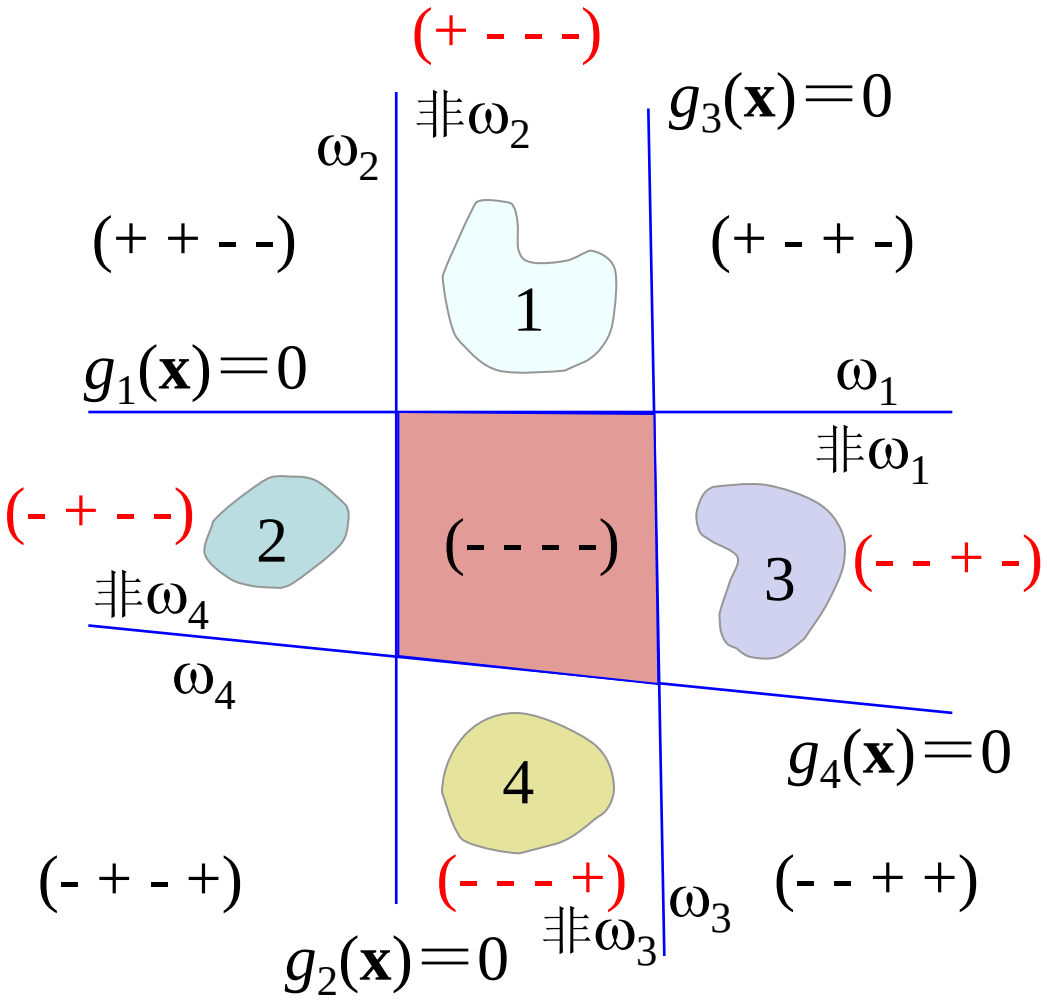
- 多类情形：One-vs-all



存在不确定区域

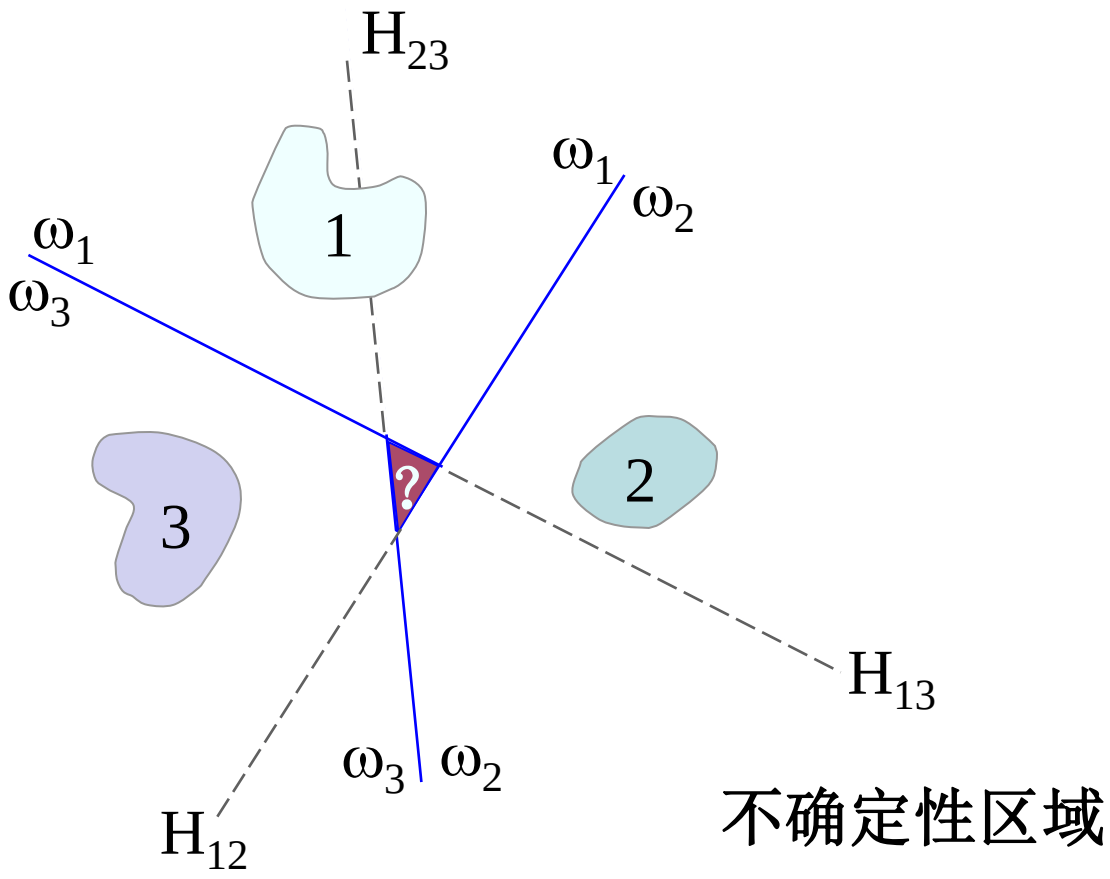
5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形:One-vs-all



5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形：One-vs-one



5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器
  - 考虑one-vs-all情形，构建 c 个两类线性分类器：

$$g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + w_{i0}, \quad i = 1, 2, ..., c$$

  - 对样本点 $\mathbf{x}$，采用如下决策规则：

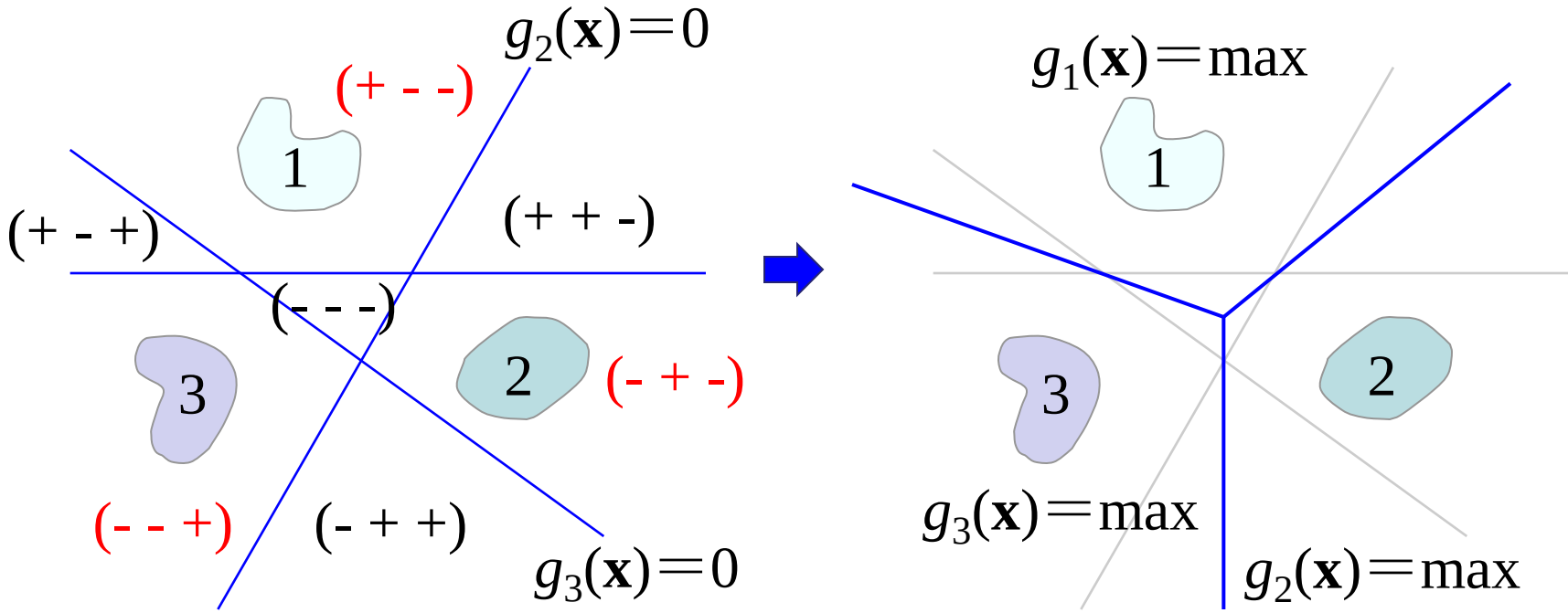
对 $j \neq i$, 如果 $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}$ 则被分类 ω_I 类；否则不决策

$$\mathbf{x} \in \omega_i, \quad g_i(\mathbf{x}) = \max_{j=1,2,..c} g_j(\mathbf{x})$$

线性机器将样本空间分为 c 个**可以决策的区域$\boldsymbol{R_1}$,…, $\boldsymbol{R_c}$**

5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器：（变成“最大”决策）



线性机器将样本空间分为 c 个可以决策的区域$\boldsymbol{R_1},\ldots,\boldsymbol{R_c}$

5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器的决策面
  - 线性机器将样本空间分为 c 个可以决策的区域$\boldsymbol{R_1},\ldots,\boldsymbol{R_c}$。即是说，如果 $\mathbf{x}$ 位于 $\boldsymbol{R_i}$ 中，在所有的判别值中，$g_i(\mathbf{x})$将会是最大的。
  - 如果 R_i 和 R_j 相邻，则这两个区域的边界将是超平面 H_{ij} 的一部分。 H_{ij} 定义为：

$$g_i(\mathbf{x}) = g_j(\mathbf{x})$$

即 $$g_i(\mathbf{x}) - g_j(\mathbf{x}) = (\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j)^T\mathbf{x} + (w_{i0} - w_{j0}) = 0$$

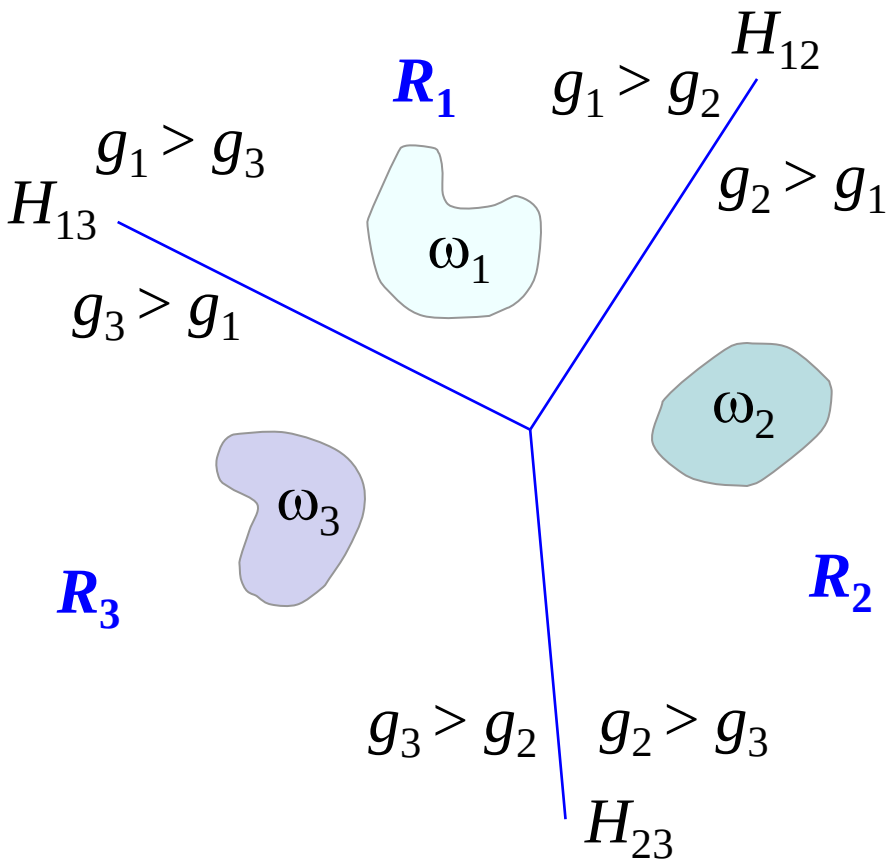
可见： 法方向$\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j$ 垂直于H_{ij}，且 $\mathbf{x}$ 到 H_{ij} 的符号距离为：

$$(g_i(\mathbf{x}) - g_j(\mathbf{x})) / \| \mathbf{w}_i - \mathbf{w}_j \|$$

可见： **重要的是权向量之差，而不是权向本身！**

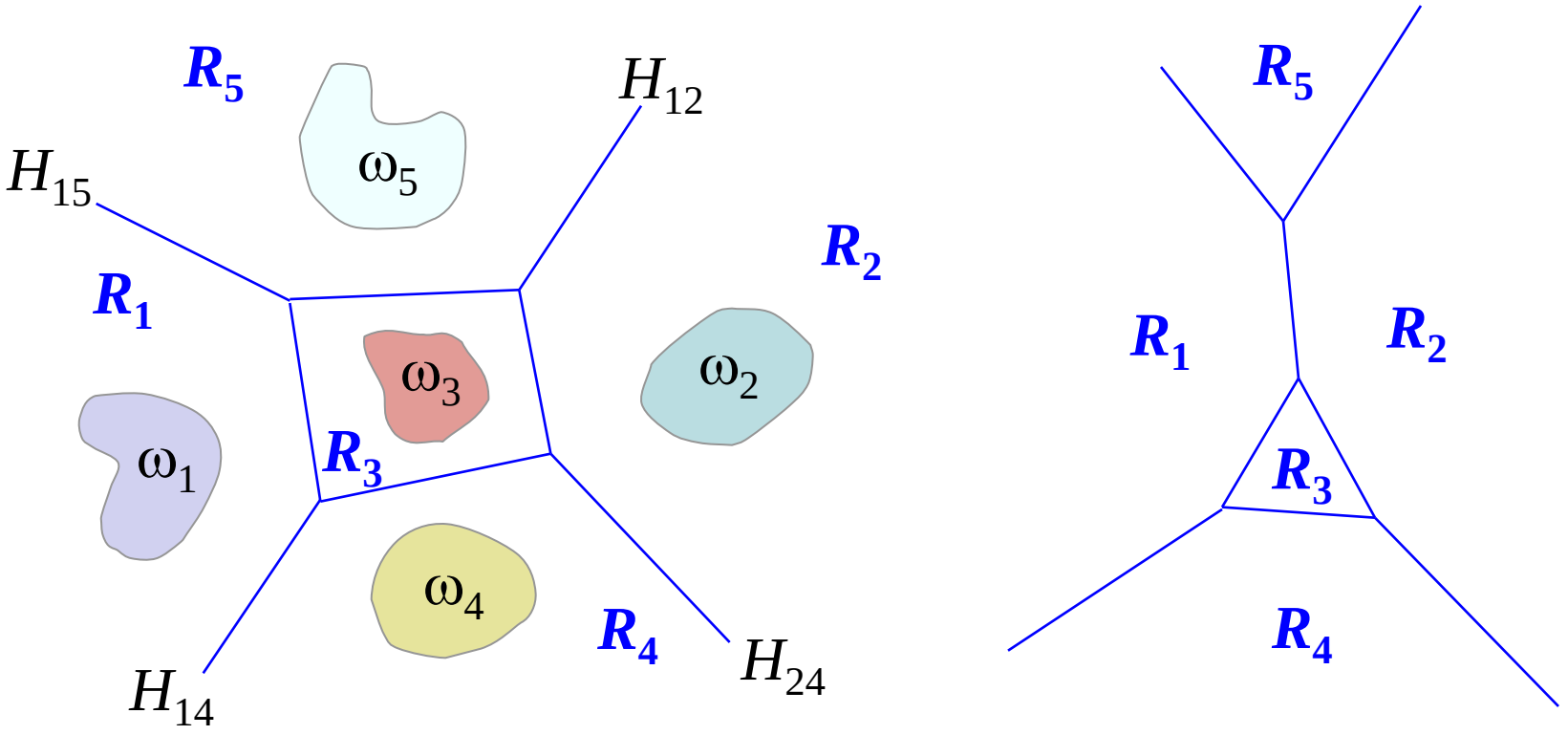
5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器的决策面
  - **One-vs-one**



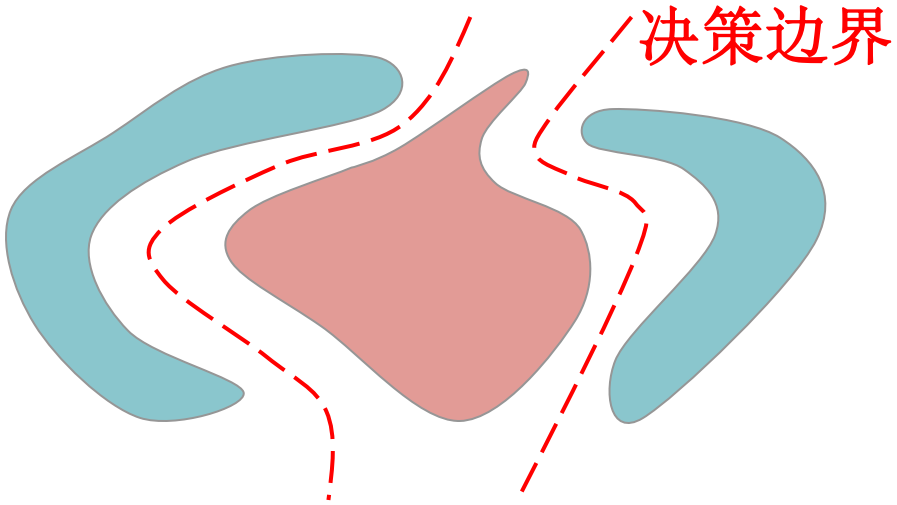
5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器的决策面
  - 可以多达 $c(c\text{-}1)/2$ 个决策边界（有些可能可以删除）！



5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形—线性机器的决策面
  - 所有的决策区域都是凸的——便于分析
  - 所有的决策区域都是单通连的——便于分析
  - 凸决策区域：限制分类器的灵活性和精度
  - 单通连区域：不利于复杂分布数据的分类（比如：分离的多模式分布）



5.3 广义线性判别函数

- 线性判别函数形式简单，计算方便，且已被充分研究。人们期望将其推广至非线性判别函数。

一种有效的途径是将原来的数据点 **x** 通过一种适当的**非线性映射**将其映射为新的数据点 **y**，从而**在新的数据空间内可以应用线性判别函数方法**。

5.3 广义线性判别函数

- 线性情形

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i, \quad \text{其中，} \mathbf{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_d]^T$$

- 推广
  - 多项式判别函数，比如二次推广：

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} w_{ij} x_i x_j \quad \text{——} \quad \text{二次推广}$$

1. 共有 $d(d+1)/2$ 个系数待估计 ($w_{ij} = w_{ji}$)
2. $g(\mathbf{x})=0$为决策面，它是一个二次超曲面

5.3 广义线性判别函数

- 一般情形

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i y_i(\mathbf{x})$$

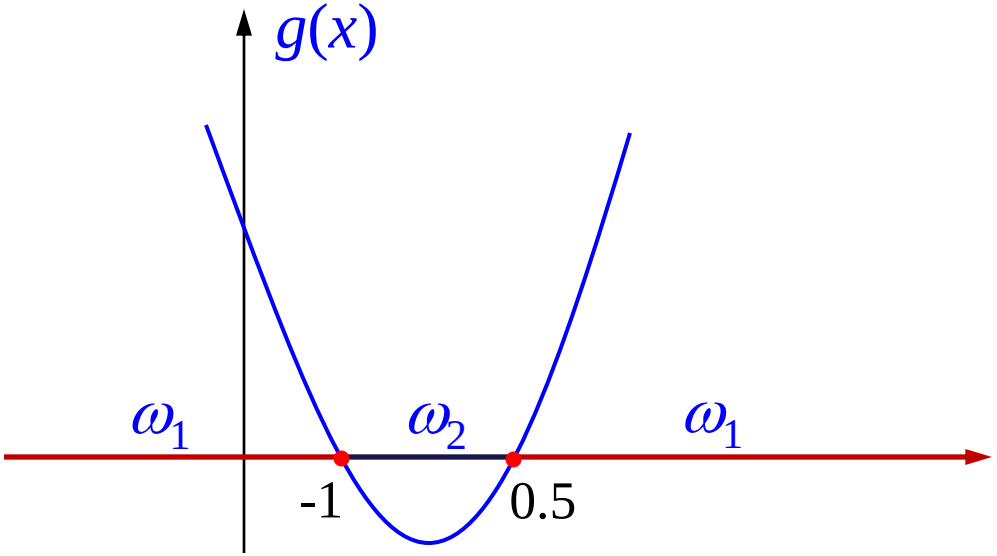
令 $\mathbf{a} = [a_1, a_2, ..., a_{\hat{d}}]^T$， $\mathbf{y} = [y_1, y_2, ..., y_{\hat{d}}]^T$ 可以简写为：

$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T\mathbf{y}$$

1. **a**为广义权重向量， **y** 是经由 **x** 所变成的新数据点。
2. 广义判别函数 $g(\mathbf{x})$ 对 **x** 而言是非线性的，对 **y** 是线性的。
3. $g(\mathbf{x})$ 对 **y** 是齐次的，意味着决策面通过新空间的坐标原点。且任意点 **y** 到决策面的代数距离为 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} / \|\mathbf{a}\|$ 。
4. 当新空间的维数足够高时，$g(\mathbf{x})$ 可以逼近任意判别函数。
5. 新空间的维数远远高于原始空间的维数 d 时，会造成维数灾难问题。

5.3 广义线性判别函数

- 例子1
  - 设有一维样本空间X，我们期望如果 $x<-1$ 或者 $x>0.5$, 则 x 属于第一类ω_1；如果 $-1<x<0.5$，则属于第二类 ω_2，请设计一个判别函数 $g(x)$。



5.3 广义线性判别函数

- 例子1
  - 设有一维样本空间X，我们期望如果 $x<-1$ 或者 $x>0.5$，则 x 属于第一类ω_1；如果 $-1<x<0.5$，则属于第二类ω_2，请设计一个判别函数 $g(x)$。
- 决策函数：$g(x) = (x-0.5)(x+1)$
- 决策规则：$g(x)>0$, x 属于ω_1；$g(x)<0$, x 属于ω_2

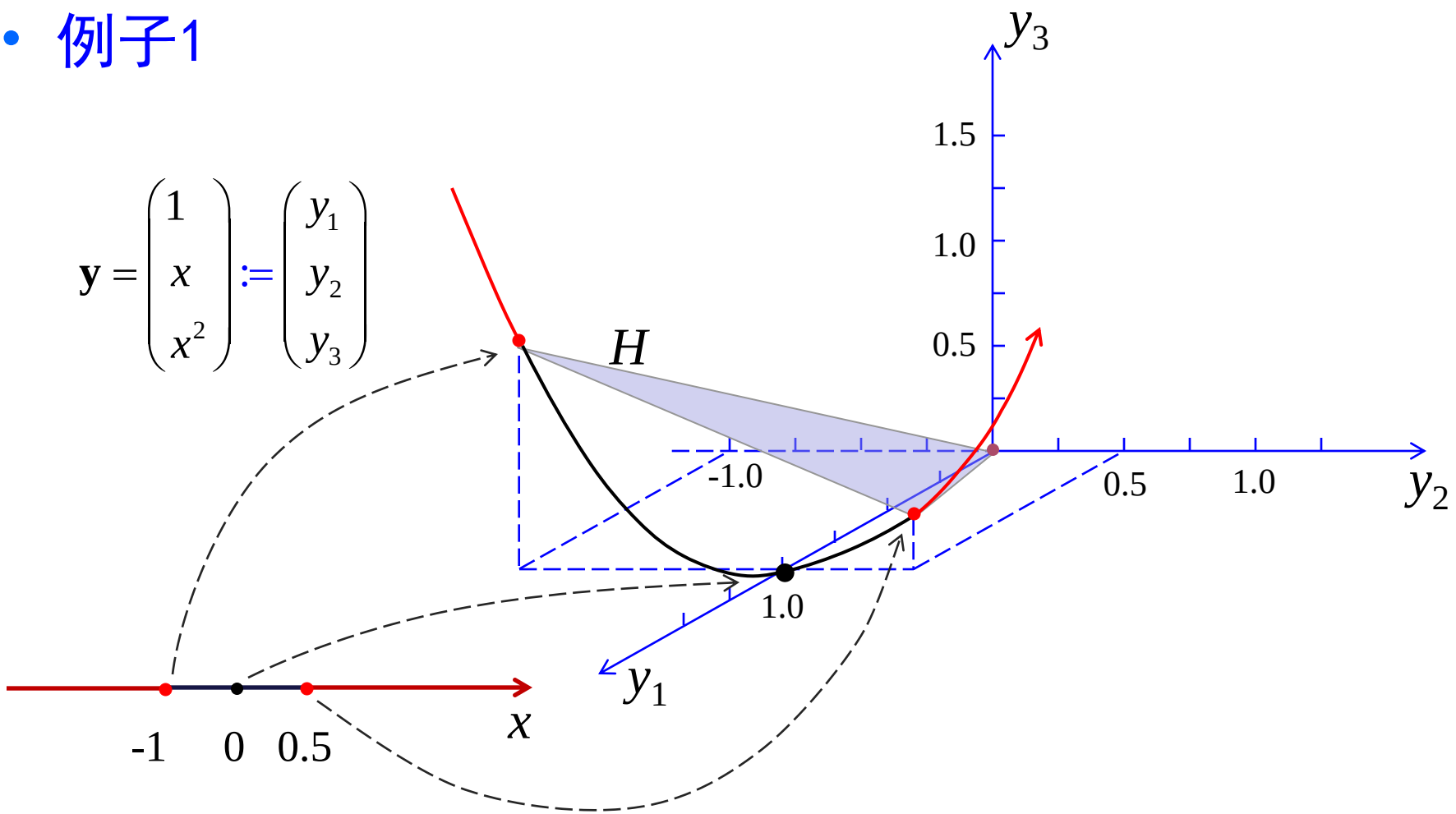
$$g(x) = (x-0.5)(x+1) = -0.5 + 0.5x + x^2 = a_1 + a_2x + a_3x^2$$

映射关系

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

5.3 广义线性判别函数

- 例子1



将一维数据点变成三维数据点

5.3 广义线性判别函数

- 例子2
  - 对线性判别函数采用齐次增广表示
    - 增广样本向量 **y** 与增广权重向量 **a**：

$$\mathbf{y}=\begin{pmatrix}1\\ \mathbf{x}\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}1 & x_1 & \cdots & x_d\end{bmatrix}^T,\quad \mathbf{a}=\begin{pmatrix}w_0\\ \mathbf{w}\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}w_0 & w_1 & \cdots & w_d\end{bmatrix}^T$$

  - 线性判别函数的齐次简化：$g(\mathbf{x})=\mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0=\mathbf{a}^T\mathbf{y}$
  - Y空间任意一点 **y** 到 H 的距离为：$r=\dfrac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{a}\|}=\dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{y}}{\|\mathbf{a}\|}$

线性齐次空间增加了一个维度，但可保持欧氏距离不变，分类效果与原来的决策面相同。但分类面将过坐标原点，对于某些分析，将具有优势。

5.3 广义线性判别函数

- 例子2
  - 设有一维空间的分类器，其决策方程为：$x-c=0$
  - 采用增广样本向量 **y** 与增广权重向量 **a**：

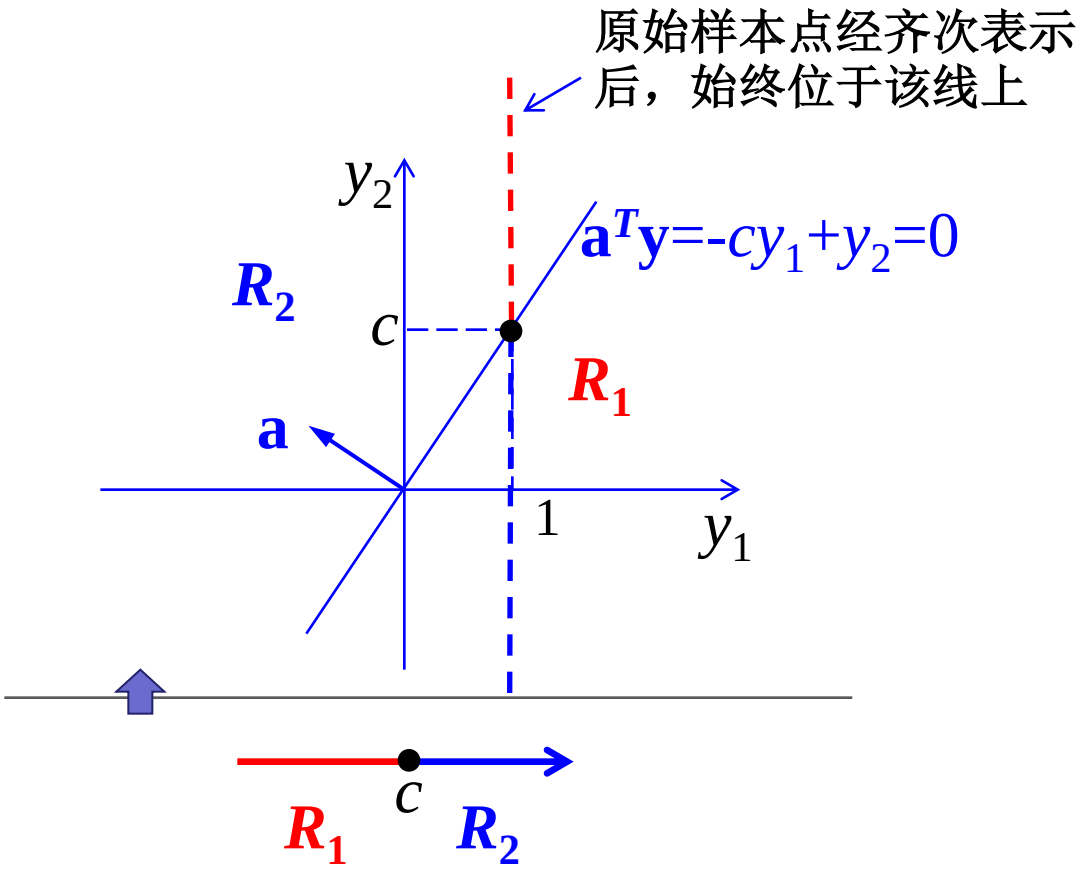
$$\mathbf{y}=\begin{pmatrix}1\\ x\end{pmatrix}:=\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\end{pmatrix},\quad \mathbf{a}=\begin{pmatrix}-c\\ 1\end{pmatrix}$$

  - 决策面方程： $\mathbf{a}^T\mathbf{y}=-cy_1+y_2=0$

决策面为一个二维空间中过原点的直线。

5.3 广义线性判别函数

- 例子2：对一维空间的决策方程：$x-c=0$



5.3 广义线性判别函数

- 例子3：
  - 考察二维空间的一条不过原点的直线: $ax_1+bx_2+c=0$。如果采用齐次坐标表示，令$\mathbf{y}=[1, x_1, x_2]^T=[y_1, y_2, y_3]^T$, $\mathbf{a}=[c, a, b]^T$, 则决策表面将变成一个平面： $\mathbf{a}^T\mathbf{y}=\mathbf{0}$。
  - 在三维空间中，原来的直线将为 $y_1=1$ 这个平面与 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}=\mathbf{0}$平面的交线。

5.4 感知准则函数

- **线性可分性**
  - 现有 n 个 d 维空间中的样本: $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_n$, 这些样本来自于两个类别 $\boldsymbol{\omega}_1$ 或 $\boldsymbol{\omega}_2$。
  - 我们的任务：要寻找一个线性判别函数 $g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T\mathbf{y}$，使对这 n 个样本的错分概率最小。
  - 如果存在一个权向量 $\mathbf{a}$，对所有 $\mathbf{y} \in \boldsymbol{\omega}_1$，均有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} > 0$，且对所有 $\mathbf{y} \in \boldsymbol{\omega}_2$，均有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} < 0$，则这组样本集为线性可分的；否则为线性不可分的。（广义判别函数意义下）
- 本节考虑**“线性可分的两类”**情形

5.4 感知准则函数

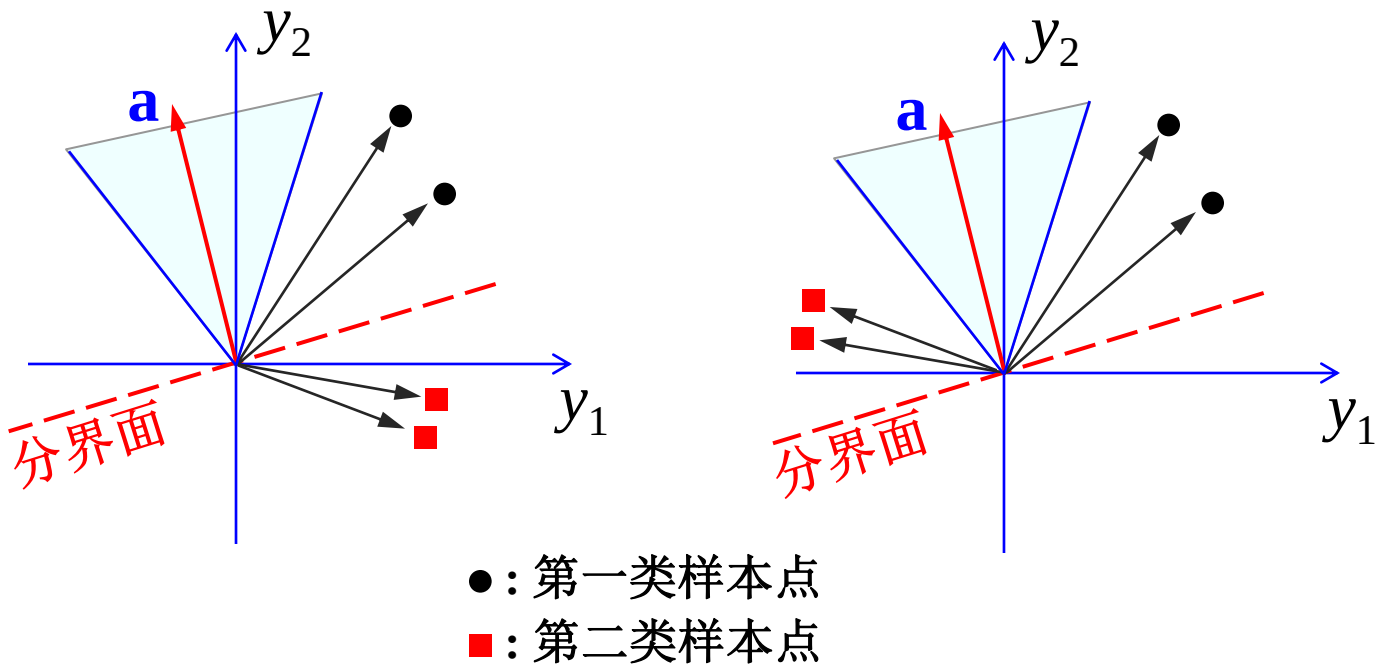
- **样本规范化**
  - 如果样本集是线性可分的，将属于 ω_2 的所有样本由 **y 变成 –y，对所有 *n* 样本，将得到 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}>0$** 。
  - 经过上述处理之后，在训练的过程中就不必考虑原来的样本类别。这一操作过程称为对样本的**规范化** (normalization) 处理。

5.4 感知准则函数—两类可分情形

- **解区与解向量**
  - 在线性可分的情形下，满足 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0, i = 1, 2, \ldots, n$ 的权向量 $\mathbf{a}$ 称为**解向量**。
  - 权向量 $\mathbf{a}$ 可以理解为权空间中的一点，每个样本 $\mathbf{y}_i$ 对 $\mathbf{a}$ 的位置均可能起到限制作用，即要求 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$。
  - 任何一个样本点 $\mathbf{y}_i$ 均可以确定一个超平面 H_i ：$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i = 0$，其法向量为 $\mathbf{y}_i$。如果解向量 $\mathbf{a}^*$存在，它必定在 H_i 的正侧，因为只有在正侧才能满足 $(\mathbf{a}^*)^T\mathbf{y}_i > 0$。
  - 按上述方法，n 个样本将产生 n 个超平面。每个超平面将空间分成两个半空间。**如果解向量存在，它必定在所有这些正半空间的交集区域内。**这个区域内的所有向量均是一个可行的解向量 $\mathbf{a}^*$ 。

5.3 感知准则函数—两类可分情形

- 解区与解向量



未规范化　　规范化

给定一个可行的 **a**, 即可得到一个分界面

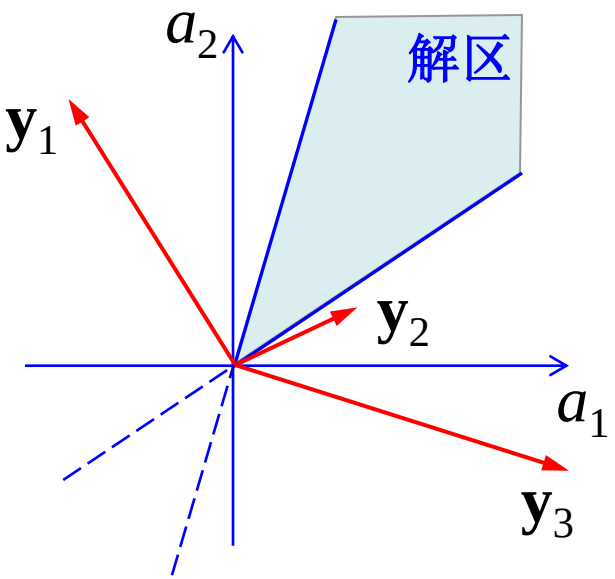
5.4 感知准则函数

- **限制解区**
  - 可行的解向量不是唯一的，有无穷多个。
  - 经验：**越靠近区域中间的解向量**，越能对新的样本正确分类
  - 可以引入一些条件来限制解空间
    - 寻找一个单位长度的解向量 **a**，能最大化样本到分界面的最小距离
    - 寻找一个最小长度的解向量 **a**，使$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i \geq b > 0$。此时可以将 b 称为 间隔 (margin)。
      - 解更加可靠，推广性更强
      - 防止算法收敛到解区的边界

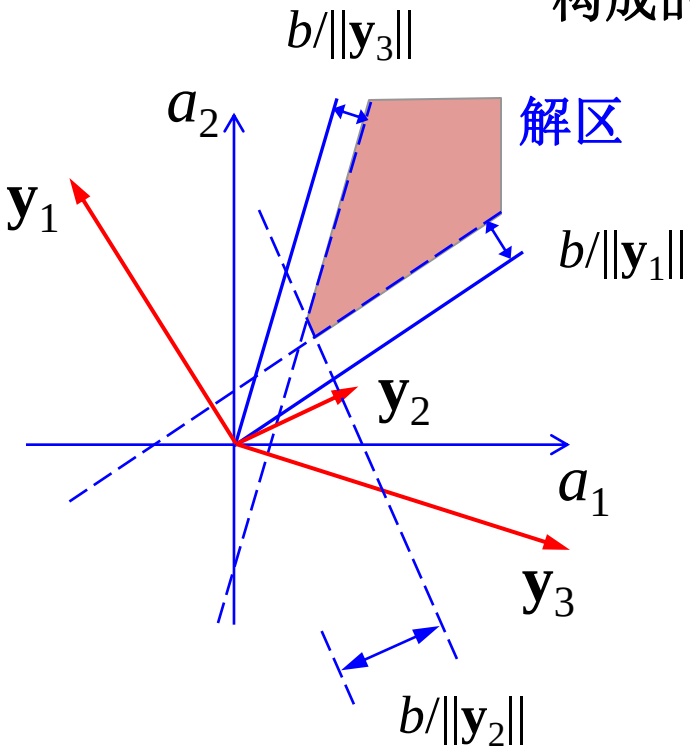
5.4 感知准则函数

- 限制解区：移动一个间隔

将正半空间向外推一定的距离后构成的交集



b=0,不考虑margin



b>0,考虑margin

$$\because\ r=\frac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{w}\|}$$

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数**
  - 任务：设有一组样本$\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_n$，各样本均规范化表示。我们的目的是要寻找一个解向量 **a**，使

$$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0，\ i=1,2,\ldots,n$$

  - 在线性可分情形下，满足上述不等式的 **a** 是无穷多的，因此我们需要引入一个准则。

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数—基本思想**
  - 考虑如下准则函数：

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(-\mathbf{a}^T\mathbf{y}),\ \text{其中，}\ Y\text{为错分样本集合}$$

  - 当 $\mathbf{y}$ 被错分时， $\mathbf{a}^T\mathbf{y} \le 0$，则 $-\mathbf{a}^T\mathbf{y} \ge 0$。因此 $J_p(\mathbf{a})$ 总是大于等于0。在可分情形下，当且仅当 Y 为空集时 $J_p(\mathbf{a})$ 将等于零，这时将不存在错分样本。
  - 因此，目标是最小化 $J_p(\mathbf{a})$: $\min_{\mathbf{a}} J_p(\mathbf{a})$
  - 这即是Frank Rosenblatt 于50年代提出的感知学习机思想。

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数**
  - 考察 $J_p(\mathbf{a})$ 对 $\mathbf{a}$ 的导数：

$$\frac{\partial J_p(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -\sum_{\mathbf{y}\in Y} \mathbf{y}$$

  - 因此，根据梯度下降法，有如下更新准则：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k \sum_{\mathbf{y}\in Y_k} \mathbf{y}$$

这里，$\mathbf{a}_{k+1}$是当前迭代的结果，$\mathbf{a}_k$是前一次迭代的结果，Y_k是被$\mathbf{a}_k$错分的样本集合，η_k为步长因子（更新动力因子）。

5.4 感知准则函数

- 感知准则函数一算法

Batch Perceptron

1 begin initialize: **a**, η , certain θ, $k=0$

2 do $k \leftarrow k+1$

3 $\mathbf{a} = \mathbf{a} + \eta_k \sum_{\mathbf{y} \in Y(k)} \mathbf{y}$ $(Y(k) = Y_k)$

4 until $|\eta_k \sum \mathbf{y}| < \theta$, $\mathbf{y} \in Y_k$

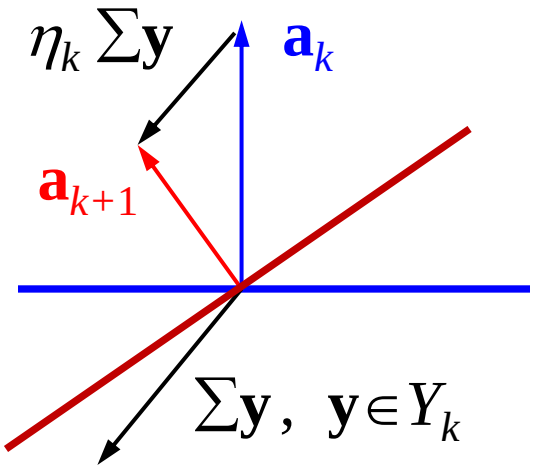
5 return **a**

6 end

1. 之所以称为“batch perception”是因为在迭代过程中同时考虑多个样本。
2. 计算复杂度低，能以较快的速度收敛到极小值点

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数—算法收敛性**
  - 由于所有被 $\mathbf{a}_k$ 错分的样本必然位于以为法向量的超平面的负侧，所以这些样本的和也必然在该侧。
  - $\mathbf{a}_{k+1}$在更新的过程中，会向错分类样本之和靠近，因而朝着有利的方向移动。**一旦这些错分样本点穿过超平面，就正确分类了**。
  - 对于线性可分的样本集，算法可以在有限步内找到最优解。
  - 收敛速度取决于初始权向量和步长



5.4 感知准则函数

- **感知准则函数－算法收敛性**
  - 为了说明算法的收敛性，我们将样本看成一个不断重复出现的序列而逐个加以考虑。
  - 对于任意权向量 $\mathbf{a}_k$，如果错分某样本，则将得到一次修正。由于在分错样本时 $\mathbf{a}_k$ 才得到修正，不妨假定只考虑由错分样本组成的序列。即是说，每次都只需利用一个分错样本来更正权向量。
  - 记错分样本序列为 $\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \ldots, \mathbf{y}^k \ldots$。考虑此情形的算法收敛性问题。
  - 不失一般性，考虑 η_k 固定的情形，且可以令 η_k=1。这样做并不改变分类决策，因为相当于将样本作了一个因子为 $1/\eta_k$ 的缩放。

5.4 感知准则函数

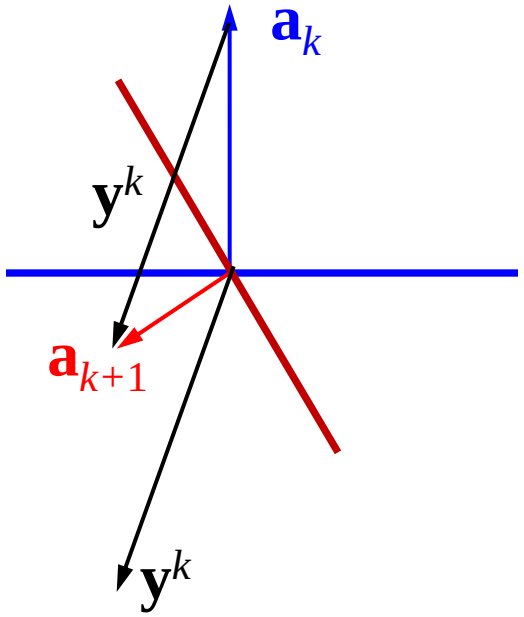
- **感知准则函数—算法收敛性**
  - 经过上述简化后，梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\mathbf{y}^k$。
  - 称该算法为**固定增量单样本修正方法**

Fixed-Increment Single-Sample Perceptron

```
1  begin initialize: a,  k=0
2      do k←k+1 (mod n)
3          if y^k is misclassified by a, then a = a + y^k
4      until  all patterns properly classified
5      return a
6  end
```

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数—算法收敛性**
  - 简化后，梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\mathbf{y}^k$。
  - 称该算法为固定增量单样本修正方法。
  - 权向量总能得到修正。由于$\mathbf{a}_k$将$\mathbf{y}^k$分错，所以$(\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k\le 0$。此时，$\mathbf{a}_k$不在$\mathbf{y}^k$确定的超平面$(\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k=0$的正侧。若将$\mathbf{y}^k$加到$\mathbf{a}_k$上，则$\mathbf{a}_k$将向该超平面的正侧移动，也许会穿过这个超平面（即正确分类）。



$(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k=(\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k+\|\mathbf{y}^k\|^2$

$(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k$增加了一个正数$+\|\mathbf{y}^k\|^2$

5.4 感知准则函数

- **感知准则函数—收敛性定理**
  - 在样本线性可分的情形下，固定增量单样本权向量修正方法收敛，并可得到一个可行解。
- **证明思路**
  - 设 **a** 是一个解向量，只要证明 $\|\mathbf{a}_{k+1}-\mathbf{a}\| < \|\mathbf{a}_k-\mathbf{a}\|$即可。

5.4 感知准则函数

- 证明
  - 设 **a** 是一个解向量，对于任意一个正的标量α， $\alpha\mathbf{a}$也为一个可行解，于是有:

$$\mathbf{a}_{k+1}- \alpha\mathbf{a} = (\mathbf{a}_k -\alpha\mathbf{a}) + \mathbf{y}^k$$

$$\|\mathbf{a}_{k+1}- \alpha\mathbf{a}\|^2 = \|\mathbf{a}_k -\alpha\mathbf{a}\|^2 + 2(\mathbf{a}_k -\alpha\mathbf{a})^T\mathbf{y}^k + \|\mathbf{y}^k\|^2$$

由于 $\mathbf{y}^k$ 被错分，有 $(\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k \le 0$。但 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k > 0$, 于是:

$$\|\mathbf{a}_{k+1}- \alpha\mathbf{a}\|^2 \le \|\mathbf{a}_k -\alpha\mathbf{a}\|^2 - 2\alpha\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k + \|\mathbf{y}^k\|^2$$

因此，寻找一个合适的α，满足$\|\mathbf{a}_{k+1}- \alpha\mathbf{a}\|^2 \le \|\mathbf{a}_k -\alpha\mathbf{a}\|^2$即可。

5.4 感知准则函数

- 证明 (续)
  - 令 $\beta^2 = \max_{i=1,..,n} \|\mathbf{y}_i\|^2, \quad \gamma = \min_i \mathbf{a}^T\mathbf{y}_i$

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \alpha\mathbf{a}\|^2 \le \|\mathbf{a}_k - \alpha\mathbf{a}\|^2 - 2\alpha\gamma + \beta^2$$

令 $\alpha = \beta^2/\gamma$

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \alpha\mathbf{a}\|^2 \le \|\mathbf{a}_k - \alpha\mathbf{a}\|^2 - \beta^2$$

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \alpha\mathbf{a}\|^2 < \|\mathbf{a}_k - \alpha\mathbf{a}\|^2$$

因此，每次迭代，当前解离可行解越来越近。经过 k+1次迭代后:

$$\|\mathbf{a}_{k+1} - \alpha\mathbf{a}\|^2 \le \|\mathbf{a}_1 - \alpha\mathbf{a}\|^2 - k\beta^2$$

由于 $\|\mathbf{a}_{k+1} - \alpha\mathbf{a}\|$ 总是非负的，所以至多经过如下次更正即可：

$$k_0 = \|\mathbf{a}_1 - \alpha\mathbf{a}\|^2/\beta^2$$

5.4 感知准则函数

- 可变增量单样本修正方法
  - 梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1}= \mathbf{a}_k + \eta_k \mathbf{y}^k$

Variable-Increment Perceptron with Margin

1 begin initialize: **a,** margin b, η_0 , k=0
2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)
3 if $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k \leq$ b, then $\mathbf{a} = \mathbf{a} + \eta_k \mathbf{y}^k$
4 until $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k > b$ for all k
5 return **a**
6 end

5.4 感知准则函数

- **可变增量批处理修正方法**
  - 梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k \sum_{\mathbf{y} \in Y_k} \mathbf{y}$
  - 每次迭代纠正错分样本之和：$\mathbf{y}^k = \sum_{\mathbf{y} \in Y_k} \mathbf{y}$

5.4 感知准则函数

Batch Variable-Increment Perceptron

1 begin initialize: **a**, η_0, k=0
2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)
3 Y_k ={}, j = 0
4 do $j \leftarrow j$ + 1
5 if $\mathbf{y}_j$ is misclassified, then append $\mathbf{y}_j$ to Y_k
6 until $j = n$
7 $\mathbf{a} = \mathbf{a} + \eta_k \sum_{\mathbf{y} \in Y(k)} \mathbf{y}$
8 until Y_k ={}
9 return **a**
10 end

5.5 松驰方法

- **学习准则**
  - 在感知函数准则中，目标函数中采用了$-\mathbf{a}^T\mathbf{y}$ 的形式。实际上有很多其它准则也可以用于感知函数的学习。
  - **线性准则：**
  - **平方准则：**

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(-\mathbf{a}^T\mathbf{y}),$$

$$J_q(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(\mathbf{a}^T\mathbf{y})^2,$$

Y为错分样本集合

  - **松驰准则：**

$$J_r(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}\in Y}\frac{(\mathbf{a}^T\mathbf{y}-b)^2}{\|\mathbf{y}\|^2},$$

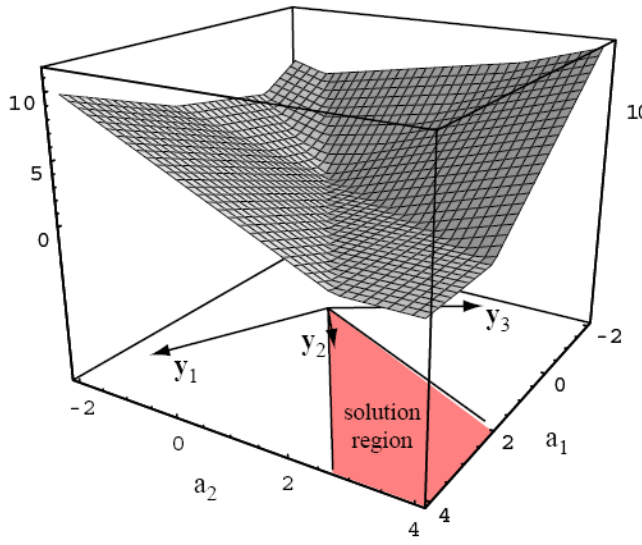
Y为 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}\le b$ 的样本集合

5.5 松驰方法

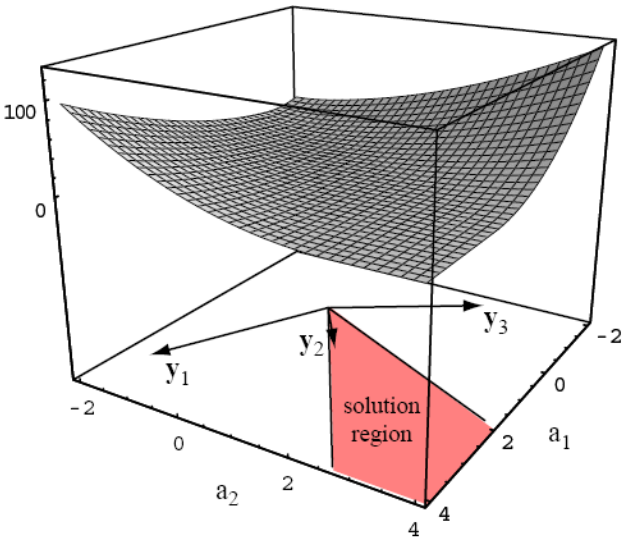
- 学习准则
  - 线性准则的目标函数是分段线性的，因此其梯度是不连续的。
  - 平方准则的梯度是连续的，但目标函数过于平滑，收敛速度很慢（达到目标函数为零的区域的路径很平缓）。同时，目标函数过于受到最长样本的影响。
  - J_r(a) 则避免了这些缺点。
  - J_r(a) 最终达到零。此时对所有的 $\mathbf{y}$， $\mathbf{a}^T\mathbf{y} > b$，则意味着集合 Y 是空集。

5.5 松驰方法

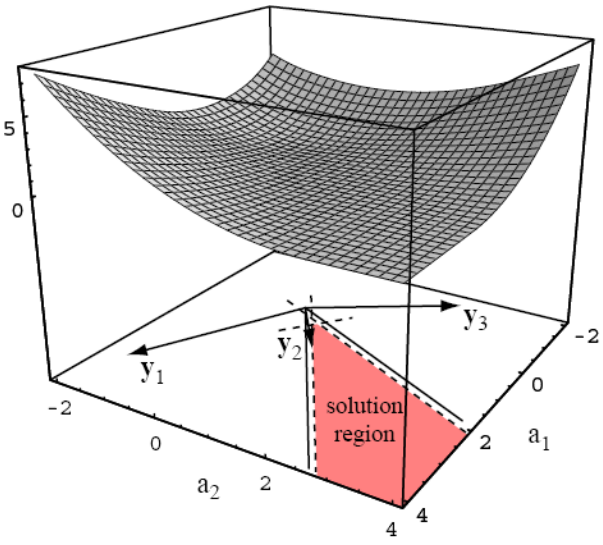
- 目标函数比较:



$J_p(\mathbf{a})$



$J_q(\mathbf{a})$



$J_r(\mathbf{a})$

5.5 松驰方法

- 学习：训练
  - 梯度：

$$\frac{\partial J_r(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \sum_{\mathbf{y}\in Y} \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b}{\|\mathbf{y}\|^2}\mathbf{y}$$

  - 梯度下降准则：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \eta_k \sum_{\mathbf{y}\in Y} \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b}{\|\mathbf{y}\|^2}\mathbf{y}$$

5.5 松驰方法

Batch Relaxation with Margin

1 begin initialize: $\mathbf{a}$, b η_0, k=0

2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)

3 Y_k={}, j = 0

4 do $j \leftarrow j + 1$

5 if $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_j \le b$, then append $\mathbf{y}_j$ to Y_k

6 until $j = n$

7 $\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \eta_k \sum_{\mathbf{y}\in Y} \left((\mathbf{a}^T\mathbf{y} - b)/\|\mathbf{y}\|^2\right)\cdot\mathbf{y}$,

8 until Y_k={}

9 return $\mathbf{a}$

10 end

5.5 松弛方法

- **学习：训练**
  - 算法是收敛的。
  - 仍然可以将批处理算法改写为适合于按序列样本，即单样本修正方法。
  - 此时，仍可假定在梯度下降过程中，更新步长 η_k 为常数，且 $\eta_k = \eta$ 。
  - 此时，仍可假定序列中每个样本都为错分样本（此时为 $\mathbf{a}^T\mathbf{y} \le b$ ），记为： $\mathbf{y}^1, \mathbf{y}^2, \ldots, \mathbf{y}^k \ldots$。
  - **更新准则：**

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \eta_k \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k - b}{\| \mathbf{y}^k \|^2} \mathbf{y}^k$$

5.5 松驰方法

- 单样本松驰算法

Single Sample Relaxation with Margin

1 begin initialize: **a,** margin b, η, k=0

2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)

3 if $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k \le b$, then $\mathbf{a} = \mathbf{a} - \left(\eta(\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k - b)/\|\mathbf{y}^k\|^2\right)\cdot\mathbf{y}^k$

4 until $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k > b$ for all $\mathbf{y}^k$

5 return **a**

6 end

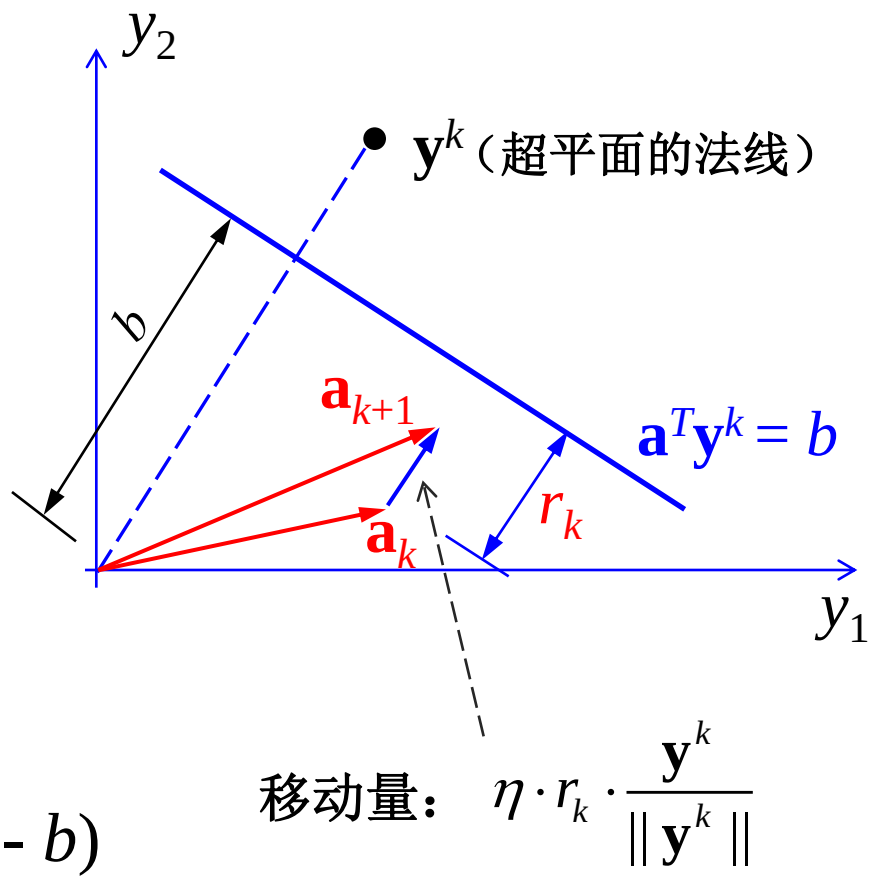
5.5 松驰方法

- 几何解释

点 $\mathbf{a}_k$ 到超平面 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k = b$ 的距离：

$$r_k = \frac{b - \mathbf{a}_k^T\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$$

点 $\mathbf{a}_k$ 沿着单位向量方向 $\mathbf{y}^k/\|\mathbf{y}^k\|$ 移动其 ηr_k 倍距离，得到新的 $\mathbf{a}_{k+1}$。



根据更新准则，有：

$$(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k - b = (1-\eta)\,((\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k - b)$$

5.5 松驰方法

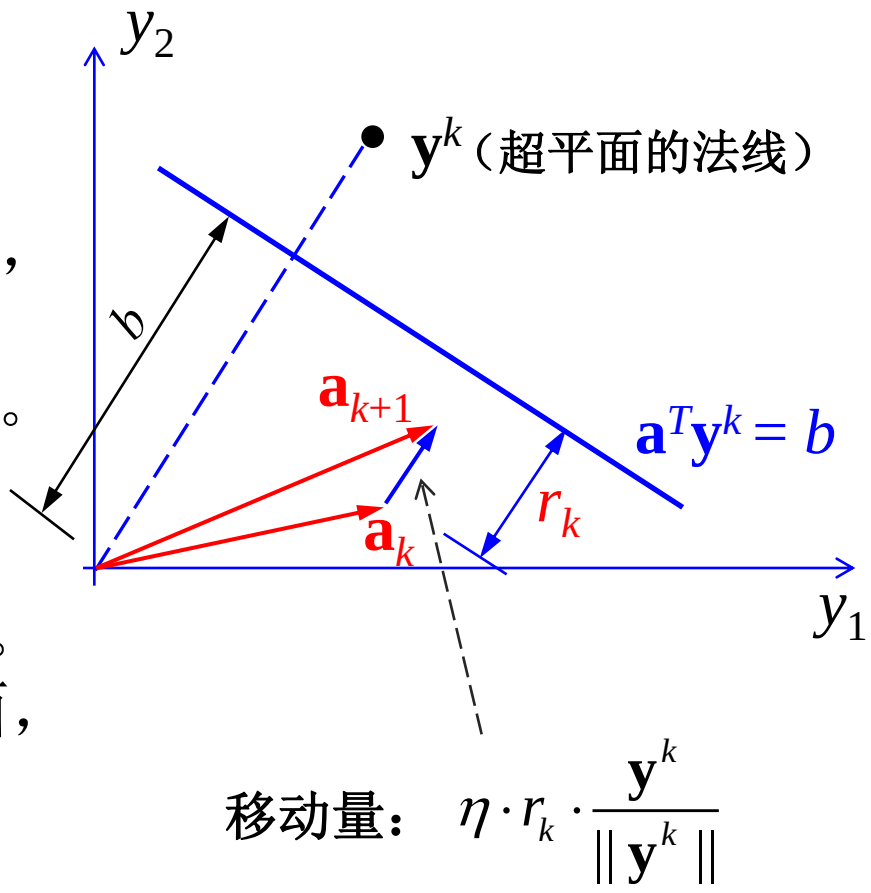
- 几何解释

如果$\eta=1$，$\mathbf{a}_k$将直接移动到该超平面。因此由于$\mathbf{y}^k$被错分引起的压力“$\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k < b$”被释放，因此称此方法为松驰方法。

如果$\eta < 1$，仍有$(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k < b$。此时尽管$\mathbf{y}^k$仍被错分，但$\mathbf{a}_{k+1}$比$\mathbf{a}_k$更好。因为$\mathbf{a}_{k+1}$离跨过超平面更近。此时，称为软松驰。

如果$\eta > 1$, $\mathbf{a}_{k+1}$将跨过超平面，$\mathbf{y}^k$将被正确分类。此时称为超松驰。

实际中取 $0 < \eta < 2$。



5.5 松驰方法

- 收敛性
  - 设 $\mathbf{a}$ 是一个解向量，因此对任意 $\mathbf{y}_i$，有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > b$，于是：

$$\|\mathbf{a}_{k+1}-\mathbf{a}\|^2 = \|\mathbf{a}_k-\mathbf{a}\|^2 - 2\eta\frac{b-\mathbf{a}_k^T\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|^2}(\mathbf{a}-\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k + \eta^2\frac{(b-\mathbf{a}_k^T\mathbf{y}^k)^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}$$

$$(\mathbf{a}-\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k = \mathbf{a}^T\mathbf{y}^k - \mathbf{a}_{k+1}^T\mathbf{y}^k > b-\mathbf{a}_{k+1}^T\mathbf{y}^k$$

$$\Rightarrow \quad \|\mathbf{a}_{k+1}-\mathbf{a}\|^2 < \|\mathbf{a}_k-\mathbf{a}\|^2 - \eta(2-\eta)\frac{(b-\mathbf{a}_k^T\mathbf{y}^k)^2}{\|\mathbf{y}^k\|^2}$$

$$\Rightarrow \quad \|\mathbf{a}_{k+1}-\mathbf{a}\|^2 < \|\mathbf{a}_k-\mathbf{a}\|^2$$

（由于$0 < \eta < 2$)

5.6 最小平方误差（MSE）准则函数

- 动机
  - 对两类分问题，感知准则函数是寻找一个解向量 $\mathbf{a}$，对所有样本 $\mathbf{y}_i$，满足 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$, i=1,2,…n。或者说，求解一个不等式组，使满足 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$的数目最大，从而错分样本最少。
  - 现在将不等式改写为等式形式：

$$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i = b_i > 0$$

其中， b_i 是任意给定的正常数，通常取$b_i = 1$，或者 $b_i = n_j / n$ 。 其中， n_j, j =1 or 2，为属于第 j 类样本的总数，且 $n_1 + n_2 = n$。

5.6 MSE 准则函数

- 方法
  - 可得一个线性方程组：

$$\begin{pmatrix} y_{10} & y_{11} & \cdots & y_{1d} \\ y_{20} & y_{21} & \cdots & y_{2d} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n0} & y_{n1} & \cdots & y_{nd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_d \end{pmatrix} \quad \text{or} \quad \mathbf{Ya} = \mathbf{b}$$

  - 如果 **Y** 可逆，则 $\mathbf{a} = \mathbf{Y}^{-1}\mathbf{b}$
  - 但通常情形下，$n >> d+1$，因此，考虑定义一个误差向量：$\mathbf{e} = \mathbf{Ya} - \mathbf{b}$，并使误差向量最小。

5.6 MSE 准则函数

- 平方误差准则函数：

$$J_s(\mathbf{a}) = \|\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{Ya}-\mathbf{b}\|^2 = \sum_{i=1}^{n}(\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i - b_i)^2$$

  - 偏导数：

$$\frac{\partial J_s(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = \sum_{i=1}^{n} 2(\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i - b_i)\mathbf{y}_i = 2\mathbf{Y}^T(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})$$

  - 令偏导数为零，得：

$$\mathbf{Y}^T\mathbf{Ya} = \mathbf{Y}^T\mathbf{b}, \quad \Rightarrow \mathbf{a} = (\mathbf{Y}^T\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{Y}^T\mathbf{b} = \mathbf{Y}^+\mathbf{b}$$

    其中，$\mathbf{Y}^+$ 即为$\mathbf{Y}$的伪逆。

  - 实际计算（正则化技术）：$\mathbf{Y}^+ \approx (\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}+\varepsilon\mathbf{I})^{-1}\mathbf{Y}^T\Big|_{\varepsilon\to 0}$

（即回归分析方法）

5.6 MSE 准则函数

- **梯度下降法**
  - 计算伪逆需要求矩阵的逆，计算复杂度高。如果原始样本的维数很高，比如 $d > 5000$，将十分耗时。
  - 采用梯度下降法： $\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k \mathbf{Y}^T(\mathbf{b} - \mathbf{Y}\mathbf{a}_k)$
    - 梯度下降法得到的 $\mathbf{a}_{k+1}$ 将收敛于一个解，该解满足方程： $\mathbf{Y}^T(\mathbf{b} - \mathbf{Y}\mathbf{a}) = \mathbf{0}$
  - 也可以采用序列更新方法，此方法需要的计算存储量会更小：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k (b_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k)\, \mathbf{y}^k$$

5.6 MSE 准则函数

- **Widrow-Hoff方法（序列最小平方更新方法）**

Widrow-Hoff (Least mean squared) Approach

1 begin initialize: **a, b,** η, threshold θ, k=0
2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)
3 $\mathbf{a} = \mathbf{a} + \eta_k (b_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k) \mathbf{y}^k$
4 until $\| (b_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k) \mathbf{y}^k \| < \theta$
5 return **a**
6 end

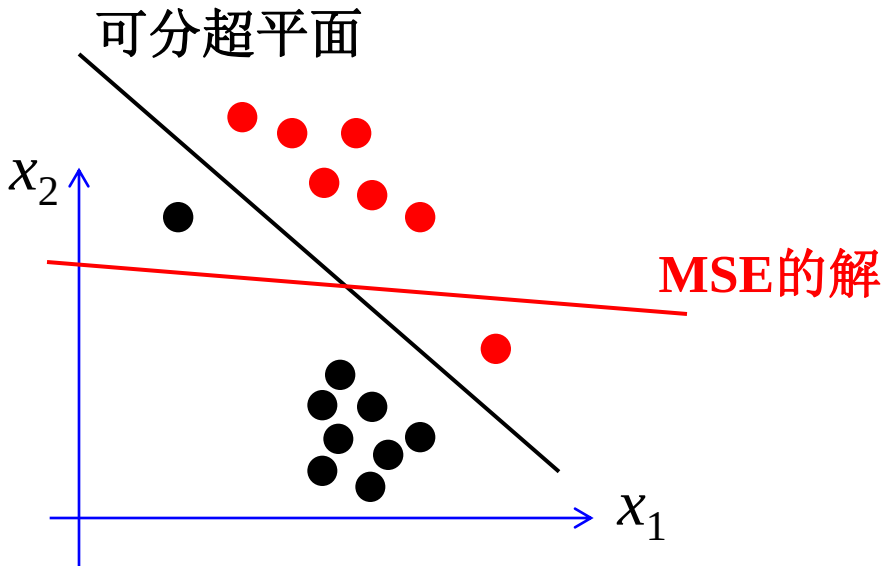
注：$\mathbf{y}^k$ 为使 $(\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k \neq b_k$ 的样本

5.6 MSE 准则函数

- Widrow-Hoff方法 vs 松驰算法
  - 松驰算法是一种错误更正方法，要求 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k > b$ for all $\mathbf{y}^k$。
  - Widrow-Hoff 要求更正不相等情形：$(\mathbf{a}_k)^T\,\mathbf{y}^k \neq b_k$。但是，实际上，满足$(\mathbf{a}_k)^T\,\mathbf{y}^k = b_k$ 几乎是不可能的。因此，迭代将会无穷次进行下去。所以要求 η_k 需要随着 k 的增加而逐渐减小，以保证算法的收敛性。一般来讲，实际计算中取: $\eta_k = \eta_1 / k$ 。

5.6 MSE 准则函数

- **Widrow-Hoff方法 vs 感知器准则**
  - 相对于感知器准则，最小平方准则方法可能并不收敛于可分超平面，即使该平面是存在的。因为，MSE方法的本质是最小化样本至超平面的距离的平方和。



将超平面旋转一个角度，不会改变距离平方和

5.6 MSE 准则函数

- **随机方法 (不讲，如感兴趣自己看）**
  - 前面的方法均是针对确定性样本集的。但在诸多实际应用中，样本总是随机抽取的。实际上，每个样本 **x** 均可看作是从一个总体分布中随机抽取的。
  - 设样本按如下方式随机抽取得到：先按先验概率$P(\omega_i)$选择一个类别，然后再按类条件概率 $p(\mathbf{x}|\omega_i)$ 选择一个样本 **x**。对两类问题，取类别标签为 $\theta = +1$或-1:

$$(\mathbf{x}_1, \theta_1), (\mathbf{x}_2, \theta_2), ..., (\mathbf{x}_k, \theta_k), \ ...,$$

  - 对于两类分类问题，在样本 **x** 给定时，其后验概率为：

$$\begin{cases} P(\theta = 1 | \mathbf{x}) \quad = P(\omega_1 | \mathbf{x}) \\ P(\theta = -1 | \mathbf{x}) = P(\omega_2 | \mathbf{x}) \end{cases}$$

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 随机变量θ的条件期望：

$$E_{\theta|\mathbf{x}}[\theta]=\sum_{\theta}\theta P(\theta\,|\,\mathbf{x})=P(\omega_1\,|\,\mathbf{x})-P(\omega_2\,|\,\mathbf{x})=g_0(\mathbf{x})$$

  - 上述方法也适合于期望为0的噪声情形：$g_0(\mathbf{x})+\delta$。

    因为：　$\mathrm{E}_{\theta|\mathbf{x}}[\theta]=g_0(\mathbf{x})+\mathrm{E}(\delta)=g_0(\mathbf{x})$

  - 目标：求解一个（广义）线性判别函数：

$$g(\mathbf{x})=\mathbf{a}^T\mathbf{y}=\sum_{i=1}^{\hat{d}}a_i y_i(\mathbf{x})$$

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 考虑最小平方误差准则

$$J_s(\mathbf{a}) = \| \mathbf{Ya} - \mathbf{b} \|^2 = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{a}^T \mathbf{y}_i - b_i)^2$$

  - 对规范化样本，如果 $\mathbf{b}=[1, 1,\ldots, 1]^T$, 则所得线性判别函数$g(\mathbf{x})$ 是对贝叶斯决策函数 $g_0(\mathbf{x})$ 的一个渐近逼近*。
  - 对随机样本，可以得到随机最小平方误差准则函数：

$$J_m(\mathbf{a}) = E(\mathbf{a}^T \mathbf{y} - \theta)^2$$

  - 直观上讲，由于$\mathrm{E}[\theta] = g_0(\mathbf{x})$，所以上述准则函数得到的线性判别函数$g(\mathbf{x})$也是$g_0(\mathbf{x})$的一个渐近逼近

*证明见：Richard O. Duda, Peter E. Hart, David G. Stork, Pattern Classification, 2nd Edition, John Wiley, 2001. page: 243-244

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 令梯度等于0，得到关于回归函数的根的随机逼近方程：

$$\frac{\partial J_m(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = 2E[(\mathbf{a}^T\mathbf{y} - \theta)\mathbf{y}] = \mathbf{0}$$

  - 进一步，可得 closed-form solution:

$$\mathbf{a} = \{E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T]\}^{-1} E[\theta\mathbf{y}]$$

  - 任务：用样本来估计 $\mathbf{E}[\mathbf{y}\mathbf{y}^T]$ 的逆矩阵以及$\mathbf{E}[\theta\,\mathbf{y}]$
    - 这一步通常较困难，广义意义下的 $\mathbf{y}$ 实际上也是按 $p(\mathbf{x}|\omega_i)$随机生成的。因为通常情况下$p(\mathbf{x}|\omega_i)$是未知的。

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 可以采用梯度下降法：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k (\theta_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k) \mathbf{y}^k$$

不同的是，此处 θ_k 是一个随机变量 (随机 Widrow-Hoff)

  - 也可以采用牛顿梯度下降法:
    - 注意到目标函数 $J_m(\mathbf{a})$ 的二阶梯度（海森矩阵）为

$$\mathbf{D} = 2E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T]$$

    - 牛顿梯度下降法：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T]^{-1} E[(\theta - \mathbf{a}^T \mathbf{y})\mathbf{y}]$$

或

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \mathbf{R}_{k+1} (\theta_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k) \mathbf{y}^k$$

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 牛顿梯度下降法：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \mathbf{D}^{-1} E[(\theta - \mathbf{a}^T \mathbf{y})\mathbf{y}]$$

或

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \mathbf{R}_{k+1}(\theta_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k)\mathbf{y}^k$$

将$\mathbf{R}_{k+1}$看成$\mathbf{D}^{-1}$，并采用样本序列来代替期望计算。计算上，我们有：

$$\mathbf{D}_{k+1} := \mathbf{R}_{k+1}^{-1} = \mathbf{R}_k^{-1} + \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T$$

或者直接地，有：

$$\mathbf{R}_{k+1} = \mathbf{R}_k - \frac{\mathbf{R}_k \mathbf{y}_k (\mathbf{R}_k \mathbf{y}_k)^T}{1 + \mathbf{y}_k^T \mathbf{R}_k \mathbf{y}_k}$$

$$\because \quad (\mathbf{A} + \mathbf{x}\mathbf{x}^T)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}\mathbf{x}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{x}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}}$$

5.6 MSE 准则函数

- **随机最小平方误差准则**
  - 上述算法得到的权向量序列$\{\mathbf{a}_k\}$以均方收敛于最优解，且收敛速度很快，但缺点是计算量很大。

5.6 Ho-Kashyap 方法

- **Ho-Kashyap 方法**
  - MSE算法上最小化 $||\mathbf{Ya-b}||^2$，所得到的最优解并不需要位于可分超平面上。
  - 如果训练样本是线性可分的，则一定可以找到一个权向量 **a**，对所有样本，均有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$。换句话说，一定存在一个 **a** 和 **b**, 使

$$\mathbf{Ya = b > 0}$$

但是，我们事先并不知道 **b**。因此，MSE准则函数可以更新为

$$J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = ||\mathbf{Ya-b}||^2$$

直接优化 $J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ 将导致平凡解，所以需要给 **b** 加一个 **b>0** 的约束条件。此时，**b** 可以解释为margin。

5.6 Ho-Kashyap 方法

- **梯度下降法**
  - 梯度

$$\frac{\partial J_s(\mathbf{a},\mathbf{b})}{\partial \mathbf{a}} = 2\mathbf{Y}^T(\mathbf{Ya}-\mathbf{b}), \quad \frac{\partial J_s(\mathbf{a},\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} = -2(\mathbf{Ya}-\mathbf{b})$$

因此，对 **a** 而言，总有 $\mathbf{a} = \mathbf{Y}^+\mathbf{b}$，其中 $\mathbf{Y}^+$ 为 **Y** 的伪逆。但对于 **b**，需要同时满足约束条件 $\mathbf{b}>\mathbf{0}$。

为了防止 **b** 收敛于 **0**，一种可行的办法是让 **b** 从一个非负向量（ $\mathbf{b}_1>\mathbf{0}$ ）开始进行更新。

由于要求 $\partial J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b}) / \partial \mathbf{b}$ 等于**0**，在开始迭代时可令 $\partial J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b}) / \partial \mathbf{b} = \mathbf{0}$。

5.6 Ho-Kashyap 方法

- 梯度下降法
  - **b** 的梯度更新：

元素取绝对值

$$\mathbf{b}_1 > \mathbf{0}, \quad \mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{b}_k - \eta_k \frac{1}{2}\left[\frac{\partial J_s(\mathbf{a},\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} - \left|\frac{\partial J_s(\mathbf{a},\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}}\right|\right]$$

  - 更新 **a** 和 **b**：

$$\mathbf{a}_k = \mathbf{Y}^{+}\mathbf{b}_k$$

$$\mathbf{b}_1 > \mathbf{0}, \quad \mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{b}_k + 2\eta_k \mathbf{e}_k^{+}$$

其中，
$$\mathbf{e}_k^{+} = \frac{1}{2}\left(\left(\mathbf{Y}\mathbf{a}_k - \mathbf{b}_k\right) + \left|\mathbf{Y}\mathbf{a}_k - \mathbf{b}_k\right|\right)$$

5.6 Ho-Kashyap 方法

Ho-Kashyap Algorithm

1 begin initialize: **a**, **b**, $\eta_0 < 1$, k=0, threshold $b_{\min}$, $k_{\max}$

2 do $k \leftarrow k$+1 (mod n)

3 **e** $\leftarrow$ **Ya - b**

4 **e**$^+ \leftarrow$1/2(**e** + abs**(e))**

5 **b** $\leftarrow$ **b** + 2 η_k **e**$^+$

6 **a = Y**$^+$**b**

7 if abs**(e)** $\leq$ $b_{\min}$, then return **a ,b** and exit

8 until $k = k_{\max}$

9 print “No solution found!”

10 end

5.6 Ho-Kashyap 方法

- **Ho-Kashyap算法**
  - 由于权向量序列 $\{\mathbf{a}_k\}$ 完全取决定于 $\{\mathbf{b}_k\}$，因此本质上讲 **Ho-Kashyap** 算法是一个生成**margin** 序列 $\{\mathbf{b}_k\}$ 的方法。
  - 由于初始 $\mathbf{b}_1>\mathbf{0}$，且更新因子 $\eta > 0$，因此 $\mathbf{b}_k$ 总是大于**0**。
  - 如果 $\mathbf{e}_k = \mathbf{Y}\mathbf{a}_k - \mathbf{b}_k$ 全为 0，此时， $\mathbf{b}_k$ 将不再更新，因此获得一个解。如果 $\mathbf{e}_k$ 有一部分元素小于0，则可以证明该问题不是线性可分的* 。

*证明见：Richard O. Duda, Peter E. Hart, David G. Stork, Pattern Classification, 2nd Edition, John Wiley, 2001. page: 251-253

5.6 多类线性判别函数

- 对 c 类分类问题
  - 对于 c 类分类问题:
    - 设 $g_i(\mathbf{x})$, i=1,2,…, c, 表示每个类别对应的判别函数
    - 决策规则：
      - 如果 $g_i(\mathbf{x}) \geq g_j(\mathbf{x}), \forall\, j \neq i$，则 $\mathbf{x}$ 被分为第 ω_i 类。
    - 考虑多类线性可分的情形，对规范化样本表示方法，此时决策规则为：

$$\mathbf{a}_i^T\mathbf{y} \geq \mathbf{a}_j^T\mathbf{y}, \quad \forall\, j \neq i, \text{ 则 } \mathbf{y} \text{ 被分为第 } i \text{ 类}$$

5.6 多类线性判别函数

- 对c类分类问题
  - 前面提到了将多类问题转化为多个两类问题的分类器训练策略。我们也可以设计一个两类分类线性分类器。解决这一问题的思路是**将$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_c$ 组合成一个长向量，同时构造新的训练样本**。
  - 比如，如果样本 $\mathbf{y}$ 属于第一类,则有 $\mathbf{a}_1^T\mathbf{y} \geq \mathbf{a}_j^T\mathbf{y},\ j = 2,3,\ldots,c$

    此时，可构造如下c–1个新样本：

$$\boldsymbol{\eta}_{12} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ -\mathbf{y} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\eta}_{13} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{y} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \ldots, \quad \boldsymbol{\eta}_{1c} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ -\mathbf{y} \end{pmatrix}$$

5.6 多类线性判别函数

- **Kelser 构造**
  - 因此，对 n 个样本来讲，由于有 c 个类别，一共会构造成出 $(c\text{-}1)n$ 个新样本，它们的维数为 $c(d+1)$ (考虑线性齐次坐标），这样我们生成了一个新的两类分类问题。
  - 如果线性可分，则需要找一个权向量 **a** 使

$$\mathbf{a}^T \boldsymbol{\eta}_{ij} > 0,\ j \neq i$$

其中，$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_c \end{pmatrix}$.

5.6 多类线性判别函数

- **Kelser 构造**
  - 优点：
    - 可以将一个多类问题转化为一个两类分类问题，便于采用现有的两类分类器构造方法
    - 由此获得的一个多类线性分类器可以保证不会出现歧义区域。
  - 缺点：
    - 缺点十分明确：增加了样本的规模，增大了样本空的维数，对大数据处理极度不利。

5.6 多类线性判别函数

- **感知器准则扩展方法—逐步修正法**
  - (1) 设置任意的初始权重向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_c$
  - (2) 考察某个样本 $\mathbf{y}^k$ (注意，$\mathbf{y}^k$ 的类别已知):
    - 如果存在某个 $i, (\mathbf{a}_i)^T\mathbf{y}^k > (\mathbf{a}_j)^T\mathbf{y}^k$ ，对任意 $j \neq i$ 均成立，则所有权向量不变。
    - 如果存在 j 使 $(\mathbf{a}_i)^T\mathbf{y}^k \leq (\mathbf{a}_j)^T\mathbf{y}^k$ ，则可以选择一个 j（比如使 $(\mathbf{a}_j)^T\mathbf{y}^k$ 最大者），对权值分量进行修正：

$$\begin{cases} \mathbf{a}_i(k+1) = \mathbf{a}_i(k) + \eta_k \mathbf{y}^k \\ \mathbf{a}_j(k+1) = \mathbf{a}_j(k) - \eta_k \mathbf{y}^k \\ \mathbf{a}_m(k+1) = \mathbf{a}_m(k), \quad m \neq i, j \end{cases}$$

  - (3) 如果对所有样本均正确分类，则停止；否则考察另一个样本。

5.6 多类线性判别函数

- **MSE多类扩展**
  - 可以直接采用 c 个两类分类器的组合，且这种组合具有与两类分类问题类似的代数描述形式
  - 决策准则：

$$\begin{cases} \mathbf{a}_i^T\mathbf{y}=1, & \text{for all } \mathbf{y}\in\omega_i \\ \mathbf{a}_i^T\mathbf{y}=-1, & \text{for all } \mathbf{y}\notin\omega_i \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} \mathbf{a}_i^T\mathbf{y}=1, & \text{for all } \mathbf{y}\in\omega_i \\ \mathbf{a}_i^T\mathbf{y}=0, & \text{for all } \mathbf{y}\notin\omega_i \end{cases}$$

令：$\mathbf{A}=[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_c]\in R^{(d+1)\times c}$

设第1,2个样本均属于第一类

$$\mathbf{B}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}_{n\times c}$$

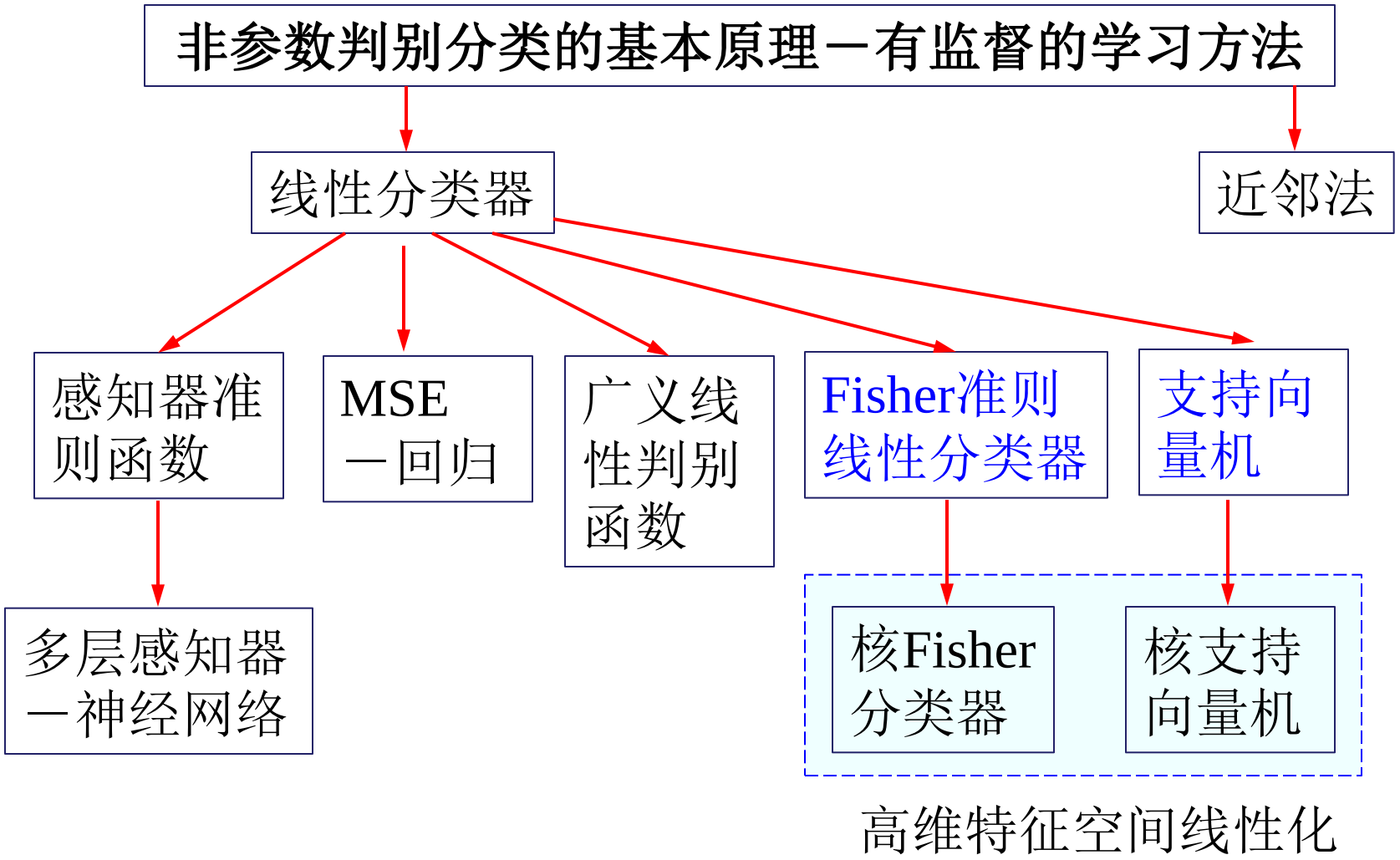
$$\min_{\mathbf{A}} \|\mathbf{YA}-\mathbf{B}\|_F^2$$

$\|.\|_F$为Frobenius范数

5.8 本章小结

- 概念
  - 判别函数、线性判别函数、广义线性判别函数、可分性、分界面、决策规则、点到超平面的距离、规范化样本表示、多类分类
- 线性判别函数
  - 感知准则函数、松驰感知准则函数、平方误差准则函数
- 算法
  - 感知准则函数的批量更新方法、感知准则函数的单样本更新方法、松驰感知准则函数单样本更新方法、MSE梯度下降法、MSE随机逼近方法、Ho-Kashyap方法

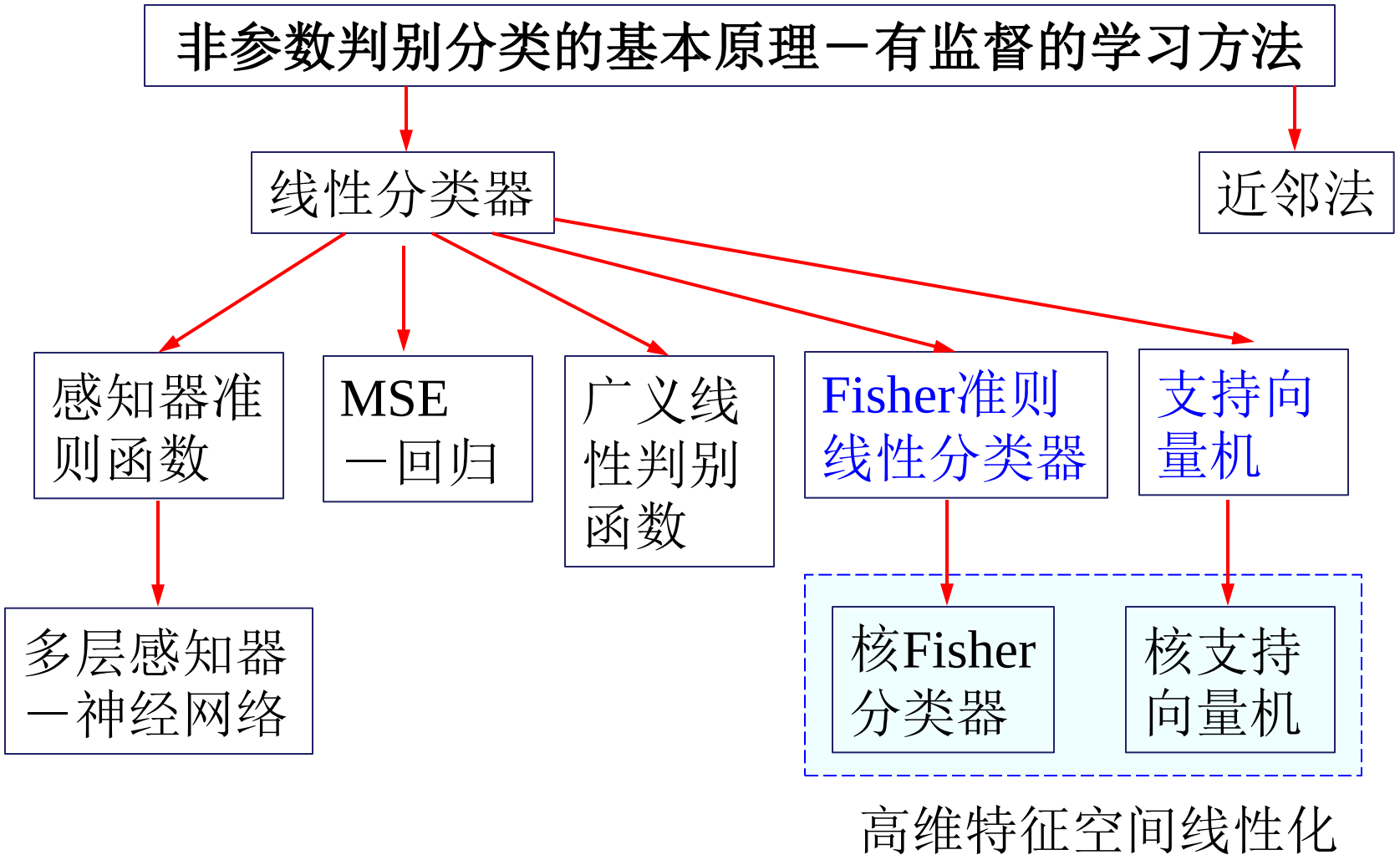
5.8 本章小结


非参数判别分类的基本原理—有监督的学习方法
线性分类器
近邻法
感知器准则函数
MSE—回归
广义线性判别函数
Fisher准则线性分类器
支持向量机
多层感知器—神经网络
核Fisher分类器
核支持向量机
高维特征空间线性化

下次课内容

- **神经网络基础**
  - 发展历史
  - 网络结构
- **基本模型**
  - 单层感知器等

下次课内容


非参数判别分类的基本原理—有监督的学习方法
线性分类器
近邻法
感知器准则函数
MSE—回归
广义线性判别函数
Fisher准则线性分类器
支持向量机
多层感知器—神经网络
核Fisher分类器
核支持向量机
高维特征空间线性化

Thank All of You!