机器学习笔记

黎雷蕾

2017 年 10 月 20 日

摘要

学医三年, 自谓天下无不治之症。
行医三年, 始信世间无可用之方。——孙思邈

纸上得来终觉浅，绝知此事要躬行。——陆游

目录

Chapter 1

线性模型 (linear model)

1.1 基本形式

给定一个由 d 个属性描述的样本 $x = (x_1; x_2; \cdots; x_i)$, 其中 x_i 表示 x 在第 i 个属性上的取值，那么线性模型可以表示为:

$$f(x) = w_1x_1 + w_2x_2 + \cdots + w_dx_d + b \tag{1.1}$$

用向量形式来表示:

$$f(x) = w^Tx + b \tag{1.2}$$

其中 $w = (w_1; w_2; \cdots; w_d)$，一旦确定 w, b 模型就可以得到确定。

1.2 线性回归 (linear regression)

线性回归试图学习:

$$f(x_i) = wx_i + b, \text{使得 } f(x_i) \simeq y_i \tag{1.3}$$

为了得到最好的 w^*, b^*，我们可以采用均方误差（欧氏距离）最小化的

方法：

$$
\begin{aligned}
E_{(w,b)} = (w^*, b^*) &= \arg\min_{(w,b)} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2 \\
&= \arg\min_{(w,b)} \sum_{i=1}^{m} (y_i - wx_i - b)^2
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

求解 1.4的过程，被称为线性回归模型的最小二乘“参数估计 (parameter estimation)”：将其分别对 w, b 求偏导：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial w} &= 2\left(w\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \sum_{i=1}^{m}(y_i - b)x_i\right) \\
\frac{\partial E_{(w,b)}}{\partial b} &= 2\left(wb - \sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i)\right)
\end{aligned}
\tag{1.5}
$$

令 1.5中两式为 0，即可求出 w, b 的最优解的闭式解：

$$
\begin{aligned}
w &= \frac{\sum_{i=1}^{m} y_i(x_i - \overline{x})}{\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \frac{1}{m}(\sum_{i=1}^{m} x_i)^2} \\
b &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i) \\
\overline{x} &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i, \quad \overline{x} \text{ 为 } x \text{ 的均值}
\end{aligned}
\tag{1.6}
$$

1.3 多元线性回归 (multivariate linear regression)

上一节中的 x 仅由单个属性描述，若其由 d 个属性进行了描述, 就可以拓展为多元线性回归。

将 w, b 写成向量形式 $\hat{w} = (w; b)$，同时把数据集表示成一个 $m \times (d+1)$ 大小的矩阵 X(m 代表样本个数，d 代表样本对应的属性个数),X 中的元素 x_{ij} 代表第 i 个样本的第 j 个属性，最后一列恒为 1：

$$
X = \begin{pmatrix}
x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\
x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
x_1^T & 1 \\
x_2^T & 1 \\
\vdots & \vdots \\
x_m^T & 1
\end{pmatrix}
\tag{1.7}
$$

与 1.4类似

$$\begin{aligned} E_{\hat{w}} &= \hat{w}^* = \arg\min_{\hat{w}} (y - X\hat{w})^T (y - X\hat{w}) \\ \frac{\partial E_{\hat{w}}}{\partial \hat{w}} &= 2X^T (X\hat{w} - y) \end{aligned} \tag{1.8}$$

若 $X^T X$ 为满秩矩阵或者正定矩阵，则:

$$\hat{w}^* = (X^T X)^{-1} X^T y \tag{1.9}$$

令 $\hat{x_i} = (x_i, 1)$，则最终学得的多元回归模型:

$$f(\hat{x_i}) = \hat{x_i}^T (X^T X)^{-1} X^T y \tag{1.10}$$

1.4 对数线性回归 (log-linear regression)

一般来说我们得到的线性回归模型可以简写为:

$$y = w^T x + b \tag{1.11}$$

我们把 y 取对数，那它的本质是试图让 $e^{w^T x + b}$ 逼近 y，即:

$$\ln y = w^T x + b \tag{1.12}$$

一般地，考虑单调可微的函数 $g(\cdot)$，令:

$$y = g^{-1}(w^T x + b) \tag{1.13}$$

这个模型就被称为广义上的线性模型。

1.5 对数几率回归/逻辑回归 (logistic regression)

首先介绍 *Sigmoid* 函数:

$$y = \frac{1}{1 + e^{-z}} \tag{1.14}$$

它将 z 值转化为一个接近 0 或者 1 的 y 值，并且在 $z = 0$ 附近变化很陡，带入上节的对数几率函数：

$$y = \frac{1}{1 + e^{-(w^T x + b)}} \tag{1.15}$$

若将 y 视为样本 x 作为正例的可能性，那么 $1 - y$ 为其反例的可能性，两者比值取对数：

$$\ln \frac{y}{1 - y} = w^T x + b \tag{1.16}$$

这个比值称为对数几率 (log odds, 也叫 logit)。

若将 y 视为后验概率 $p(y = 1|x)$，则：

$$\begin{aligned} p(y = 1|x) &= \frac{e^{w^T x + b}}{1 + e^{w^T x + b}} \\ p(y = 0|x) &= \frac{1}{1 + e^{w^T x + b}} \end{aligned} \tag{1.17}$$

我们可以采用极大似然估计法 (maximum likehood method) 来估计 w 和 b, 那么上述的对数似然可以写为:

$$\ell(w, b) = \sum_{i=1}^{m} \ln p(y_i|x_i; w, b) \tag{1.18}$$

令 $\beta = (w; b), \hat{x} = (x; 1)$，那么 $w^T x + b = \beta^T \hat{x}$。
令 $p_1(\hat{x}; \beta) = p(y = 1|\hat{x}; \beta)$, 那么 $p_0(\hat{x}; \beta) = p(y = 0|\hat{x}; \beta) = 1 - p_1(\hat{x}; \beta)$
那么 1.18可重写为：

$$p(y_i|x_i; w, b) = y_i p_1(\hat{x_i}; \beta) + (1 - y_i) p_0(\hat{x_i}; \beta) \tag{1.19}$$

由上述几个公式，重写 1.18:

$$\ell(\beta) = \sum_{i=1}^{m} (-y_i \beta^T \hat{x}_i + \ln(1 + e^{\beta^T \hat{x_i}})) \tag{1.20}$$

1.20是高阶可导的连续凸函数，根据凸优化理论，梯度下降法或者牛顿迭代法均可以求出最优解。

$$\beta^* = \arg\min_{\beta} \ell(\beta) \tag{1.21}$$

1.6 线性判别分析 (linear discriminant analysis, LDA)

LDA 思想特别朴素：给定训练样例集，设法将样例投影到一条直线上，使得同类样例的投影点尽可能的近，异类样例的投影点尽可能远。即不同分类的样例在直线上是聚集在一起的，像一个个部落一样。

设 μ_0, μ_1 分别是两个分类的样本中心点，那么他们在直线上的投影分别是 $w^T\mu_0, w^T\mu_1$。若将所有样本点都投影到直线上，这两类样本的协方差分别为 $w^T\sum_0 w, w^T\sum_1 w$。

- 欲使同类样例投影点尽可能接近，可以让协方差尽可能小：$w^T\sum_0 w + w^T\sum_1 w$
- 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：$||w^T\mu_0 - w^T\mu_1||_2^2$

综合上面两点，最大化目标 J 可写为：

$$\begin{aligned} J &= \frac{||w^T\mu_0 - w^T\mu_1||_2^2}{w^T\sum_0 w + w^T\sum_1 w} \\ &= \frac{w^T(\mu_0 - \mu_1)(\mu_0 - \mu_1)^T w}{w^T(\sum_0 + \sum_1)w} \end{aligned} \tag{1.22}$$

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

$$\begin{aligned} S_w &= \sum_0 + \sum_1 \\ &= \sum_{x\in X_0}(x-\mu_0)(x-\mu_0)^T + \sum_{x\in X_1}(x-\mu_1)(x-\mu_1)^T \end{aligned} \tag{1.23}$$

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

$$S_b = (\mu_0 - \mu_1)(\mu_0 - \mu_1)^T \tag{1.24}$$

重写 1.22:

$$J = \frac{w^T S_b w}{w^T S_w w} \tag{1.25}$$

由于 1.25的解与 w 的长度无关, 只与其方向有关, 不是一般性, 令 $w^T S_w w = 1$, 最大化分子 $w^T S_b w$，一般采用拉格朗日乘子法。可得:

$$w = S_w^{-1}(\mu_0 - \mu_1) \tag{1.26}$$

为了求 S_w^{-1}, 通常的做法是对 S_w 进行奇异值分解，$S_w = U \sum V^T$, 得到 $S_w^{-1} = V \sum^{-1} U^T$，从而进行求解。

结合贝叶斯理论，当两类数据满足先验概率相同、服从高斯分布且协方差相等，LDA 可以达到最优分类

1.7 多元 LDA

假定存在 N 个类，且第 i 类示例数为 m_i，我们可以定义 S_w, S_b 和全局散度矩阵 S_t

$$\begin{aligned} S_w &= \sum_{i=1}^{N} S_{w_i} = \sum_{x \in X_i} (x - \mu_i)(x - \mu_i)^T \\ S_b &= \sum_{i=1}^{N} m_i (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T \\ S_t &= S_w + S_b = \sum_{i=1}^{m} (x_i - \mu)(x_i - \mu)^T \end{aligned} \tag{1.27}$$

其中 μ 是所有示例的均值向量。通常知道上式三者中的两者即可，采用优化目标:

$$\max_W \frac{tr(W^T S_b W)}{tr(W^T S_w W)} \tag{1.28}$$

$$S_b W = \lambda S_w W \tag{1.29}$$

故 W 的闭式解是 $S_w^{-1} S_b$ 的 $N-1$ 个最大广义特征值所对应的特征向量组成的矩阵。**由于投影有降维的作用，故 LDA 也被视为一种经典的监督降维技术。**

1.8 多分类学习

经典的拆分策略有三个，涉及到编码不详细说明，详情见周志华《机器学习》$p.63 \sim p.66$:

- 一对一：One vs One, OvO
- 一对其余：One vs Rest, OvR
- 多对多：Many vs Many,MvM

1.9 类别不平衡问题 (class imbalance)

若训练集中正 (m^+) 反 (m^-) 例子数目不均等，那么：

$$\frac{y}{1-y} > \frac{m^+}{m^-}, \text{预测为正例} \tag{1.30}$$

故对样本进行再缩放 (rescaling)：

$$\frac{y'}{1+y'} = \frac{y}{1+y} \times \frac{m^-}{m^+} \tag{1.31}$$

总之，处理类别不平衡主要有三种方法：

- 欠采样 (undersampling): 去除一定样本，使得正负样本数目趋于平衡。
- 过采样 (oversampling): 增加一些样本。
- 再缩放策略。

1.10 小结

本章是机器学习理论的基础基础章节，介绍的是最基本的线性模型。

- 线性模型：
  - 形式简单、易于建模，许多功能更加强大的非线性模型大都都是在线性模型的基础上通过引入层级结构或者高维映射而得。

  - 线性模型中的 w 具有很好的解释性，便于理解。

- 逻辑回归，又名对数几率回归:
  - 可以直接对分类可能性进行建模，无需事先假设数据的分布，就可以避免假设分布不准确所带来的问题。
  - 它不仅可以进行分类，还可以得到近似的概率预测。
  - 对率函数是任意阶可导的凸函数，具有很好的数学性质许多数值化方法都可以用于求取最优解。

- 线性判别分析 (LDA): 是一种采用投影的策略，被视为一种经典的监督降维技术。

Chapter 2

决策树 (decision tree)

2.1 基本流程

决策树其实是一个递归建树的流程，具体步骤如下：

1. 对于属性集 A，采用信息增益或者基尼指数等方式确定当做根节点的 a_i
2. 根据 a_i 的取值将样本分成几份 $D = \{D_1^{a_i}, D_2^{a_i}, \cdots, D_n^{a_i}\}$
3. 对于每一个样本子集 $D_j^{a_i}$，重复上述的 (1), (2) 两步。直到样本子集里的每个样本属于同一类别 C。

2.2 划分选择

2.2.1 信息增益 (information gain)

首先需要了解信息熵 (information entropy)，信息熵代表了信息不确定的程度：信息熵越大，说明信息越不确定，那么纯度越低；反之，若信息熵很小，说明信息确定程度高，那么信息纯度越高。假设当前样本集合 D 中第 k 类样本所占的比例为 $p_k, (k = 1, 2, \cdots, |\mathcal{Y}|)$，那么信息熵可以被定义为：

$$Ent(D) = -\sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k \log_2 p_k \tag{2.1}$$

由于信息熵取值和纯度大小呈反比，为了便于理解，我们引入“信息增益”，假设一个属性 a 的取值为 $\{a^1, a^2, \cdots, a^V\}$，那么样本集合 D 可以按照 a 分成 V 份，假设按照 a^v 分的样本子集是 D^v，那么信息增益 $Gain(D, a)$ 可以写为：

$$Gain(D, a) = Ent(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D_v|}{|D|} Ent(D^v) \tag{2.2}$$

为了得到最大的信息增益，我们可以求出所有属性 a^i 的信息增益 $Gain(D, a^i)$，从中选择信息增益最大的 a_* 作为当前的节点，这个思想就是**ID3 决策树学习算法。**

$$a_* = \arg\max_{a \in A} \ Gain(D, a) \tag{2.3}$$

2.2.2 信息增益率 (information gain ratio)

信息增益准则会对取值数目较多的属性有所偏好，为了减少这种不利影响，我们采用增益率 (gain ratio) 来划分最优属性，这个思想就是C4.5 决策树算法。

$$\begin{aligned} Gain\_ratio(D, a) &= \frac{Gain(D, a)}{IV(a)} \\ IV(a) &= -\sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \log_2 \frac{|D^v|}{|D|} \end{aligned} \tag{2.4}$$

2.3 基尼指数 (Gini index)

CART 决策树采用基尼指数来选择划分属性，数据集 D 的纯度可以用基尼值 $Gini(D)$ 来测量：

$$Gini(D) = \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} \sum_{k' \neq k} p_k p_{k'} = 1 - \sum_{k=1}^{|\mathcal{Y}|} p_k^2 \tag{2.5}$$

和信息熵类似，基尼值越小，数据集的纯度越高。基尼指数可以定义为：

$$Gini\_index(D, a) = \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} Gini(D^v) \tag{2.6}$$

与信息增益相反，我们选择基尼系数最小的属性当做划分属性：

$$a_* = \arg\min_{a \in A} \ Gini\_index(D, a) \tag{2.7}$$

2.4 剪枝处理 (pruning)

剪枝是为了避免决策树算法是否进入‘过拟合’的手段。

2.4.1 预剪枝 (prepruning)

预剪枝是指在决策树生成过程中对当前节点进行估计，若当前节点的划分不能带来决策树泛化性能的提升，则停止划分并将当前节点标记为叶节点。

- 计算不分叶节点之前验证集的精度 p_{pre}。
- 计算分开的叶节点之后的验证集精度 p_{post}
- 若 $p_{post} > p_{pre}$ 则扩展该节点，否则直接将其作为叶节点。
- 预剪枝可以减少很多不必要的分支，时间开销较小，但是会带来更大的欠拟合风险。

2.4.2 后剪枝 (postpruning)

- 和预剪枝类似，也是采用划分前后的验证集精度来决定是否进行剪枝。
- 不同的是，后剪枝是先分叶节点后再剪枝。
- 相比于预剪枝，后剪枝通常可以保留更加多的叶节点，所以后剪枝的欠拟合风险较小，泛化性能优于预剪枝，但是后剪枝需要在决策树生成后才能进行，训练的开销要大于预剪枝。

2.5 连续之和缺失值

2.5.1 连续值

对于连续值，一般采用连续属性离散化技术，最简单的策略是采用二分法 (bi-partition) 对连续属性进行处理，C4.5 决策树算法就是采用这种方法。

给定样本集 D 和连续属性 a, 假定 a 在 D 上出现了 n 个不同的取值，将其按从大到小的顺序进行排列, 记为 $\{a_1.a_2,\cdots,a_n\}$，基于划分点 t 可将 D 分为子集 D_t^- 和 D_t^+, 其中 $a_i \leq a_t, a_i \in D_t^-$ 且 $a_j > a_t, a_j \in D_t^+$，对于相邻的属性 a_t, a_{t+1},t 在区间 $[a_t, a_{t+1})$ 上取任意值的划分相同。那么对于一个连续属性 a_t 我们就可以考察包含 $n-1$ 个袁术的划分点集合，即：

$$T_n = \left\{ \frac{a_i + a_{i+1}}{2} | 1 \leq i \leq n-1 \right\} \tag{2.8}$$

上述公式的意思就是把区间 $[a_t, a_{t+1})$ 上的中位点 $\frac{a_i+a_{i+1}}{2}$ 作为候选的划分点，从而连续值就变成了离散值。

2.5.2 缺失值

对于缺失值，我们通常是采用给特定的信息增益赋予权值 ρ 的方式。

1. 假设某一个属性 a_i 的集合为 A, 缺失的属性集合为 A^*，那么在 D 上有，$|D_A| = |A| + |A^*|$, 其中 $|A|$ 代表集合 A 中的属性个数。

2. 我们把 A 当做一个无缺失值的属性，计算出相应的信息增益 $Gain(A, a_i)$.

3. 实际上属性的信息增益：

$$Gain(D_A, a_i) = \rho \times Gain(A, a_i) = \frac{|A|}{|A| + |A^*|} \times Gain(A, a_i) \tag{2.9}$$

4. 若用该属性作为父节点，那么缺失值将同时进入所有的子节点，在每个节点计算信息增益时，它的权重：

$$\rho_{child} = \frac{\text{该子节点不缺失的属性个数}}{\text{父节点不缺失属性的个数}} \tag{2.10}$$

2.6 多变量决策树 (multivariate decision tree)

上述所有的决策树算法的节点都是以单个属性为准，而我们实际的情况下，经常会用到多变量作为决策树的分界点，每个非叶结点都是形如 $\sum_{i=1}^{d} w_i a_i = t$ 的线性分类器，这个分类器可能会采取 $softmax$ 之类的方式进行决策，不太便于解释。

2.7 随机森林 (Random Forest)

虽然拥有剪枝技术，但是决策树还是会存在过拟合的问题，随机森林可以很好地解决这个问题：

随机森林顾名思义，是用随机的方式建立一个森林，森林里面有很多的决策树组成，随机森林的每一棵决策树之间是没有关联的。在得到森林之后，当有一个新的输入样本进入的时候，就让森林中的每一棵决策树分别进行一下判断，看看这个样本应该属于哪一类（对于分类算法），然后看看哪一类被选择最多，就预测这个样本为那一类。

随机森林是一个最近比较火的算法，它有很多的优点：

- 在数据集上表现良好
- 在当前的很多数据集上，相对其他算法有着很大的优势
- 它能够处理很高维度（feature 很多）的数据，并且不用做特征选择
- 在训练完后，它能够给出哪些 feature 比较重要
- 在创建随机森林的时候，对误差 (generalization error) 使用的是无偏估计
- 训练速度快
- 在训练过程中，能够检测到 feature 间的互相影响
- 容易做成并行化方法, 实现比较简单

每棵树的按照如下规则生成：

1. 如果训练集大小为 N，对于每棵树而言，随机且有放回地从训练集中的抽取 N 个训练样本（这种采样方式称为 bootstrap sample 方法），作为该树的训练集；如果不进行随机抽样，每棵树的训练集都一样，那么最终训练出的树分类结果也是完全一样的，这样的话完全没有 bagging 的必要；我理解的是这样的：如果不是有放回的抽样，那么每棵树的训练样本都是不同的，都是没有交集的，这样每棵树都是" 有偏的"，都是绝对" 片面的"（当然这样说可能不对），也就是说每棵树训练出来都是有很大的差异的；而随机森林最后分类取决于多棵树（弱分类器）的投票表决，这种表决应该是" 求同"，因此使用完全不同的训练集来训练每棵树这样对最终分类结果是没有帮助的，这样无异于是" 盲人摸象"。

2. 如果每个样本的特征维度为 M，指定一个常数 $m \ll M$，随机地从 M 个特征中选取 m 个特征子集，每次树进行分裂时，从这 m 个特征中选择最优的；

3. 每棵树都尽最大程度的生长，并且没有剪枝过程。

两个随机性的引入对随机森林的分类性能至关重要。由于它们的引入，使得随机森林不容易陷入过拟合，并且具有很好得抗噪能力（比如：对缺省值不敏感）。

随机森林分类效果（错误率）与两个因素有关：

- 森林中任意两棵树的相关性：相关性越大，错误率越大；
- 森林中每棵树的分类能力：每棵树的分类能力越强，整个森林的错误率越低。
- 减小特征选择个数 m，树的相关性和分类能力也会相应的降低；增大 m，两者也会随之增大。所以关键问题是如何选择最优的 m（或者是范围），这也是随机森林唯一的一个参数。

2.8 迭代决策树 (Gradient Boost Decision Tree, GBDT)

首先要了解 Boost 算法：原始的 Boost 算法是在算法开始的时候，为每一个样本赋上一个权重值，初始的时候，大家都是一样重要的。在每一步训练中得到的模型，会使得数据点的估计有对有错，我们就在每一步结束后，增加分错的点的权重，减少分对的点的权重，这样使得某些点如果老是被分错，那么就会被“严重关注”，也就被赋上一个很高的权重。然后等进行了 N 次迭代（由用户指定），将会得到 N 个简单的分类器（basic learner），然后我们将它们组合起来（比如说可以对它们进行加权、或者让它们进行投票等），得到一个最终的模型。

而 Gradient Boost 与传统的 Boost 的区别是，每一次的计算是为了减少上一次的残差 (residual)，而为了消除残差，我们可以在残差减少的梯度 (Gradient) 方向上建立一个新的模型。所以说，在 Gradient Boost 中，每个新的模型的简历是为了使得之前模型的残差往梯度方向减少，与传统 Boost 对正确、错误的样本进行加权有着很大的区别。

建立 GBDT 流程：

1. 给定一个初始化的值，$F_0(x)$
2. 迭代 M 次，建立 M 颗决策树
3. 对 $F_i(x)$ 进行逻辑回归。
4. 求得残差减少的梯度方向
5. 类似随机森林方式投票确定当前决策树，与原来的决策树合在一起作为一个新的模型。

2.9 小结

这章主要是介绍了决策树算法，随机森林和 GBDT 会在书上第八章再详细进行说明。

Chapter 3

神经网络 (neural networks)

3.1 神经元模型

设输入的样本属性 X 和对应的连接权重 W, 阈值 θ, 那么神经元可以被表示为:

$$y = f(WX - \theta) = f(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i - \theta) \tag{3.1}$$

其中 y 表示输出，$f(x)$ 表示激活函数 (activation function)。

3.2 感知机 (Perceptron) 和多层网络

最简单的有两层 (输入层和输出层)。如图所示:

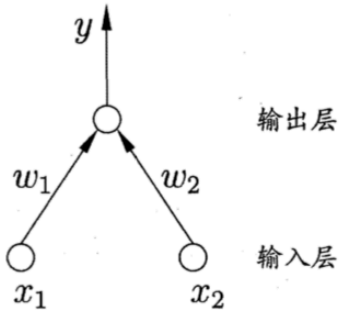


图 5.3 两个输入神经元的感知机网络结构示意图

一般的，给定训练的数据集，权重 $w_i(i=1,2,\cdots,n)$ 和阈值 θ 可以通过学习得到。对于训练的样例 (x,y)，若当前感知机的输出为 $\hat{y}$, 感知机的权重可以调整为:

$$\begin{aligned} w_i &\leftarrow w_i + \Delta w_i, \\ \Delta w_i &= \eta(y-\hat{y})x_i \end{aligned} \tag{3.2}$$

其中 $\eta \in (0,1)$ 称为学习率 (learning rate)，若感知机预测正确，$\hat{y}=y$，否则根据错误程度进行权重调整。

单层感知机只能解决线性可分的问题，若不是线性可分的问题，那么我们得改成多层感知机才行，如输入层与输出层之间加入一层隐藏层。如下图就是典型的多层前馈神经网络 (multi-layer feedforward neural networks):

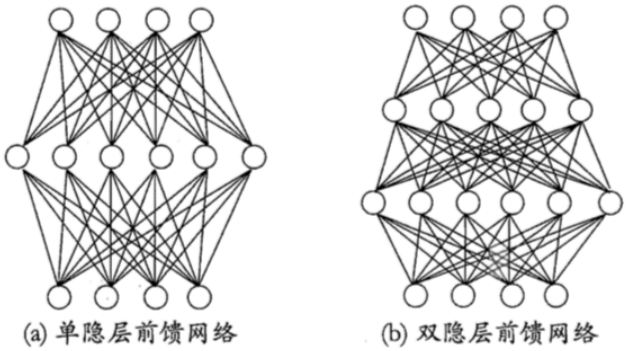


图 5.6 多层前馈神经网络结构示意图

3.3 误差逆传播算法 (BackPropagation, BP)

BP 算法可以说是 NN 算法中最杰出的代表，大部分时间都是用于多层前馈网络。

给定训练集 $D=\{(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_m,y_m)\}, x_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \mathbb{R}^l$, 即输入示例由 d 个属性进行描述，输出 l 维向量，即 d 个输入神经元和 l 个输出神经元，q 个隐藏层神经元。其中输出层的第 j 个神经元的阈值为 θ_j, 隐层第 h 个神经元用 γ_h, 输入层第 i 个神经元和隐层的第 h 个神经元连接权

值为 v_{ih}, 隐层第 h 个神经元与输出层第 j 个神经元之间的连接权值为 w_{hj}。记隐层第 h 个神经元接收到的输入为 $a_h = \sum_{i=1}^{d} v_{ih}x_i$，输出层第 j 个神经元接收到的输入为 $\beta_j = \sum_{h=1}^{q} w_{hj}b_h$，其中 b_h 为隐层第 h 个神经元的输出，如下图所示：

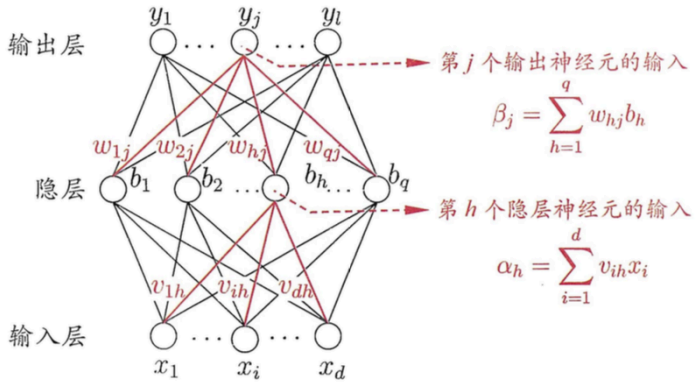


图 5.7 BP 网络及算法中的变量符号

对训练例子 (x_k, y_k)，假定神经网络的输出为 $\hat{y}_k = (\hat{y}_1^k, \hat{y}_2^k, \cdots, \hat{y}_l^k)$，可以表示为：

$$\hat{y}_j^k = f(\beta_j - \theta_j) \tag{3.3}$$

那么在 (x_k, y_k) 的均方误差为：

$$E_k = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{l}(\hat{y}_j^k - y_j^k)^2 \tag{3.4}$$

BP 算法实际上是一个迭代学习的过程，下面以隐藏层到输出层的连接权值 w_{hj} 为例进行推导。由于 BP 算法基于梯度下降 (gradient descent) 策略，以目标的负梯度方向对参数进行调整，对上面的均方误差 E_k 及给定的学习率 η，有：

$$\Delta w_{hj} = -\eta\frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}} \tag{3.5}$$

而从图 3.3可以看出 w_{hj}，首先影响第 j 个输出层神经元的输入值 β_j，再影响其输出值 $\hat{y}_j^k$, 最后影响到 E_k，根据复合微分和马尔科夫过程，有:

$$\frac{\partial E_k}{\partial w_{hj}} = \frac{\partial E_k}{\partial \hat{y}_j^k}\cdot\frac{\partial \hat{y}_j^k}{\partial \beta_j}\cdot\frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}} \tag{3.6}$$

而根据 $\beta_j = \sum_{h=1}^{q} w_{hj} b_h$，可得：

$$\frac{\partial \beta_j}{\partial w_{hj}} = b_h \tag{3.7}$$

我们选择 $Sigmoid$ 函数作为激活函数，是由于它有一个特别好的性质：

$$f' = (x) = f(x)(1 - f(x)) \tag{3.8}$$

根据公式 3.3和 3.4可得：

$$g_j = -\frac{\partial E_k}{\partial \hat{y}_j^k} \cdot \frac{\partial \hat{y}_j^k}{\partial \beta_j} = -(\hat{y}_j^k - y_j^k) f'(\beta_j - \theta_j) = \hat{y}_j^k (1 - \hat{y}_j^k)(y_j^k - \hat{y}_j^k) \tag{3.9}$$

这个式子表示 g_j 可以采用实际输出 $\hat{y}_j^k$ 和样本真实输出 y_j^k 进行表示，那么结合前面的式子 3.5-3.9 ：

$$\Delta w_{hj} = \eta g_j b_h \tag{3.10}$$

同理，我们可以求出其他的参数：

$$\begin{aligned}
&\Delta \theta_j = -\eta g_j \\
&\Delta v_{ih} = \eta e_h x_i \\
&\Delta \gamma_h = -\eta e_h \\
&\text{其中：} \\
e_h &= -\frac{\partial E_k}{\partial b_h} \cdot \frac{\partial b_h}{\partial \alpha_h} = -\sum_{j=1}^{l} \frac{\partial E_k}{\partial \beta_j} \cdot \frac{\partial \beta_j}{\partial b_h} f'(\alpha_h - \gamma_h) \\
&= b_h (1 - b_h) \sum_{j=1}^{l} w_{hj} g_j
\end{aligned} \tag{3.11}$$

学习率 $\eta \in (0, 1)$ 控制算法每一轮迭代中的更新步长，若太大则容易造成震荡，太小会导致收敛速度太慢。

BP 算法的目标是要最小化训练集 D 上的积累误差：

$$E = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} E_k \tag{3.12}$$

一般来说，只要一个包含足够多神经元的隐层，多层前馈网络就能以任意精度逼近任意复杂度的连续函数，实践中通常采用试错法 (trial-by-error) 进行调整。

为了防止过拟合, 通常采用两种策略：

- 早停 (early stopping)：将数据分成训练集和测试集，在更新权值时，若训练集误差降低而测试集误差升高，则停止训练。

- 正则化 (regularization): 在目标函数中增加一个用于描述网络复杂度的部分，如连接层权值与阈值的平方和，用 E_k 表示第 k 个训练样例上的误差，w_i 表示连接权值和阈值的平方和。，那么 E 可以改写为：

$$E = \lambda \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} E_k + (1 - \lambda) \sum_{i} w_i^2 \tag{3.13}$$

  其中 $\lambda \in (0, 1)$ 表示经验误差与网络复杂度这两项的折中，通常采用交叉验证法进行估计。

3.4 全局最小与局部极小

一般来说，用的最多的参数寻优的方法是梯度搜素。梯度下降法是沿着函数值下降得最快的方向进行搜索，若误差函数在当前值为零了，说明已经到达局部极小，但是不一定到达全局最小。

为了跳出局部极小，通常采用如下策略：

- 以多组不同的参数值初始化神经网络，但是可能会陷入多个不同的局部极小。

- 模拟退火 (simulated annealing)，其策略是在每一步有一定的概率接收比当前解更差的结果，即选择次优解。

- 采用随机梯度算法，这样可以保证即使到局部极小时它的梯度仍不为零，从而跳出局部极小。

- 或者采用遗传算法 (genetic algorithms)。

3.5 其他常见神经网络

3.5.1 径向基函数网络，RBF

RBF 网络是一种单隐层神经网络，采用径向基函数作为隐层神经元的激活函数：

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \sum_{i=1}^{q} w_i \rho(x, c_i) \\ \rho(x, c_i) &= e^{-\beta_i ||x - c_i||^2} \end{aligned} \tag{3.14}$$

已经被证明：拥有足够度的隐层神经元的 RBF 网络，能以任意精度逼近任意连续函数。

3.5.2 ART 网络

ART 网络是竞争 (competitive learning) 型网络，是神经网络中常用的无监督学习网络，其原理是所有网络的输出神经元都进行相互的竞争，每一时刻有且仅有一个神经元获胜而被激活，剩下的神经元都处于抑制状态。

ART 可以缓解竞争学习中的'可塑性-稳定性窘境 (stability-plasticity dilemma)', 可塑性 (plasticity) 指的是神经网络要有学习新知识的能力，稳定性 (stability) 指的是神经网络在学习心得知识时要保持旧的知识，这样 ART 可以进行增量学习 (incremental learning) 或者在线学习 (online learning).

3.5.3 SOM 网络

自组织映射网络 (Self-Organizing Map), 是一种竞争学习型的无监督映射网络，它能够将高维数据映射到低维空间，同时保持输入数据在高维空间的拓扑结构。

3.5.4 级联相关网络

级联相关 (Cascade-Correlation) 网络能够在训练过程中改变自身的网络拓扑结构，与一般的前馈神经网络相比，级联相关网络无需设置网络层数、隐层神经元数目，训练速度较快，但是在数据量较小时容易陷入过拟合。

3.5.5 Elman 网络

递归神经网络 (recurrent neural networks,RNN)允许网络中出现环形结构，从而让一些神经元的输出反馈来作为输入信号，使得网络在 t 时刻的输出状态不仅与 t 时刻的输入有关，还与 $t-1$ 时刻的网络状态有关，从而能处理与实践相关的动态变化。Elman 网络就是常用的 RNN 一种。

3.5.6 Boltzmann 机

一种基于能量 (energy) 的模型，当能量最小化时取得网络的理想状态。

3.6 深度学习

3.7 小结

Chapter 4

支持向量机 (Support Vector Machine,SVM)

4.1 间隔与支持向量

在样本空间中，划分超平面可以通过如下线性方程组进行描述:

$$w^T x + b = 0 \tag{4.1}$$

样本空间中任一点 x，到超平面 (w, b) 的距离可以写为:

$$\tau = \frac{|w^T x + b|}{||w||} \tag{4.2}$$

假设超平面 (w, b) 能使训练样本正确分类，即对于 $(x_i, y_i) \in D$，有:

$$\begin{cases} w^T x_i + b \geq +1, y_i = +1; \\ w^T x_i + b \leq -1, y_i = -1. \end{cases} \tag{4.3}$$

对于距离超平面最近的几个点使得上式的等号成立，那么它们被称为“支持向量 (support vector)”，如下图所示，两个异类支持向量到超平面的距离之和为:

$$\gamma = \frac{2}{||w||} \tag{4.4}$$

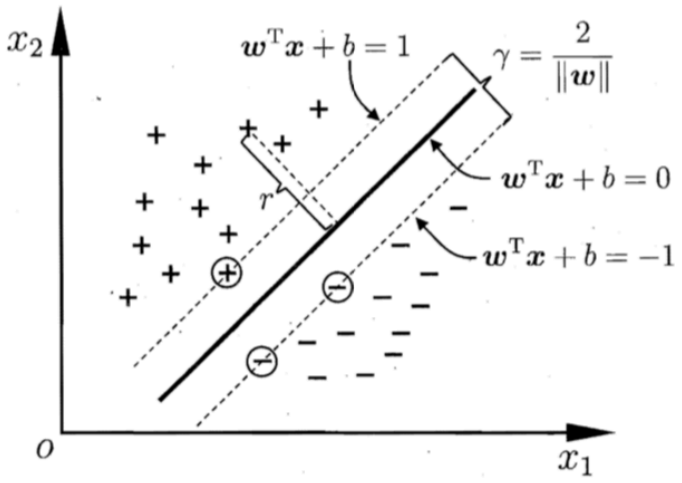


图 6.2　支持向量与间隔

欲找到最大间隔 (maximum margin) 来划分超平面，也就是要找到能满足约束的 w, b，使得 γ 最大，即：

$$\max_{w,b} \frac{2}{||w||}, \quad s.t.\ y_i(w^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \cdots, m \tag{4.5}$$

即只需要最大化 $\frac{1}{||w||}$，即最小化 $||w||^2$ 即可，所以将上式改写一下：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2, \quad s.t.\ y_i(w^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \cdots, m \tag{4.6}$$

这个就是支持向量机 (Support Vector Machine,SVM) 的基本型.

4.2　对偶问题

公式 4.6是一个凸二次规划问题, 可以使用拉格朗日乘子法得到其的“对偶问题”(dual problem)，即对公式 4.6每个约束添加拉格朗日乘子 $\alpha_i \geq 0$:

$$L(w, b, \alpha) = \frac{1}{2}||w||^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha(1 - y_i(w^T x_i + b)) \tag{4.7}$$

令 $L(w,b,\alpha)$ 对 w 和 b 的偏导为零可得：

$$\begin{aligned} w &= \sum_{i=1}^{m} a_i y_i x_i \\ 0 &= \sum_{i=1}^{m} a_i y_i \end{aligned} \tag{4.8}$$

将 4.8带入 4.7, 可以将 w 和 b 消去，就可以得到 4.6的对偶问题：

$$\begin{aligned} &\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j \\ &s.t. \ \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{4.9}$$

求解出 α 后，再求出 w 和 b 即可求出模型:

$$f(x) = w^T x + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i^T x + b \tag{4.10}$$

上述过程要满足 KKT(Karush-Kuhn-Tucker) 条件，即要求：

$$\begin{cases} \alpha_i \leftarrow 0; \\ y_i f(x_i) - 1 \geq 0; \\ \alpha_i (y_i f(x_i) - 1) = 0 \end{cases} \tag{4.11}$$

上述约束条件显示了 SVM 一个重要的性质：训练完成后，大部分的训练样本都不需要保留，最终模型仅仅与支持向量有关。

为了求解 4.9，我们常常采用 SMO 算法，其基本思路：先固定 α_i 之外的所有参数，然后求 α_i 上的极值。由于存在约束 $\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0$, 所以 SMO 每次选择两个变量 α_i 和 α_j 并固定其它参数，不断重复以下的步骤知道收敛：

- 选取一对需要更新的变量 α_i 和 α_j;
- 固定 α_i 和 α_j，求解 3.9获得更新后的 α_i 和 α_j;

一般来说，只要 α_i 和 α_j 有一个不满足 KKT 条件，目标函数 4.9就会在迭代中减小，违背 KKT 的程度越大，那么目标函数值减幅也会更大。基于这个性质 SMO 先选取违背 KKT 条件程度最大的变量，第二个变量选取一个使得目标函数值减小最快的变量，为了简便，所选取的两个变量对应的样本之间的间隔应该最大。

SMO 算法之所以高效，是应为它仅仅需要优化两个参数 α_i 和 α_j，将 4.9重写为:

$$\begin{aligned} &\alpha_i y_i = \alpha_j y_j = c, \alpha_i \geq 0, \alpha_j \geq 0, \\ &c = -\sum_{k \neq i,j} \alpha_k y_k \end{aligned} \tag{4.12}$$

用 4.12消去 4.9中的变量 α_j，得到一个关于 α_i 的单变量二次规划的问题，仅有约束 $\alpha_i \geq 0$。

对于任意的支持向量 (x_s, y_s) 都有 $y_s f(x_s) = 1$，即:

$$y_s \left(\sum_{i \in S} \alpha_i y_i x_i^T x_s + b \right) = 1 \tag{4.13}$$

其中 $S = \{i | \alpha_i > 0, i = 1, 2, \cdots, m\}$ 为了简便，直接求解所有支持向量的平均值得到偏置 b:

$$b = \frac{1}{|S|} \sum_{s \in S} \left(y_s - \sum_{i \in S} \alpha_i y_i x_i^T x_s \right) \tag{4.14}$$

4.3 核函数

在实际应用中，往往遇到的是线性不可分的问题, 遇到这种问题，一般的做法是将样本映射到一个更加高维的空间，使得样本能够在这个特征空间内线性可分。

令 $\phi(x)$ 表示将 x 映射后的特征向量，于是，在特征空间中划分超平面所对应的模型可表示为:

$$f(x) = w^T \phi(x) + b \tag{4.15}$$

类似上面的 4.6和 4.9，有:

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} ||w||^2 \quad s.t.\ y_i(w^T \phi(x_i) + b) \geq 1,\ i = 1, 2, \cdots, m \tag{4.16}$$

其对偶问题为：

$$\begin{aligned} &\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \phi(x_i)^T \phi(x_j) \\ &s.t. \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0,\ \alpha_i \geq 0,\ i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{4.17}$$

假设一个函数 $\kappa(x_i, x_j)$ 表示 $\phi(x_i)^T \phi(x_j)$ 来计算内积，这个函数 κ 我们称为'核函数'(kernel function)：

$$\kappa(x_i, x_j) = \langle \phi(x_i), \alpha(x_j) \rangle = \phi(x_i)^T \phi(x_j) \tag{4.18}$$

重写 4.17：

$$\begin{aligned} &\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \kappa(x_i, x_j) \\ &s.t. \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0,\ \alpha_i \geq 0,\ i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{4.19}$$

求解后:

$$f(x) = w^T \phi(x) + b = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \kappa(x, x_i) + b \tag{4.20}$$

一般来说，只要一个对称函数所对应的核矩阵是半正定的，它就能作为核函数使用，下图是一些常用的核函数：

表 6.1 常用核函数

名称	表达式	参数
线性核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j$	
多项式核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = (\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j)^d$	$d \geqslant 1$ 为多项式的次数
高斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|^2}{2\sigma^2}\right)$	$\sigma > 0$ 为高斯核的带宽(width)
拉普拉斯核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|}{\sigma}\right)$	$\sigma > 0$
Sigmoid 核	$\kappa(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \tanh(\beta \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}_j + \theta)$	tanh 为双曲正切函数, $\beta > 0$, $\theta < 0$

核函数还会满足下面三个性质：

- 若 κ_1, κ_2 为核函数，那么对于任意正数 γ_1, γ_2，其线性组合也为核函数

$$\gamma_1 \kappa_1 = \gamma_2 \kappa_2 \tag{4.21}$$

- 若 κ_1, κ_2 为核函数，则核函数的直积也为核函数

$$\kappa_1 \otimes \kappa_2(x, z) = \kappa_1(x, z)\kappa_2(x, z) \tag{4.22}$$

- 若 κ_1 为核函数，则对任意函数 $g(x)$，

$$\kappa(x, z) = g(x)\kappa_1(x, z)g(z) \tag{4.23}$$

  也是核函数

4.4 软间隔与正则化

在现实任务中，我们往往很难确定一个适合的核函数使得训练样本在特征空间中线性可分，很难断定这个貌似线性可分的结果是不是由于过拟合造成的。缓解该问题的一个办法是允许 SVM 在一些样本上出错，为此我们引入' 软间隔'(soft margin)，但是在最大化间隔的同事，不满足约束的样本应该尽可能减少，故优化目标可以写为：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \ell_{0/1}(y_i(w^T x_i + b) - 1) \tag{4.24}$$

其中：$C > 0$ 是一个常数，$\ell_{0/1}$ 是一个"0/1 损失函数"

$$\ell_{0/1}(z) = \begin{cases} 1, & if\ z < 0; \\ 0, & otherwise. \end{cases} \tag{4.25}$$

显由于 $\ell_{0/1}$ 性质不太好（非凸，非连续），我们常用其它一些函数进行代替，称为代替损失 (surrogate loss)，下面列举了常用的代替损失函数, 如下图所示：

$$\begin{aligned} &\text{hinge 损失: } \ell_{hinge}(z) = \max(0, 1 - z) \\ &\text{指数损失 (exponential loss): } \ell_{exp}(z) = \exp(-z) \\ &\text{对率损失 (logistic loss): } \ell_{log}(z) = \log(1 + \exp(-z)) \end{aligned} \tag{4.26}$$

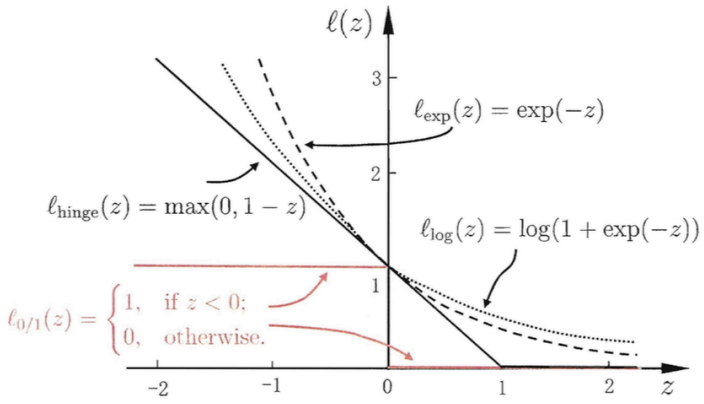


图 6.5 三种常见的替代损失函数: hinge损失、指数损失、对率损失

若采用 hinge 损失，那么改写 4.24:

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \max(0, 1 - y_i(w^T x_i + b)) \tag{4.27}$$

引入松弛变量 (slack variables)$\xi_i \geq 0$，重写上式:

$$\begin{aligned} &\min_{w,b,\xi_i} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \xi_i \\ &s.t.\ y_i(w^T x_i + b) \geq 1 - \xi_i,\ \xi_i \geq 0,\ i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{4.28}$$

这称为常用的'软间隔 SVM'，通过拉格朗日乘子法可得:

$$\begin{aligned} &L(w, b, \alpha, \xi, \mu) = \\ &\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \xi_i + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i(1 - \xi_i - y_i(w^T x_i + b)) - \sum_{i=1}^{m} \mu_i \xi_i \end{aligned} \tag{4.29}$$

其中 $\alpha_i \geq 0, \mu_i \geq 0$ 是拉格朗日乘子。令 $L(w, b, \alpha, \xi, \mu)$ 对 w, b, ξ_i 求偏导为零可得:

$$\begin{aligned} w &= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i \\ 0 &= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \\ C &= \alpha_i + \mu_i \end{aligned} \tag{4.30}$$

联立上面两个公式，可得 4.28的对偶问题:

$$\begin{aligned} &\max_{\alpha} \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j \\ &s.t. \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0, 0 \leq \alpha \leq C, i = 1, 2, \cdots, m. \end{aligned} \tag{4.31}$$

软间隔与硬间隔的唯一差别是在于对偶变量的约束不同，前者是 $0 \leq \alpha_i \leq C$, 后者是 $0 \leq \alpha_i$, 那么软间隔 KKT 条件相应改为:

$$\begin{cases} \alpha_i \geq 0, \quad \mu_i \geq 0, \\ y_i f(x_i) - 1 + \xi_i \geq 0, \\ \alpha_i (y_i f(x_i) - 1 + \xi_i) = 0, \\ \xi_i \geq 0, \quad \mu_i \xi_i = 0 \end{cases} \tag{4.32}$$

通过上述 KKT 条件，可以看出软间隔 SVM 最终模型仅仅与支持向量有关，即通过采用 hinge 损失函数仍然保持了稀疏性。

我们可以把上面的优化目标写成更加一般的形式，其中第一项用来描述划分超平面的'间隔'大小，另一项 $\sum_{i=1}^{m} \ell(f(x_i), y_i)$ 用来表述训练集上的误差:

$$\min_{f} \Omega(f) + C \sum_{i=1}^{m} \ell(f(x_i), y_i) \tag{4.33}$$

其中 $\Omega(f)$ 称为结构分析按 (structural risk)，用来描述模型 f 的某些性质，$\sum_{i=1}^{m} \ell(f(x_i), y_i)$ 称为经验风险 (empirical risk)，用于描述模型与训练数据的契合程度，C 对两者进行权重。$\Omega(f)$ 也称为正则化项,C 称为正则化函数。

4.5 支持向量回归 (Support Vector Regression,SVR)

SVR 与传统的回归模型有些许不同，他假设我们能容忍模型输出 $f(x)$ 与真实输出 y 之间最多有 ϵ, 当且仅当 $|f(x) - y| > \epsilon$ 才计算损失，相当于以 $f(x)$ 为中间，构建一个宽度为 2ϵ 的间隔带，若样本落入这个间隔带，则认为分类时正确的。

SVR 问题可以形式化为：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m} \ell_\epsilon(f(x_i) - y_i) \tag{4.34}$$

其中 ℓ_ϵ 称为 ϵ-不敏感损失函数 (ϵ-insensitive loss):

$$\ell_\epsilon(z) = \begin{cases} 0, & if\ |z| \le \epsilon \\ |z| - \epsilon, & otherwise \end{cases} \tag{4.35}$$

引入松弛变量 ξ_i 和 $\hat{\xi}_i$，重写上上式：

$$\begin{aligned} &\min_{w,b,\xi_i,\hat{\xi}_i} \frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i + \hat{\xi}_i) \\ s.t.\quad &f(x_i) - y_i \le \epsilon + \xi_i, \quad y_i - f(x_i) \le \epsilon + \hat{\xi}_i, \\ &\xi_i,\ \hat{\xi}_i \ge 0, i = 1, 2, \cdots, m \end{aligned} \tag{4.36}$$

引入拉格朗日乘子法：$\mu_i \ge 0, \hat{\mu}_i \ge 0, \alpha_i \ge 0, \hat{\alpha}_i \ge 0$:

$$\begin{aligned} &L(w, b, \alpha, \hat{\alpha}, \xi, \hat{\xi}, \mu, \hat{\mu}) = \\ &\frac{1}{2}||w||^2 + C\sum_{i=1}^{m}(\xi_i + \hat{\xi}_i - \sum_{i=1}^{m}\mu_i\xi_i - \sum_{i=1}^{m}\hat{\mu}_i\hat{\xi}_i + \\ &\sum_{i=1}^{m}\alpha_i(f(x_i) - y_i - \epsilon - \xi_i) + \sum_{i=1}^{m}\hat{\alpha}_i(y_i - f(x_i) - \epsilon - \hat{\xi}_i) \end{aligned} \tag{4.37}$$

对上式进行求导：

$$\begin{aligned} w &= \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i)x_i \\ 0 &= \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha}_i - \alpha_i) \\ C &= \alpha_i + \mu_i \\ C &= \hat{\alpha}_i + \hat{\mu}_i \end{aligned} \tag{4.38}$$

所以我们可以计算出 SVR 的对偶问题：

$$\begin{aligned} &\max_{\alpha,\hat{\alpha}} \ sum_{i=1}^{m} y_i(\hat{\alpha_i}-\alpha_i)-\epsilon(\hat{\alpha_i}+\alpha_i)-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}(\hat{\alpha_i}(\hat{\alpha_j}-\alpha_j)x_i^T x_j \\ &s.t. \quad \sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha_i}+\alpha_i)=0,\ 0\le\alpha_i,\hat{\alpha_i}\le C \end{aligned} \tag{4.39}$$

满足以下 KKT 条件：

$$\begin{cases} \alpha_i(f(x_i)-y_i-\epsilon-\xi_i)=0, \\ \hat{\alpha_i}(y_i-f(x_i)-\epsilon-\hat{\xi_i})=0, \\ \alpha_i\hat{\alpha_i}=0,\xi\hat{\xi_i}=0, \\ (C-\alpha_i)\xi_i=0,(C-\hat{\alpha_i})\hat{\epsilon_i}=0 \end{cases} \tag{4.40}$$

综上，SVR 的解形可以写为:

$$f(x)=\sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha_i}-\alpha_i)x_i^T x+b \tag{4.41}$$

能使得上式中的 $\hat{\alpha_i}-\alpha_i\neq 0$ 的样本即为 SVR 的支持向量，他们必然落于 ϵ-间隔带外，在得到 α_i 后，若 $0<\alpha_i<C$，则必有 $\xi_i=0$，进而有：

$$b=y_i+\epsilon-\sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha_i}-\alpha_i)x_i^T x \tag{4.42}$$

一般在实践中，我们采取更加鲁棒的做法：选取多个满足条件 $0<\alpha_i<C$ 的样本后求解 b 取平均值，考虑到映射的形式，SVR 可表示为：

$$f(x)=\sum_{i=1}^{m}(\hat{\alpha_i}-\alpha_i)\kappa(x,x_i)+b \tag{4.43}$$

其中 $\kappa(x_i,x_j)=\phi(x_i)^T\phi(x_j)$ 为核函数。

4.6 核方法

表示定理：满足 Ω 单挑递增，ℓ 非负损失函数, 对于优化问题：

$$\min_{h\in\mathbb{H}} F(h)=\Omega(||h||_{\mathbb{H}})+\ell(h(x_1),h(x_2),\cdots,h(x_m)) \tag{4.44}$$

的解总可写为：

$$h^*(x) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(x, x_i) \tag{4.45}$$

一般来说，人们把这种方法称为核方法 (kernel methods)，最常见的就是通过引入核函数来核化将线性学习期拓展为非线性拓展，从而得到核线性判别分析 (Kernelized Linear Discriminant Analysis, KLDA).

我们可以假设通过某种映射 $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{F}$ 将样本空间到一个特征空间 $\mathbb{F}$，然后在 $\mathbb{F}$ 中执行线性判别分析，以求得：

$$h(x) = w^T \phi(x) \tag{4.46}$$

那么 KLDA 的学习目标：

$$\max_w J(w) = \frac{w^T S_b^\phi w}{w^T S_w^\phi w} \tag{4.47}$$

其中 $w^T S_b^\phi w$ 表示 $\mathbb{F}$ 中的类间散度矩阵，而 $w^T S_w^\phi w$ 类内散度矩阵。令 X_i 表示第 $i \in 0, 1$ 类样本的集合，其样本数为 m_i，总样本数为 $m = m_0 + m_1$，那么第 i 类样本在特征空间 $\mathbb{F}$ 的均值为：

$$\mu_i^\phi = \frac{1}{m_i} \sum_{x \in X_i} \phi(x) \tag{4.48}$$

两个散度矩阵分别为：

$$\begin{aligned} S_b^\phi &= (\mu_1^\phi - \mu_0^\phi)(\mu_1^\phi - \mu_0^\phi)^T \\ S_w^\phi &= \sum_{i=0}^{1} \sum_{x \in X_i} (\phi(x) - \mu_i^\phi)(\phi(x) - \mu_i^\phi)^T \end{aligned} \tag{4.49}$$

我们用核函数 $\kappa(x, x_i)$ 来表示，那么 $h(x)$ 可写为：

$$h(x) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \kappa(x, x_i) \tag{4.50}$$

故：

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \phi(x_i) \tag{4.51}$$

令 $K \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 为 κ 的核矩阵，那么：

$$\begin{aligned}
\hat{\mu_0} &= \frac{1}{m_0} K l_0, \\
\hat{\mu_1} &= \frac{1}{m_1} K l_1, \\
M &= (\hat{\mu_0} - \hat{\mu_1})(\hat{\mu_0} - \hat{\mu_1})^T, \\
N &= KK^T - \sum_{i=0}^{l} m_i \hat{\mu_i} \hat{\mu_i}^T,
\end{aligned} \tag{4.52}$$

于是 4.47等价为：

$$\max_{\alpha} J(\alpha) = \frac{\alpha^T M \alpha}{\alpha^T N \alpha} \tag{4.53}$$

用线性判别分析求解方法即可得到 α，从而求出 $h(x)$。

4.7 小结

Chapter 5

贝叶斯分类器 (bayes classifier)

由于在深极做过一次 ppt 的演讲了，所以这一章不用写得太详细。

5.1 贝叶斯公式

贝叶斯公式的本质就是通过条件概率 (也叫似然) 之间的转化，建立先验概率 $P(x|c)$ 与后验概率 $P(c|x)$ 之间的联系。

$$P(c|x) = \frac{P(c,x)}{P(x)} = \frac{P(x|c)P(c)}{P(x)} \tag{5.1}$$

5.2 贝叶斯决策论 (bayesian decision theory)

假设有 N 种可能的类别标记。即 $\mathcal{Y} = \{c_1, c_2, \cdots, c_N\}$,$\lambda_{ij}$ 是将一个真实标记为 c_j 的样本误分类为 c_i 的损失，那么基于后验概率 $P(c_i|x)$ 就可以获得将样本 x 分类为 c_i 所产生的期望损失，即 x 上的条件风险 (conditional risk)。

$$R(c_i|x) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_{ij} P(c_j|x) \tag{5.2}$$

我们的目标即找出 x 的分类，使得期望风险 $R(c|x)$ 最小:

$$h^*(x) = \arg\min_{c \in \mathcal{Y}} R(c|x) \tag{5.3}$$

5.3 极大似然估计 (Maximum Likelihood Estimation,MLE)

- 对 θ_c 进行极大似然估计。就是寻找能最大化似然 $P(D_c|\theta_c)$ 的参数值 $\hat{\theta}_c$。换句话说，就是遍历 θ_c 所有可能的取值，找出一个使数据出现的“可能性”最大的一个。

- 为了加快计算速度和减少溢出的可能性，可以用取对数相加代替连乘的操作：

$$LL(\theta_c) = \log P(D_c|\theta_c) = \sum_{x \in D_c} \log P(x|\theta_c) \tag{5.4}$$

- 此时参数 θ_c 的极大似然估计 $\hat{\theta}_c$ 可以写为：

$$\hat{\theta}_c = \arg\max_{\theta_c} LL(\theta_c) \tag{5.5}$$

- 总之，MLE 的思想可以总结为：已知某个参数能使这个样本出现的概率最大，我们当然不会再去选择其他小概率的样本，所以干脆就把这个参数作为估计的真实值。

5.4 朴素贝叶斯分类器 (Naïve Bayes Classifier)

- 朴素 (Naïve)，指的是“属性条件独立性假设”，即对于已知类别，假设所有的属性相互独立。聊天监控系统里采用的贝叶斯算法就是基于 NBC 的。

- 在这个前提下，贝叶斯公式可以改写：

$$P(c|x) = \frac{P(c)P(x|c)}{P(x)} = \frac{P(c)}{P(x)} \prod_{i=1}^{d} P(x_i|c) \tag{5.6}$$

  其中，d 为属性的数目，x_i 为 x 在第 i 个属性上的取值。

- 由上，我们可得朴素贝叶斯分类器的表达式。

$$h_{nb}(x) = \arg\max_{c \in \mathcal{Y}} P(c) \prod_{i=1}^{d} P(x_i|c) \tag{5.7}$$

- 对于贝叶斯分类器，若前提有大量的训练集，我们可以事先训练贝叶斯分类所有的概率估值，进行测试时，我们只需进行查表操作即可，借助哈希表、二叉树等数据结构进行存储，贝叶斯分类器的时间复杂度为 $O(n)$。

5.5 半朴素贝叶斯分类器 (semi-Naïve Bayes Classifier)

- NBC 是基于属性之间是相互独立的假设，但是在现实条件下这个假设是很难实现的，所以我们提出了半朴素贝叶斯分类器，它的基本想法是适当考虑一部分属性间的相互依赖信息，从而既不需要进行完全联合计算，又不至于彻底忽略了比较强的属性依赖关系。

- 采用得比较多得是“独依赖估计”(One-Dependent Estimator,ODE), 指的是每个属性最多仅依赖一个其他属性，即：

$$P(c|x) \propto P(c)\prod_{i=1}^{d} P(x_i|c, pa_i) \tag{5.8}$$

其中 pa_i 为属性 x_i 所依赖的属性，称为 x_i 的父属性。

5.6 贝叶斯网 (Bayesian network)

- 贝叶斯网也称为信念网 (belief network)。它借助有向无环图来刻画属性间的依赖关系，并使用条件概率表来描述属性的联合概率分布。

- 贝叶斯网 B 可以表示成如下公式：

$$B = \langle G, \Theta \rangle \tag{5.9}$$

其中 G 表示一个有向无环图，Θ 定量描述两个属性之间的直接依赖关系。假设属性 x_i 在 G 中的父结点集为 π_i, 则 Θ 包含了每个属性的条件概率表 $\theta_{x_i|\pi_i} = P_B(x_i|\pi_i)$。

- 贝叶斯网学习的首要任务是通过训练集构建一个最合理的贝叶斯网，一般采用评分搜索的办法。
- 首先定义一个评分函数 (score function)，基于信息论准则，其目标是找到一个能以最小编码长度描述训练模型，即“最小描述长度”(Minimal Description Length,MDL)

5.6.1 贝叶斯网 (Bayesian network)-学习

求 MDL 的过程可以描述如下：

1. 给定训练集 $D = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$，那么贝叶斯网 $B = \langle G, \Theta \rangle$ 的评分函数可以写为：

$$s(B|D) = f(\theta)|B| - LL(B|D) \tag{5.10}$$

其中 $|B|$ 是贝叶斯网的参数个数；$f(\theta)$ 表示描述每个参数所需的字节数，$LL(B|D)$ 表示贝叶斯网 B 的对数似然。

$$LL(B|D) = \sum_{i=1}^{m} \log P_B(x_i) \tag{5.11}$$

2. 学习任务转化为一个优化任务，即寻找一个贝叶斯网 B 使评分函数 $s(B|D)$ 最小。

3. 若 $f(\theta) = 0$，即不计算对网络编码的长度，评分函数退化成负对数似然，那么学习任务退化成极大似然估计。

$$s(B|D) = -LL(B|D) = -\sum_{i=1}^{m} \log P_B(x_i) \tag{5.12}$$

4. 若 $B = \langle G, \Theta \rangle$ 的网络结构 G 固定，则 $s(B|D)$ 等价于对参数 Θ 的极大似然估计，那么 $\theta_{x_i|\pi_i}$ 可以直接在训练数据 D 上通过经验估计得到：

$$\theta_{x_i|\pi_i} = \hat{P}_D(x_i|\pi_i) \tag{5.13}$$

其中 $\hat{P}_D(\cdot)$ 是 D 上的经验分布。

5. 为了最小化评分函数 $s(B|D)$，只需要对网络结构进行搜索，而候选结构的最优参数可以直接在训练集上计算得到。

6. 搜索出贝叶斯网最优结构是一个 NP 难的问题，难以快速求解，一般常用两种方法保证在有限时间内求得近似解。

    - 采用贪心策略，从某个网络结构出发，每次调整一条边，直到评分函数值不再降低为止。
    - 通过网络结构施加约束来削减搜索空间，例如将网络结构限定为树形结构。

5.6.2 贝叶斯网 (Bayesian network)-推断

- 通过前面的训练和学习，贝叶斯网就可以通过一些属性变量的观测值来推测其他属性变量的取值，这个过程我们称为“推断”(inference)，已知变量观测值称为“证据”(evidence)。
- 理想情况下是直接根据贝叶斯网定义的联合概率分布计算后验概率，但前面已经说明搜索最优结构是 NP 难的，在现实应用中，贝叶斯网的近似推断常使用吉布斯采样 (Gibbs sampling) 来完成。

5.7 EM(Expectation-Maximization) 算法

- 在实际应用的时候，我们很难获得所有属性变量的值，即训练样本是不完整的，像这种无法获得属性变量的“未观测”变量，我们称为“隐变量”(latent variable)。
- EM(Expectation-Maximization) 算法，就是常用的估计参数隐变量的算法。它的基本思想很简单：若参数 Θ 已知，则可根据训练数据推断出最优隐变量 Z 的值（E 步）；反之，若 Z 的值已知，则可方便地对 Θ 做极大似然估计（M 步）。

若我们不是取 Z 的期望,而是基于 Θ^t 计算隐变量 Z 的概率分布 $P(Z|X,\Theta^t)$，那么 em 算法两步可以直接定义:

- E 步 (Expectation)：以当前参数 Θ^t 推断隐变量分布 $P(Z|X,\Theta^t)$，并计算对数似然 $LL(\Theta|X,Z)$ 关于 Z 的期望。

$$Q(\Theta|\Theta^t) = \mathbb{E}_{Z|X,\Theta^t} LL(\Theta|X,Z) \tag{5.14}$$

- M 步 (Maximization)：寻找参数最大化期望似然：

$$\Theta^{t+1} = \arg\max_{\Theta} Q(\Theta|\Theta^t) \tag{5.15}$$

5.8 小结

贝叶斯模型是一个 precision 很高的模型，而且属于线性模型，十分便于工程实现。

最简单的朴素贝叶斯分类器，在很多情况下都能够获得相当好的性能，十分适合信息检索领域，是常用的文本分类策略之一。

Chapter 6

集成学习 (ensemble learning)

6.1 个体与集成

集成学习指的是将几个弱学习器 (weaker learner, 一般就是指基学习器) 按照某种策略组合在一起进行学习。首先说明几个概念:

- 基学习器: 表示构成的集成所用的算法都是一致的
- 组件学习器: 表示构成的集成所用的算法都是不一致的

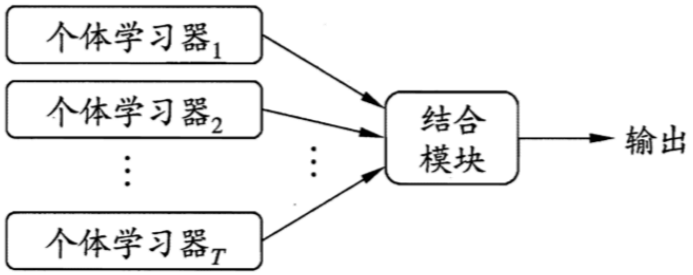


图 8.1 集成学习示意图

假定基分类器的错误率为 ϵ, 即对每个基分类器 h_i 有:

$$P(h_i(x) \neq f(x)) = \epsilon \tag{6.1}$$

若采用投票法，即超过半数基分类器认为是正确的，则集成分类就正确：

$$H(x) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{T} h_i(x)\right) \tag{6.2}$$

若基分类器之间的错误率相互之间是独立的，那么根据 Hoeffding 不等式，集成错误率为：

$$P(h_i(x) \neq f(x)) = \sum_{k=0}^{[T/2]} \binom{T}{k} (1-\epsilon)^k \epsilon^{T-k} \leq \exp\left(-\frac{1}{2}T(1-2\epsilon)^2\right) \tag{6.3}$$

说明随着个体分类器数目 T 的不断增大，集成的错误率将逐渐下降。当前二种集成学习的思想:

- 各个个体学习期之间存在强依赖的关系、必须串行生成序列化的方法，如 Boosting
- 各个个体学习期之间不存在强依赖关系、可以同时生成的并行化方法，如 Bagging 或者随机森林。

6.2 Boosting

Boosting 算法的工作机制很类似：

1. 从初始训练集中选择一个基学习器
2. 再根据基学习器的表现对训练样本分布进行调整，使之前分类错误的训练样本在后面受到更多关注。
3. 基于调整后的样本分布来训练下一个基学习器
4. 直到基学习器数目到达事先指定的值 T，最终将这 T 个基学习器进行加权结合。

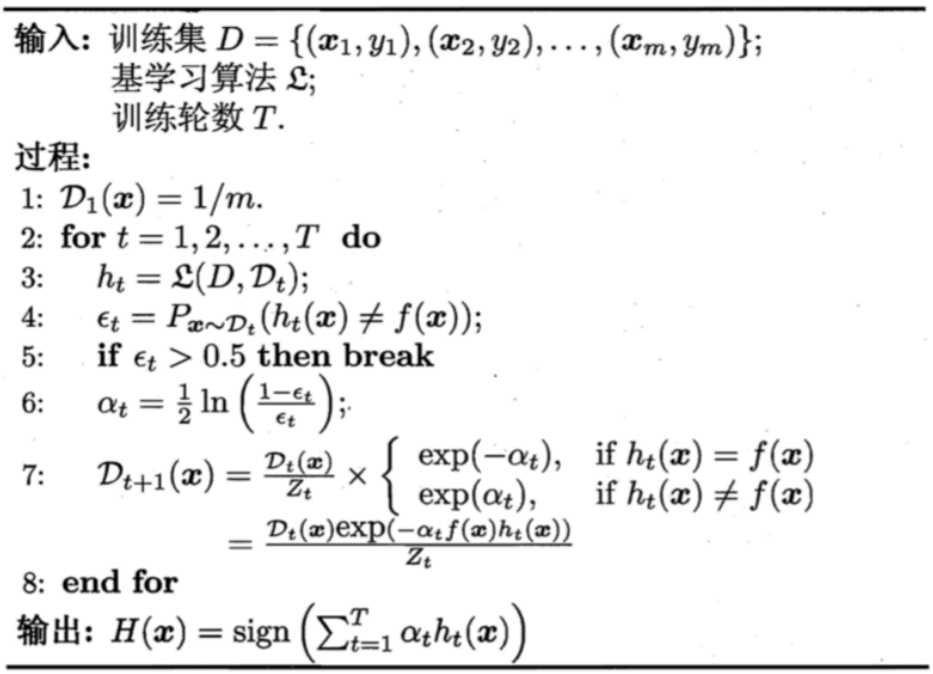
其中最出名的 Boosting 算法是 AdaBoost，一般用的是基学习器的线性组合：

$$H(x) = \sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(x) \tag{6.4}$$

来最小化指数损失函数 (exponential loss function):

$$\ell_{\exp}(H|\mathcal{D}) = \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H(x)}] \tag{6.5}$$

对应的算法流程图:算法用 LaTeX 打起来太麻烦了，先用截图，以后有时间再改成 LaTeX



输入: 训练集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$;
基学习算法 $\mathfrak{L}$;
训练轮数 T.

过程:

1: $\mathcal{D}_1(\boldsymbol{x}) = 1/m$.
2: **for** $t = 1, 2, \ldots, T$ **do**
3: $h_t = \mathfrak{L}(D, \mathcal{D}_t)$;
4: $\epsilon_t = P_{\boldsymbol{x}\sim\mathcal{D}_t}(h_t(\boldsymbol{x}) \neq f(\boldsymbol{x}))$;
5: **if** $\epsilon_t > 0.5$ **then break**
6: $\alpha_t = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}\right)$;
7: $\mathcal{D}_{t+1}(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathcal{D}_t(\boldsymbol{x})}{Z_t} \times \begin{cases} \exp(-\alpha_t), & \text{if } h_t(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) \\ \exp(\alpha_t), & \text{if } h_t(\boldsymbol{x}) \neq f(\boldsymbol{x}) \end{cases}$
$= \frac{\mathcal{D}_t(\boldsymbol{x})\exp(-\alpha_t f(\boldsymbol{x}) h_t(\boldsymbol{x}))}{Z_t}$
8: **end for**

输出: $H(\boldsymbol{x}) = \operatorname{sign}\left(\sum_{t=1}^{T} \alpha_t h_t(\boldsymbol{x})\right)$

图 8.3 AdaBoost算法

对 $H(x)$ 进行偏导:

$$\frac{\partial \ell_{\exp}(H|\mathcal{D})}{\partial H(x)} = -e^{-H(x)}P(f(x) = 1|x) + e^{H(x)}P(f(x) = -1|x) \tag{6.6}$$

令上式为 0，有:

$$H(x) = \frac{1}{2}\ln\frac{P(f(x) = 1|x)}{P(f(x) = -1|x)} \tag{6.7}$$

于是：

$$\begin{aligned}\operatorname{sign}(H(x)) &= \operatorname{sign}\left(\frac{1}{2}\ln\frac{P(f(x)=1|x)}{P(f(x)=-1|x)}\right)\\ &= \begin{cases}1, & P(f(x)=1|x) > P(f(x)=-1|x)\\ -1, & P(f(x)=1|x) < P(f(x)=-1|x)\end{cases}\\ &= \underset{y\in\{-1,1\}}{\arg\max} P(f(x)=y|x)\end{aligned} \tag{6.8}$$

上式表明，若使得指数损失函数最小化了，那么分类错误率也将得到最小化；在 AdaBoosting 算法中，第一个基分类器 h_1 是通过直接将基学习算法用于初始数据分布而得到的，此后迭代地生成 h_t 和 α_t，当基分类器 h_t 的基于分布 $\mathcal{D}$ 产生后，该基分类器的权重 α_t 应使得 $\alpha_t h_t$ 最小化指数函数:

$$\ell_{\exp}(\alpha_t h_t|\mathcal{D}_t) = e^{-\alpha_t}(1-\epsilon_t) + e^{\alpha_t}\epsilon_t \tag{6.9}$$

其中 $\epsilon_t = P_{x\sim\mathcal{D}_t}(h_t(x)\neq f(x))$，对 α_t 进行求导：

$$\frac{\partial\ell_{\exp}(\alpha_t h_t|\mathcal{D}_t)}{\partial\alpha_t} = -e^{-\alpha_t}(1-\epsilon_t) \tag{6.10}$$

令上式为 0，可得：

$$\alpha_t = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}\right) \tag{6.11}$$

AdaBoost 算法能在获得 H_{t-1} 之后的样本分布进行相应的调整，使得下一轮的基学习器 h_t 能够纠正 H_{t-1} 的一些错误，理想的情况下，h_t 能纠正 H_{t-1} 的所有错误，达到理想化：

$$\begin{aligned}h_t(x) &= \underset{h}{\arg\min}\,\ell_{\exp}(H_{t-1}+h|\mathcal{D})\\ &= \underset{h}{\arg\max}\,\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}} = \left[\frac{e^{-f(x)H_{t-1}(x)}}{\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H_{t-1}(x)}]}f(x)h(x)\right]\end{aligned} \tag{6.12}$$

其中 $\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H_{t-1}(x)}]$ 是一个常数，令 $\mathcal{D}_t$ 表示一个分布：

$$\mathcal{D}_t(x) = \frac{\mathcal{D}(x)e^{-f(x)H_{t-1}(x)}}{\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H_{t-1}(x)}]} \tag{6.13}$$

根据数学的期望，这等价于：

$$h_t(x) = \arg\max_h \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}_t}[f(x)h(x)] \tag{6.14}$$

由于 $f(x), h(x) \in \{-1, +1\}$，有：

$$h_t(x) = \arg\min_h \mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}_t}[\mathbb{I}(f(x) \neq h(x))] \tag{6.15}$$

综上：理想的 h_t 将在分布 $\mathcal{D}_t$ 上最小化分类误差，类似于残差逼近的思想。考虑到 $\mathcal{D}_t$ 和 $\mathcal{D}_{t+1}$ 的关系，有：

$$\mathcal{D}_{t+1}(x) = \mathcal{D}_t(x) \cdot e^{-f(x)\alpha_i h_t(x)} \frac{\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H_{t-1}(x)}]}{\mathbb{E}_{x\sim\mathcal{D}}[e^{-f(x)H_t(x)}]} \tag{6.16}$$

对应算法流程图中的第七行样本分布的更新公式。

Boosting 算法要求基学习器能对特定的数据分布进行学习，可以通过‘重赋权法’实施，即在迭代的每一轮中，根据样本分布为每个训练样本重新赋予一个权重，对于无法接受代权样本的基学习方法，可以通过重采样法进行处理，即在每一轮学习中，根据样本分布对训练集进行重新采样，再进行训练。需要注意，Boosting 算法在训练每一轮都要检查当前生成的基学习器是否满足基本条件，一旦不满足，直接抛弃。

从偏差-方差分解的角度来说，Boosting 主要关注如何降低偏差，因此 Boosting 能基于泛化性能相当弱的学习器构建出很强的集成。

6.3 Bagging 与随机森林

在上一节中，我们可以知道，想得到泛化性能强的集成，集成中的个体学习器应当尽可能的相互独立，在实际应用中，应当使个体学习器尽可能有较大的差异。

6.3.1 Bagging