（请大家预习）

第5章
线性判别函数
Linear Discriminant Functions

张 燕 明

ymzhang@nlpr.ia.ac.cn

people.ucas.ac.cn/~ymzhang

模式分析与学习课题组(PAL)

多模态人工智能系统实验室 中科院自动化所

助教： 杨 奇 (yangqi2021@ia.ac.cn)

张 涛 (zhangtao2021@ia.ac.cn)

University of Chinese Academy of Sciences

第5讲内容回顾

第二次作业已布置，请按时完成

- 任务：估计任意点 $\mathbf{x}$ 处的概率密度 $p(\mathbf{x})$
- 非参数估计的基本原理
  - 以 $\mathbf{x}$ 点为中心找一个体积为V小区域 R
  - 假设 n 个样本中，有 k 个落入 R，则：

$$p(\mathbf{x}) \approx \frac{k}{nV}$$

- 难点：R 的选取
  - R太大：估计值是一个很大区域上的平均，不能近似$p(\mathbf{x})$
  - R太小：很可能没有样本落入 R 中，估计值不稳定

Parzen窗估计

- 当n给定时，选择一个固定大小的窗口，在任意位置$\mathbf{x}$，统计落入窗口的样本数

$$p(\mathbf{x}) \approx \frac{k}{nV}$$

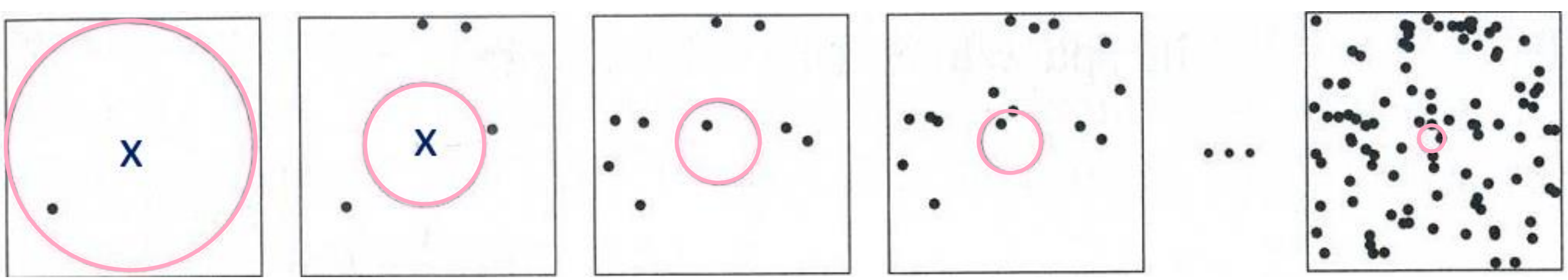
  - 计数可以由窗函数完成，并由此得到Parzen窗估计的解析表达式

$$p_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{V_n}\varphi\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h_n}\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)$$

- 当n增加时，使窗口大小随之减小，如：令$V_n = V_0/\sqrt{n}$，从而使$n \to \infty$时，$V_n \to 0$，$p_n(\mathbf{x}) \to p(\mathbf{x})$

Parzen窗

$V_n = 1/\sqrt{n}$



n=1　n=4　n=9　n=16　n=100

K近邻估计

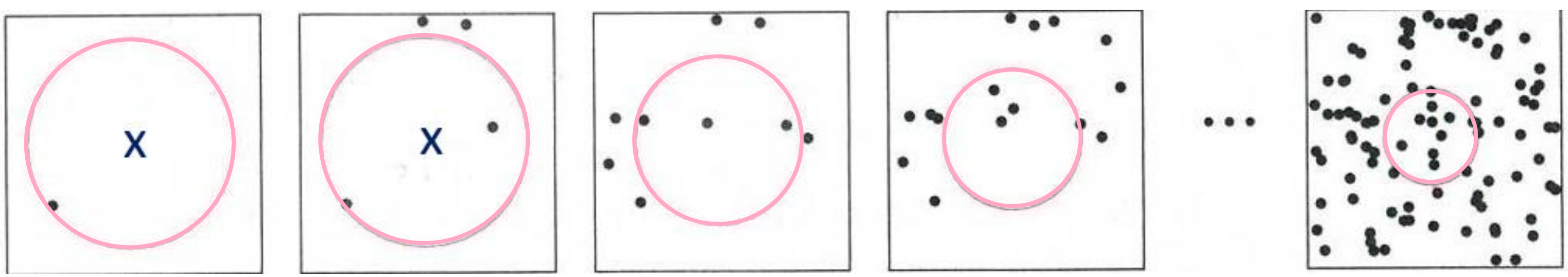
- 当n给定时，选择一个固定的近邻数k，在任意位置$\mathbf{x}$，计算包含k个样本的最小窗口的体积

$$p(\mathbf{x}) \approx \frac{k}{nV}$$

- 当n增加时，使近邻数k随之增加，如：令$k_n = k_0\sqrt{n}$，从而使$n \to \infty$时，$V_n \to 0$，$p_n(\mathbf{x}) \to p(\mathbf{x})$

k 近邻

$k_n = \sqrt{n}$



n=1 n=4 n=9 n=16 n=100

K近邻分类器

- 理论分析
  - 样本数$n \to \infty$时，最近邻分类器的错误率不超过2倍的贝叶斯错误率
  - $K \to \infty$时，K近邻分类器的错误率收敛至贝叶斯错误率
  - 本质上，K近邻分类器是使用K近邻方法做类条件概率密度估计，然后用贝叶斯公式计算类后验概率的一种分类方法
- 距离度量
  - K近邻分类高度依赖距离度量的选择
  - 常见距离度量
    - 无监督的距离度量、基于先验知识的距离度量

非参数密度估计的总结

- 优点：
  - 基于概率和密度的原始定义，无需对数据分布的形式做任何假设，适用性广
  - 当样本数趋于无穷时，Parzen窗估计和K近邻估计都能收敛到真实分布
  - 方法简单；在低维问题上，性能出色
- 缺点：
  - 选择合适的窗宽、近邻数都不容易
  - 对高维数据，需要的样本量极大
  - 存储开销和计算开销很大

内容提要

- 5.1 引言：生成模型 vs 判别模型
- 5.2 线性判别函数与决策面
- 5.3 广义线性判别函数
- 5.4 感知准则函数
- 5.5 松弛方法
- 5.6 最小平方误差（MSE）准则函数
- 5.7 Ho-Kashyap 方法
- 5.8 多类线性判别函数

5.1 引言

- 统计模式分类的途径
  - 估计类条件概率密度函数$p(\mathbf{x}|\omega_i)$
    - 利用贝叶斯公式求出类后验概率，然后决策
    - 核心步骤：概率密度估计（参数估计和非参数估计）

  生成模型

  - 直接估计类后验概率$P(\omega_i|\mathbf{x})$
    - 不需要估计类条件概率密度函数
  - 直接估计判别函数$g_i(\mathbf{x})$
    - 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

  判别模型

5.1 引言

统计模式识别方法

生成模型
(Density-based, Bayes decision)

Parametric
- ✓ Gaussian
- ✓ Dirichlet
- ✓ Bayesian network
- ✓ Hidden Markov model

Non-Parametric
- ✓ Histogram density
- ✓ Parzen window
- ✓ K-nearest neighbor

Semi-Parametric
- ✓ Gaussian mixture

判别模型
(discriminant/decision function)

- ✓ Linear Methods
- ✓ Neural network
- ✓ Logistic regression
- ✓ Decision tree
- ✓ Kernel (SVM)
- ✓ Boosting

a.k.a. Non-parametric

5.1 引言

- Why 判别模型？
  - 生成 vs 判别
- 判别模型分类
  - 线性判别函数：感知器、支持向量机、Fisher线性判别函数
  - 广义线性判别函数：核学习机
  - 非线性模型：神经网络、决策树
  - 非参数模型：K近邻分类、高斯过程

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，采用样本来估计判别函数的参数，即寻找判别函数。（学习问题）
  - 对于给定的新样本 $\mathbf{x}\in R^d$，用判别函数判定 $\mathbf{x}$ 属于$\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_c$中的哪个类别。（推理、预测问题）

5.1 引言

- 基于判别函数的决策准则
  - 对于c 类分类问题（one-vs-all形式）：
    - 设 $g_i(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \ldots, c$，表示每个类别对应的判别函数
    - $g_i(\mathbf{x})$用于区分第 ω_i 类和其他c-1个类，其数值表示 $\mathbf{x}$ 属于第 ω_i 类的概率、置信度、打分等
    - 决策准则：如果 $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x}), \forall j \neq i$，则 $\mathbf{x}$ 被分为第 ω_i 类
  - 对于两类分类问题：
    - 只需一个判别函数：$g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) - g_2(\mathbf{x})$
    - 决策准则：$g(\mathbf{x}) > 0$，分为第一类；否则为第二类

5.2 线性判别函数与决策面

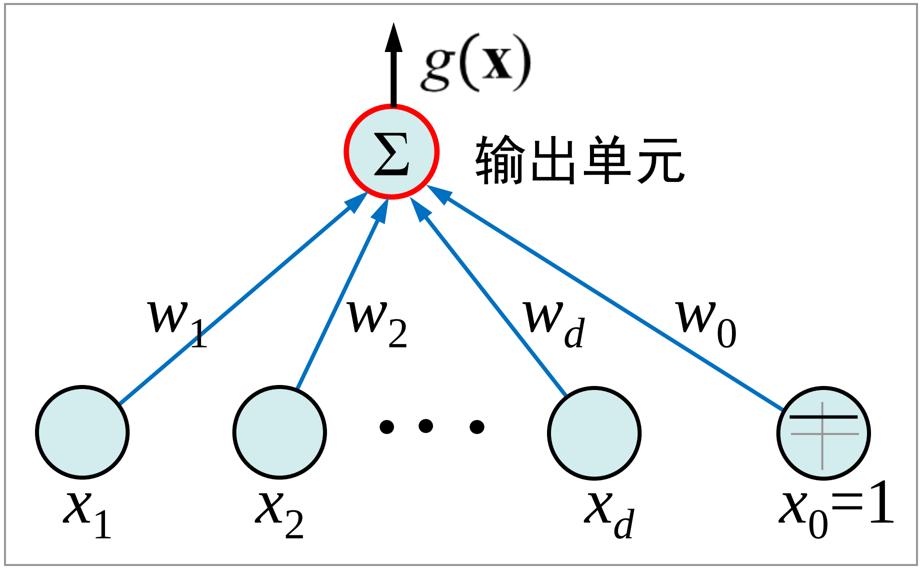
- 线性判别函数

$$g(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{d} w_i x_i + w_0 = \mathbf{w}^T\mathbf{x}+w_0$$

权重向量　偏移(阈值)

- 两类情形的决策准则：

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

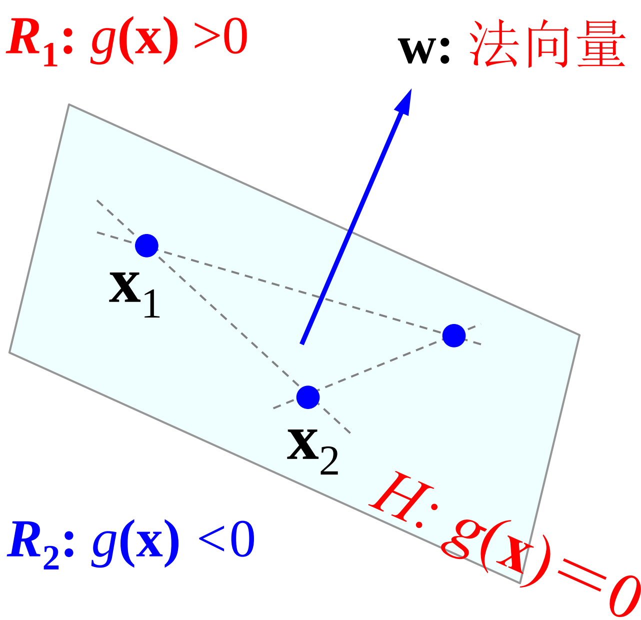


线性分类器（神经网络描述）

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，将特征空间分为两个区域。
  - 位于该平面的任意向量与法向量 $\mathbf{w}$ 垂直：
    - 如果 $\mathbf{x}_1$ 和 $\mathbf{x}_2$ 位于该超平面内，则有：

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

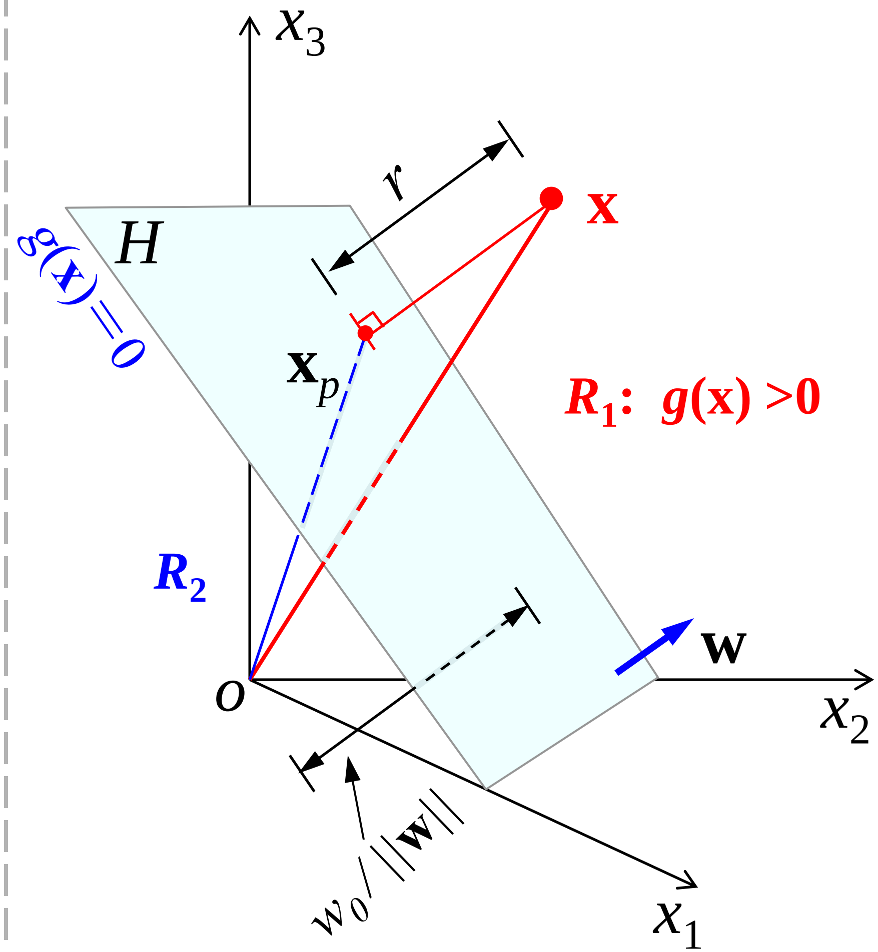


5.2 线性判别函数与决策面

- 两类情形的决策面
  - 对于任意样本 $\mathbf{x}$，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 $\mathbf{x}$ 在超平面 H 上的投影，r 为点 $\mathbf{x}$ 到超平面 H 的代数距离。如果 $\mathbf{x}$ 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

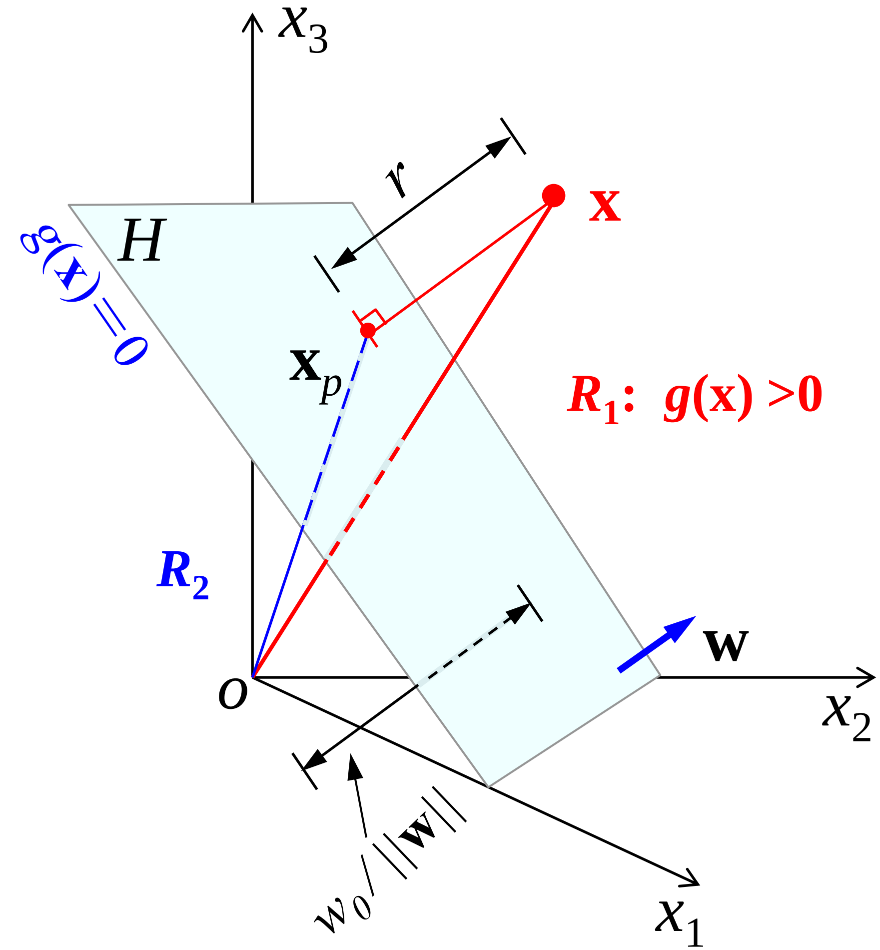
- 两类情形的决策面
  - 因为 $g(\mathbf{x}_p)=0$，于是有：

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

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

r 为点 $\mathbf{x}$ 到超平面 H 的代数距离。

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

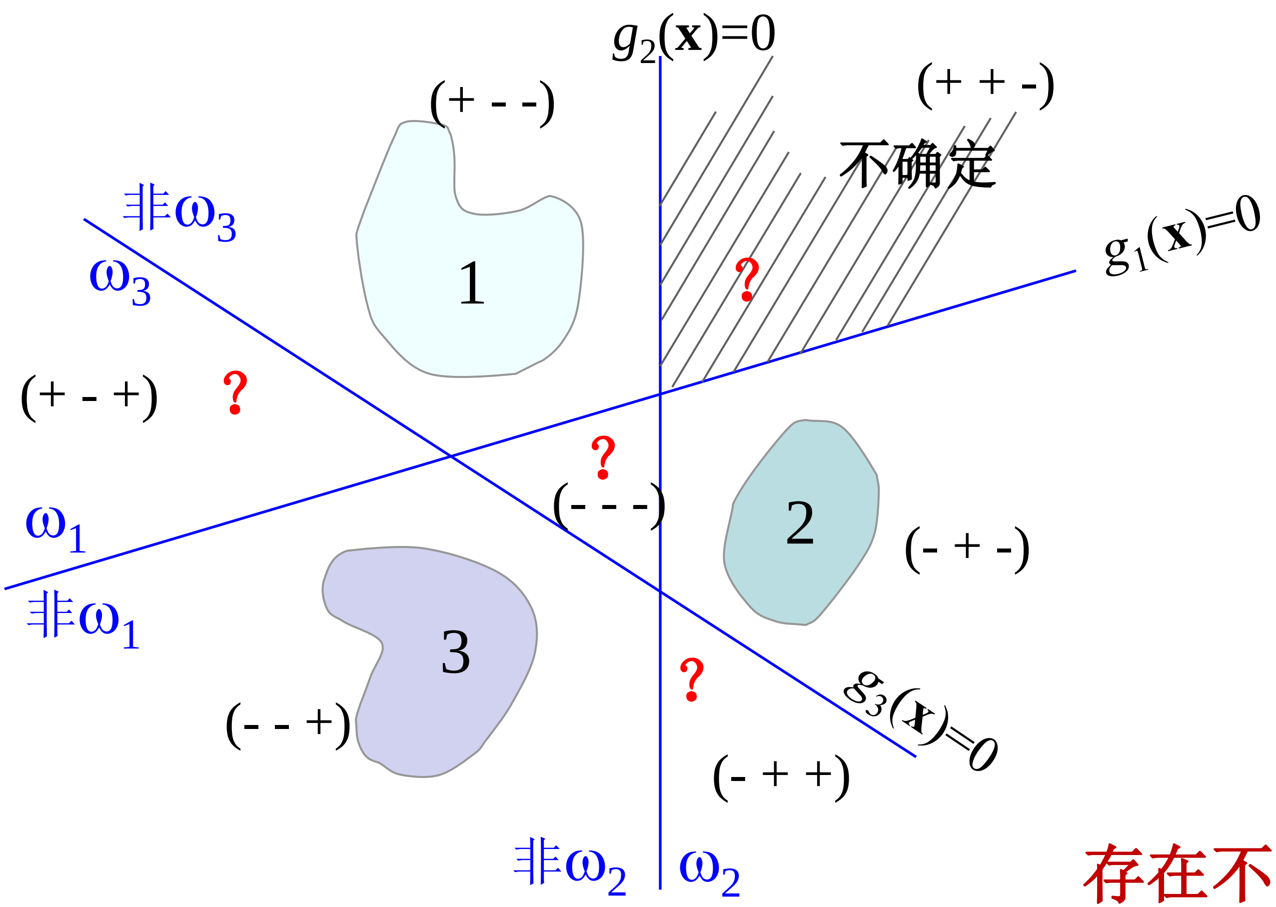


5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形($c > 2$)：采用多个两类分类器
  - 一对多（One-vs-all）：逐一将每个类与所有的其它类进行配对，可以构造 c 个两类分类器。
    - 预测时，得到c个分类结果，若仅有一个分类器预测为正，则对应类别即为预测结果；否则，需要进一步比较判别函数值。
  - 一对一（One-vs-one）：两两（类–类）配对，可以构造$c(c-1)/2$个两类分类器。
    - 预测时，得到$c(c-1)/2$个分类结果，使用投票法得到预测结果。
  - 多对多：ECOC(error correcting output codes)，层次分类

5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形：One-vs-all（3类）

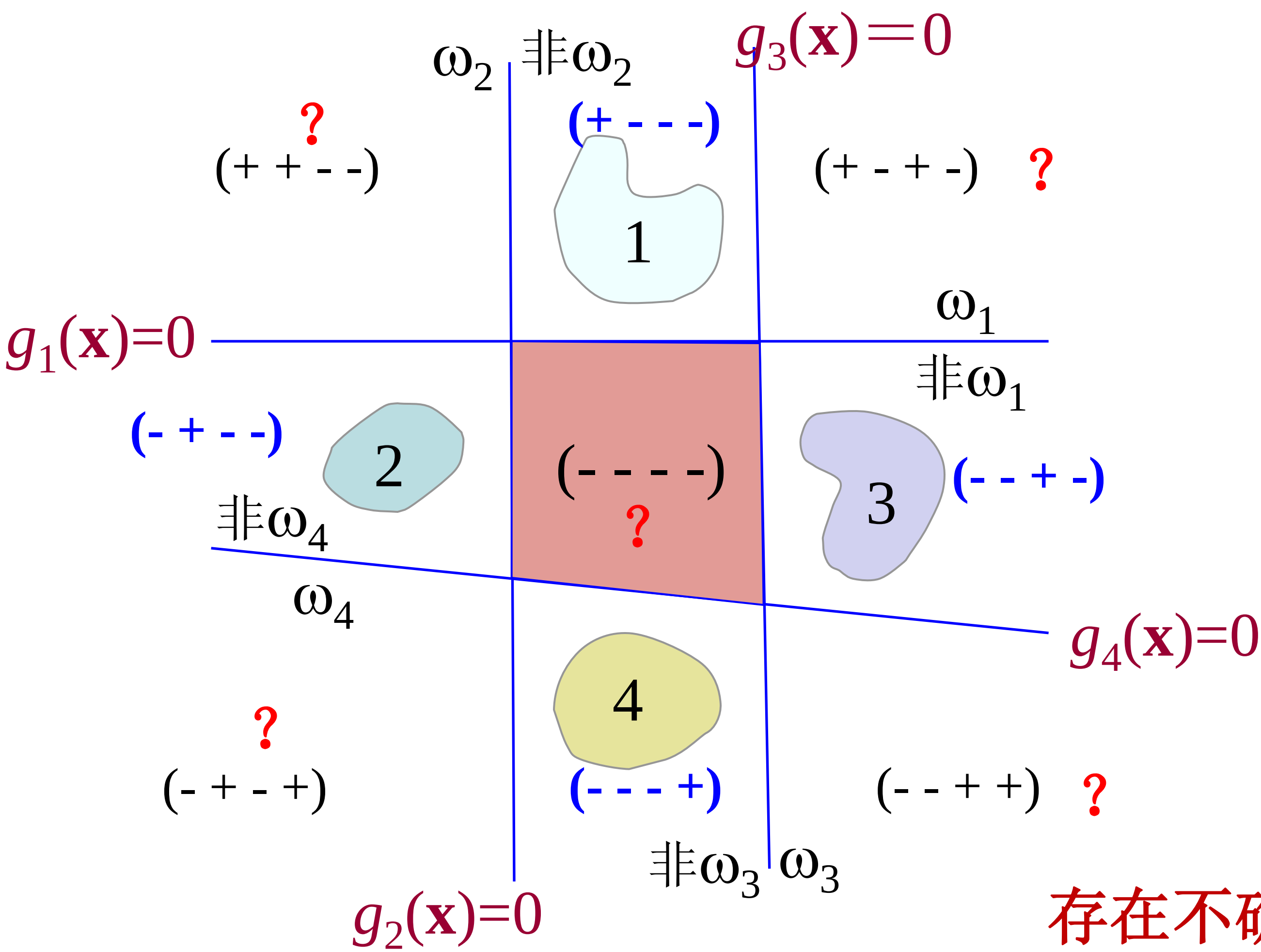


存在不确定区域

不使用判别函数的函数值，仅使用决策面进行分类

5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形：One-vs-all（4类）



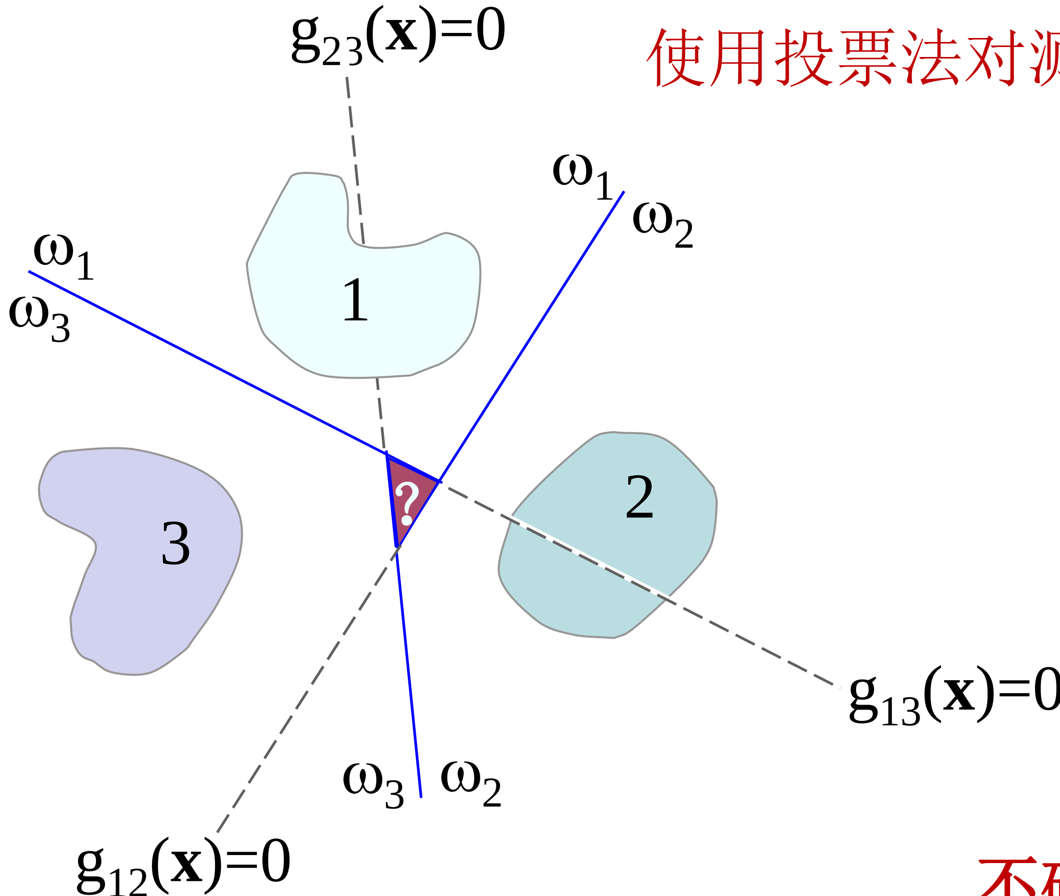
存在不确定区域

不使用判别函数的函数值，仅使用决策面进行分类

5.2 线性判别函数与决策面

- 多类情形：One-vs-one（3类）

使用投票法对测试样本分类



不确定性区域

不使用判别函数的函数值，仅使用决策面进行分类

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：

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

  - 对样本x，可以采用如下决策规则（最大判别函数决策）：

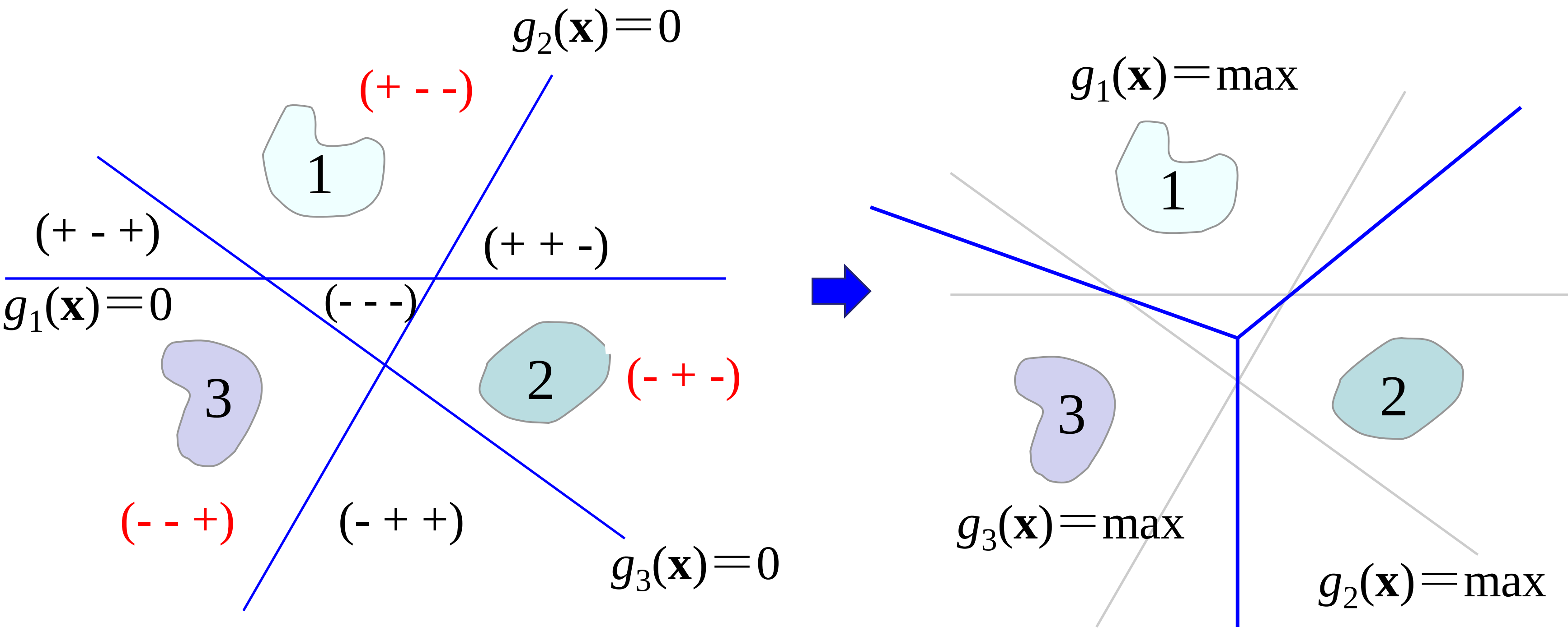
对 $\forall\, j \neq i$, 如果 $g_i(\mathbf{x}) > g_j(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}$ 则被分为 ω_i 类；否则不决策

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

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：（变成“最大判别函数”决策）

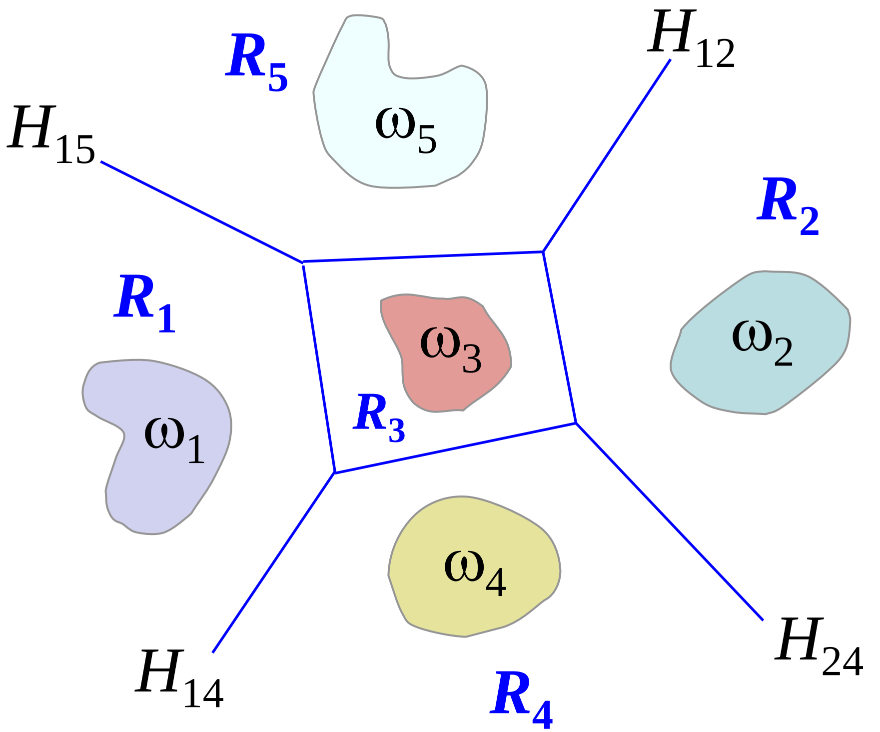


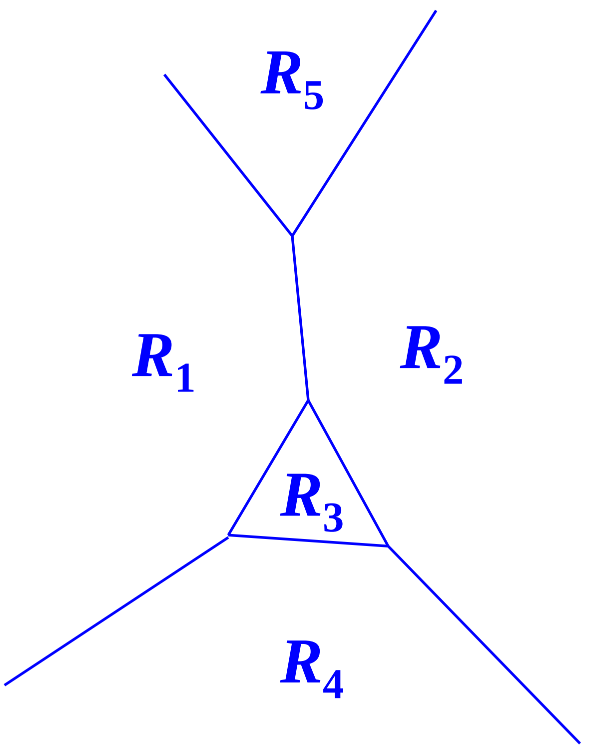
线性机器将样本空间分为 c 个可以决策的区域$\boldsymbol{R_1,\ldots, R_c}$

中国科学院大学 University of Chinese Academy of Sciences

5.2 线性判别函数与决策面

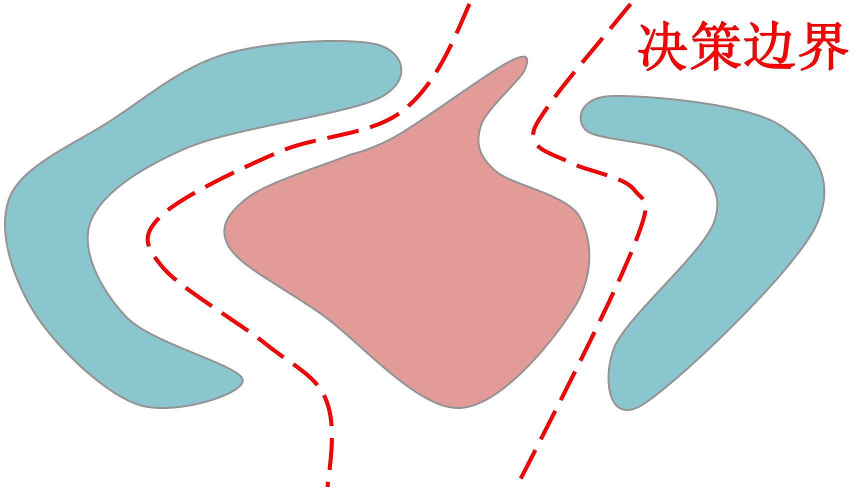
- 线性机器决策面：例子
  - 可以多达 $c(c-1)/2$ 个决策边界（有些可能可以删除）！





5.2 线性判别函数与决策面

- 线性决策面优缺点：
  - 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**，从而在新的特征空间内应用线性判别函数方法。

5.3 广义线性判别函数

- 以二次判别函数为例

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

1. 共有 $\hat{d} = (d+1)(d+2)/2$ 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

- 定义如下非线性变换$\mathbf{y}(\mathbf{x})$，把$\mathbf{x}$从 d 维变换到 $\hat{d}$ 维

$$y_1(\mathbf{x}) = 1$$

$$y_2(\mathbf{x}) = x_1$$

$$y_3(\mathbf{x}) = x_2$$

$$\cdots$$

$$y_{d+1}(\mathbf{x}) = x_d$$

$$y_{d+2}(\mathbf{x}) = x_1^2$$

$$y_{d+3}(\mathbf{x}) = x_1 x_2$$

$$\cdots$$

$$y_{\frac{(d+1)(d+2)}{2}}(\mathbf{x}) = x_d^2$$

$$\Rightarrow$$

$$g(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{d} w_i x_i + \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} w_{ij} x_i x_j = \sum_{i=1}^{\hat{d}} a_i\, y_i(\mathbf{x})$$

5.3 广义线性判别函数

- 一般情形

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

$y_i(\mathbf{x})$: 变换函数

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：

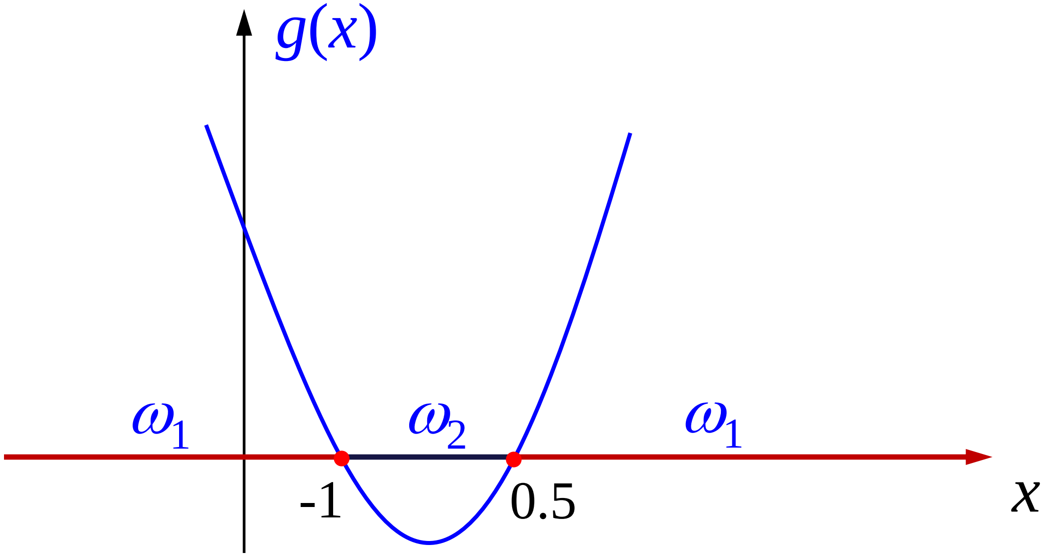
$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{y}(\mathbf{x})$$

---

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. 但是，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ω_1类；如果 $-1<x<0.5$，则属于ω_2类，请设计一个判别函数 $g(x)$。



5.3 广义线性判别函数

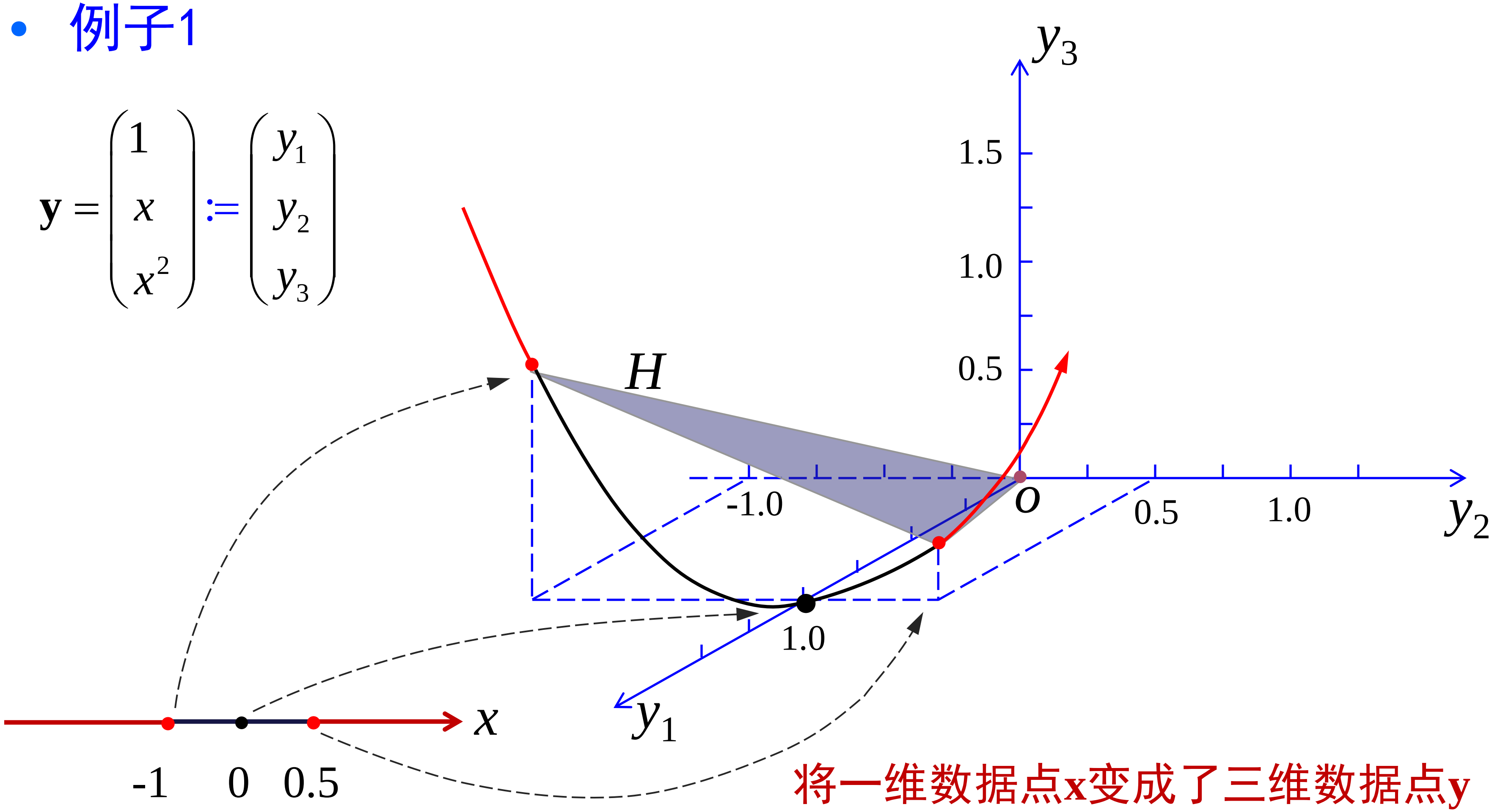
- 例子1
  - 设有一维样本空间X，我们期望如果 $x< -1$ 或者 $x> 0.5$，则 x 属于第一类ω_1；如果 $-1<x<0.5$，则属于第二类ω_2，请设计一个判别函数 $g(x)$。
  - 判别函数：$g(x) = (x-0.5)(x+1)$
  - 决策规则：$g(x)>0$, x 属于ω_1；$g(x)<0$, x 属于ω_2

$$
\begin{aligned}
g(x) &= (x-0.5)(x+1) \\
&= -0.5 + 0.5x + x^2 \\
&= a_1 + a_2 x + a_3 x^2
\end{aligned}
\quad \xrightarrow{\text{映射关系}} \quad
\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}
$$

5.3 广义线性判别函数

- 例子1

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



将一维数据点x变成了三维数据点y

在低维空间中线性不可分，在高维空间中线性可分

- 例子2
  - 对线性判别函数采用齐次增广表示
    - 此时，增广样本向量 $\mathbf{y}$ 与增广权重向量 $\mathbf{a}$ 如下：

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

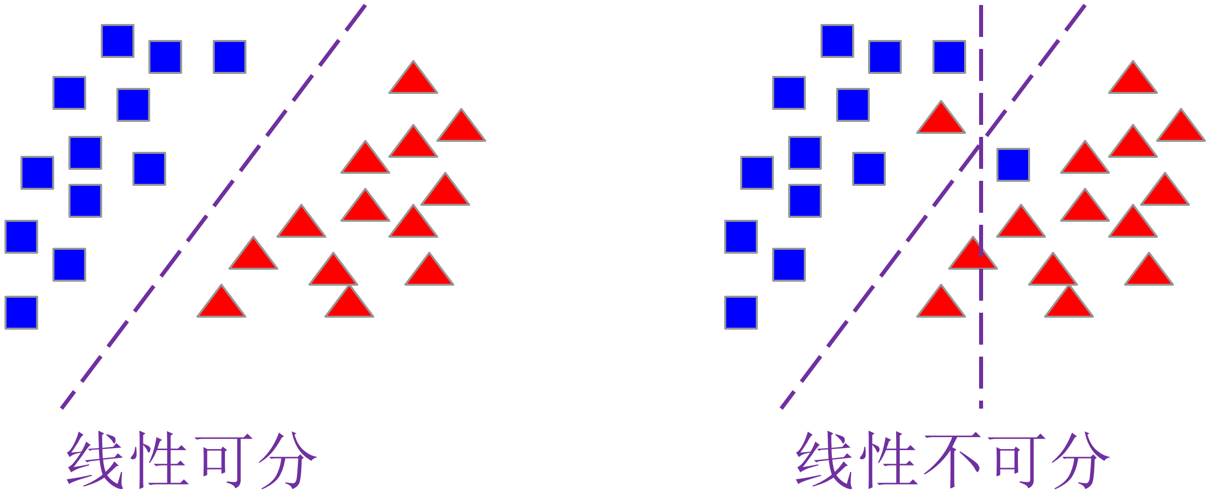
  - 线性判别函数的齐次简化： $g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + w_0 = \mathbf{a}^T \mathbf{y}$
  - Y空间中任意一点 $\mathbf{y}$ 到 H 的距离为： $r = \dfrac{g(\mathbf{x})}{\|\mathbf{a}\|} = \dfrac{\mathbf{a}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{a}\|}$

线性齐次空间增加了一个维度，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。

上述增广样本向量将在后面的讨论中经常使用。

5.4 感知准则函数

- 线性可分性
  - 来自两个类别的 n 个样本：$\mathbf{y}_1$，$\mathbf{y}_2$，…，$\mathbf{y}_n$（齐次增广表示）。
  - 如果存在一个权向量 $\mathbf{a}$，对所有 $\mathbf{y}\in\omega_1$，均有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}>0$，对所有 $\mathbf{y}\in\omega_2$，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。



  - 本节考虑“两类线性可分”情形

5.4 感知准则函数

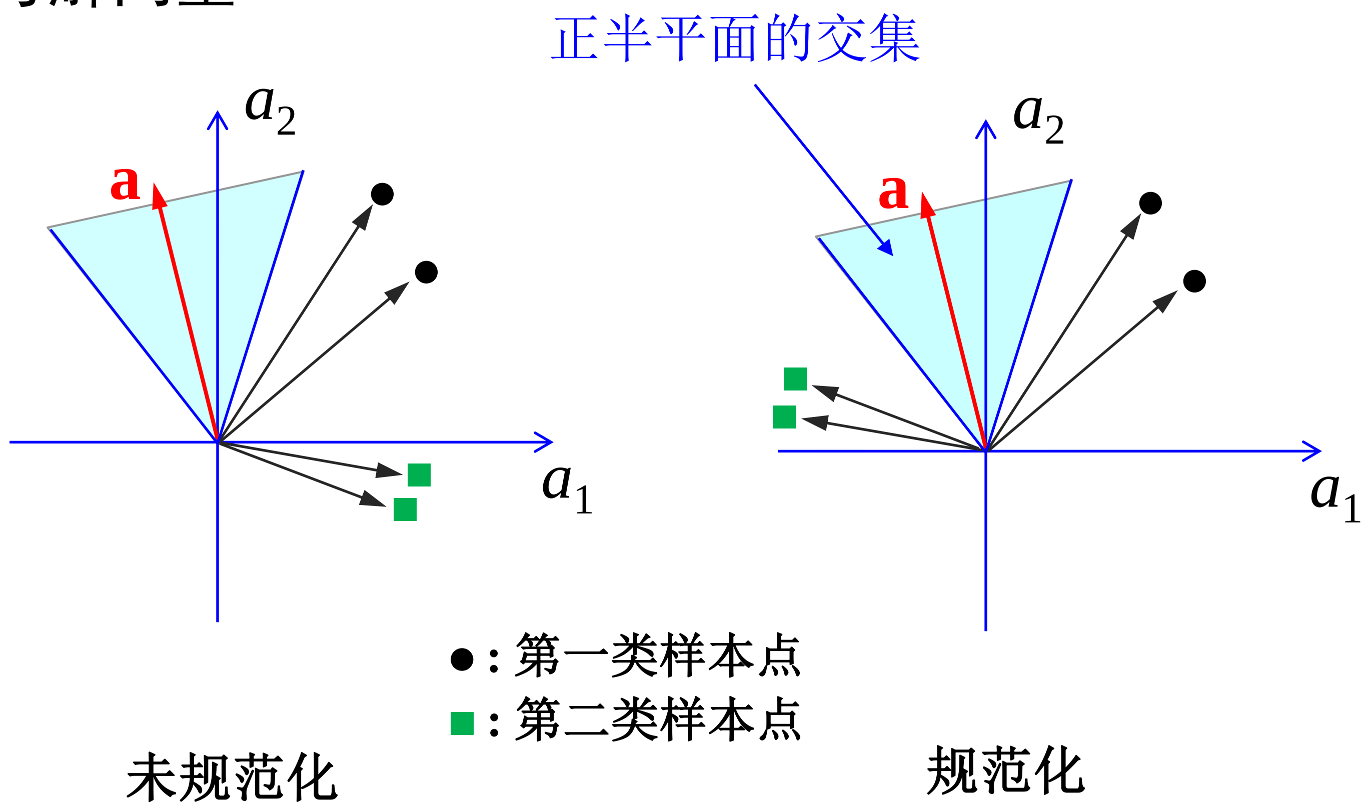
- 样本规范化
  - 如果样本集是线性可分的，将属于 $\boldsymbol{\omega}_2$ 的所有样本由 **y**变成 –**y**，对所有 n 样本，将得到 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}>0$ 。
  - 经过上述处理之后，在训练的过程中就不必考虑原来的样本类别。这一操作称为对样本的**规范化**(normalization) 处理。
  - 规范化增广样本：首先将所有样本写成齐次增广形式，然后将属于 $\boldsymbol{\omega}_2$ 的所有样本由 **y**变成 –**y**。
  - 后续讲解主要将集中于“规范化增广样本”。其中，“增广”是指“齐次增广表示”，即 $\mathbf{y} = (\mathbf{x}^T,1)^T \in R^{d+1}$。

5.4 感知准则函数—两类可分情形

- 解向量与解区
  - 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。这个区域内的任意向量均是一个可行的解向量 $\mathbf{a}^*$ 。

5.4 感知准则函数－两类可分情形

- 解区与解向量



给定一个可行的 **a**, 即可得到一个分界面

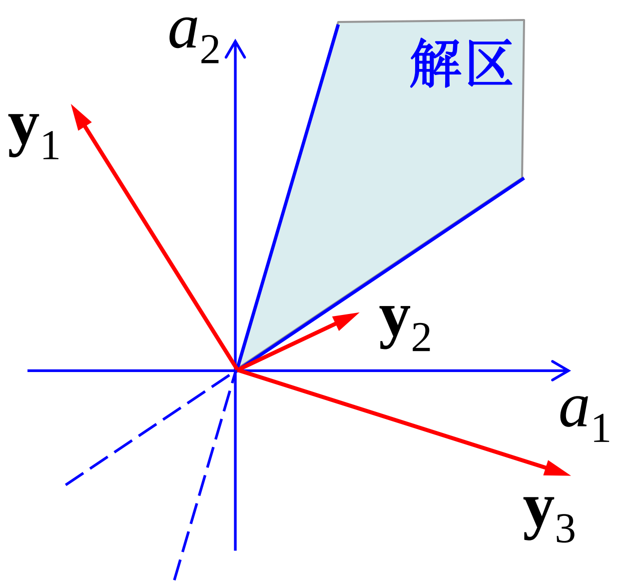
5.4 感知准则函数

- 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
    - 比如：寻找一个单位长度的解向量 $\mathbf{a}$，能最大化样本到分界面的最小距离
    - 比如：寻找一个最小长度的解向量 $\mathbf{a}$，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

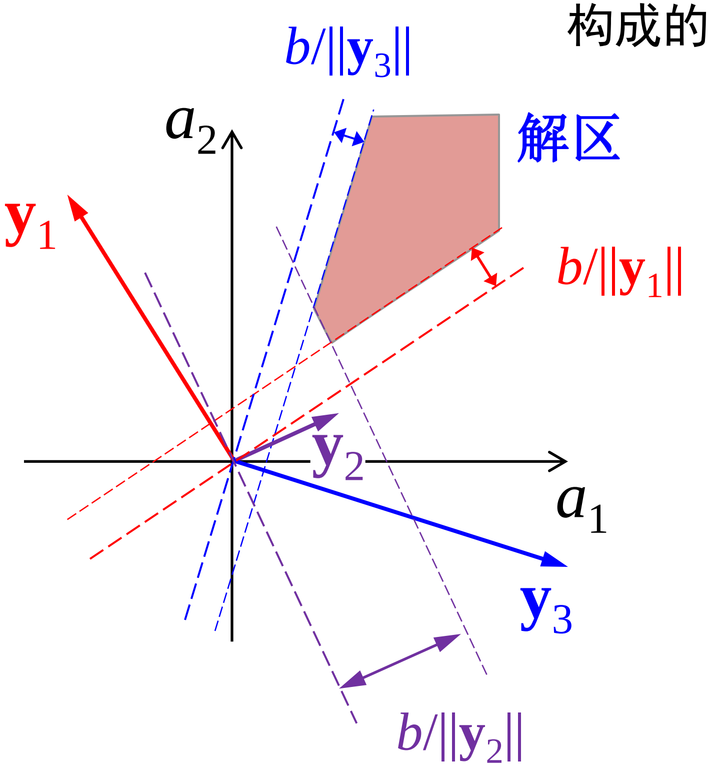
5.4 感知准则函数

- 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



$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$, 不考虑margin



$\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > b$, $b>0$, 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$\mathbf{y}_1$，$\mathbf{y}_2$，…，$\mathbf{y}_n$，各样本均规范化增广表示。我们的目的是要寻找一个解向量 $\mathbf{a}$，使

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

5.4 感知准则函数

- 感知准则函数
  - 考虑如下准则函数：

$$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(-\mathbf{a}^T\mathbf{y}),$$ 其中，Y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年代提出的感知器（Perceptron）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： $\dfrac{\partial J_p(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}} = -\sum_{\mathbf{y}\in Y} \mathbf{y}$
  - 根据梯度下降法，有如下更新准则：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k - \eta_k \left.\frac{\partial J_p(\mathbf{a})}{\partial \mathbf{a}}\right|_{\mathbf{a}=\mathbf{a}_k} = \mathbf{a}_k + \eta_k \sum_{\mathbf{y}\in Y_k} \mathbf{y}$$

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，学习率）。

可变增量批处理感知器算法

Batch Variable-Increment Perceptron

begin initialize: $\mathbf{a}_0$, η_0, $k=0$

  do $k \leftarrow k+1 \pmod n$

    $Y_k=\{\}$, $j=0$

    do $j \leftarrow j+1$

      if $\mathbf{y}_j$ is misclassified, then append $\mathbf{y}_j$ to Y_k

    until $j=n$

    $\mathbf{a}_{k+1}=\mathbf{a}_k+\eta_k\sum_{\mathbf{y}\in Y(k)}\mathbf{y}$ //发现所有错分样本，然后再修正

  until $Y_k=\{\}$ //直到所有样本均正确分类

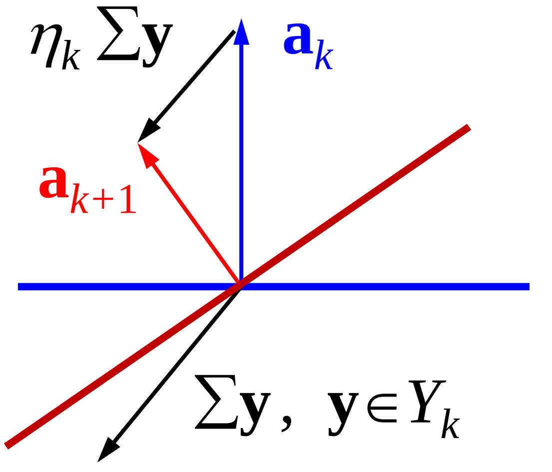
  return $\mathbf{a}_k$

end

1. 称为“batch”是因为在迭代过程中同时考虑多个样本
2. 称为“variable increment”是因为步长η_k可变
3. 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

- **几何解释**
  - 由于所有被 $\mathbf{a}_k$ 错分的样本必然位于以 $\mathbf{a}_k$ 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。



$$\mathbf{a}_k^T(\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{a}_k^T\mathbf{y} < 0$$

  - 在更新中，$\mathbf{a}_{k+1}$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。

$$\mathbf{a}_{k+1}^T(\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y})$$

$$= (\mathbf{a}_k + \eta_k\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y})^T(\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}) = \mathbf{a}_k^T(\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}) + \eta_k\left\|\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y}\right\|^2$$

$$> \mathbf{a}_k^T(\sum_{\mathbf{y}\in Y_k}\mathbf{y})$$

5.4 感知准则函数

- **固定增量单样本修正方法**
  - 每次迭代只考虑一个错分样本 $\mathbf{y}^k$，梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k \mathbf{y}^k$。考虑固定增量，即令 $\eta_k = 1$：

Fixed-Increment Single-Sample Perceptron

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

“固定增量”并不改变分类决策，相当于将样本作了一个 $1/\eta_k$ 的缩放。

5.4 感知准则函数

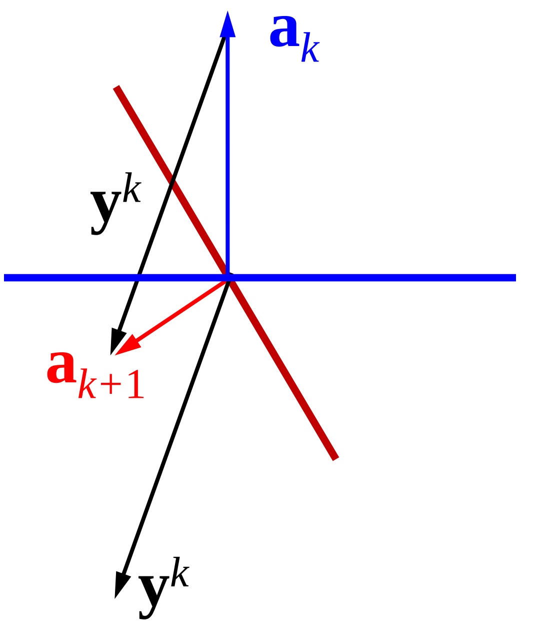
- **可变增量单样本修正方法**
  - 梯度下降法可以写成：$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \eta_k \mathbf{y}^k$

Variable-Increment Perceptron with Margin

```
begin initialize: a, margin b, η_0 , k=0
    do k ← k+1 (mod n)
        if a^T y^k ≤ b, then a = a + η_k y^k  //小于margin，马上修正
    until a^T y^k > b for all k
    return a
end
```

5.4 感知准则函数

- 几何解释
  - 梯度下降：$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \mathbf{y}^k$
  - 由于$\mathbf{a}_k$ 将 $\mathbf{y}^k$ 分错，所以 $(\mathbf{a}_k)^T\mathbf{y}^k \leq 0$。此时，$\mathbf{y}^k$ 不在 $\mathbf{a}_k$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 $\mathbf{a}_{k+1}$ 将向$\mathbf{y}^k$靠近，可能会穿过这个超平面（即正确分类）。



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

$(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k$ 在原来的基础上增加了一个正数：$||\mathbf{y}^k||^2$

5.4 感知准则函数

- **算法收敛性**
  - **以固定增量单样本修正方法为例来说明算法的收敛性**
    - 对于权向量 $\mathbf{a}_k$，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。

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 $\mathbf{a}$ 是一个解向量，只要证明 $\|\mathbf{a}_{k+1} - \mathbf{a}\| < \| \mathbf{a}_k - \mathbf{a} \| - C$ 即可。
    - 即算法每次迭代都使权向量到解向量的距离减少一个常数 C
    - 假设 $\mathrm{Dist} = \| \mathbf{a}_1 - \mathbf{a} \|$，则 Dist/C 次迭代后，算法收敛

中国科学院大学 University of Chinese Academy of Sciences

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，α**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。

- 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 $\alpha = \beta^2 / \gamma$

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

因此，每次迭代，当前解距离可行解越来越近。
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：

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

5.5 松驰方法

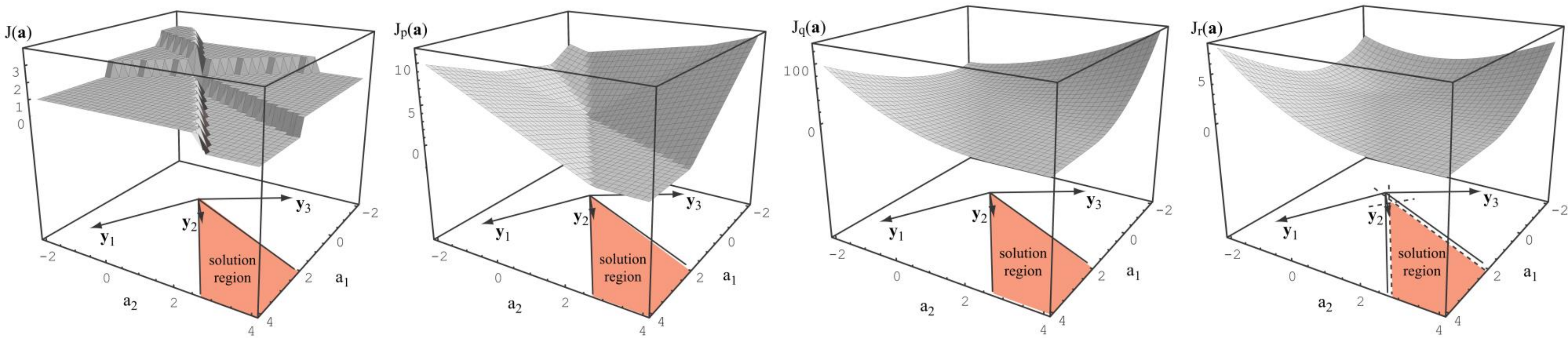
- 学习准则
  - 在感知函数准则中，目标函数中采用了$-\mathbf{a}^T\mathbf{y}$ 的形式。实际上有很多其它准则也可以用于感知函数的学习。
  - 线性准则：$J_p(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(-\mathbf{a}^T\mathbf{y}),$
  - 平方准则：$J_q(\mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{y}\in Y}(\mathbf{a}^T\mathbf{y})^2,$

  Y为错分样本集合

  - 松驰准则：$J_r(\mathbf{a}) = \dfrac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}\in Y}\dfrac{(\mathbf{a}^T\mathbf{y}-b)^2}{\|\mathbf{y}\|^2},$ Y为 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}\le b$ 的样本集合

5.5 松弛方法

- 学习准则
  - $J_p(\mathbf{a})$是分段线性的，因此其梯度是不连续的。
  - $J_q(\mathbf{a})$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。
  - $J_r(\mathbf{a})$ 则避免了这些缺点。$J_r(\mathbf{a})=0$时，对所有$\mathbf{y}$，$\mathbf{a}^T\mathbf{y} > b$，意味着集合 Y 是空集。



5.5 松驰方法

- 学习
  - 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：

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

5.5 松弛方法

Batch Relaxation with Margin

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

  do $k \leftarrow k+1 \pmod{n}$

    $Y_k = \{\}$, $j = 0$

    do $j \leftarrow j + 1$

      if $\mathbf{a}_k{}^T\mathbf{y}_j \le b$, then append $\mathbf{y}_j$ to Y_k //如果小于margin

    until $j = n$

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

  until $Y_k = \{\}$

  return $\mathbf{a}$

end

5.5 松弛方法

- **单样本松弛算法**

Single Sample Relaxation with Margin

```
begin initialize: a, margin b, η, k=0
    do k ← k+1 (mod n)
        if a^T y^k ≤ b, then a = a − (η (a^T y^k − b)/||y^k||^2) · y^k
    until a^T y^k > b for all y^k
    return a
end
```

5.5 松弛方法

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

$$= \mathbf{a}_k + \eta r_k \frac{\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$$

- **几何解释**

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

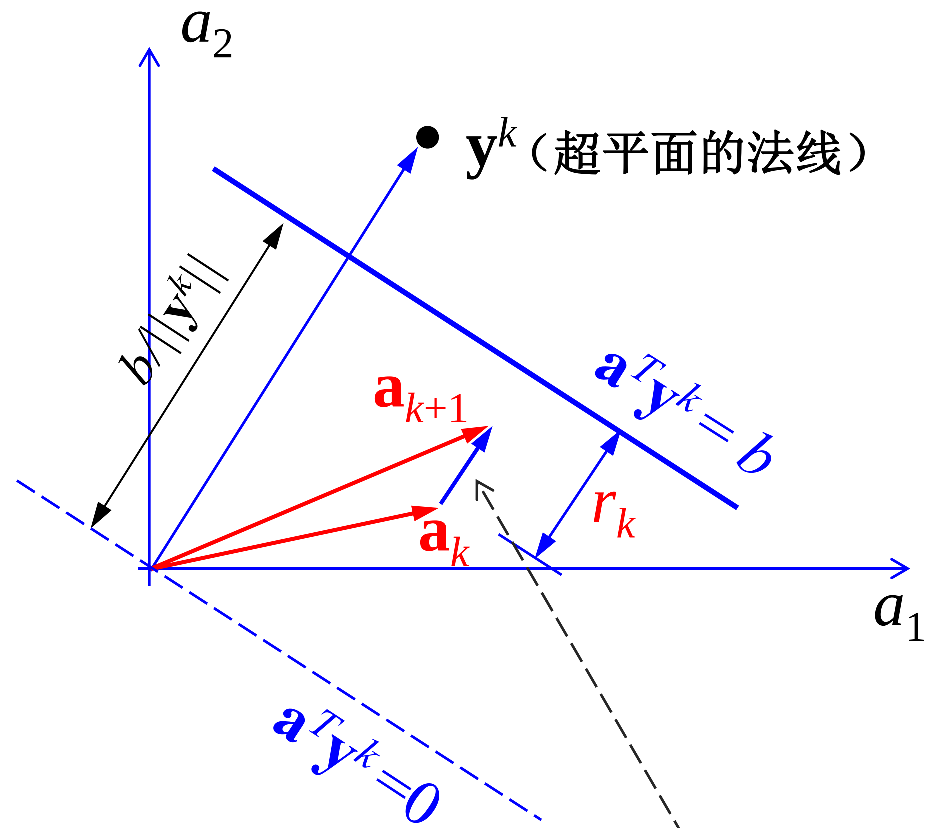
$$r_k = \frac{b - \mathbf{a}_k^T \mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$$

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

根据更新准则，有：

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

(离超平面更近了）



移动量： $\eta \cdot r_k \cdot \dfrac{\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$

5.5 松驰方法

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

$$= \mathbf{a}_k + \eta r_k \frac{\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$$

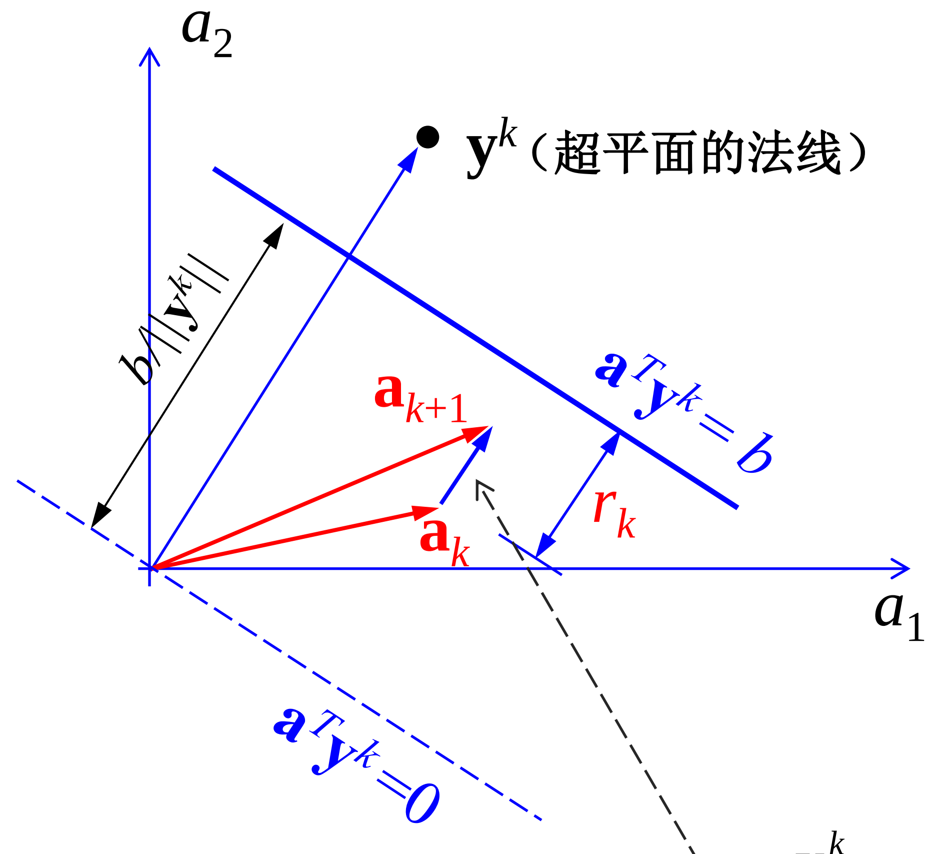
- **几何解释**

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

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

如果 $\eta > 1$，$\mathbf{a}_{k+1}$ 将跨过超平面，即 $(\mathbf{a}_{k+1})^T\mathbf{y}^k < b$。称为超松驰。

实际中取 $0 < \eta < 2$。



移动量：$\eta \cdot r_k \cdot \frac{\mathbf{y}^k}{\|\mathbf{y}^k\|}$

5.5 松驰方法

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

- **收敛性一考虑单样本松驰法**
  - 设 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：

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

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

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

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

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

（由于$0 < \eta < 2$)

证明不完整，详见教材

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 $\mathbf{a}^T \mathbf{y}_i > 0,\ i=1,2,\ldots n$。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 $b_i = n_i / n$。其中，n_i，i =1 or 2，为属于第 i 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：

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

  - 如果 $\mathbf{Y}$ 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，$\mathbf{Y}^+$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。
  - 批处理梯度下降：

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

    - 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：

$$\mathbf{Y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Y}\mathbf{a}) = \mathbf{0}$$

  - 单样本梯度下降：此方法需要的计算存储量会更小

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

（此时考虑单个样本对误差的贡献）

5.6 MSE 准则函数

- **Widrow-Hoff方法（单样本最小平方更新方法）**

Widrow-Hoff (Least mean squared) Approach

---

begin initialize: **a, b,** η, threshold θ, k=0

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

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

    until $\| (b_k - (\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k)\, \mathbf{y}^k \| < \theta$

    return **a**

end

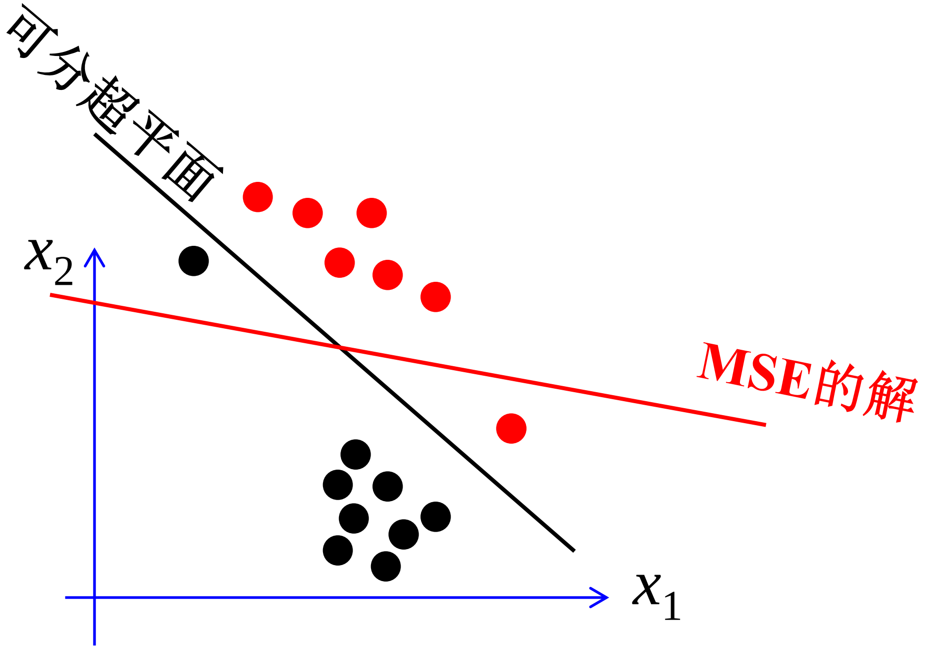
注：$\mathbf{y}^k$ 为使 $(\mathbf{a}_k)^T \mathbf{y}^k \neq b_k$ 的样本，因为相等时对更新无贡献

5.6 MSE 准则函数

- **Widrow-Hoff方法 vs 松驰算法**
  - 松驰准则要求 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}^k > b$ 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。
    - MSE方法的本质是最小化样本至超平面的距离的平方和。



5.7 Ho-Kashyap 方法

- **Ho-Kashyap 方法**
  - MSE算法上最小化 $\|\mathbf{Ya}-\mathbf{b}\|^2$，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**，则可找到一个权向量 **a**，对所有样本，均有 $\mathbf{a}^T\mathbf{y}_i > 0$。换句话说，一定存在 **a** 和 **b**，使

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

  - 但是，事先并不知道 **b**。因此，MSE准则函数可以更新为：

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

注：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。

5.7 Ho-Kashyap 方法

- **梓度下降法**
  - 梯度

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

对 $\mathbf{a}$，总有 $\mathbf{a} = \mathbf{Y}^{+}\mathbf{b}$，其中 $\mathbf{Y}^{+}$ 为 $\mathbf{Y}$ 的伪逆。

对 $\mathbf{b}$，需要同时满足约束条件 $\mathbf{b}>\mathbf{0}$。梯度更新：

$$\mathbf{b}_{k+1} = \mathbf{b}_k - \eta_k \frac{\partial J_s(\mathbf{a},\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}}$$

由于 $\mathbf{b}_k$ 总是大于零，要使$\mathbf{b}_{k+1}$也大于零，可以要求$\partial J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b})/\partial \mathbf{b} \le \mathbf{0}$。

- **梯度下降法**
  - **b 的梯度下降：**

元素取绝对值

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

  - 更新 **a** 和 **b** ：

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{Y}^{+}\mathbf{b}_k$$

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

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

为了防止 **b** 收敛于 **0**， 可以让 **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 $\partial J_s(\mathbf{a}, \mathbf{b}) / \partial \mathbf{b}$的元素为正的分量等于零，从而加快收敛速度。

5.7 Ho-Kashyap 方法

Ho-Kashyap Algorithm

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

  do $k \leftarrow k+1 \pmod{n}$

    $\mathbf{e} \leftarrow \mathbf{Ya} - \mathbf{b}$

    $\mathbf{e}^+ \leftarrow 1/2(\mathbf{e} + \mathrm{abs}(\mathbf{e}))$

    $\mathbf{b} \leftarrow \mathbf{b} + 2\eta_k \mathbf{e}^+$

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

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

  until $k = k_{\max}$

  print “No solution found!”

end

5.7 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**。
  - 对于更新因子$0<\eta\leq 1$，如果问题线性可分，则总能找到元素全为正的**b** 。
  - 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

5.8 多类线性判别函数

- **对 c 类分类的学习问题**
  - One-vs-all方法
    - 设 $g_i(\mathbf{x})$, i=1,2,…, c, 表示每个类别对应的判别函数
    - 决策准则：
      - 如果 $g_i(\mathbf{x}) \geq g_j(\mathbf{x}), \forall j \neq i$，则 $\mathbf{x}$ 被分为 ω_i 类
  - 对于线性判别函数
    - 如果 $\mathbf{a}_i^T \mathbf{x} + \mathbf{b}_i \geq \mathbf{a}_j^T \mathbf{x} + \mathbf{b}_j, \forall j \neq i$，则 $\mathbf{x}$ 被分为 ω_i 类

- **方法一：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
  - 线性变换(注，此处不采用规范化增广表示)：

$$\mathbf{z} = \mathbf{W}^T \mathbf{x} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{W} \in R^{d \times c}, \mathbf{b} \in R^c$$

  - 决策准则： if $\quad i = \arg\max \left(\mathbf{W}^T \mathbf{x} + \mathbf{b} \right), \quad$ then $\quad \mathbf{x} \in \omega_i$
  - 回归值的构造：onehot编码

$$\mathbf{x} \in \omega_j \quad \Rightarrow \quad \mathbf{z} \in R^c, \mathbf{z}_i = \begin{cases} 1, & \text{if } \ i = j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

若$\mathbf{x}$属于ω_j类，则$\mathbf{x}$的类别编码$\mathbf{z}$为一个c维向量，其中第j个元素为1，其余为0

- **方法一：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
  - 线性变换(注，此处不采用规范化增广表示)：

$$\mathbf{z} = \mathbf{W}^T\mathbf{x} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{W} \in R^{d \times c}, \mathbf{b} \in R^c$$

  - 决策准则： $\text{if} \quad j = \arg\max\left(\mathbf{W}^T\mathbf{x} + \mathbf{b}\right), \quad \text{then} \quad \mathbf{x} \in \omega_j$
  - 回归值的构造：onehot编码

比如:设第1,2个样本属于第一类,则 $\mathbf{z}_1=\mathbf{z}_2=[1,0,0\ldots,0]^T$

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = [\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_n] \in R^{c \times n}$$

- **方法一：MSE多类扩展**
  - 目标函数：

$$\min_{\mathbf{W},\mathbf{b}} \sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{W}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b} - \mathbf{z}_i \right\|_2^2$$

令： $\hat{\mathbf{W}} = \begin{pmatrix} \mathbf{W} \\ \mathbf{b}^T \end{pmatrix} \in R^{(d+1)\times c}, \quad \hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ 1 \end{pmatrix} \in R^{d+1}, \quad \hat{\mathbf{X}} = \left(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \cdots, \hat{\mathbf{x}}_n \right) \in R^{(d+1)\times n}$

$$\sum_{i=1}^{n} \left\| \mathbf{W}^T \mathbf{x}_i + \mathbf{b} - \mathbf{z}_i \right\|_2^2 = \left\| \hat{\mathbf{W}}^T \hat{\mathbf{X}} - \mathbf{Z} \right\|_F^2 \quad (\|\cdot\|_F\text{为Frobenius范数})$$

$$\min_{\hat{\mathbf{W}}} \left\| \hat{\mathbf{W}}^T \hat{\mathbf{X}} - \mathbf{Z} \right\|_F^2$$

$$\hat{\mathbf{W}} = \left(\hat{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{X}}^T \right)^{-1} \hat{\mathbf{X}} \mathbf{Z}^T \in R^{(d+1)\times c} \qquad \hat{\mathbf{W}} = \left(\hat{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{X}}^T + \lambda \mathbf{I} \right)^{-1} \hat{\mathbf{X}} \mathbf{Z}^T \in R^{(d+1)\times c}$$

λ：一个小正数

- 方法二：感知器准则扩展方法—逐步修正(不讲-自学)
  - 目标：一次性学习出c个权重向量（以下采用规范化增广样本表示）
  - S_1: 设置任意的初始权重向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_c$
  - S_2: 考察某个属于第i类的样本 $\mathbf{y}^k$:
    - 如果 $(\mathbf{a}_i)^T\mathbf{y}^k > (\mathbf{a}_j)^T\mathbf{y}^k$，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：

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

相当于将样本$[(\mathbf{y}^k)^T,(-\mathbf{y}^k)]^T$错分

  - S_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。

- **方法三：Kelser 构造**（注：此处采用齐次增广样本表示）**(不讲-自学)**
  - 设计一个两类分类线性分类器
  - (1) 将$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_c$ 拼接成一个长向量

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_c \end{pmatrix} \in R^{c(d+1)}$$

  - (2) 对每个训练样本**y**，构造c-1的新样本
    - 比如：若样本 **y** 属于第一类，则构造如下 $c-1$ 个新样本：

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

$$\boldsymbol{\eta}_{1j} \in R^{c(d+1)}$$

- **方法三：Kelser 构造**
  - （接上页）若样本 y 属于第一类，则构造如下 $c-1$ 个新样本：

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

  - 若要正确分类，则应当有：

$$\mathbf{a}_1^T\mathbf{y} > \mathbf{a}_2^T\mathbf{y} \Updownarrow \mathbf{a}^T\boldsymbol{\eta}_{12} > 0 \qquad \mathbf{a}_1^T\mathbf{y} > \mathbf{a}_3^T\mathbf{y} \Updownarrow \mathbf{a}^T\boldsymbol{\eta}_{12} > 0 \qquad \mathbf{a}_1^T\mathbf{y} > \mathbf{a}_c^T\mathbf{y} \Updownarrow \mathbf{a}^T\boldsymbol{\eta}_{12} > 0$$

- **方法三：Kelser 构造**
  - 一般地，若样本 $\mathbf{y}$ 属于第 i 类，构造如下c-1个新样本：

$$\boldsymbol{\eta}_{ij} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{y} \\ \vdots \\ -\mathbf{y} \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \leftarrow i \\ \\ \leftarrow j \\ \\ \end{matrix} \qquad \boldsymbol{\eta}_{ij} \in R^{c(d+1)}$$

  - 若要对样本 $\mathbf{y}$ 正确分类，则应当有：

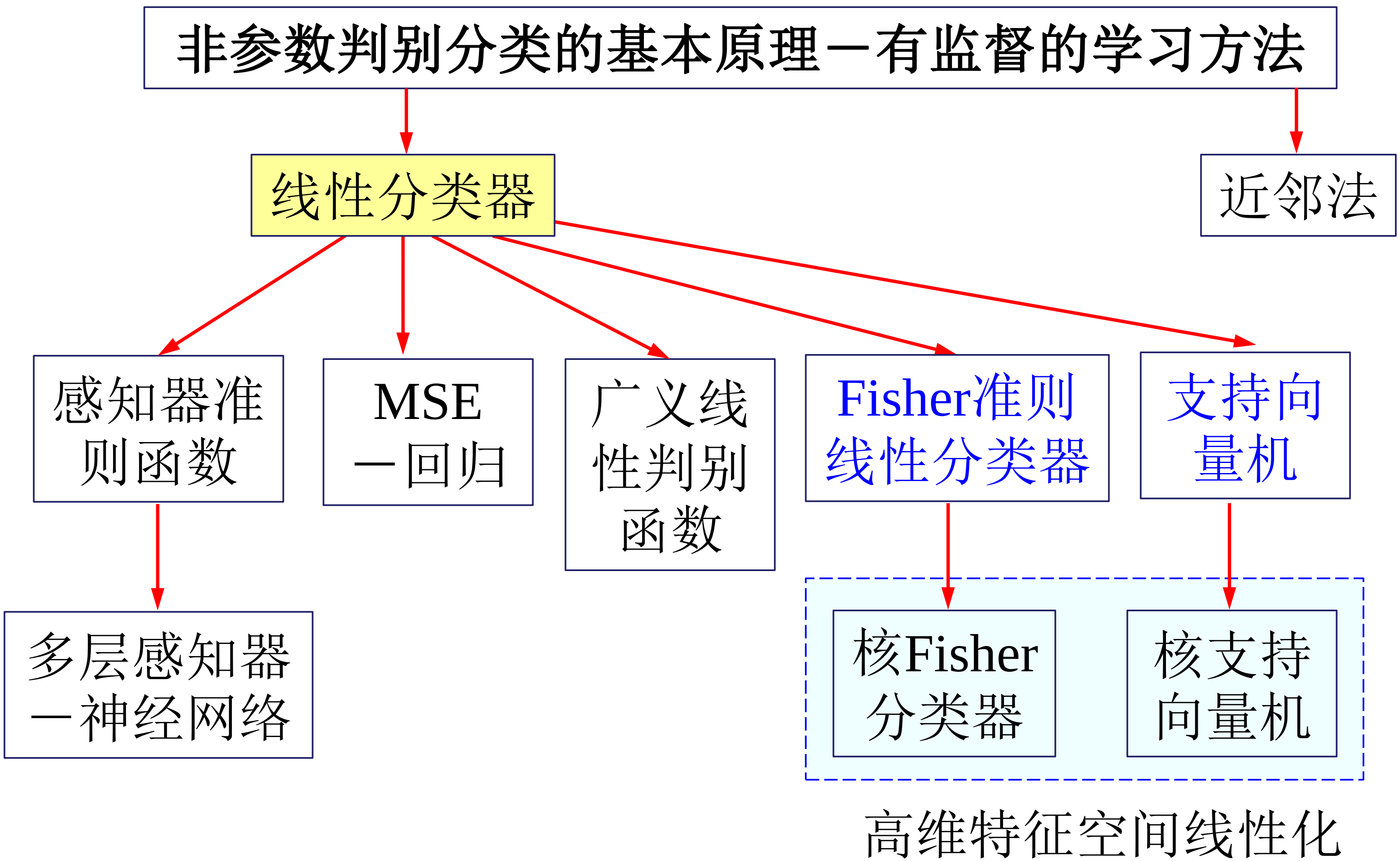
$$\mathbf{a}_i^T \mathbf{y} > \mathbf{a}_j^T \mathbf{y} \Leftrightarrow \mathbf{a}^T \boldsymbol{\eta}_{ij} > 0, \qquad j \neq i$$

- **方法三：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：
    - 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。

5.9 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、规范化增广样本表示、多类分类
- **线性判别函数**
  - 感知准则函数、松弛感知准则函数、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、松弛感知准则函数单样本更新方法、MSE梯度下降法、Ho-Kashyap方法、多类扩展方法

5.9 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、多层感知器、反向传播算法等

致谢

- **PPT由向世明老师提供**

Thank All of You!

(Questions?)

张燕明

ymzhang@nlpr.ia.ac.cn

people.ucas.ac.cn/~ymzhang

模式分析与学习课题组(PAL)

中科院自动化研究所· 模式识别国家重点实验室