周志华 著

MACHINE LEARNING

机器学习

清华大学出版社

本章课件致谢：
李绍园
刘冲

第三章：线性模型

目录

- 线性回归
  - 最小二乘法
- 二分类任务
  - 对数几率回归
  - 线性判别分析
- 多分类任务
  - 一对一
  - 一对其余
  - 多对多
- 类别不平衡问题

基本形式

- 线性模型一般形式

$$f(\boldsymbol{x}) = w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_dx_d + b$$

$\boldsymbol{x} = (x_1; x_2; \ldots; x_d)$是由属性描述的示例，其中$x_i$是$\boldsymbol{x}$在第 i 个属性上的取值

- 向量形式

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

其中 $\boldsymbol{w} = (w_1; w_2; \ldots; w_d)$

线性模型优点

- 形式简单、易于建模
- 可解释性
- 非线性模型的基础
  - 引入层级结构或高维映射

- 一个例子
  - 综合考虑色泽、根蒂和敲声来判断西瓜好不好
  - 其中根蒂的系数最大，表明根蒂最要紧；而敲声的系数比色泽大，说明敲声比色泽更重要

$$f_{\text{好瓜}}(\boldsymbol{x}) = 0.2 \cdot x_{\text{色泽}} + 0.5 \cdot x_{\text{根蒂}} + 0.3 \cdot x_{\text{敲声}} + 1$$

线性回归

- 给定数据集 $D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$

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

- 线性回归（linear regression）目的
  - 学得一个线性模型以尽可能准确地预测实值输出标记

- 离散属性处理
  - 有“序”关系
    - 连续化为连续值
  - 无“序”关系
    - 有k个属性值，则转换为k维向量

线性回归

- 单一属性的线性回归目标

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

- 参数/模型估计：最小二乘法（least square method）

$$\begin{aligned}(w^*, b^*) &= \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(f(x_i) - y_i\right)^2 \\ &= \underset{(w,b)}{\arg\min} \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - wx_i - b\right)^2\end{aligned}$$

线性回归 - 最小二乘法

- 最小化均方误差

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

- 分别对 w 和 b 求导，可得

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

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

线性回归 - 最小二乘法

- 得到闭式（closed-form）解

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

$$b = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i - wx_i)$$

其中

$$\bar{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$$

多元线性回归

- 给定数据集

$$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), (\boldsymbol{x}_2, y_2), \ldots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$$

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

- 多元线性回归目标

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

多元线性回归

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

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} & 1 \\ \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m^{\mathrm{T}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{y} = (y_1; y_2; \ldots; y_m)$$

多元线性回归 - 最小二乘法

- 最小二乘法（least square method）

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

令 $E_{\hat{\boldsymbol{w}}}=\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}-\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\right)$ ，对$\hat{\boldsymbol{w}}$求导得到

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

令上式为零可得$\hat{\boldsymbol{w}}$最优解的闭式解

多元线性回归 - 满秩讨论

- $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 是满秩矩阵或正定矩阵，则

$$\hat{\boldsymbol{w}}^{*} = \left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

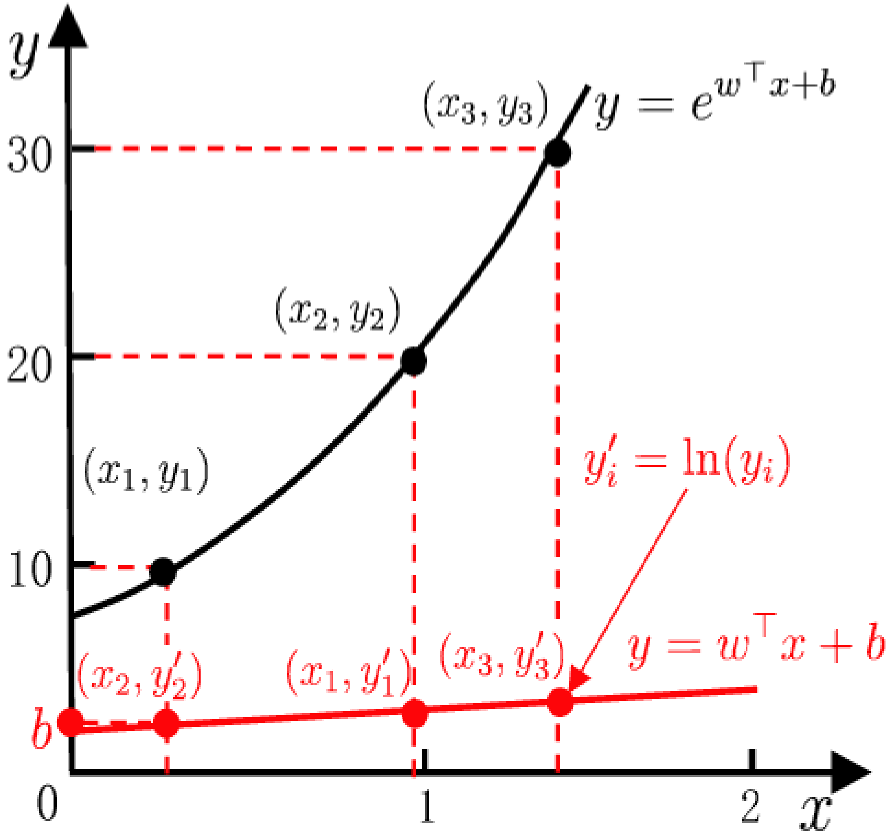
其中$\left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}$是 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 的逆矩阵，线性回归模型为

$$f\left(\hat{\boldsymbol{x}}_{i}\right) = \hat{\boldsymbol{x}}_{i}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right)^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

- $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}$ 不是满秩矩阵
  - 根据归纳偏好选择解（参见1.4节）
  - 引入正则化（参加6.4节，11.4节）

对数线性回归

- 输出标记的对数为线性模型逼近的目标



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

$$\Updownarrow$$

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

线性回归 – 广义线性模型

- 一般形式

$$y = g^{-1}\left(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b\right)$$

- $g(\cdot)$ 称为联系函数（link function）
  - 单调可微函数

- 对数线性回归是 $g(\cdot) = \ln(\cdot)$ 时广义线性模型的特例

二分类任务

- 预测值与输出标记

$$z = \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + b \qquad y \in \{0, 1\}$$

- 寻找函数将分类标记与线性回归模型输出联系起来

- 最理想的函数——单位阶跃函数

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

  - 预测值大于零就判为正例，小于零就判为反例，预测值为临界值零则可任意判别

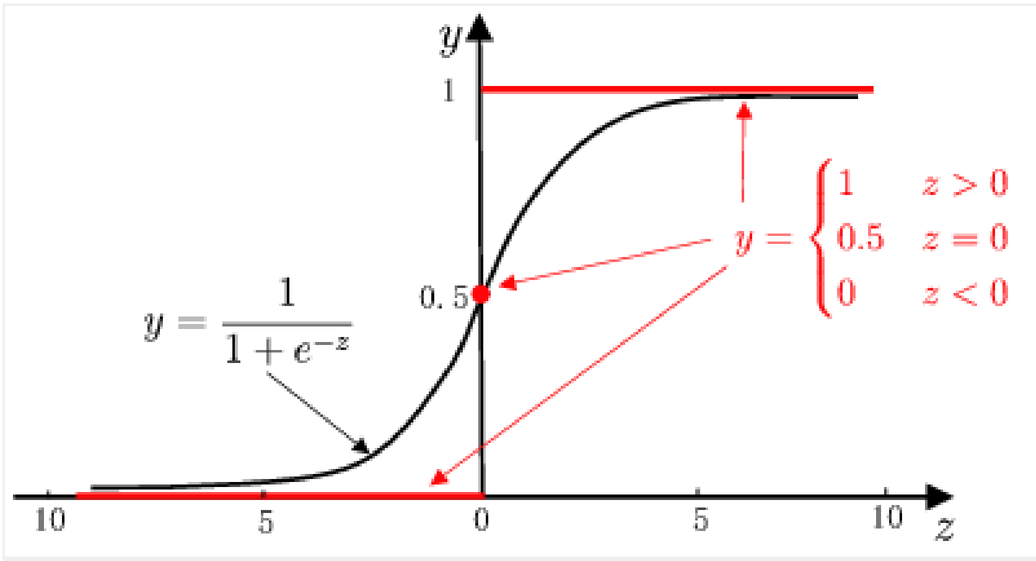
二分类任务

- 单位阶跃函数缺点
  - 不连续

- 替代函数——对数几率函数（logistic function）
  - 单调可微、任意阶可导

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

单位阶跃函数与对数几率函数的比较



对数几率回归

- 运用对数几率函数

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

- 对数几率（log odds）
  - 样本作为正例的相对可能性的对数

$$\ln \frac{y}{1-y}$$

- 对数几率回归优点
- 无需事先假设数据分布
- 可得到“类别”的近似概率预测
- 可直接应用现有数值优化算法求取最优解

对数几率回归 – 极大似然法

- 对数几率

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

显然有

$$p(y=1\mid\boldsymbol{x})=\frac{e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}{1+e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$$

$$p(y=0\mid\boldsymbol{x})=\frac{1}{1+e^{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}}$$

对数几率回归 - 极大似然法

- 极大似然法（maximum likelihood）
  - 给定数据集

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

  - 最大化样本属于其真实标记的概率
    - 最大化对数似然函数

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

对数几率回归 – 极大似然法

- 转化为最小化负对数似然函数求解
  - 令 $\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{w};b)$, $\hat{\boldsymbol{x}}=(\boldsymbol{x};1)$，则 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b$ 可简写为 $\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}$
  - 再令

$$p_1\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}\right)=p\left(y=1\mid\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta}\right)$$

$$p_0\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}\right)=p\left(y=0\mid\hat{\boldsymbol{x}};\boldsymbol{\beta}\right)=1-p_1\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}\right)$$

则似然项可重写为

$$p\left(y_i\mid\boldsymbol{x}_i;\boldsymbol{w}_i,b\right)=y_ip_1\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}\right)+\left(1-y_i\right)p_0\left(\hat{\boldsymbol{x}}_i;\boldsymbol{\beta}\right)$$

  - 故等价形式为要最小化

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

对数几率回归

- 求解得

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

- 牛顿法第t+1轮迭代解的更新公式

$$\boldsymbol{\beta}^{t+1} = \boldsymbol{\beta}^t - \left(\frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}}\right)^{-1} \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}}$$

其中关于 β 的一阶、二阶导数分别为

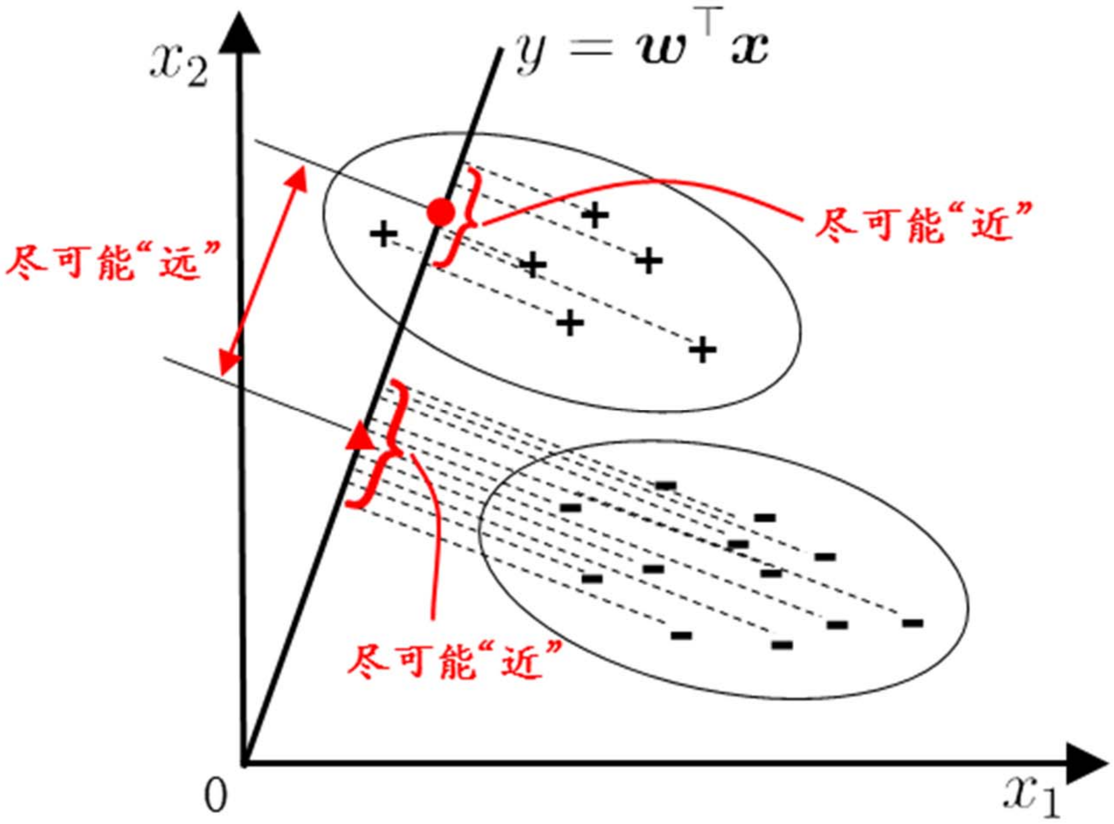
$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\sum_{i=1}^{m} \hat{\boldsymbol{x}}_i \left(y_i - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})\right)$$

$$\frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}} = \sum_{i=1}^{m} \hat{\boldsymbol{x}}_i \hat{\boldsymbol{x}}_i^{\mathrm{T}} p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta}) \left(1 - p_1(\hat{\boldsymbol{x}}_i; \boldsymbol{\beta})\right)$$

高阶可导连续凸函数，梯度下降法/牛顿法 [Boyd and Vandenberghe, 2004]

二分类任务 – 线性判别分析

- 线性判别分析（Linear Discriminant Analysis）[Fisher, 1936]



LDA也可被视为一种监督降维技术

二分类任务 – 线性判别分析

LDA的思想

- 欲使同类样例的投影点尽可能接近，可以让同类样例投影点的协方差尽可能小
- 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

一些变量

- 第i类示例的集合 X_i
- 第i类示例的均值向量 $\boldsymbol{\mu}_i$
- 第i类示例的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_i$
- 两类样本的中心在直线上的投影：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_0$ 和 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_1$
- 两类样本的协方差：$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_0\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{w}$

二分类任务 – 线性判别分析

- 最大化目标

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

- 类内散度矩阵

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

- 类间散度矩阵

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

二分类任务 – 线性判别分析

- 广义瑞利商（generalized Rayleigh quotient）

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

- 令 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\boldsymbol{w} = 1$，最大化广义瑞利商等价形式为

$$\min_{\boldsymbol{w}} \quad -\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b\boldsymbol{w}$$
$$\text{s.t.} \ \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\boldsymbol{w} = 1$$

- 运用拉格朗日乘子法

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

二分类任务 - 线性判别分析

- 同向向量

$$\underbrace{\mathbf{S}_b \boldsymbol{w}}_{\text{同向向量}} = \lambda \underbrace{(\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)}_{\text{同向向量}}$$

- 结果

$$\boldsymbol{w} = \mathbf{S}_w^{-1} (\boldsymbol{\mu}_0 - \boldsymbol{\mu}_1)$$

- 求解
  - 奇异值分解 $\mathbf{S}_w = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$

- LDA的贝叶斯决策论解释
  - 两类数据同先验、满足高斯分布且协方差相等时，LDA达到最优分类

LDA推广 – 多分类任务

- 全局散度矩阵

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_t &= \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w \\ &= \sum_{i=1}^{m} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu})^T\end{aligned}$$

- 类内散度矩阵

$$\mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_{w_i}$$

其中

$$\mathbf{S}_{w_i} = \sum_{\boldsymbol{x} \in X_i} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T$$

- 求解得

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_b &= \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w \\ &= \sum_{i=1}^{N} m_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T\end{aligned}$$

LDA推广 – 多分类任务

- 优化目标

$$\max_{\mathbf{W}} \frac{\operatorname{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_b\mathbf{W}\right)}{\operatorname{tr}\left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{S}_w\mathbf{W}\right)}$$

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

$$\Updownarrow$$

$$\mathbf{S}_b\mathbf{W} = \lambda\mathbf{S}_w\mathbf{W}$$

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

- 多分类LDA将样本投影到N-1维空间，N-1通常远小于数据原有的属性数，因此LDA也被视为一种监督降维技术

多分类学习

- 多分类学习方法
  - 二分类学习方法推广到多类
  - 利用二分类学习器解决多分类问题（常用）
    - 对问题进行拆分，为拆出的每个二分类任务训练一个分类器
    - 对于每个分类器的预测结果进行集成以获得最终的多分类结果

- 拆分策略
  - 一对一（One vs. One, OvO）
  - 一对其余（One vs. Rest, OvR）
  - 多对多（Many vs. Many, MvM）

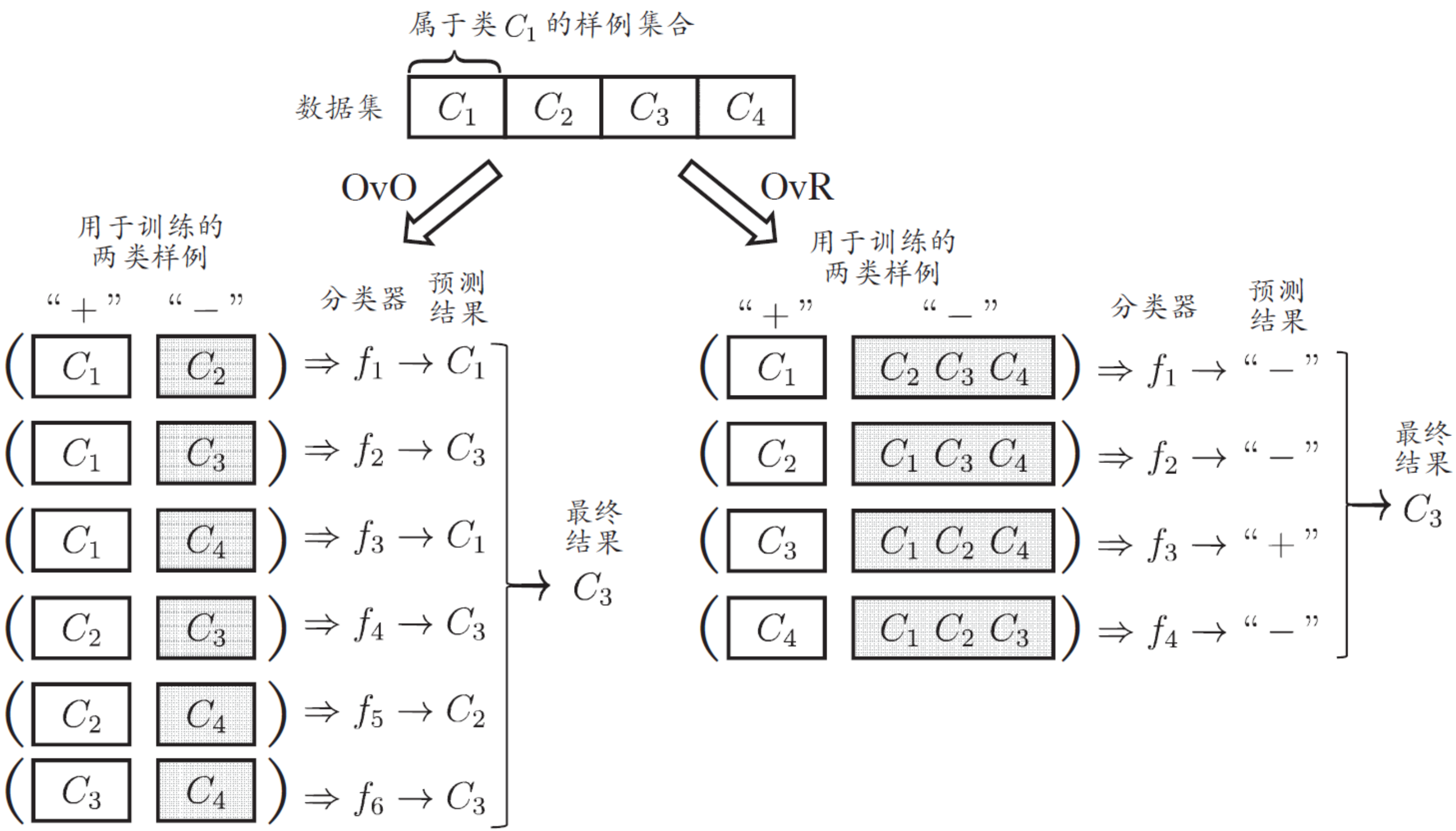
多分类学习 - 一对一

- 拆分阶段
  - N个类别两两配对
    - N(N-1)/2 个二类任务
  - 各个二类任务学习分类器
    - N(N-1)/2 个二类分类器
- 测试阶段
  - 新样本提交给所有分类器预测
    - N(N-1)/2 个分类结果
  - 投票产生最终分类结果
    - 被预测最多的类别为最终类别

多分类学习 - 一对其余

- 任务拆分
  - 某一类作为正例，其他反例
    - N 个二类任务
  - 各个二类任务学习分类器
    - N 个二类分类器
- 测试阶段
  - 新样本提交给所有分类器预测
    - N 个分类结果
  - 比较各分类器预测置信度
    - 置信度最大类别作为最终类别

多分类学习 - 两种策略比较



多分类学习 – 两种策略比较

一对一

- 训练N(N-1)/2个分类器，存储开销和测试时间大
- 训练只用两个类的样例，训练时间短

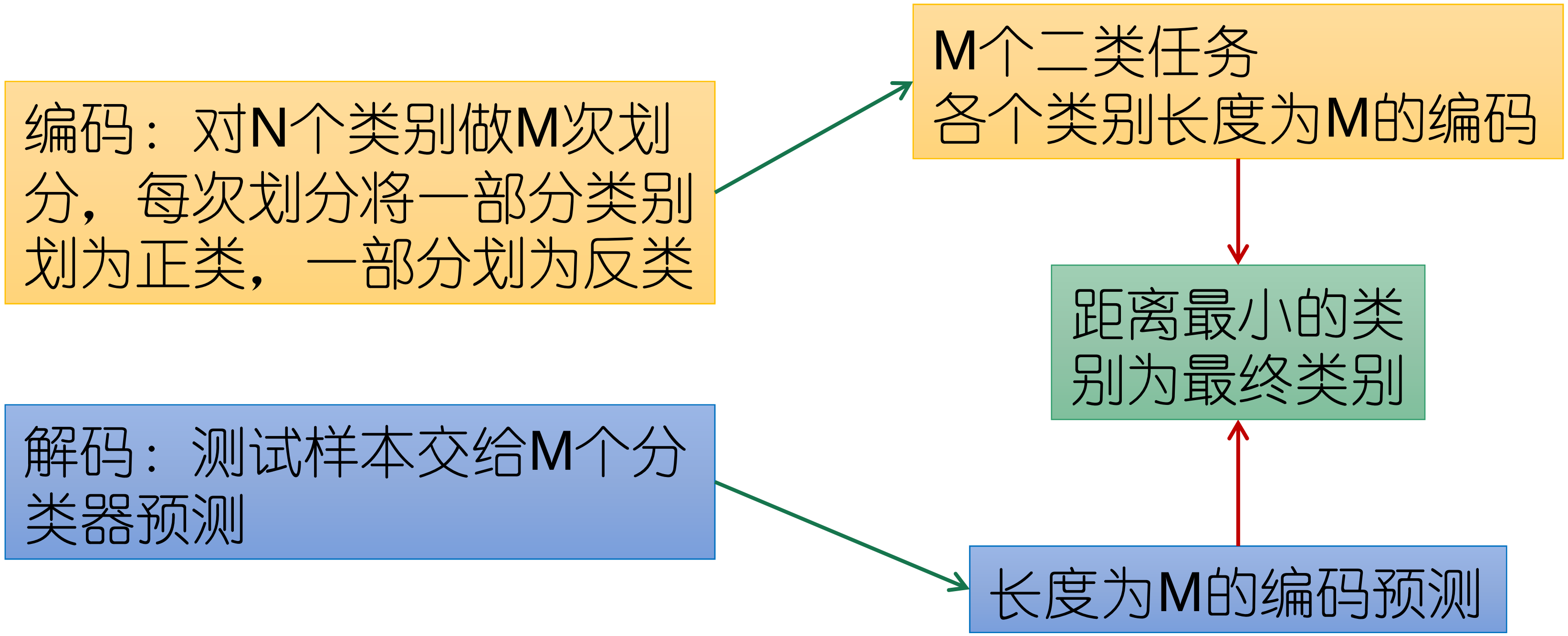
一对其余

- 训练N个分类器，存储开销和测试时间小
- 训练用到全部训练样例，训练时间长

预测性能取决于具体数据分布，多数情况下两者差不多

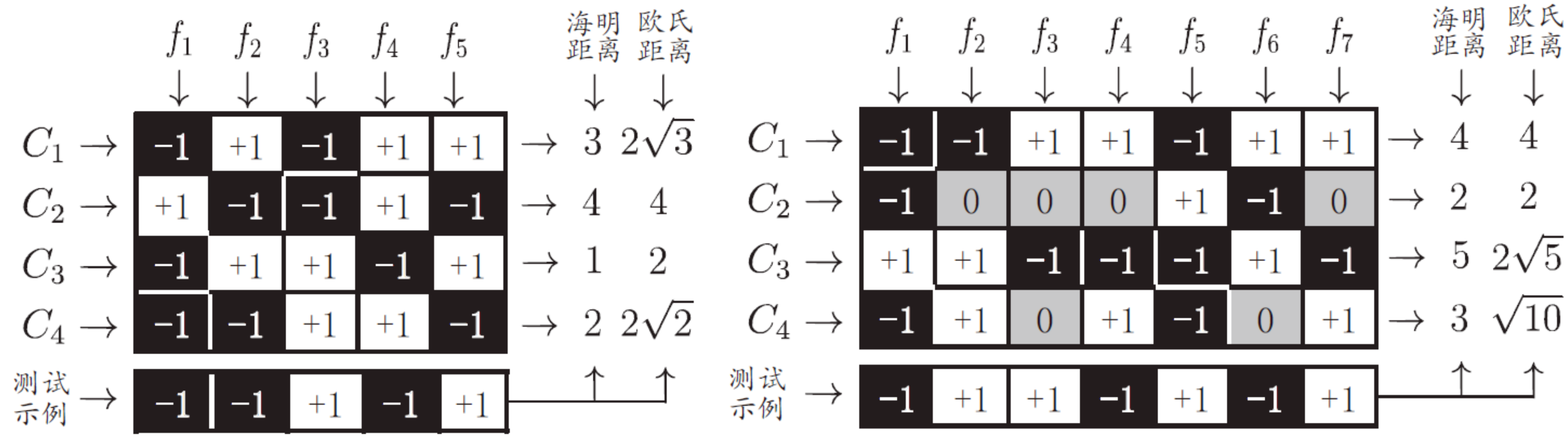
多分类学习 – 多对多

- 多对多（Many vs Many, MvM）
  - 若干类作为正类，若干类作为反类
- 纠错输出码（Error Correcting Output Code, ECOC）



多分类学习 – 多对多

- 纠错输出码(Error Correcting Output Code, ECOC)



(a) 二元 ECOC 码 [Dietterich and Bakiri,1995]

(b) 三元 ECOC 码 [Allwein et al. 2000]

- ECOC编码对分类器错误有一定容忍和修正能力，编码越长、纠错能力越强
- 对同等长度的编码，理论上来说，任意两个类别之间的编码距离越远，则纠错能力越强

类别不平衡问题

- 类别不平衡（class imbalance）
  - 不同类别训练样例数相差很大情况（正类为小类）

类别平衡正例预测 $\frac{y}{1-y} > 1$ ⟹ $\frac{y}{1-y} > \frac{m^+}{m^-}$ 正负类比例

- 再缩放
  - 欠采样（undersampling）
    - 去除一些反例使正反例数目接近（EasyEnsemble [Liu et al.,2009]）
  - 过采样（oversampling）
    - 增加一些正例使正反例数目接近（SMOTE [Chawla et al.2002]）
  - 阈值移动（threshold-moving）

优化提要

- 各任务下（回归、分类）各个模型优化的目标
  - 最小二乘法：最小化均方误差
  - 对数几率回归：最大化样本分布似然
  - 线性判别分析：投影空间内最小（大）化类内（间）散度

- 参数的优化方法
  - 最小二乘法：线性代数
  - 对数几率回归：凸优化梯度下降、牛顿法
  - 线性判别分析：矩阵论、广义瑞利商

总结

- 线性回归
  - 最小二乘法（最小化均方误差）
- 二分类任务
  - 对数几率回归
    - 单位阶跃函数、对数几率函数、极大似然法
  - 线性判别分析
    - 最大化广义瑞利商
- 多分类学习
  - 一对一
  - 一对其余
  - 多对多
    - 纠错输出码
- 类别不平衡问题
  - 基本策略：再缩放