

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

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

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
($x_1; x_2; \dots; x_d$)

- 向量形式

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

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



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

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

- 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



线性回归

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

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

- 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



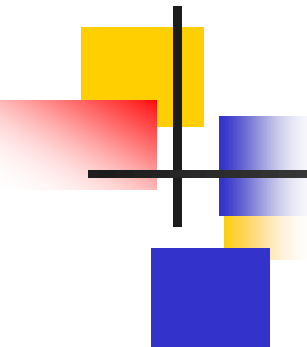
线性回归

- 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)

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



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

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

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

- 多元线性回归目标

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



多元线性回归

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

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

$$\mathbf{y} = (y_1; y_2; \cdots; y_m)$$



多元线性回归 – 最小二乘法

□ 最小二乘法 (least square method)

$$\hat{\boldsymbol{w}}^* = \arg \min_{\hat{\boldsymbol{w}}} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}^T) (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}})$$

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

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

令上式为零可得 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 最优解的闭式解

对于相同维度的两个列向量 u 和 v , 二者内积对任意维列向量 x 求导有:

$$\frac{d(u^T v)}{dx} = \frac{d(u^T)}{dx} v + \frac{d(v^T)}{dx} u.$$

因此:

$$\begin{aligned}\frac{d(x^T x)}{dy} &= \frac{d(x^T)}{dy} x + \frac{d(x^T)}{dy} x \\ &= 2 \frac{d(x^T)}{dy} x\end{aligned}$$

因此:

$$E\hat{w} = (y - X\hat{w})^T (y - X\hat{w})$$

$$\frac{\partial E\hat{w}}{\partial \hat{w}} = 2X^T(X\hat{w} - y)$$



多元线性回归 – 满秩讨论

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

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

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

$$f(\hat{\mathbf{x}}_i) = \hat{\mathbf{x}}_i^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

□ $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 不是满秩矩阵

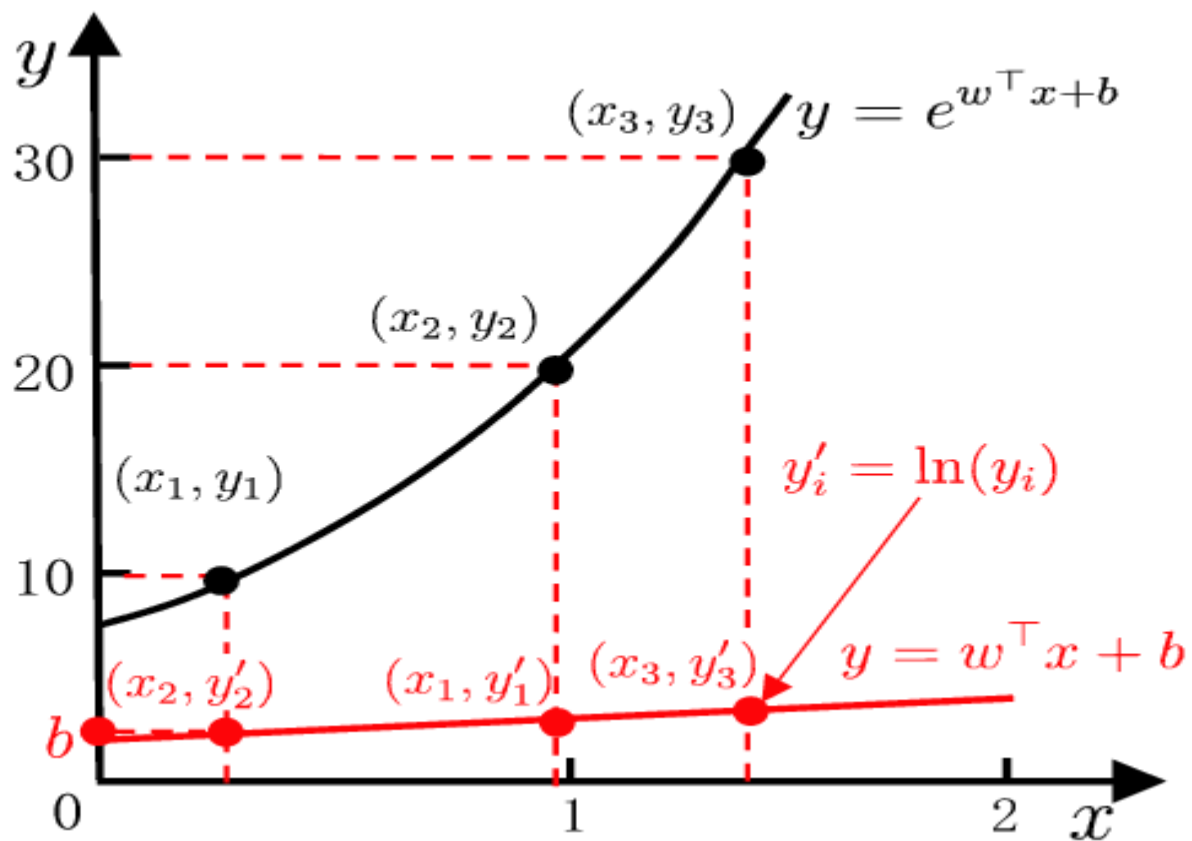
- 根据归纳偏好选择解 (参见1.4节)
- 引入正则化 (参见6.4节, 11.4节)

满秩：用初等变换将矩阵 A 化为阶梯形矩阵，则矩阵中非零行的个数定义为这个矩阵的秩，记为 $r(A)$ 。
若 $r(A) = n$ ， n 为方阵 A 的行和列数，
则 A 满秩。

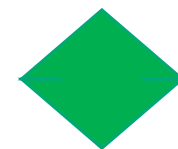
正定阵： n 阶方阵 A ，对于任何非零向量 x ，都有 $x^T A x > 0$ 。
则 A 为正定。

对数线性回归

- 输出标记的对数为线性模型逼近的目标



$$\ln y = w^T x + b$$



$$y = w^T x + b$$



线性回归 - 广义线性模型

- 一般形式

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

- $g(\cdot)$ 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

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

- 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

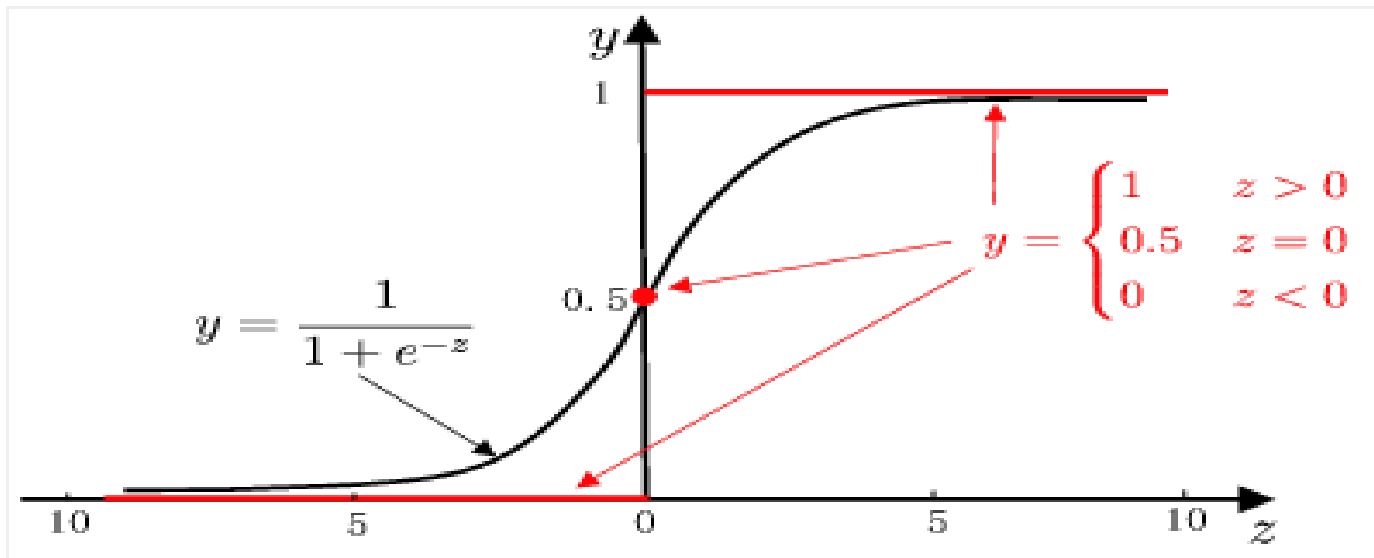
- 不连续

- 替代函数——对数几率函数 (logistic function)

- 单调可微、任意阶可导

单位阶跃函数与对数几率函数的比较

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





对数几率回归

- 运用对数几率函数

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

- 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

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

显然有

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

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



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 $\beta = (w; b)$ $\hat{x} = (x; 1)$, 则 $w^T x + b$ 可简写为 $\beta^T \hat{x}$

- 再令 $p_1(\hat{x}_i; \beta) = p(y = 1 \mid \hat{x}; \beta)$

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

则似然项可重写为

$$p(y_i \mid x_i; w_i, b) = y_i p_1(\hat{x}_i; \beta) + (1 - y_i) p_0(\hat{x}_i; \beta)$$

- 故等价形式为要最小化

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

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

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

其中 $\boldsymbol{\beta}$ 的一阶、二阶导数分别为

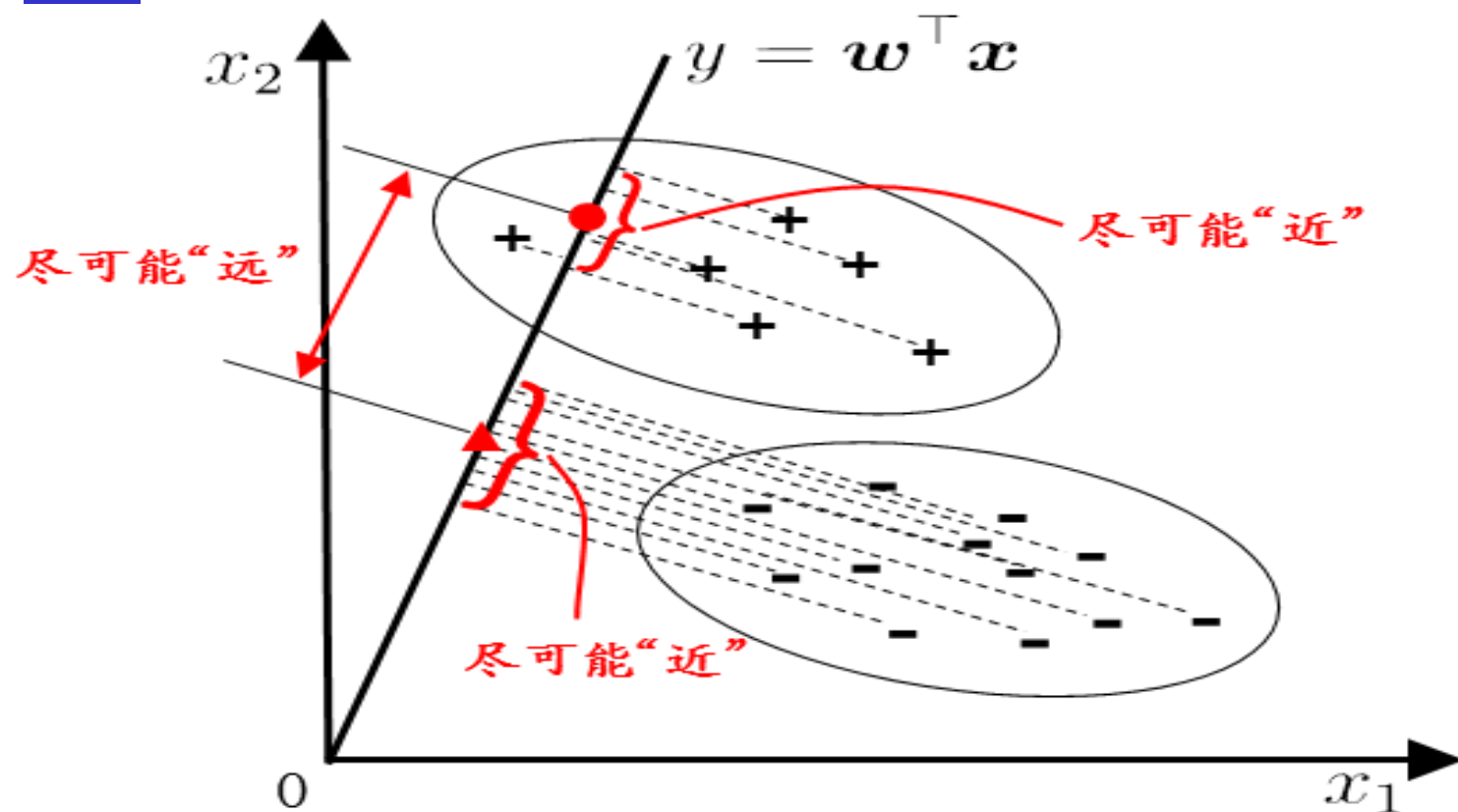
$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = - \sum_{i=1}^m \hat{\mathbf{x}}_i (y_i - p_1(\hat{\mathbf{x}}_i; \boldsymbol{\beta}))$$

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

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 μ_i
- 第 i 类示例的协方差矩阵 Σ_i
- 两类样本的中心在直线上的投影: $w^T \mu_0$ 和 $w^T \mu_1$
- 两类样本的协方差: $w^T \Sigma_0 w$ 和 $w^T \Sigma_1 w$



二分类任务 - 线性判别分析

- 最大化目标

$$\begin{aligned} J &= \frac{\|w^T \mu_0 - w^T \mu_1\|_2^2}{w^T \Sigma_0 w + w^T \Sigma_1 w} \\ &= \frac{w^T (\mu_0 - \mu_1) (\mu_0 - \mu_1)^T w}{w^T (\Sigma_0 + \Sigma_1) w} \end{aligned}$$

- 类内散度矩阵

$$S_w = \Sigma_0 + \Sigma_1$$

$$= \sum_{x \in X_0} (x - \mu_0) (x - \mu_0)^T + \sum_{x \in X_1} (x - \mu_1) (x - \mu_1)^T$$

- 类间散度矩阵 $S_b = (\mu_0 - \mu_1) (\mu_0 - \mu_1)^T$



二分类任务 - 线性判别分析

- 广义瑞利商 (generalized Rayleigh quotient)

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

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

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{w}} \quad & -\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{S}_b \boldsymbol{w} \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{S}_w \boldsymbol{w} = 1 \end{aligned}$$

- 运用拉格朗日乘子法 $\boldsymbol{S}_b \boldsymbol{w} = \lambda \boldsymbol{S}_w \boldsymbol{w}$

二分类任务 - 线性判别分析

- 同向向量

$$\underline{S_b w} = \lambda (\underline{\mu_0 - \mu_1})$$

同向向量

- 结果

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

- 求解

- 奇异值分解 $S_w = U \Sigma V^T$

- 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

$$\mathbf{S}_t = \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_w$$

$$= \sum_{i=1}^m (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

- 类内散度矩阵

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

其中

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

- 求解得

$$\mathbf{S}_b = \mathbf{S}_t - \mathbf{S}_w$$

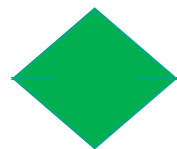
$$= \sum_{i=1}^N m_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

LDA推广 - 多分类任务

- 优化目标

$$\max_{\mathbf{W}} \frac{\text{tr}(\mathbf{W}^T \mathbf{S}_b \mathbf{W})}{\text{tr}(\mathbf{W}^T \mathbf{S}_w \mathbf{W})}$$

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



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

\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

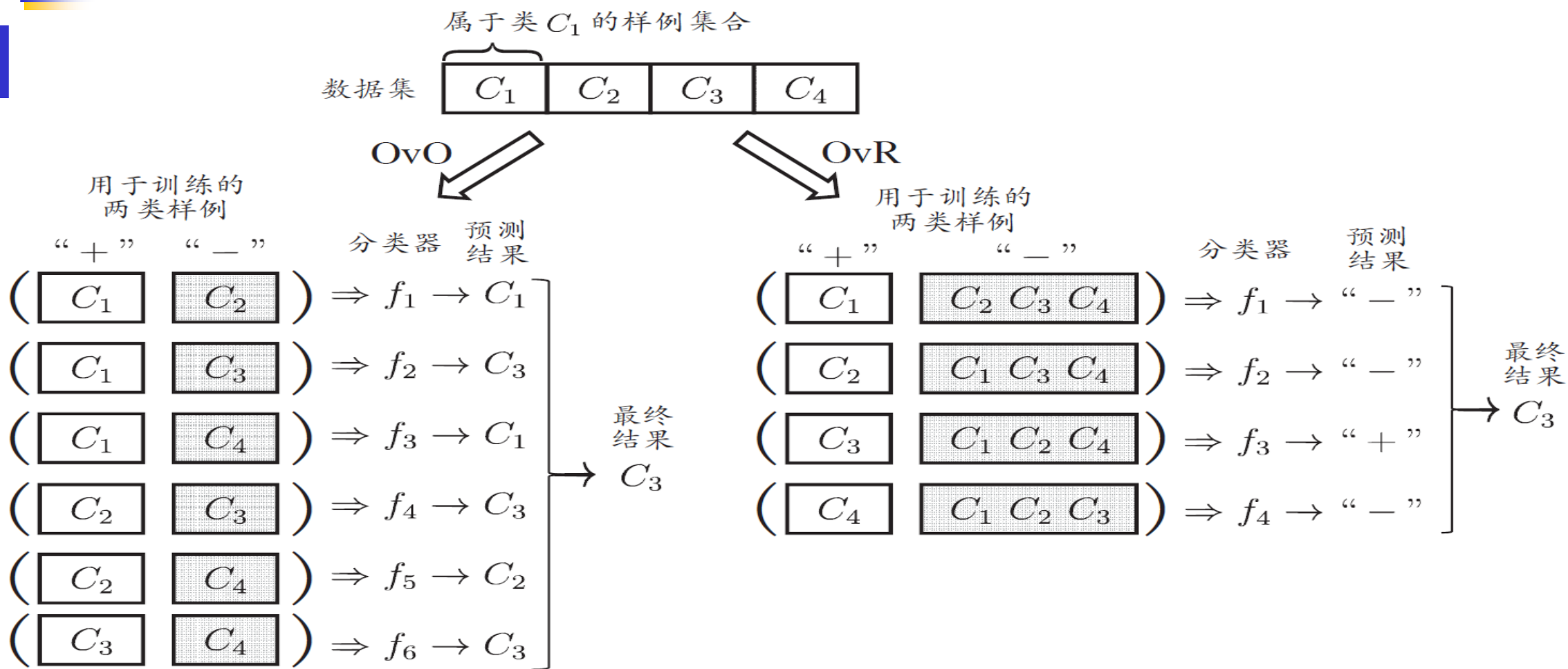
- 任务拆分

- 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)

编码：对N个类别做M次划分，每次划分将一部分类别划为正类，一部分划为反类

M个二类任务
各个类别长度为M的编码

解码：测试样本交给M个分类器预测

距离最小的类别为
最终类别

长度为M的编码预测

多分类学习 - 多对多

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

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	海明距离	欧氏距离
	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
$C_1 \rightarrow$	-1	+1	-1	+1	+1	3	$2\sqrt{3}$
$C_2 \rightarrow$	+1	-1	-1	+1	-1	4	4
$C_3 \rightarrow$	-1	+1	+1	-1	+1	1	2
$C_4 \rightarrow$	-1	-1	+1	+1	-1	2	$2\sqrt{2}$
测试示例 \rightarrow	-1	-1	+1	-1	+1	↑	↑

(a) 二元 ECOC 码

[Dietterich and Bakiri,1995]

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	海明距离	欧氏距离
	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
$C_1 \rightarrow$	-1	-1	+1	+1	-1	+1	+1	4	4
$C_2 \rightarrow$	-1	0	0	0	+1	-1	0	2	2
$C_3 \rightarrow$	+1	+1	-1	-1	-1	+1	-1	5	$2\sqrt{5}$
$C_4 \rightarrow$	-1	+1	0	+1	-1	0	+1	3	$\sqrt{10}$
测试示例 \rightarrow	-1	+1	+1	-1	+1	-1	+1	↑	↑

(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