机器学习2024
第2节

涉及知识点：
线性回归、梯度更新方式、线性回归矩阵形式、泛线性模型、最大似然估计、逻辑回归、分类指标、逻辑回归的实践

线性模型

张伟楠 – 上海交通大学

课程安排

参数化有监督学习

1. 机器学习概述
2. 线性模型
3. 双线性模型
4. 神经网络

非参数化有监督学习

5. 支持向量机
6. 决策树
7. 集成学习与森林模型

无监督学习部分

8. 概率图模型
9. 无监督学习

学习理论部分

10. 学习理论与模型选择

前沿话题部分

11. 迁移、多任务、元学习
12. System 1&2 机器意识

线性回归

张伟楠 – 上海交通大学

线性判别模型

判别模型

- 性质
  - 建模预测变量和观测变量之间的关系
  - 也称作条件模型(Conditional Models)
- 分类
  - 确定性判别模型：$y = f_\theta(x)$
  - 概率判别模型：$p_\theta(y|x)$

本节集中介绍线性判别模型(linear regression)

线性判别模型

判别模型

- 性质
  - 建模预测变量和观测变量之间的关系
  - 也称作条件模型(Conditional Models)
- 分类
  - 确定性判别模型：$y = f_\theta(x)$
  - 概率判别模型：$p_\theta(y|x)$

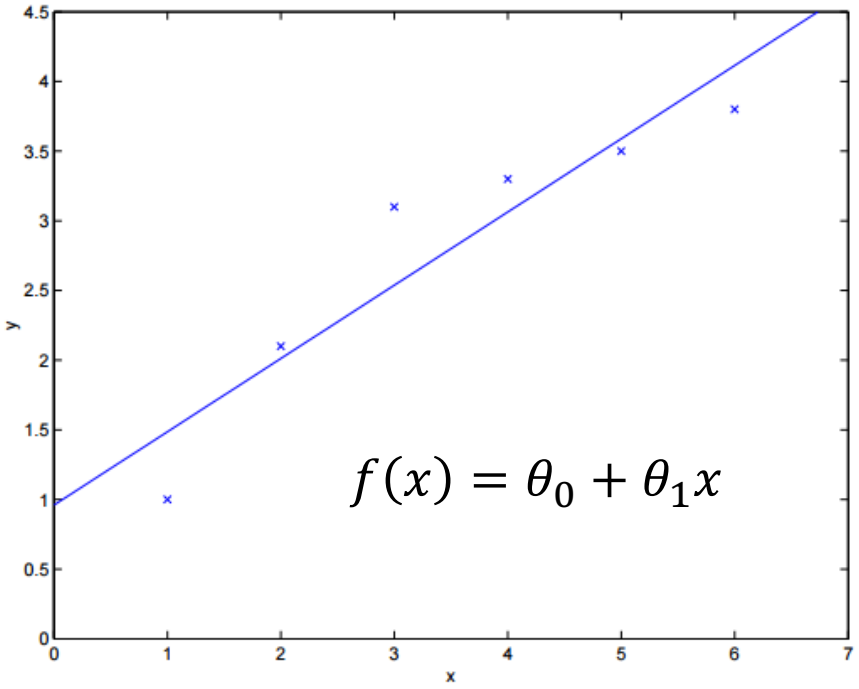
线性判别模型(linear regression)

$$y = f_\theta(x) = \theta_0 + \sum_{j=1}^{d} \theta_j x_j = \theta^\top x$$

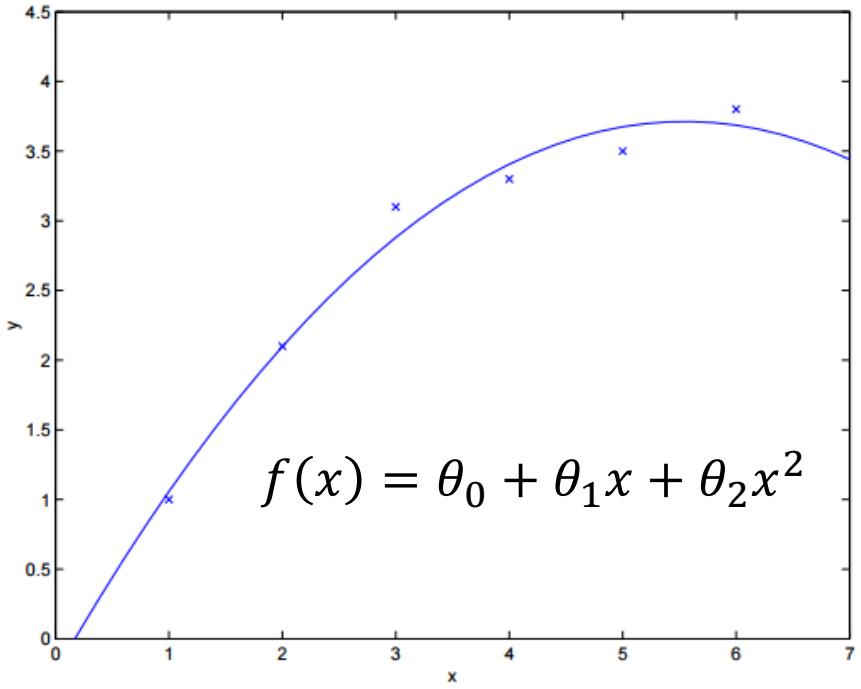
$$x = (1, x_1, x_2, \cdots, x_d)$$

线性回归

- 一维的线性回归和二次回归（都是线性模型）



线性回归

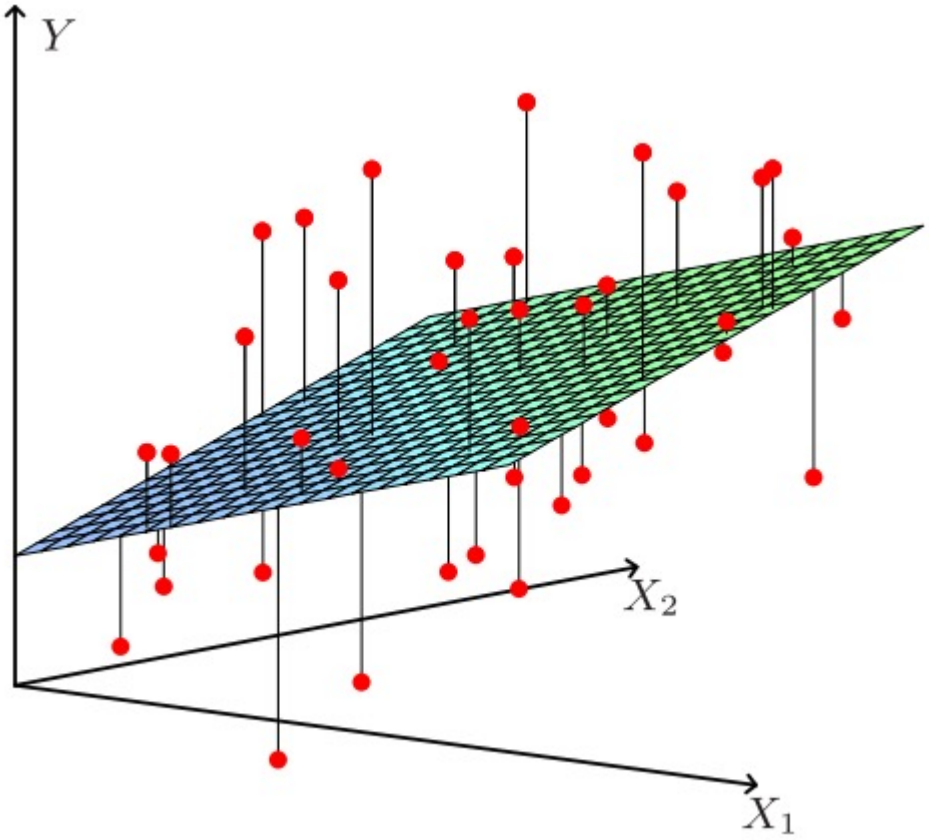


二次回归
(一种广义线性模型)

线性回归

- 二维的线性回归模型

$$f(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$



学习目标

- 使预测值和真实值的距离越近越好

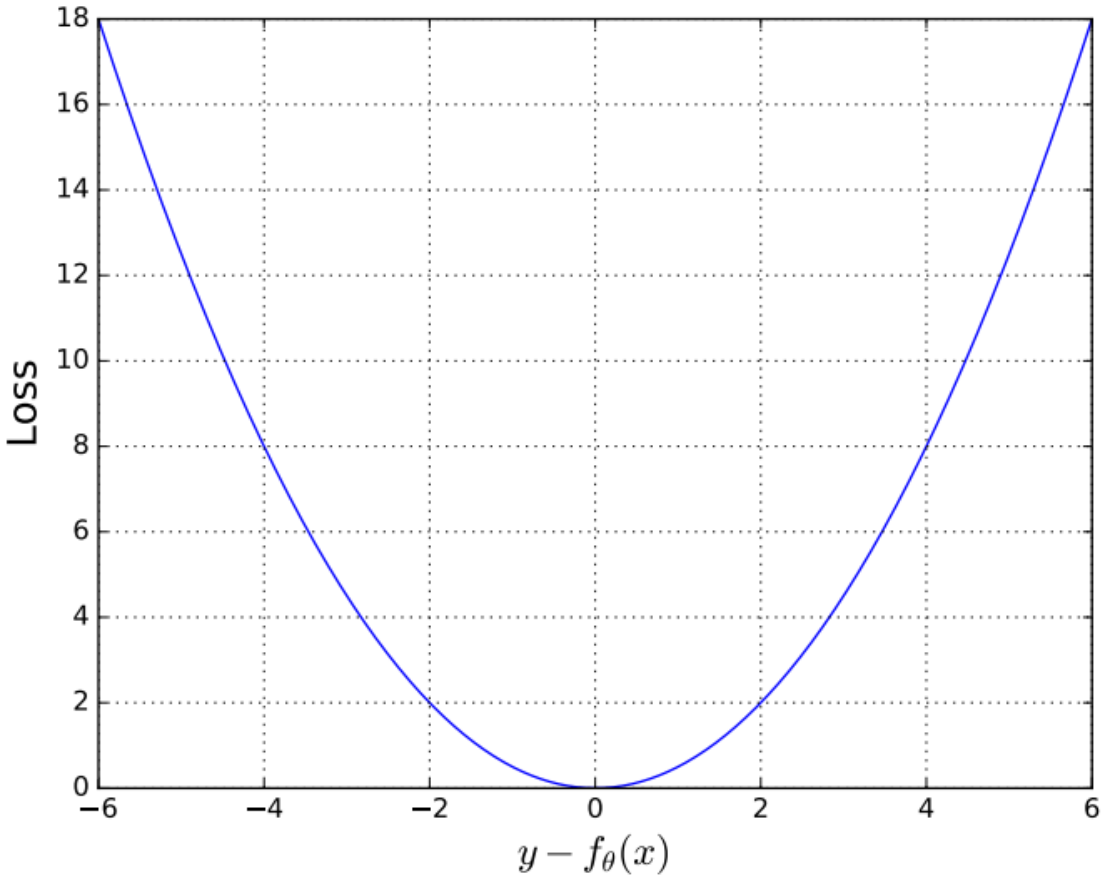
$$\min_{\theta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}(y_i, f_\theta(x_i))$$

- 损失函数$\mathcal{L}(y_i, f_\theta(x_i))$ 测量预测值和真实值之间的误差，越小越好
- 具体损失函数的定义依赖于具体的数据和任务
- 最广泛使用的损失回归函数：平方误差(squared loss)

$$\mathcal{L}\left(y_i, f_\theta(x_i)\right) = \frac{1}{2}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)^2$$

平方误差

$$\mathcal{L}\left(y_i, f_\theta(x_i)\right) = \frac{1}{2}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)^2$$

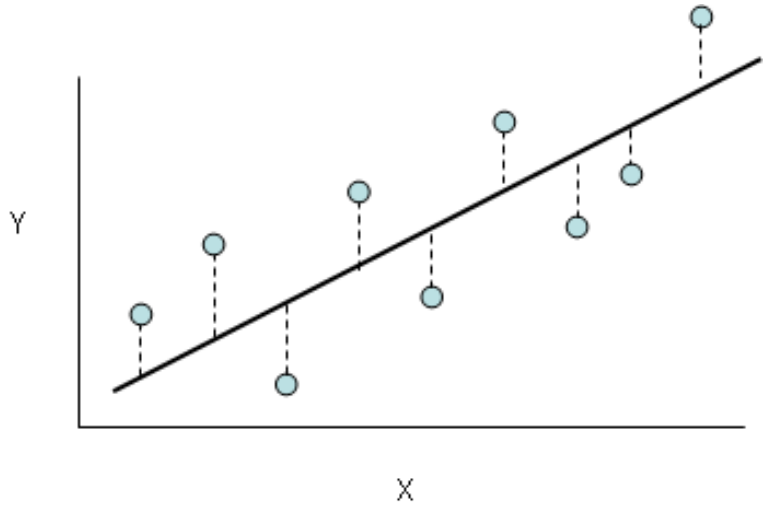


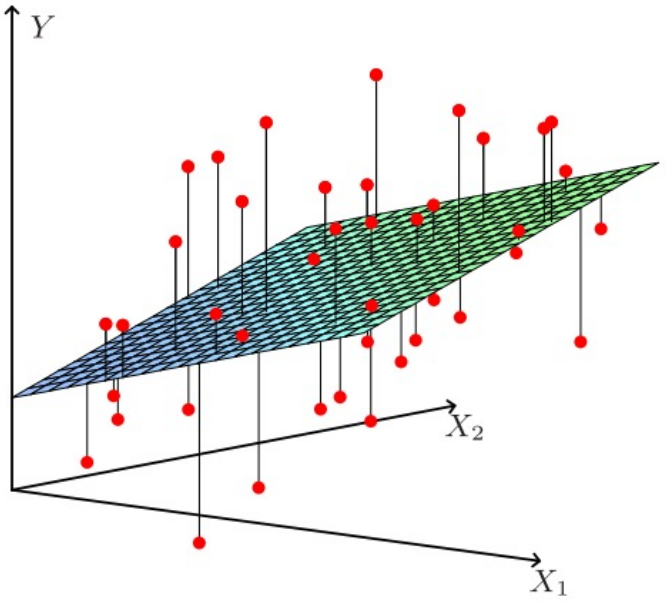
- 对预测误差大的有更大的惩罚
- 容忍很小的预测误差
  - 观测误差等
  - 提升模型的泛化能力

最小均方误差回归

- 优化目标是最小化训练数据上的均方误差

$$J_\theta = \frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)^2 \qquad \min_\theta J_\theta$$

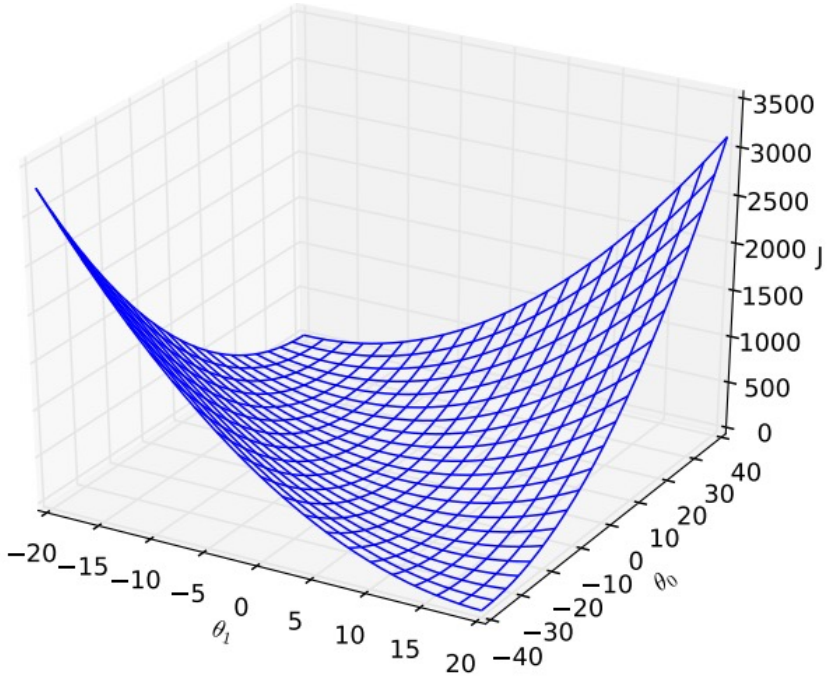


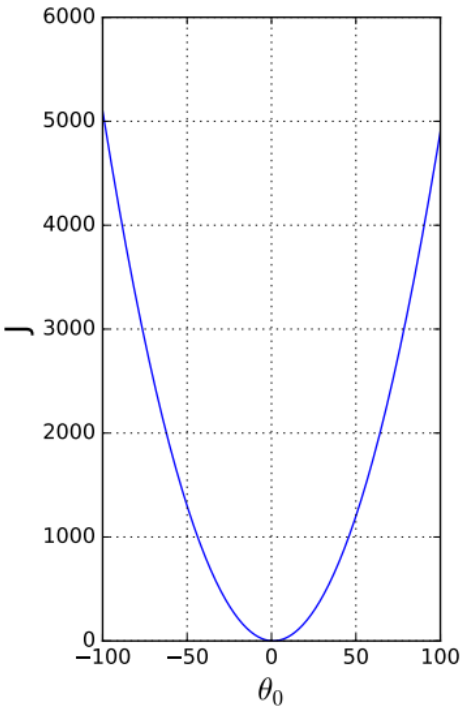


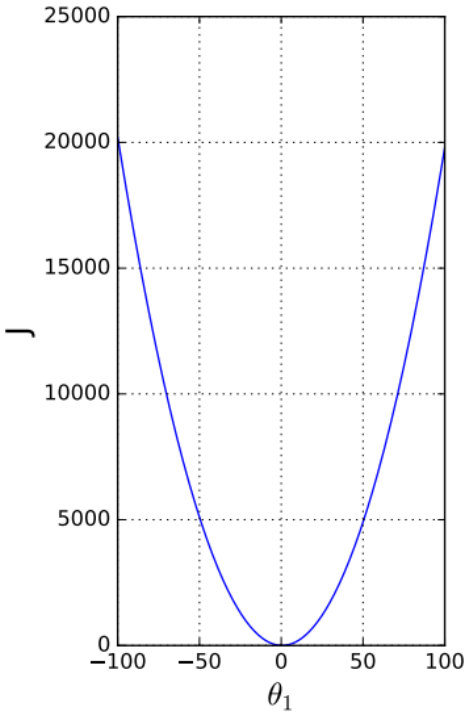
最小化目标函数

- 举一个$N = 1$的简单示例，对于数据点$(x, y) = (2,1)$

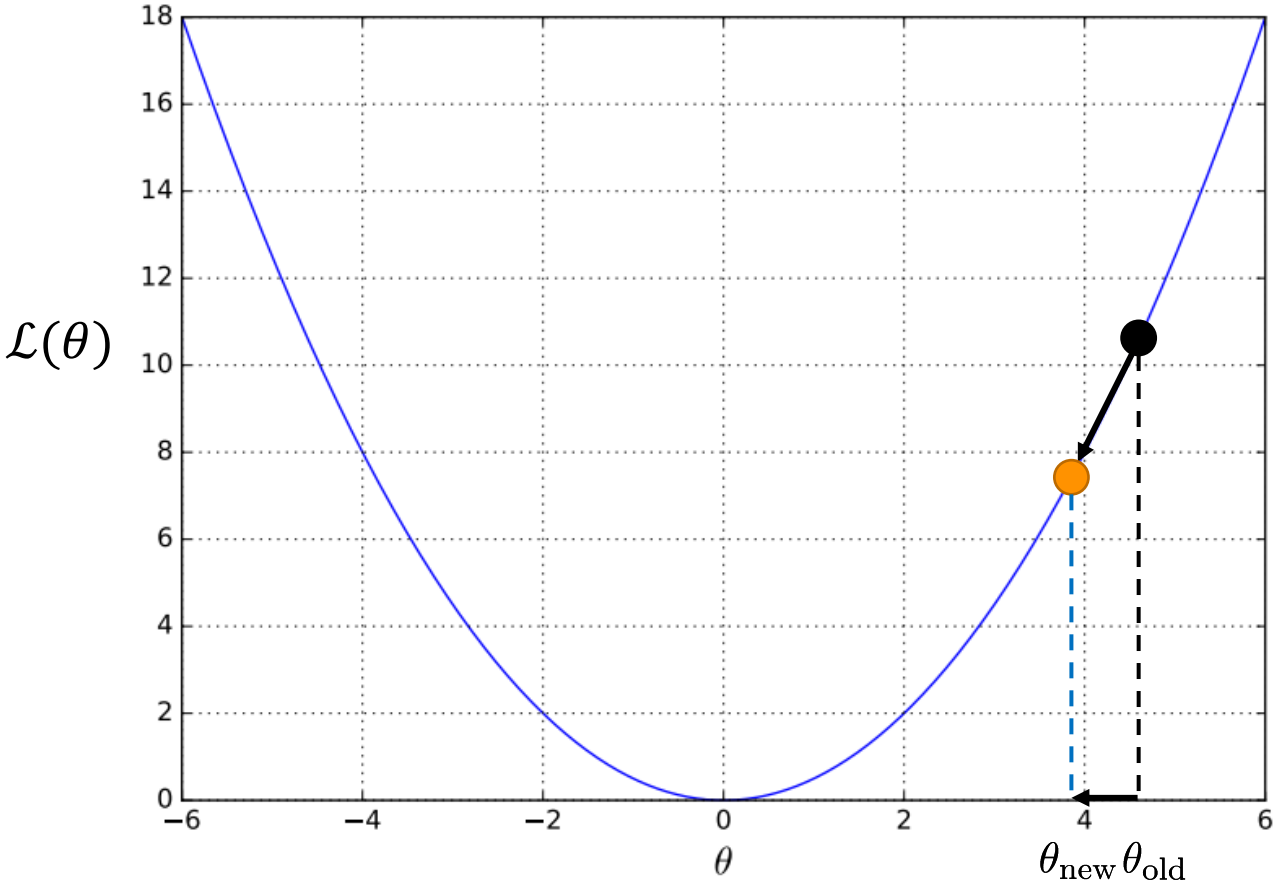
$$J(\theta) = \frac{1}{2}(y - \theta_0 - \theta_1 x)^2 = \frac{1}{2}(1 - \theta_0 - 2\theta_1)^2$$







梯度学习方法



$$\theta_{\text{new}} \leftarrow \theta_{\text{old}} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \theta}$$

梯度更新方式

张伟楠 – 上海交通大学

目录

Contents


01
批量梯度下降

批量梯度下降

- 优化目标

$$J(\theta) = \frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)^2 \qquad \min_\theta J(\theta)$$

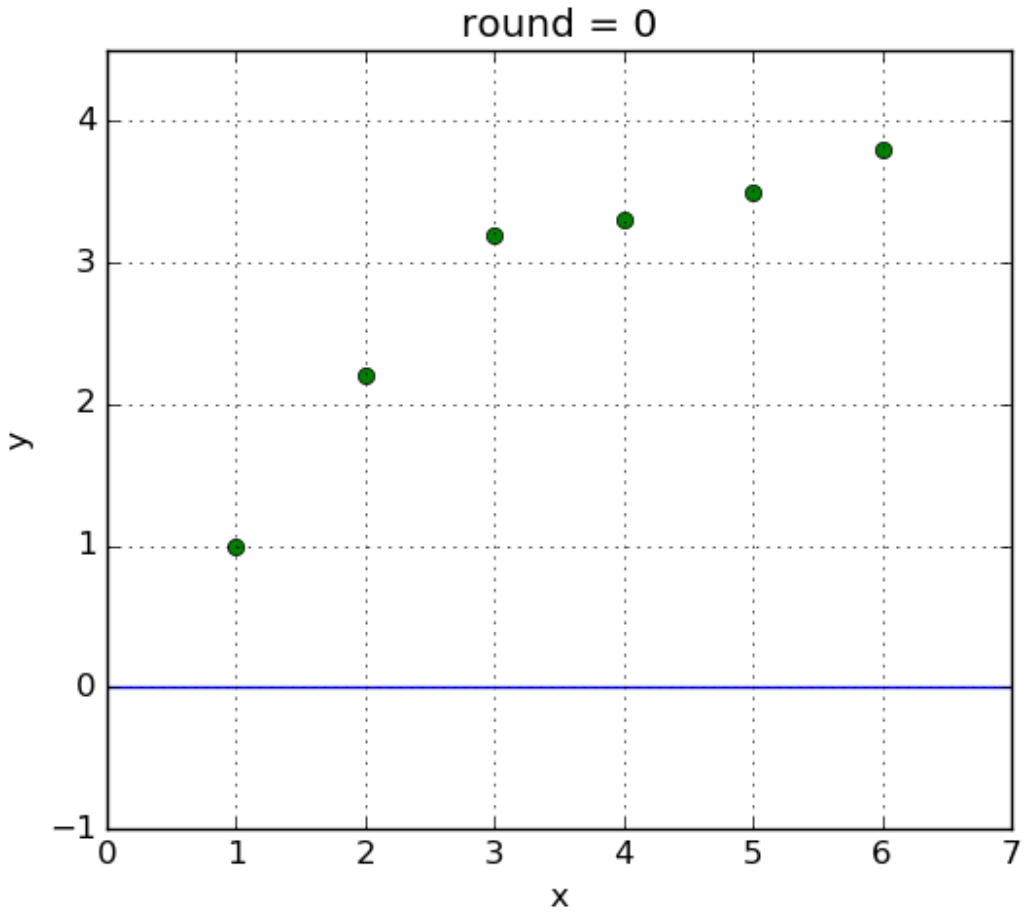
- 根据整个批量数据的梯度更新参数 $\theta_{\text{new}} \leftarrow \theta_{\text{old}} - \eta\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta}$

$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial\theta} = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)\frac{\partial f_\theta(x_i)}{\partial\theta}\right)$$

$$= -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)x_i$$

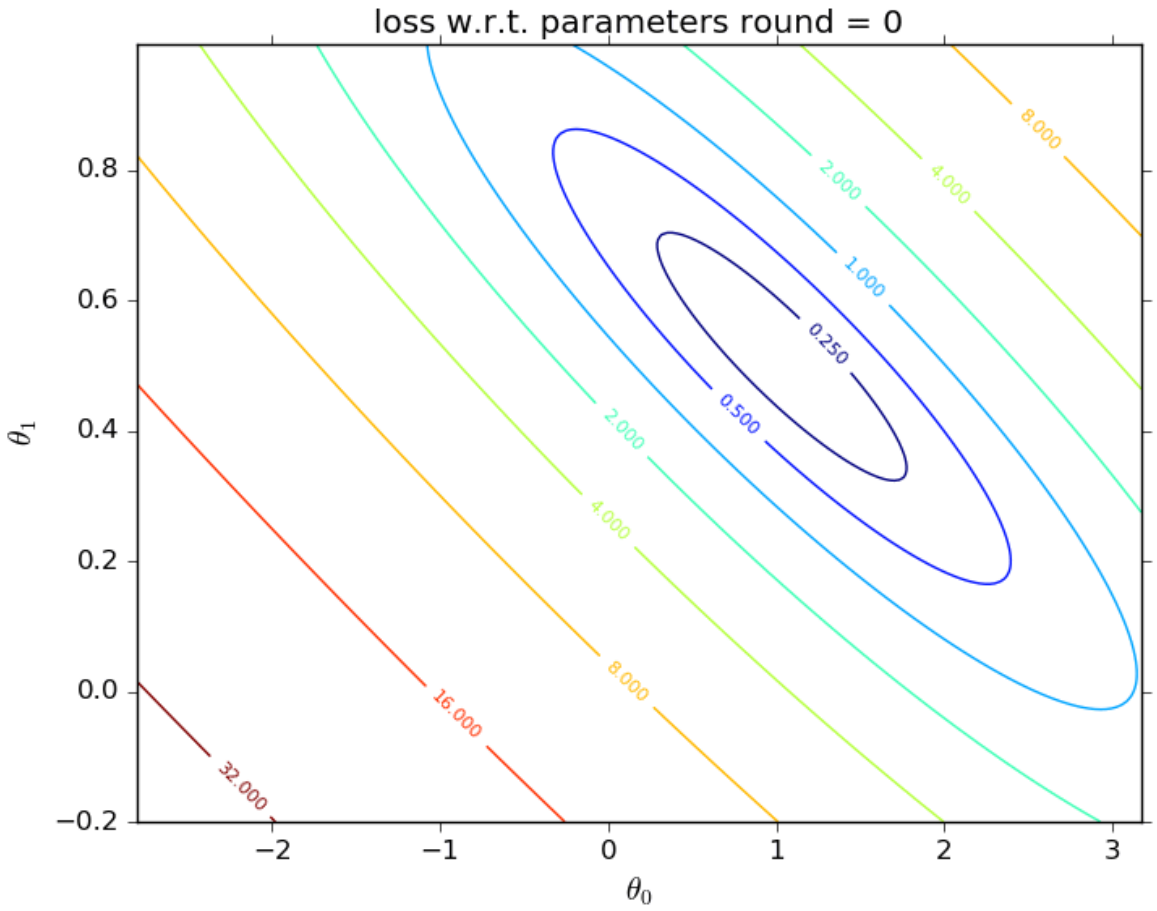
$$\theta_{\text{new}} = \theta_{\text{old}} + \eta\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)x_i$$

线性模型学习展示 - 函数曲线



$$f(x) = \theta_0 + \theta_1 x$$

线性模型学习展示 – 参数改变



批量梯度更新


02
随机梯度下降

随机梯度下降

- 优化目标

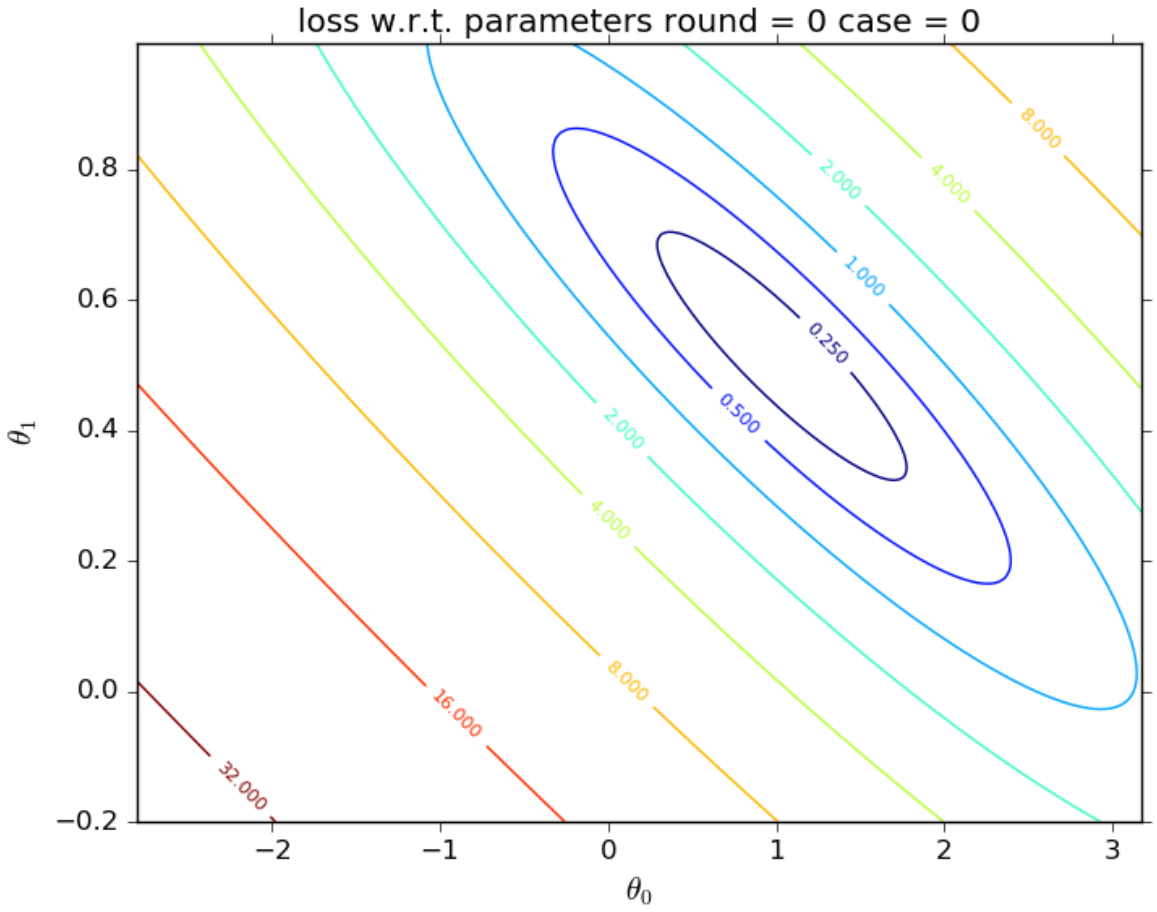
$$J^{(i)}(\theta) = \frac{1}{2}\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)^2 \qquad \min_\theta \frac{1}{N}\sum_i J^{(i)}(\theta)$$

- 根据整个批量数据的梯度更新参数 $\theta_{\text{new}} = \theta_{\text{old}} - \eta \frac{\partial J^{(i)}(\theta)}{\partial \theta}$

$$\frac{\partial J^{(i)}(\theta)}{\partial \theta} = -\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)\frac{\partial f_\theta(x_i)}{\partial \theta}$$
$$= -(\, y_i - f_\theta(x_i))\, x_i$$
$$\theta_{\text{new}} = \theta_{\text{old}} + \eta\left(y_i - f_\theta(x_i)\right)x_i$$

- 对比批量梯度下降
  - 更快地更新参数(优点)
  - 学习中不确定性或震荡(缺点)

线性模型学习展示 – 参数改变



随机梯度更新

03
小批量梯度下降

小批量梯度下降

算法思想

批量梯度下降和随机梯度下降的结合

训练步骤

- 将整个训练集分成 K个小批量（mini-batches）

$$\{1,2,3,\cdots,K\}$$

- 对于每一个小批量 k, 做一步批量下降来降低

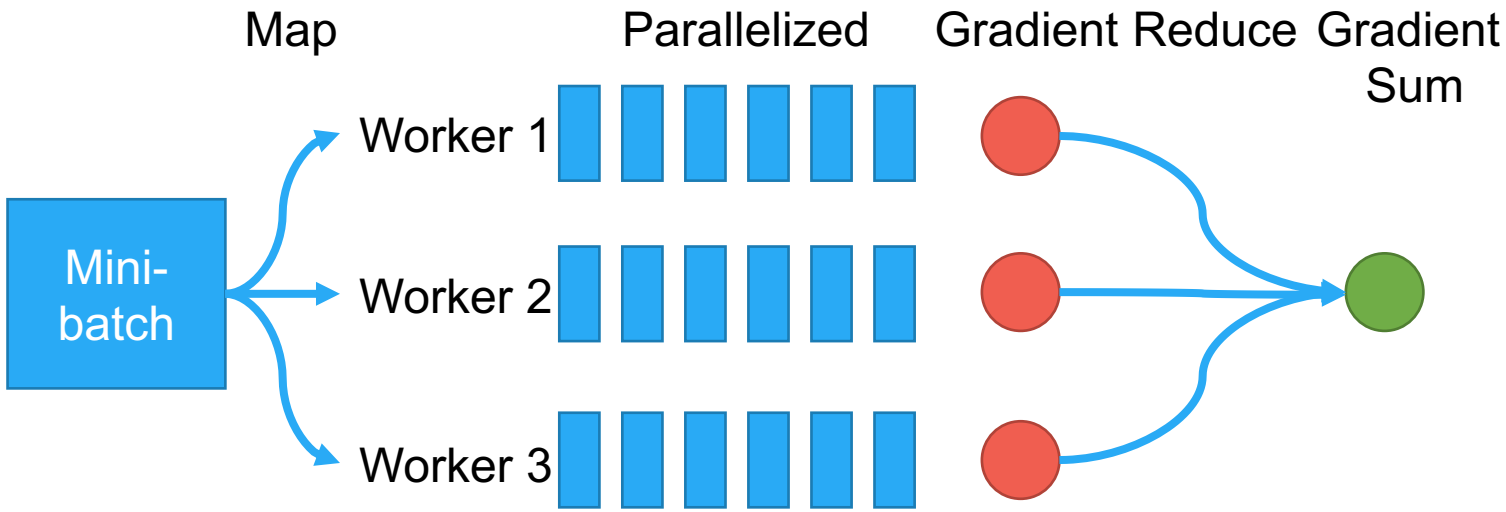
$$J^{(k)}(\theta)=\frac{1}{2N_k}\sum_{i=1}^{N_k}\left(y_i-f_\theta(x_i)\right)^2$$

- 对于每一个小批量，更新参数 $\theta_{\text{new}} = \theta_{\text{old}}-\eta\frac{\partial J^{(k)}(\theta)}{\partial\theta}$

小批量梯度下降

优点

- 结合了批量梯度下降和随机梯度下降的优点
  - 批量梯度下降的优秀的稳定性
  - 随机梯度下降的快速更新
- 小批量梯度下降很适合使用在并行化计算中
  - 将每个小批量数据进一步切分，每个线程分别计算梯度，最后再加和这些梯度

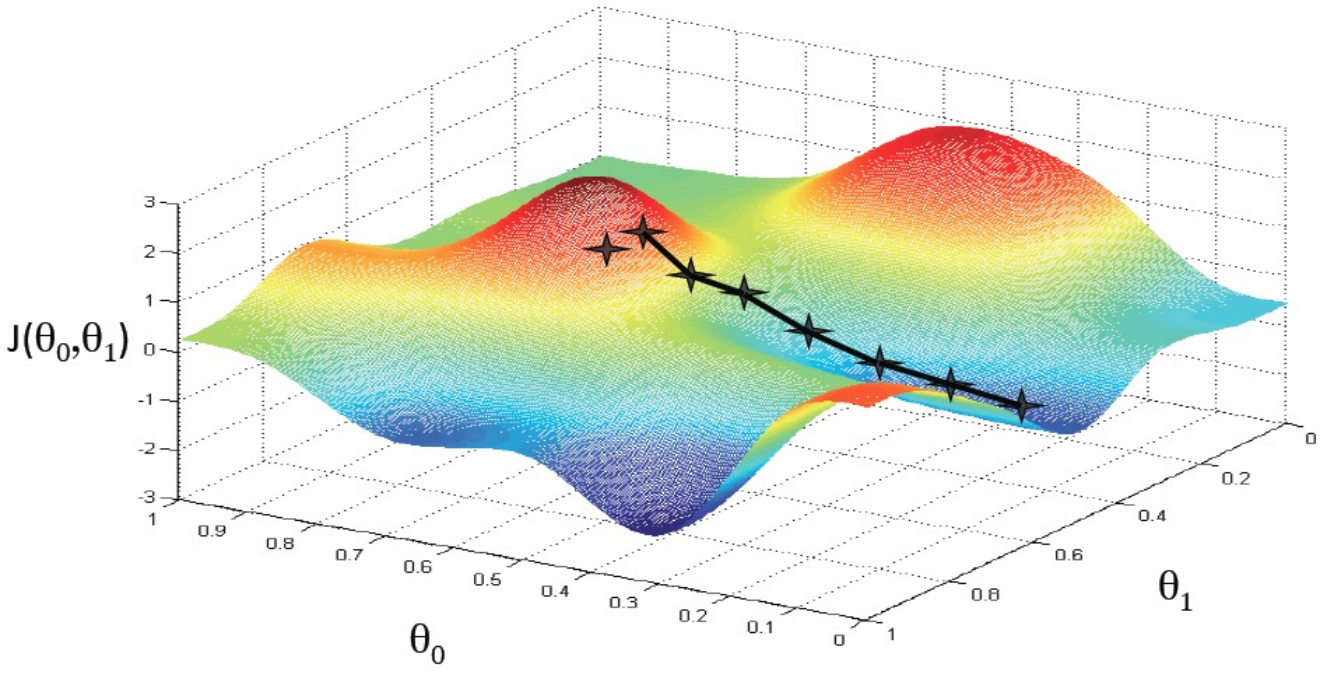


04

基本搜索步骤

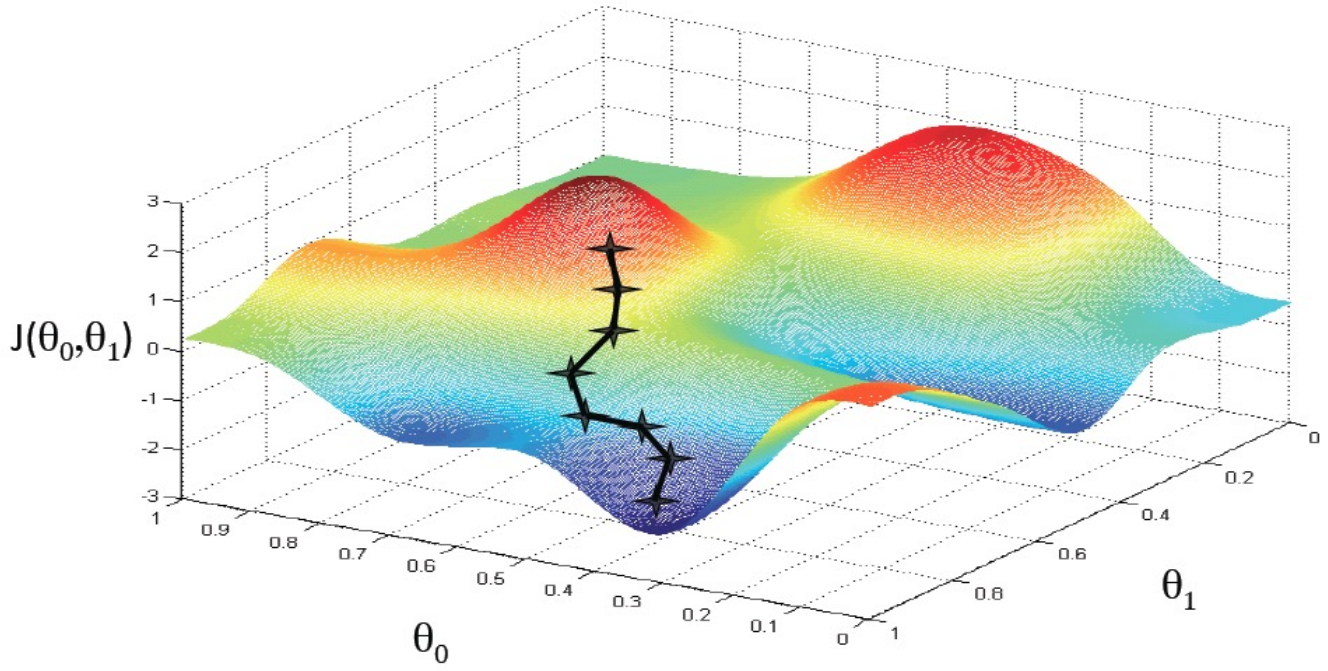
基本搜索步骤

- 随机选择一个参数初始化 θ
- 根据数据和梯度算法来更新 θ
- 直到走到局部一个最小区域(local minimum)

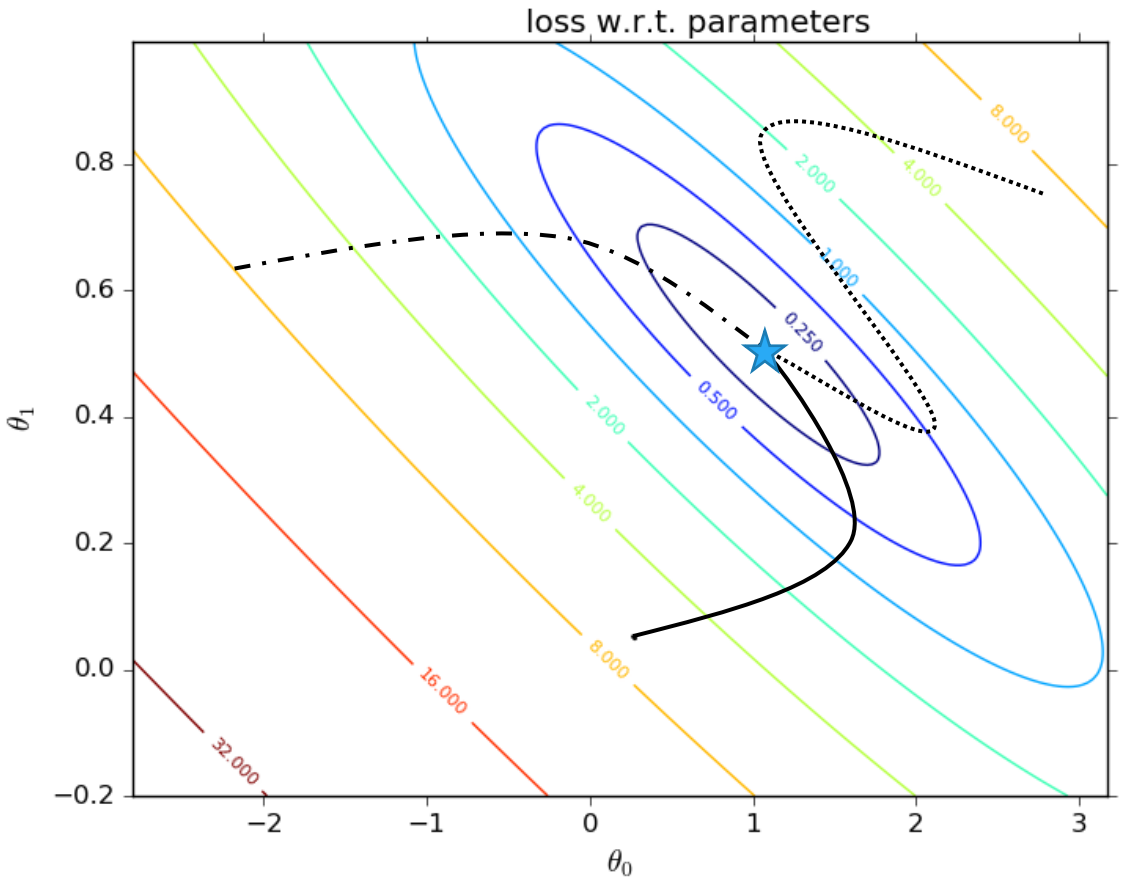


基本搜索步骤

- 随机选择一个新的参数初始化 θ
- 根据数据和梯度算法来更新 θ
- 直到走到局部一个最小区域(local minimum)



凸优化目标函数具有唯一最小点



- 不同的初始化参数最终也会学习到相同的最优值

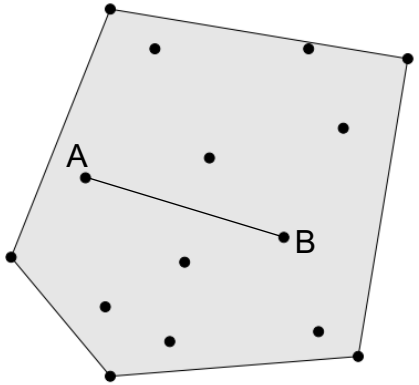
凸集 (Convex Set)

凸集的定义

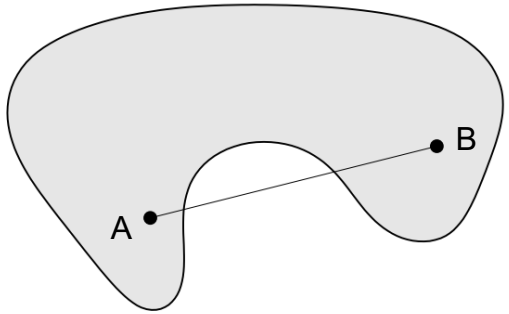
一个点集S被称为凸集，当且仅当该S里的任意两点A和B的连线上任意一点同样属于S

$$tx_1 + (1-t)x_2 \in S$$

$$\text{for all } x_1, x_2 \in S, 0 \leq t \leq 1$$



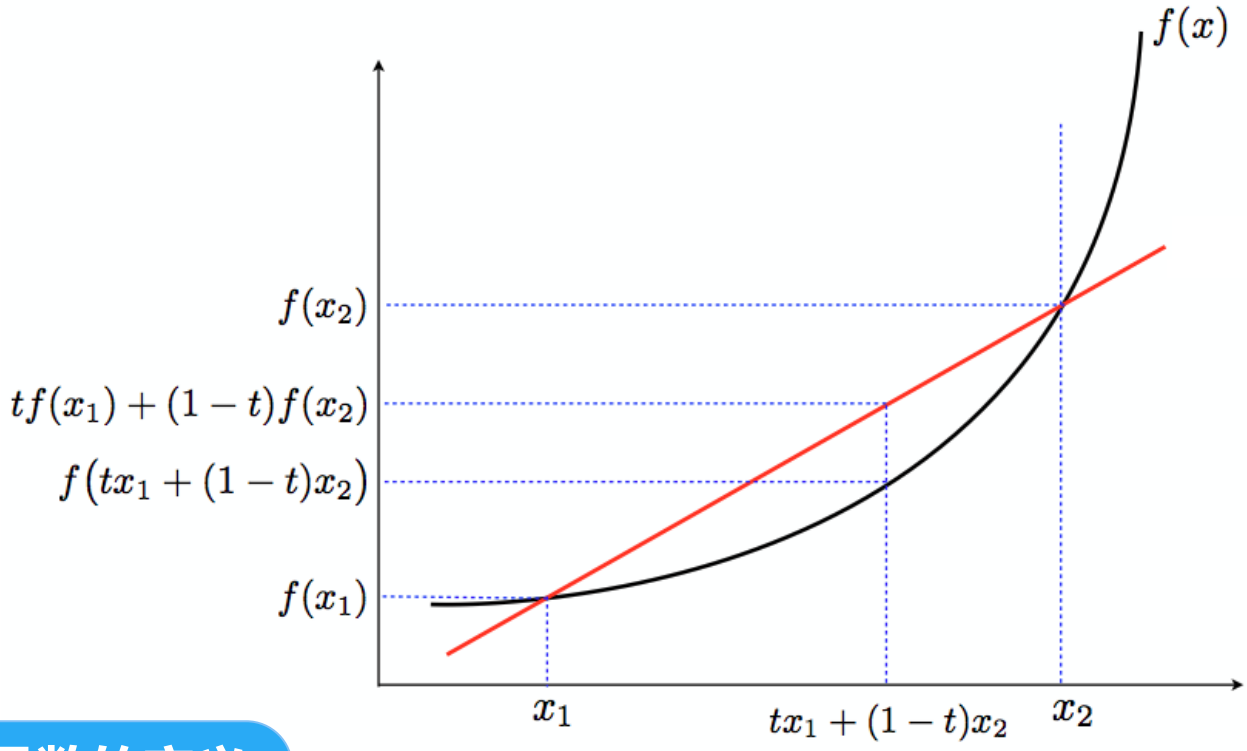
凸集



非凸集

Boyd, Stephen, and Lieven Vandenberghe. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.

凸函数 (Convex Function)



凸函数的定义

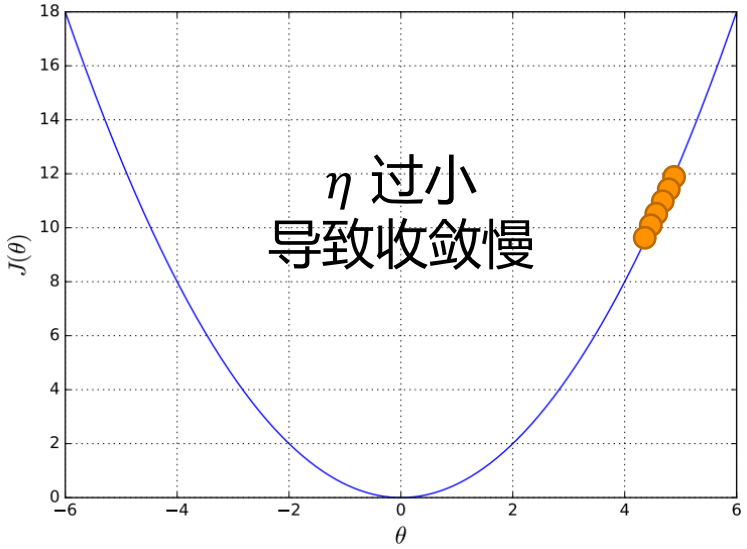
$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是凸函数: $\mathbf{dom}\ f$ 是一个凸集，并且满足

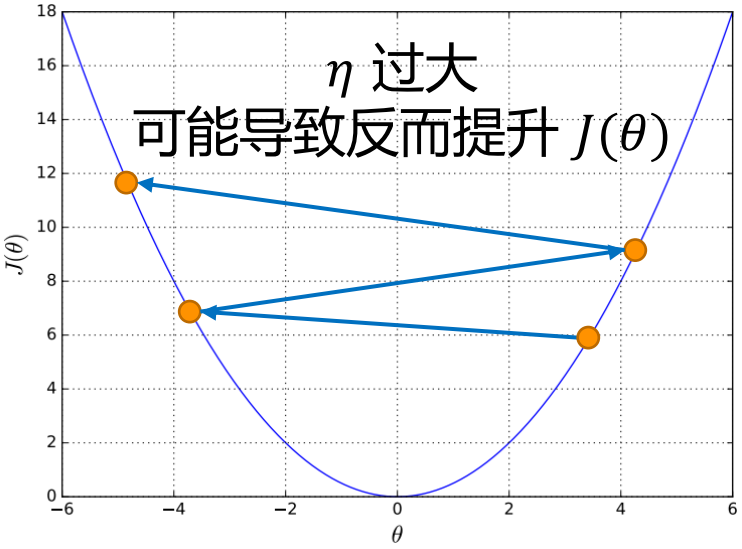
$$f(tx_1+(1-t)x_2) \le tf(x_1)+(1-t)f(x_2)$$

$$\forall x_1, x_2 \in \mathbf{dom} f, 0 \le t \le 1$$

学习率的选择

$$\theta_{\text{new}} = \theta_{\text{old}} - \eta \frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta}$$





- 初始点可能距离最优点太远，从而导致收敛速度慢

- 可能越过最优点
- 可能无法收敛
- 甚至可能发散

- 要检查梯度下降是否有效工作，可以打印出每几个迭代得到的损失 $J(\theta)$, 如果发现 $J(\theta)$ 并没有正常地下降，调整学习率 η

线性回归矩阵形式

张伟楠 – 上海交通大学

从代数视角来看线性回归

训练数据矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \cdots & x_d^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & & x_d^{(2)} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \cdots & x_d^{(n)} \end{pmatrix} \quad \text{参数 } \boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_d \end{pmatrix} \quad \text{标签 } \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

预测

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{\theta} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{\theta} \end{pmatrix}$$

目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta})$$

线性回归的矩阵形式

目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})$$

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

$$= \frac{1}{2}(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - (\boldsymbol{X\theta})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta} + (\boldsymbol{X\theta})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} - (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta}$$

对参数向量的梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta}$$

最优参数求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta}$$

$$\rightarrow \boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

向量梯度法则

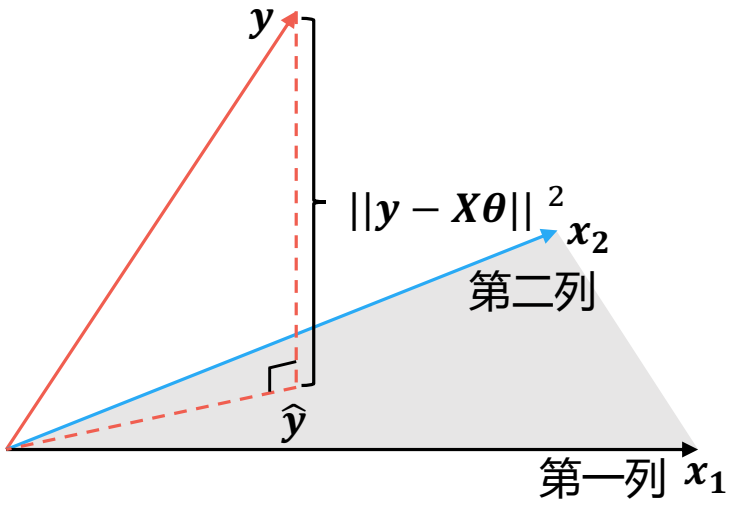
$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{x} \qquad \frac{\partial \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{A} \qquad \frac{\partial \boldsymbol{\theta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A\theta}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{\theta}$$

线性回归的矩阵形式

预测值 $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{y}$$

$\boldsymbol{H}$:帽子矩阵



几何解释

- 数据矩阵的列向量$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_d]$张成一个 $\mathbb{R}^n$ 上的子空间
- $\boldsymbol{H}$就是将标签向量$\boldsymbol{y}$投影到该子空间的映射

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \cdots & x_d^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & & x_d^{(1)} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \cdots & x_d^{(n)} \end{pmatrix} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_d] \qquad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$X^T X$为奇异矩阵的情况

- 当数据矩阵的一些列向量线性相关时
  - 例如$\boldsymbol{x}_2 = 3\boldsymbol{x}_1$
- $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$为奇异矩阵，所以$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$无法被直接计算。

解决方案

- 正则化（Regularization）

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta}) + \frac{\boldsymbol{\lambda}}{\boldsymbol{2}}||\boldsymbol{\theta}||_{\boldsymbol{2}}^{\boldsymbol{2}}$$

带正则项的线性回归矩阵形式

优化目标

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})^{\top}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta}) + \frac{\lambda}{2}||\boldsymbol{\theta}||_2^2 \qquad \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

对参数向量的梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{X}^{\top}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta}) + \lambda\boldsymbol{\theta}$$

最优参数求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow -\boldsymbol{X}^{\top}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta}) + \lambda\boldsymbol{\theta} = 0$$

$$\rightarrow \boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{\theta}$$

$$\rightarrow \widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X} + \lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{y}$$

泛线性模型

张伟楠 – 上海交通大学

回顾：线性回归

训练数据矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)} \\ \boldsymbol{x}^{(2)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & x_3^{(1)} & \cdots & x_d^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & x_3^{(2)} & \cdots & x_d^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & x_3^{(n)} & \cdots & x_d^{(n)} \end{bmatrix}$$ 参数$\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_d \end{bmatrix}$ 标签$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$

预测

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}^{(1)}\boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{x}^{(2)}\boldsymbol{\theta} \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}^{(n)}\boldsymbol{\theta} \end{bmatrix}$$

目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\theta})$$

回顾：线性回归的矩阵形式

目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta}) \qquad \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

对参数向量的梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})$$

最优参数求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta}) = 0$$
$$\rightarrow \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X\theta}$$
$$\rightarrow \widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

泛线性模型

相关关系(Dependence)

$$y = f(\theta^{\top}\phi(x))$$

- 特征映射函数 $\phi(x)\colon \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^h$
- 特征映射矩阵 $\Phi_{n\times h}$

$$\boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} \phi(x^{(1)}) \\ \phi(x^{(2)}) \\ \vdots \\ \phi(x^{(i)}) \\ \vdots \\ \phi(x^{(n)}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1(x^{(1)}) & \phi_2(x^{(1)}) & \cdots & \phi_h(x^{(1)}) \\ \phi_1(x^{(2)}) & \phi_2(x^{(2)}) & \cdots & \phi_h(x^{(2)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x^{(i)}) & \phi_2(x^{(i)}) & \cdots & \phi_h(x^{(i)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x^{(n)}) & \phi_2(x^{(n)}) & \cdots & \phi_h(x^{(n)}) \end{bmatrix}$$

核线性回归的矩阵形式

目标函数

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi\theta})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi\theta}) \qquad \min_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta})$$

对参数向量的梯度

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\theta})$$

最优参数求解

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = 0 \rightarrow \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi\theta}) = 0$$

$$\rightarrow \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi\theta}$$

$$\rightarrow \widehat{\boldsymbol{\theta}} = (\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi})^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

核线性回归的矩阵形式

- 使用线性代数技巧（见matrix cookbook sec 3.1.1）

$$\left(\boldsymbol{P}^{-1}+\boldsymbol{B}^{\top}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{B}\right)^{-1}\boldsymbol{B}^{\top}\boldsymbol{R}^{-1}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{B}^{\top}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}\boldsymbol{B}^{\top}+\boldsymbol{R})^{-1}$$

- L2正则化的最优参数

$$\boldsymbol{P}=\frac{1}{\lambda}\boldsymbol{I}_{h\times h}\quad \boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}_{n\times n}\quad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{\Phi}_{n\times h}$$

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{\theta}}&=(\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{\Phi}+\lambda\boldsymbol{I}_h)^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{y}\\&=\boldsymbol{\Phi}^{\top}(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{T}+\lambda\boldsymbol{I}_n)^{-1}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

预测时，不需要使用$\boldsymbol{\Phi}$

$$\begin{aligned}\widehat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{\Phi}\widehat{\boldsymbol{\theta}}&=\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\top}(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\top}+\lambda\boldsymbol{I}_n)^{-1}\boldsymbol{y}\\&=\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}+\lambda\boldsymbol{I}_n)^{-1}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

其中核矩阵$\boldsymbol{K}=\{K(\boldsymbol{x}^{(i)},\boldsymbol{x}^{(j)})\}$

http://www.ics.uci.edu/~welling/classnotes/papers_class/Kernel-Ridge.pdf

最大似然估计

张伟楠 – 上海交通大学

线性判别模型

判别模型

- 建模预测变量和观测变量之间的关系
- 又名条件模型（Conditional Models）
- 确定性判别模型：$y = f_\theta(x)$
- **概率判别模型**：$p_\theta(y|x)$

带高斯白噪声的线性拟合

$$y = f_\theta(x) + \epsilon = \theta_0 + \sum_{j=1}^{d} \theta_j x_j + \epsilon = \theta^\top x + \epsilon$$

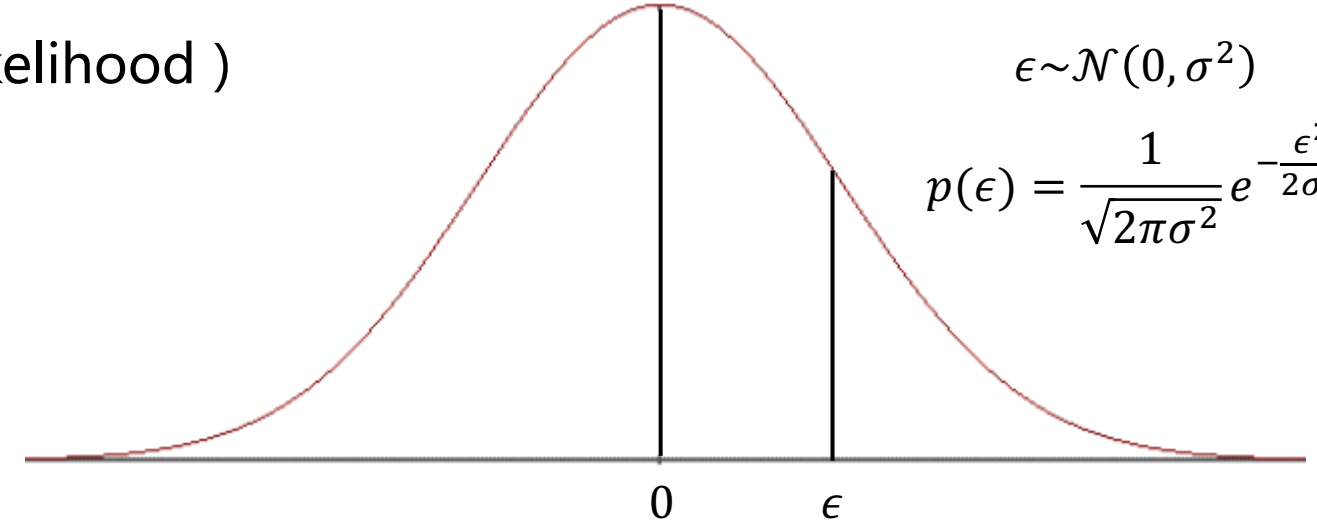
$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

$$x = (1, x_1, x_2, \ldots, x_d)$$

线性判别模型

优化目标

最大似然（likelihood）



$$\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

$$p(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2}}$$

一个数据点的标签预测似然

$$p(y|x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y-\theta^T x)^2}{2\sigma^2}}$$

概率判别模型的学习

最大化训练数据的似然

$$\max_{\theta} \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i-\theta^{\top}x_i)^2}{2\sigma^2}}$$

最大化训练数据的对数似然

$$\log \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i-\theta^{\top}x_i)^2}{2\sigma^2}} = \sum_{i=1}^{N} \log \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(y_i-\theta^{\top}x_i)^2}{2\sigma^2}} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i-\theta^{\top}x_i)^2}{2\sigma^2} + \text{const}$$

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{N} (y_i - \theta^{\top}x_i)^2$$

等价于最小均方误差学习

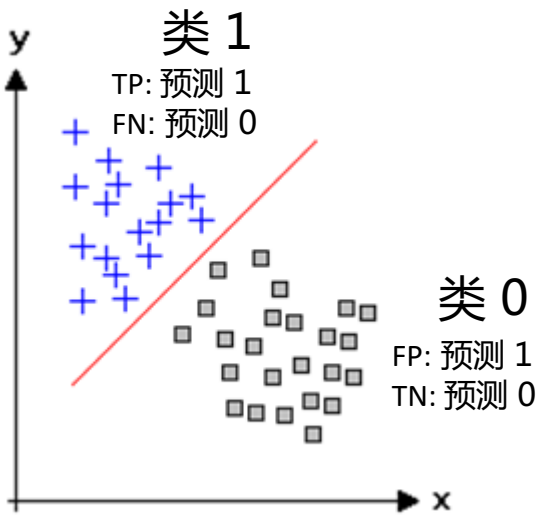
线性分类 - 分类指标

张伟楠 – 上海交通大学

评估指标

		预测	
		1	0
标签	1	True Positive	False Negative
	0	False Positive	True Negative

- True / False
  - True：预测 = 标签
  - False：预测 ≠ 标签
- Positive / Negative
  - Positive：预测$y = 1$
  - Negative：预测$y = 0$



评估指标

预测

标签	1	0
1	True Positive	False Negative
0	False Positive	True Negative

精度(Accuracy)

- 分类正确的样本占样本总数的比例

$$\mathrm{Acc} = \frac{\mathrm{TP} + \mathrm{TN}}{\mathrm{TP} + \mathrm{TN} + \mathrm{FP} + \mathrm{FN}}$$

评估指标

预测

标签	1	0
1	True Positive	False Negative
0	False Positive	True Negative

准确率(Precision)

- 预测为1的样本中标签为1的比例

$$\mathrm{Prec} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FP}}$$

预测

标签	1	0
1	True Positive	False Negative
0	False Positive	True Negative

召回率(Recall)

- 标签为1的样本中预测为1的比例

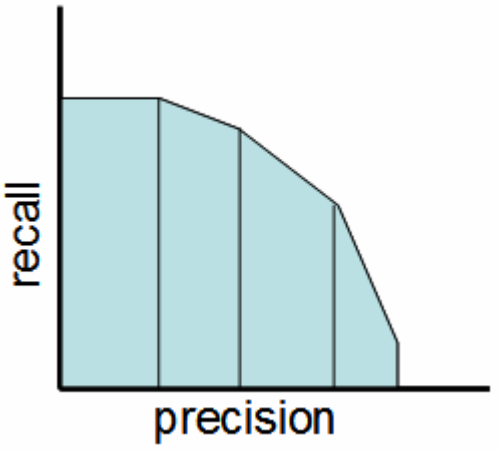
$$\mathrm{Rec} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$$

评估指标

- 准确率和召回率的权衡

$$\hat{y} = \begin{cases} 1, & p_\theta(y=1|x) > h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

  - 阈值越高，准确度越高，召回率越低
    - 极端情况：阈值=0.99
  - 阈值越低，准确度越低，召回率越高
    - 极端情况：阈值=0

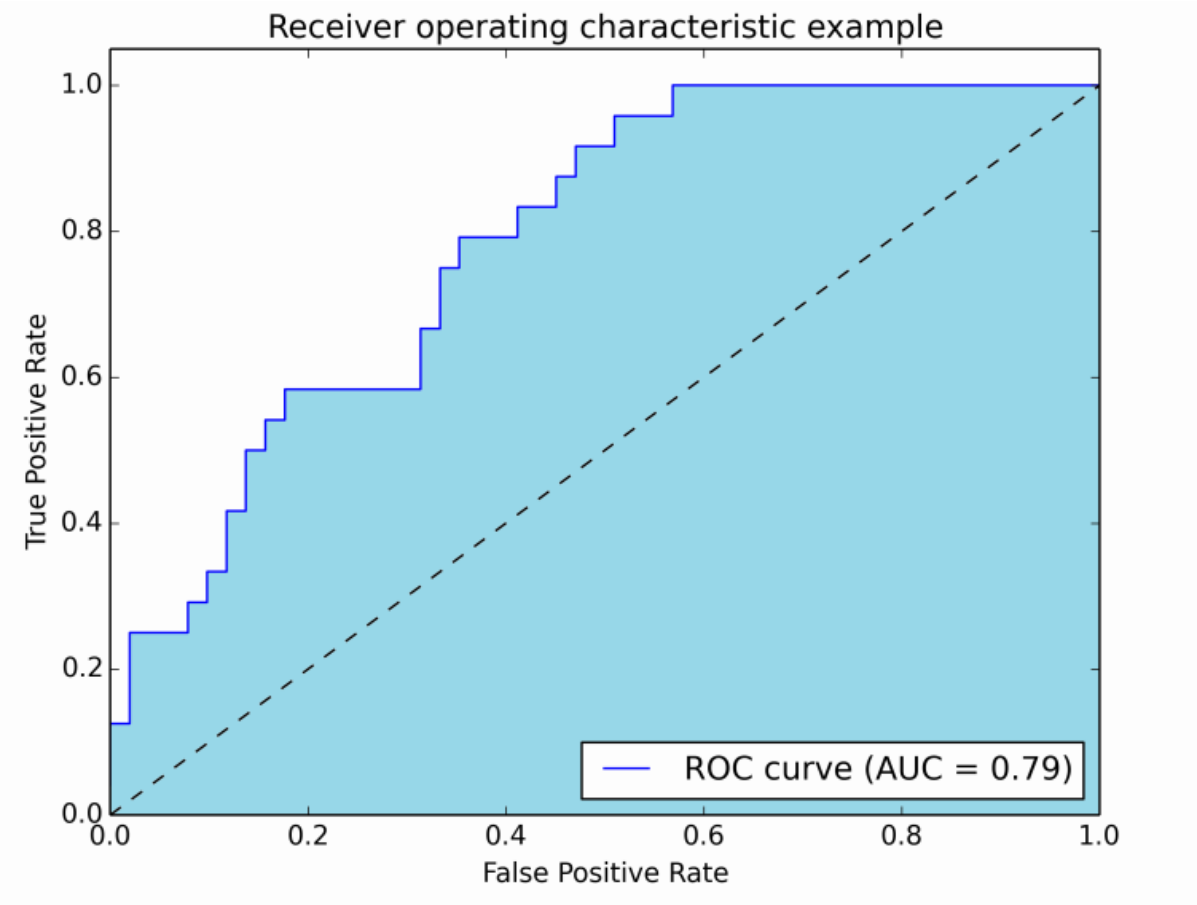


- F1度量

$$\mathrm{F1} = \frac{2 \times \mathrm{Precision} \times \mathrm{Recall}}{\mathrm{Precision} + \mathrm{Recall}}$$

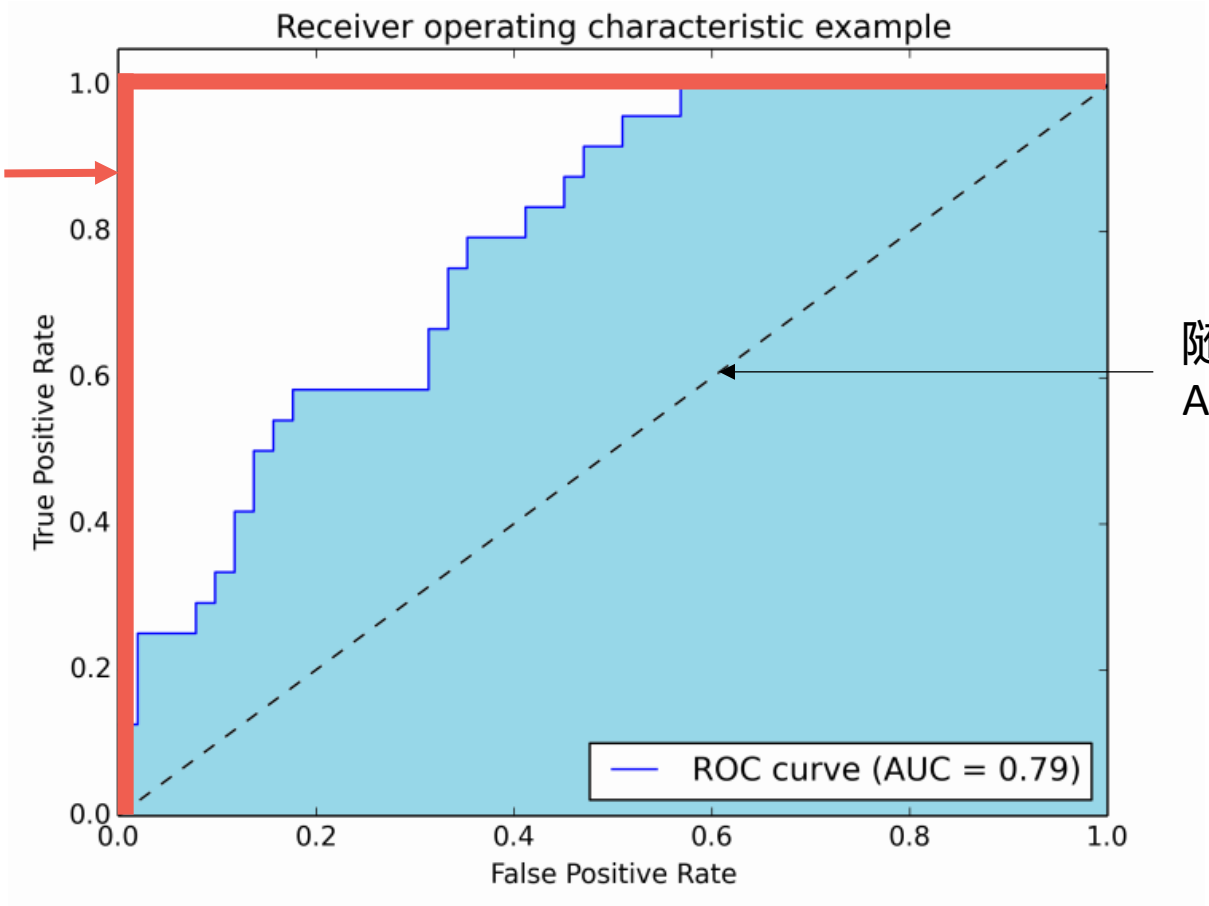
评估指标

- 基于排序的度量：ROC曲线下面积（AUC）



评估指标

- 基于排序的度量：ROC曲线下面积（AUC）

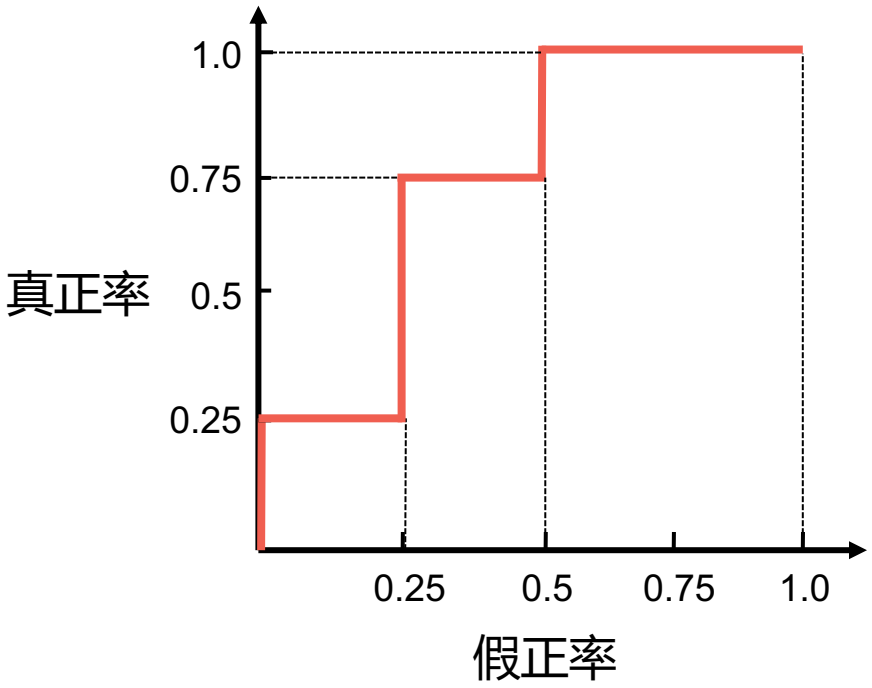


完美预测
AUC=1

随机预测
AUC = 0.5

评估指标

- AUC计算例子



AUC = 0.75

Prediction	Label
0.91	1
0.85	0
0.77	1
0.72	1
0.61	0
0.48	1
0.42	0
0.33	0

逻辑回归

张伟楠 – 上海交通大学

目录

Contents

01
二分类

分类问题

给定

- 样本空间$\mathbb{X}$中一个样本x $(x \in \mathbb{X})$的描述
- 一个固定的类别集：$C = \{c_1, c_2, \cdots, c_m\}$

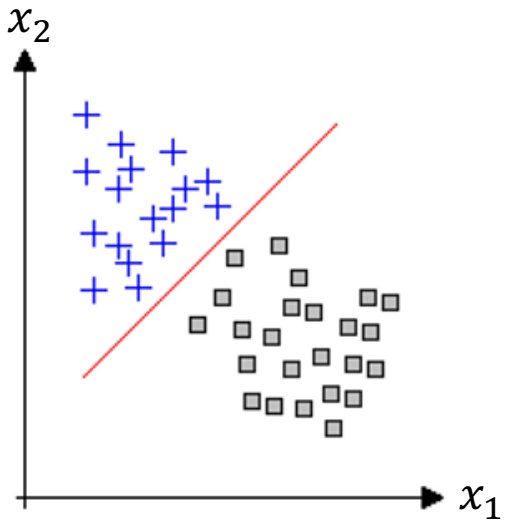
求解

- x的类别:$f(x) \in C$，其中$f(x)$是一个定义域为$\mathbb{X}$，值域为C的类别函数

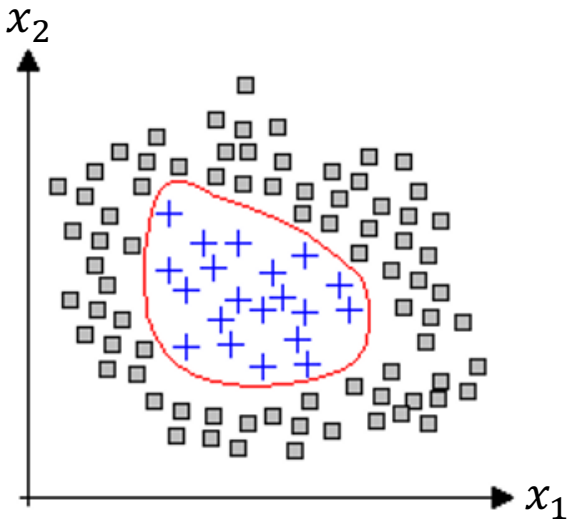
二分类

- 假如类别集是二元的，即$C = \{0,1\}$({错误，正确}，{负，正})，那么这就是二分类问题

二分类



线性可分



线性不可分

线性可分性：是否存在 $ax_1 + bx_2 + c = 0$

使得对于所有的正例：$ax_1 + bx_2 + c > 0$

对于所有的负例：$ax_1 + bx_2 + c < 0$

线性判别模型

判别模型

- 性质
  - 建模预测变量和观测变量之间的关系
  - 也称作条件模型(Conditional Models)
- 分类
  - 确定性判别模型：$y = f_\theta(x)$
    - 对于分类任务不可微分
  - 概率判别模型：$p_\theta(y|x)$
    - 对于分类任务可微分

二分类

$$p_\theta(y = 1|x)$$

$$p_\theta(y = 0|x) = 1 - p_\theta(y = 1|x)$$

损失函数

交叉熵损失

- 离散的情况 $H(p,q) = -\sum_x p(x)\log q(x)$
- 连续的情况 $H(p,q) = -\int_x p(x)\log q(x)\,dx$

分类问题计算交叉熵损失

Ground Truth	0	1	0	0	0
Prediction	0.1	0.6	0.05	0.05	0.2

$$\mathcal{L}(y,x,p_\theta) = -\sum_k \delta(y=c_k)\log p_\theta(y=c_k|x)$$

$$\delta(z) = \begin{cases} 1, & z \text{ is true} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

理解交叉熵

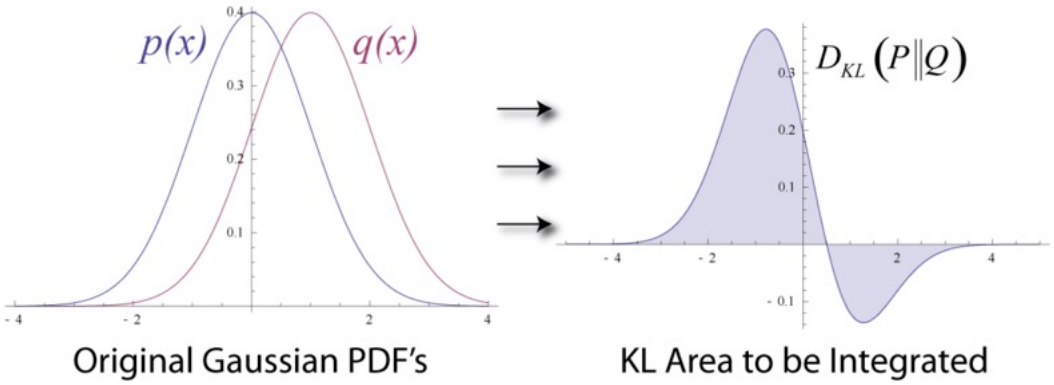
交叉熵损失

- 离散的情况 $H(p,q) = -\sum_x p(x)\log q(x)$
- 连续的情况 $H(p,q) = -\int_x p(x)\log q(x)\,dx$

KL散度

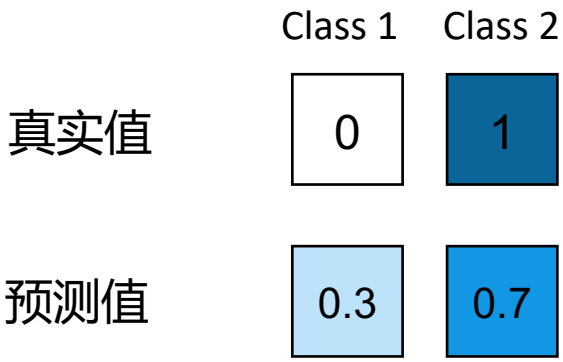
$KL(p,q) = H(p,q) - H(p)$

- 衡量两个分布的距离：恒大于0，两者相等时为0，不对称
- 离散的情况 $KL(p,q) = \sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}$
- 连续的情况 $KL(p,q) = \int_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}\,dx$



Original Gaussian PDF's　　KL Area to be Integrated

二分类的交叉熵



- 损失函数

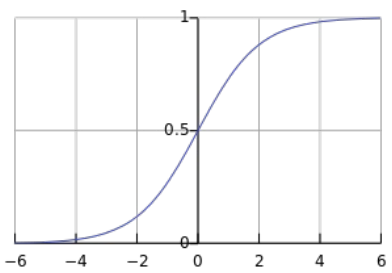
$$\mathcal{L}(y, x, p_\theta) = -\delta(y=1)\log p_\theta(y=1|x) - \delta(y=0)\log p_\theta(y=0|x)$$
$$= -y\log p_\theta(y=1|x) - (1-y)\log\big(1 - p_\theta(y=1|x)\big)$$

逻辑回归 (Logistic Regression)

- 逻辑回归是一个二分类模型

$$p_\theta(y=1|x) = \sigma(\theta^\top x) = \frac{1}{1+e^{-\theta^\top x}}$$

$$p_\theta(y=0|x) = \frac{e^{-\theta^\top x}}{1+e^{-\theta^\top x}}$$



- 交叉熵损失函数

$$\mathcal{L}(y, x, p_\theta) = -y \log \sigma(\theta^\top x) - (1-y)\log(1-\sigma(\theta^\top x))$$

- 梯度

$$\frac{\partial \mathcal{L}(y,x,p_\theta)}{\partial \theta} = -y\frac{1}{\sigma(\theta^\top x)}\sigma(z)\big(1-\sigma(z)\big)x - (1-y)\frac{-1}{1-\sigma(\theta^\top x)}\sigma(z)\big(1-\sigma(z)\big)x$$

$$= (\sigma(\theta^\top x) - y)x$$

$$\theta \leftarrow \theta + \eta\big(y - \sigma(\theta^\top x)\big)x$$

$$\frac{\partial \sigma(z)}{\partial z} = \sigma(z)(1-\sigma(z))$$

标签的决定

- 逻辑回归求出的概率

$$p_\theta(y=1|x)=\delta(\theta^\top x)=\frac{1}{1+e^{-\theta^\top x}}$$

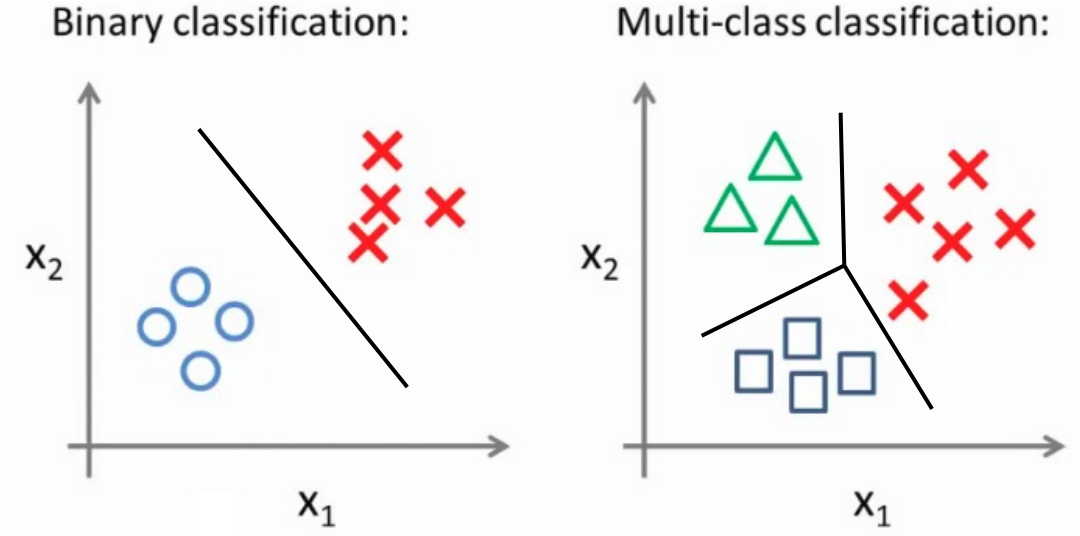
$$p_\theta(y=0|x)=\frac{e^{-\theta^\top x}}{1+e^{-\theta^\top x}}$$

- 设置域(threshold)h决定示例最终标签

$$\hat{y}=\begin{cases}1, & p_\theta(y=1|x)>h\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases}$$


02
多分类

多分类



多分类交叉熵

$$\mathcal{L}(y, x, p_\theta) = -\sum_k \delta(y = c_k) \log p_\theta(y = c_k | x)$$

$$\delta(z) = \begin{cases} 1, & z \text{ is true} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

真实值	0	1	0
预测值	0.1	0.7	0.2

多类别逻辑回归

- 类别集

$$C = \{c_1, c_2, \cdots, c_m\}$$

- 预测$p_\theta(y = c_j|x)$的概率

$$p_\theta\left(y = c_j\middle|x\right) = \frac{e^{\theta_j^\top x}}{\sum_{k=1}^{m} e^{\theta_k^\top x}} \quad \text{for } j = 1, \cdots, m$$

- Softmax
  - 参数$\theta = \{\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m\}$
  - 可以标准化成$m - 1$组参数

多类别逻辑回归

- 对一个示例的学习（$x, y = c_j$）
  - 最大对数化似然(log-likelihood)

$$\max_{\theta} \log p_\theta(y = c_j|x)$$

  - 梯度

$$\frac{\partial \log p_\theta(y = c_j|x)}{\partial \theta_j} = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \log \frac{e^{\theta_j^\top x}}{\sum_{k=1}^m e^{\theta_k^\top x}}$$

$$= x - \frac{\partial}{\partial \theta_j} \log \sum_{k=1}^m e^{\theta_k^\top x}$$

$$= x - \frac{e^{\theta_j^\top x}}{\sum_{k=1}^m e^{\theta_k^\top x}} x = \left(1 - p_\theta(y = c_j|x)\right) x$$

逻辑回归的实践

张伟楠 – 上海交通大学

在线广告中的点击率（CTR）估算

是否点击？

大陆

河南省公安厅彻查“封丘36人入警35人身份不合规”

中封丘县公安局的36名受训人员，35人是公安局内部的文职或临时人员，与“民警必须具备公务员身份”的国家规定不符，引发该局内部

- 上海至成都沿江高铁提上日程 串联长江沿线22城市
- 2016号歼-20原型机曝光 已滑行测试(图)
- 日媒：中国或派万吨海警船巡钓鱼岛 打消耗战
- 外媒：中国开始研制隐身武装直升机 预计2020年交付
- 习近平关于中美关系的十个判断
- 住建部黑臭水沟整治工作指南：9成百姓满意才能达标
- 陕西：职校“校长”让女学生陪酒 学校被撤除
- 揭秘“团团伙伙”的武钢漩涡和落马高管

国际

巴塞罗那200万人游行 呼吁加泰罗尼亚独立(图)

- 李炜光：收税是不公平的恶？
- 许章润：超级大国没有纯粹内政
- 刘昀献:国外政党联系群众的路径研究

时局观

民革中央副主席：中共从未否定国民党抗战作用

- 施芝鸿：文革基础上搞改革致一个时期市场官场乱象
- 朱维群回应争议：尊重民族差异而不强化
- 伊协副会长：穆斯林不应因宗教功修忽视社会责任

领袖圈

奥巴马54岁啦，当7年总统人苍老了头发也

海绵城市 未来之城
水危机：青岛告急
探访中国绿化博览会
帝都吸引华人首富
凤凰房产 诚邀加盟
谈华山论剑与中国精神
黑龙江创新驱动三步棋
《印记》之江城夜未眠
办公环境搜查令
圈层生活尽在凤凰会

精彩视频

凤凰联播台

菲媒曝菲律宾军演针对中国 直指南海生命线

播放数：2602282

用户响应估计问题

问题描述

一个实例数据

Date: 20160320
Hour: 14
Weekday: 7
IP: 119.163.222.*
Region: England
City: London
Country: UK
Ad Exchange: Google
Domain: yahoo.co.uk
URL: http://www.yahoo.co.uk/abc.html
OS: Windows
Browser: Chrome
Ad size: 300*250
Ad ID: a1890
User occupation: Student
User tags: Sports, Electronics

对应标签

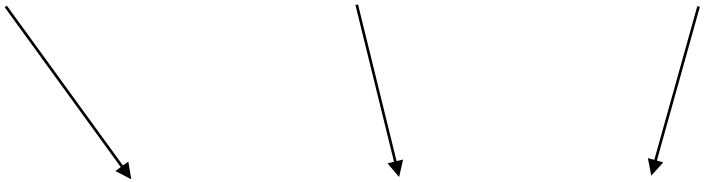
Click (1) or not (0)?

预测的点击率CTR (0.15)

One-Hot 二进制（独热）编码

- 标准特征工程范例

x=[Weekday=Friday, Gender=Male, City=Shanghai]



x=[0,0,0,0,1,0,0 0,1 0,0,1,0...0]

稀疏表示: x=[5:1 9:1 12:1]

- 高维稀疏二进制特征向量
  - 通常维度超过1M，甚至1B
  - 极其稀疏

训练/验证/测试 数据

- 范例(LibSVM 格式)

```
1 5:1 9:1 12:1 45:1 154:1 509:1 4089:1 45314:1 988576:1
0 2:1 7:1 18:1 34:1 176:1 510:1 3879:1 71310:1 818034:1
…
```

- 训练/验证/测试数据拆分
  - 按时间排序数据
  - 训练：验证：测试 = 8：1：1
  - 随机(shuffle)训练数据顺序

逻辑回归训练

- 逻辑回归是二分类模型

$$p_\theta(y=1|x)=\sigma(\theta^\top x)=\frac{1}{1+e^{-\theta^\top x}}$$

- 带有L2正则化的交叉熵损失函数

$$\mathcal{L}(y,x,p_\theta)=-y\log\sigma(\theta^\top x)-(1-y)\log\big(1-\sigma(\theta^\top x)\big)+\frac{\lambda}{2}||\theta||_2^2$$

- 参数学习

$$\theta\leftarrow(1-\lambda\eta)\theta+\eta\big(y-\sigma(\theta^\top x)\big)x$$

  - 仅更新标签中非零项对应的参数

实验结果

- 数据集
  - Criteo TB级数据集
    - 13个数字字段，26个分类字段
    - 2014年24天中取七天连续数据(大约300GB)
    - 79.4M次展示，负采样后点击次数为1.6M
  - iPinYou数据集
    - 65个分类字段
    - 2013年的连续十天数据
    - 19.5M次展示，负采样后点击次数为937.7K

实验结果

- 性能

Model	Linearity	AUC		Log Loss	
		Criteo	iPinYou	Criteo	iPinYou
Logistic Regression	Linear	71.48%	73.43%	0.1334	5.581e-3
Factorization Machine	Bi-linear	72.20%	75.52%	0.1324	5.504e-3
Deep Neural Networks	Non-linear	75.66%	76.19%	0.1283	5.443e-3

- 与非线性模型相比，线性模型具有以下优缺点
  - 优点：标准化，易于理解和实施，高效和可扩展
  - 缺点：建模局限（特征独立假设），无法探索特征交互

Yanru Qu et al. Product-based Neural Networks for User Response Prediction. ICDM 2016.

THANK YOU