机器学习导论_作业1

1 Basic concepts

1.1 Probability

解:

$$P(D|T)=\frac{P(D)P(T|D)}{P(T|D)\cdot P(D)+P(T|\neg D)\cdot P(\neg D)}=\frac{0.01\times0.98}{0.98\times0.01+0.10\times(1-0.01)}=0.09$$

故Bob有0.1088的概率确实患有该疾病。

1.2 Maximum likelihood estimation

解：抛10次该硬币，有8次正面朝上记为事件A，那么有

$$P(A)=p^8(1-p)^2$$

记函数 $f(p)=p^8(1-p)^2, 0<p<1$
令 $f'(p)=2p^7(1-p)(4-5p)=0, 0<p<1$
得 $p=0.8$

由于$f'(p)>0, (0<p<0.8)$且 $f'(p)<0, (0.8<p<1)$，那么在$p=0.8$时，$f(p)$取得最大值。

也即$p=0.8$时事件A发生的概率最大。故根据MLE，p的估计值为0.8.

1.3 Performance meause

1）根据C_1，C_2给出的预测结果分别对样本排序，各样本划分为正例，若当前为真正例，则对应坐标为(x, y + 0.2)，若当前为假正例，则对应坐标为（x + 1/3, y).

① C_1:

y	yC_1	(x_i,y_i)
1	0.93	$(0,\frac{1}{5})$
1	0.72	$(0,\frac{2}{5})$
1	0.62	$(0,\frac{3}{5})$
1	0.45	$(0,\frac{4}{5})$
0	0.39	$(\frac{1}{3},\frac{4}{5})$
0	0.32	$(\frac{2}{3},\frac{4}{5})$
1	0.18	$(\frac{2}{3},1)$
0	0.01	$(1,1)$

那么 $AUC_{C_1}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{7}(x_{i+1}-x_i)(y_i+y_{i+1})=\frac{13}{15}$.

② C_2:

y	yC_2	(x_i, y_i)
1	0.97	$(0, \frac{1}{5})$
1	0.89	$(0, \frac{2}{5})$
1	0.82	$(0, \frac{3}{5})$
0	0.75	$(\frac{1}{3}, \frac{3}{5})$
0	0.36	$(\frac{2}{3}, \frac{3}{5})$
1	0.34	$(\frac{2}{3}, \frac{4}{5})$
1	0.17	$(\frac{2}{3}, 1)$
0	0.12	$(1, 1)$

那么 $AUC_{C_2} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{7}(x_{i+1} - x_i)(y_i + y_{i+1}) = \frac{11}{15}$.

2)

①当C_1设定阈值为0.40时，其混淆矩阵为

真实情况/预测结果	P	N
正例	4	1
反例	0	3

$P = \frac{TP}{TP+FP} = 1$

$R = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{5}$

$F_1 = \frac{2\times P\times R}{P+R} = \frac{8}{9}$

②当C_2设定阈值为0.90时，其混淆矩阵为

真实情况/预测结果	P	N
正例	1	4
反例	0	3

$P = \frac{TP}{TP+FP} = 1$

$R = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{1}{5}$

$F_1 = \frac{2\times P\times R}{P+R} = \frac{1}{3}$

2 Linear model

1)

记(2.1)式为F_w，

对(2.1)式求导得

$\frac{\partial F_w}{\partial w}=X^T(Xw-y)+2\lambda w$

$=(X^TX+2\lambda E)w-2X^Ty \quad (2.2)$

令(2.2)为0，由于X为列满秩，故X^TX为正定矩阵，解得通式解如下：

$w^*=(X^TX+2\lambda E)^{-1}X^Ty \quad (2.2)$

E为与X^TX同阶单位矩阵.

2)

$\lambda=1$时，(2.2)可写作

$w^*=(X^TX+2E)^{-1}X^Ty \quad (2.3)$

由训练集有

$$X=\begin{bmatrix}2&9&1\\9&3&1\\8&3&1\\8&8&1\\2&1&1\\8&4&1\\4&3&1\\1&8&1\\3&3&1\\5&3&1\end{bmatrix}$$

$$y=\begin{bmatrix}290\\1054\\944\\964\\246\\948\\488\\167\\370\\598\end{bmatrix}$$

代入(2.3)解得

$$w=\begin{bmatrix}112.9340\\6.1899\\11.9795\end{bmatrix}$$

3 Logistic Regression

1）对式（3.2）求二阶导：

$$\frac{\partial^2\ell(\beta)}{\partial\beta\partial\beta^T}=\sum_{i=1}^{m}\frac{\hat{x}_i\hat{x}_i{}^Te^{\beta^T\hat{x}_i}}{(1+e^{\beta^T\hat{x}_i})^2} \qquad (3.3)$$

由$\hat{x}_i\hat{x}_i^T = (\hat{x}_i\hat{x}_i^T)^T$知$\hat{x}_i\hat{x}_i^T$对称.

取任意的实数非零列向量$\vec{a}$,有$\vec{a}^T\hat{x}_i\hat{x}_i^T\vec{a} = (\vec{a}^T\hat{x}_i)(\vec{a}^T\hat{x}_i)^T = \| a^T\hat{x}_i \|_2^2 \geq 0$

故$\hat{x}_i\hat{x}_i^T$对称正定.那么（3.3）式是对称正定的.

故式（3.2）具有凸函数性质。

2)

当$y_i \epsilon \{1, 2, \ldots, K\}$时，有

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_K \end{pmatrix}, \mathbf{W} = (w_1, w_2, \ldots, w_K), \mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_K)$$

$\mathbf{y}$的预测值为$\mathbf{z} = \mathbf{W}^T x + \mathbf{b}$,

该模型的对数似然为

$$\begin{aligned} \ell(\mathbf{W}, \mathbf{b}) &= \sum_{i=1}^{m} lnp(\mathbf{y}_i|\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_{i=1}^{m} ln \prod_{j=1}^{K} p(y_{ij}|\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{K} lnp(y_{ij}|\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{K} (y_{ij}(\mathbf{w}_j^T\mathbf{x}_i + b_j) - ln(1 + e^{w_j^T x_i + b_j})) \end{aligned}$$

3)

使用`sklearn`工具对给定数据集[1]采用OvO,OvR,MvMLR模型进行训练。训练集数据占数据集的$\frac{7}{10}$,数据集的其余$\frac{3}{10}$数据作训练集。相关代码[2]

训练结果如下：

模型	训练集正确率(%)	测试集正确率(%)	耗时(s)
OvO	52.8	53.1	0.183
OvR	54.1	52.5	0.058
MvM	53.3	52.5	0.077

各模型的正确率相近。由于OvO模型需要训练$O(\frac{N(N-1)}{2})$个分类器，耗时较长。OvR模型和MvM模型的耗时相近。

$1: http://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/yeast/yeast.data$

$2: ./LogisticRegression/main.py$