CS5487 编程作业1：回归

安东尼·陈（Antoni Chan）
香港城市大学计算机科学系

在本次编程作业中，你需要实现并测试课堂及习题集中介绍的部分回归方法。设$f(x,\theta)$为一个函数，其输入为$x \in \mathbb{R}^d$，参数为$\theta \in \mathbb{R}^D$，且满足：
$f(x,\theta) = \phi(x)^T\theta$
其中$\phi(x): \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D$是输入$x$的**特征变换**。例如，输入$x \in \mathbb{R}$的$K$次多项式可表示为：
$f(x,\theta) = \sum_{k=0}^K x^k\theta_k = \phi(x)^T\theta$
其特征变换与参数分别为：
$\phi(x) = \left[1, x, x^2, \cdots, x^K\right]^T \in \mathbb{R}^{K+1}, \theta = [\theta_0, \cdots, \theta_K]^T \in \mathbb{R}^{K+1}$

给定独立同分布（iid）样本$D = \{(x_1,y_1),\ldots,(x_n,y_n)\}$（其中$y_i$是$f(x_i,\theta)$的带噪声观测值），我们的目标是得到函数$f(x,\theta)$的最优估计。为方便后续计算，定义如下变量：
$y = [y_1,\cdots,y_n]^T, \Phi = [\phi(x_1),\cdots,\phi(x_n)], X = [x_1,\cdots,x_n]$

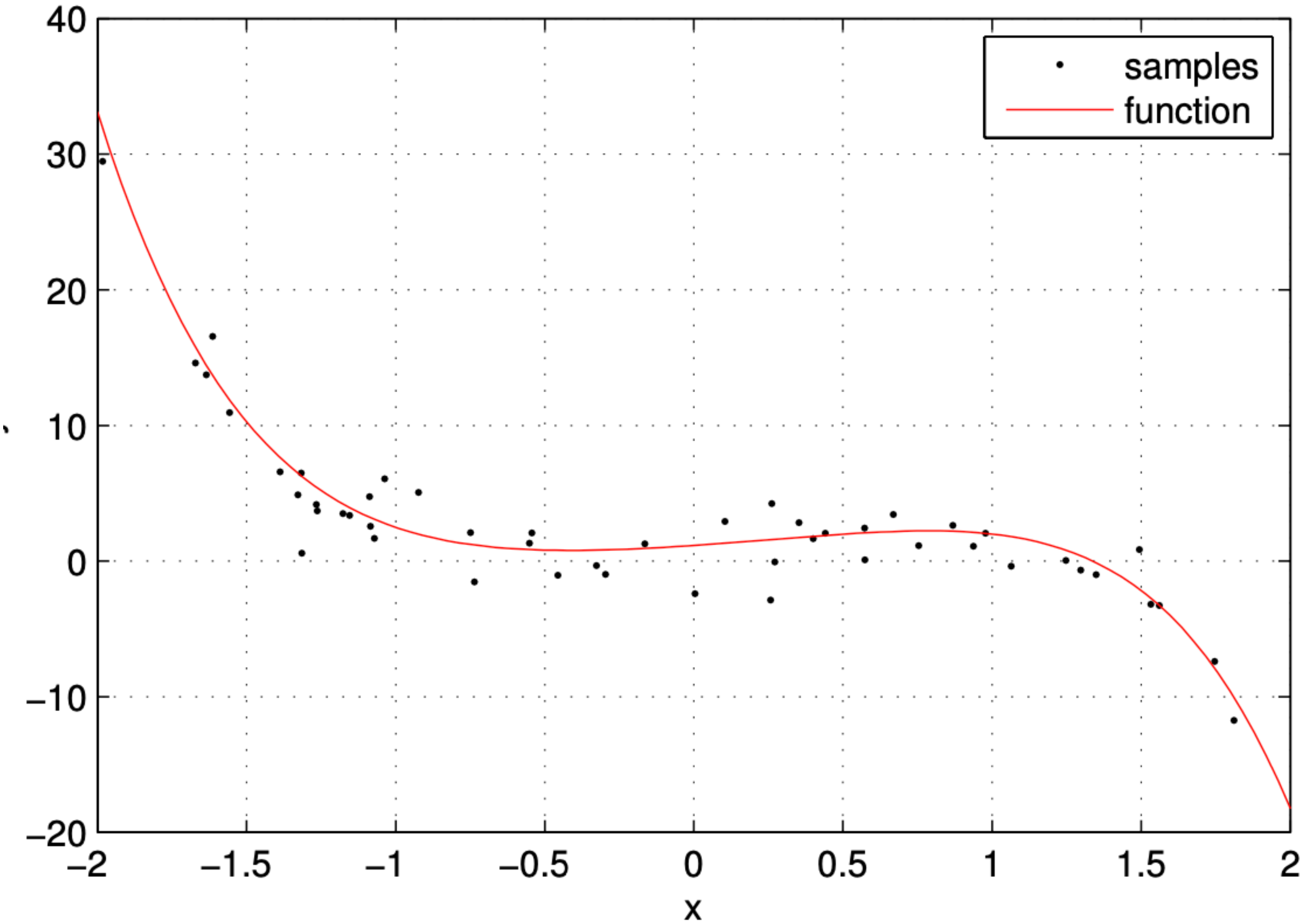
以下是目前我们已学习的各类回归算法总结：

方法	目标函数/分布	参数估计/后验分布	输入x_*的预测值f_*
最小二乘（LS）	$\lvert y-\Phi^T\theta\rvert^2$	$\hat{\theta}_{LS} = (\Phi\Phi^T)^{-1}\Phi y$	$f_* = \phi(x_*)^T\hat{\theta}$
正则化最小二乘（RLS）	$\lvert y-\Phi^T\theta\rvert^2 + \lambda\lvert\theta\rvert^2$	$\hat{\theta}_{RLS} = (\Phi\Phi^T + \lambda I)^{-1}\Phi y$	$f_* = \phi(x_*)^T\hat{\theta}$
L1正则化最小二乘（LASSO）	$\lvert y-\Phi^T\theta\rvert^2 + \lambda\lvert\theta\rvert_1$	二次规划求解器（参见习题3.13）	$f_* = \phi(x_*)^T\hat{\theta}$
鲁棒回归（RR）	$\lvert y-\Phi^T\theta\rvert_1$	线性规划求解器（参见习题2.10）	$f_* = \phi(x_*)^T\hat{\theta}$
贝叶斯回归（BR）	分布： $\theta \sim N(0,\alpha I)$ $y \mid x,\theta \sim N(f(x,\theta),\sigma^2)$	后验分布： $\theta \mid X,y \sim N(\hat{\mu}_\theta,\hat{\sigma}_\theta^2)$ $\hat{\mu}_\theta = \frac{1}{\sigma^2}\hat{\Sigma}_\theta\Phi y$ $\hat{\Sigma}_\theta = (\frac{1}{\alpha}I + \frac{1}{\sigma^2}\Phi\Phi^T)^{-1}$	预测分布： $f_* \mid X,y,x_* \sim N(\hat{\mu}_*,\hat{\sigma}_*^2)$ $\hat{\mu}_* = \phi(x_*)^T\hat{\mu}_\theta$ $\hat{\sigma}_*^2 = \phi(x_*)^T\hat{\Sigma}_\theta\phi(x_*)$

第一部分 多项式函数

在本问题中，你将在一个简单数据集上测试上述回归方法，并分析不同目标函数、正则化项及模型形式对结果的影响。MATLAB数据文件 `poly_data.mat` （若不使用MATLAB，可使用 `poly_data *.txt` ）包含一组由5次多项式生成的样本，观测噪声方差为$\sigma^2 = 5$。该文件包含以下变量：

- `sampx` ：样本输入值（即x_i），每个元素对应一个输入值；
- `sampy` ：样本输出值（即y_i），每个元素对应一个输出值；
- `polyx` ：真实函数的输入值（同时作为测试输入x_*）；
- `polyy` ：真实函数的输出值；
- `thtrue` ：生成数据时使用的真实参数θ。



样本（ `sampx` ， `sampy` ）与真实多项式函数（ `polyx` ， `polyy` ）的图像如下（原文附图略）：
（图像横轴为x，范围为-2至2；纵轴为y，范围为-20至40
，标注“samples”为样本点，“function”为真实函数曲线）

本部分目标是通过样本估计该多项式函数，具体任务如下：

(a) 算法实现

针对公式（2）给出的K次多项式，实现上述5种回归算法。在后续问题中，你将为这些回归方法使用不同的特征变换$\phi(x)$，因此在实现时**最好将回归算法与特征变换分开**（便于后续复用）。

(b) 5次多项式估计与误差分析

对于每种回归方法，使用样本数据（ sampx ， sampy ）估计5次多项式函数的参数，并以 polyx 为输入绘制估计函数的图像（需附上样本数据）。对于贝叶斯回归（BR），还需额外绘制均值周围的标准差曲线。
计算估计函数输出值与真实函数输出值（ polyy ）之间的**均方误差**（对 polyx 中所有输入值取平均）。对于含有超参数的算法（如RLS、LASSO），需选择一组效果较好的超参数值。

(c) 训练数据量对模型的影响

重复（b）的步骤，但通过选择样本子集（如10%、25%、50%、75%的样本）减少可用训练数据量，绘制各数据量下的估计函数图像。分析：

- 哪些模型在数据量较少时更鲁棒?
- 哪些模型容易过拟合?
  绘制"误差-训练数据量"关系图，并分析其中的重要趋势与发现（需使用不同的随机子集进行多次实验，取平均误差以减少随机性影响）。

(d) 异常值对模型的影响

在输出值中添加一些异常值（例如，对 sampy 中的部分值加上一个较大的数），然后重复（b）的步骤。分析：

- 哪些方法对异常值具有鲁棒性?
- 哪些方法对异常值最敏感?
  并解释原因。

(e) 高次多项式的过拟合分析

重复（b）的步骤，但估计更高次的多项式（例如10次多项式）。分析：

- 在学习更复杂的模型时，哪些模型容易过拟合数据？哪些模型不会？
  通过观察估计的参数值（如参数的绝对值大小）验证你的结论。

第二部分 真实世界回归问题——人数统计

本部分将考虑一个真实世界的回归问题：**估计图像中的人数**。以下为一个包含人群的人行道图像示例（原文附图略）。

从每张图像中，我们提取一个9维特征向量$x_i \in \mathbb{R}^9$，该向量基于人群的一些属性（例如，人群覆盖的面积、人群的周长等）；同时，我们还拥有每张图像对应的实际人数$y_i \in \mathbb{R}$。本部分目标是学习特征向量与人数之间的回归函数（暂不考虑人数为非负整数的特性，直接应用标准回归方法）。

数据存储在MATLAB文件 count_data.mat 中（若不使用MATLAB，可使用 count_data *.txt ），包含以下变量：

- trainx ： 训练输入，每一列是一个9维特征向量；
- trainy ： 训练输出，即每个输入向量对应的"去均值人数"（已减去所有样本的人数均值，因此会出现负的输出值）；
- testx ： 测试输入；

- `testy`： 测试输入对应的真实输出。

(a) 基于原始特征的回归

首先直接使用原始特征（即令$\phi(x) = x$），通过训练集（ `trainx` ， `trainy` ），用上述部分回归算法估计函数。使用测试集输入 `testx` 进行输出预测，并将预测结果与真实输出 `testy` 比较（可对预测值取整，使其符合人数的整数特性）。
计算**平均绝对误差**与**均方误差**，分析哪种方法效果最好；绘制测试集预测值与真实人数的对比图，并讨论其中有趣的发现（如预测偏差、异常样本等）。

(b) 特征变换的效果

尝试一些其他的特征变换，例如：

- 构造简单的2次多项式特征：$\phi(x) = [x_1, \dots, x_9, x_1^2, \dots, x_9^2]^T$；
- 扩展特征以包含交叉项$x_i x_j$ （$i \neq j$）；
- 尝试其他非线性特征变换（如对数变换、指数变换等）。

分析这些特征变换能否改进（a）中的结果。

第三部分 超参数估计（选做）

截至目前，你可能通过“手动调整超参数（如λ）并选择测试集上效果最好的值”来优化模型，但这种方式并不公平——它本质上是“针对测试集优化”，无法反映模型对未见过数据的泛化能力（真实场景中无法获取测试集的真实输出）。以下是两种仅使用训练集选择超参数的常用方法：

1. N折交叉验证（N-fold Cross-Validation）

该方法将原始训练集划分为“新训练集”与“验证集”，基于新训练集估计回归函数并在验证集上测试（针对不同超参数值重复此过程），最终选择验证集误差最小的超参数。具体步骤如下：

1. 将训练集D划分为N个等大小的子集$D_1, D_2, \dots, D_N$；
2. 对每个子集D_i和每个候选超参数λ_j：
   - 基于$D \setminus D_i$（即除D_i外的所有训练数据），使用λ_j训练回归函数；
   - 在D_i上测试该函数，记录误差$e_{i,j}$；
3. 对每个超参数λ_j，计算其在所有子集上的总误差$E_j = \sum_{i=1}^N e_{i,j}$；
4. 选择总误差最小的λ_j，并使用完整的训练集D训练最终的回归函数。

（通常根据训练集大小选择3折至10折交叉验证，数据量较小时可选择更多折数以充分利用数据）

2. 最大边缘似然（Maximum Marginal Likelihood）

对于贝叶斯回归，可通过最大化训练数据的**边缘似然**来选择超参数（详见习题3.12）。超参数估计公式为：
ParseError: KaTeX parse error: \tag works only in display equations

其中，边缘对数似然的计算公式为：

$$\log p(y \mid X, \sigma^2, \alpha) = \log \int p(y \mid \theta, X, \sigma^2) p(\theta \mid \alpha) d\theta$$
$$= -\frac{D}{2}\log\alpha - \frac{n}{2}\log\sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\left\|y - \Phi^T \hat{\mu}_\theta\right\|^2 - \frac{1}{2\alpha}\left\|\hat{\mu}_\theta\right\|^2 - \frac{1}{2}\log\left|\hat{\Sigma}_\theta^{-1}\right| - \frac{n}{2}\log(2\pi)$$

（注：原文中边缘对数似然公式存在重复项$-\frac{1}{2\alpha}\left\|\hat{\mu}_\theta\right\|^2$，此处保留原文形式）

超参数选择步骤：对每个候选超参数对(α_j, σ_j^2)，计算上述边缘对数似然，选择使边缘似然最大的超参数对。

(a) 超参数自动选择的效果

针对第二部分的人数统计问题，仅使用训练数据，通过交叉验证或最大边缘似然选择超参数。分析：

- 与手动选择超参数相比，自动选择的超参数是否提高或降低了模型准确率？
- 自动选择的超参数与你手动选择的超参数接近程度如何？

提交要求

你需提交以下材料：

1. 上述所有问题的答案、图像、分析与讨论；
2. 源代码文件。

抄袭说明

- 需使用**自己的代码**实现每种回归算法，不得使用他人实现的回归算法（包括MATLAB自带的回归函数，如 `lsqcurvefit` 、 `lasso` 等）；
- 可使用常用的库组件与函数，例如：
  - 标准矩阵运算（如 `inv` 求逆、 `eig` 求特征值）；
  - 通用优化工具箱（如 `quadprog` 二次规划求解器、 `linprog` 线性规划求解器）；
- 若使用了特殊的工具箱或库，务必在报告中注明。

评分标准

本作业的分数分布如下：

- 10%：回归算法实现（第一部分(a)）；
- 40%：回归函数测试结果（第一部分(b)(c)(d)(e)）；
- 20%：人数统计问题结果（第二部分(a)）；
- 10%：人数统计问题的特征变换尝试（第二部分(b)）；
- 20%：书面报告质量（观察深刻、分析透彻者将获得更高分数）。

注：若确实无法正确实现算法，可使用第三方软件获取结果。此时无法获得“算法实现”部分的分数，但仍可通过呈现结果、分析结论获得其他部分的分数。

选做问题说明

第三部分“超参数估计”为选做内容，不参与评分。