大家好，这篇是有关台大机器学习课程作业四的详解，题目同Coursera。

我的github地址：
https://github.com/Doraemonzzz

个人主页：
http://doraemonzzz.com/

作业地址:
https://www.csie.ntu.edu.tw/~htlin/course/ml15fall/

参考资料:
https://blog.csdn.net/a1015553840/article/details/51085129
http://www.vynguyen.net/category/study/machine-learning/page/6/
http://book.caltech.edu/bookforum/index.php
http://beader.me/mlnotebook/

Problem 1

我的理解是deterministic noise是由$\mathcal{H}$和f“复杂度之差”产生的，所以如果选择使用$\mathcal{H}^{'}$，那么"复杂度之差"会增加，所以deterministic noise会增加。

Problem 2

这题比较简单，$\mathcal{H}(Q,0,Q_0)=\sum_{q=0}^{Q_0-1}w_qL_q(x)=\mathcal{H}(Q_0-1)$，所以

$$\mathcal{H}(10,0,3)\cap\mathcal{H}(10,0,4)=\mathcal{H}(2)\cap\mathcal{H}(3)=\mathcal{H}(2)$$

Problem 3

首先计算$E_in(w),E_{aug}(w)$

$$\begin{aligned}E_{in}(w)&=||Xw-y||^2\\&=(Xw-y)^T(Xw-y)\\&=w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}E_{aug}(w)&=E_{in}(w)+\frac{\lambda}{N}w^Tw\\&=w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty+\frac{\lambda}{N}w^Tw\end{aligned}$$

接着关于w求梯度

$$\nabla E_{in}(w)=2X^TXw-2X^Ty$$

$$\nabla E_{aug}(w)=\nabla E_{in}(w)+2\frac{\lambda}{N}w=2X^TXw-2X^Ty+2\frac{\lambda}{N}w$$

由梯度下降法可知更新规则为

$$
\begin{aligned}
w(t+1) &= w(t) - \eta\nabla E_{aug}(w)\\
&= w(t) - \eta(\nabla E_{in}(w) + 2\frac{\lambda}{N}w)\\
&= (1-2\eta\frac{\lambda}{N})w - \eta\nabla E_{in}(w)
\end{aligned}
$$

所以

$$\alpha = 1-2\eta\frac{\lambda}{N}, \beta = -\eta$$

Problem 4

首先回顾w_{reg}的公式，记$u=Z^Ty$

$$w_{reg} = (Z^TZ+\lambda I)^{-1}Z^Ty = (Z^TZ+\lambda I)^{-1}u$$

假设$Z\in R^{N\times M}$，所以$Z^TZ\in R^{M\times M}$。

由于Z^TZ为半正定对称矩阵， 所以Z^TZ正交相似于对角阵，且特征值非负，令记P为正交相似矩阵，Z^TZ的特征值为$k_1,\ldots,k_M(k_i\ge 0)$，所以

$$P^TZ^TZP = diag\{k_1,k_2..k_M\}$$

从而

$$
\begin{aligned}
P^T(Z^TZ+\lambda I)P &= diag\{k_1+\lambda,k_2+\lambda,\ldots,k_M+\lambda\}\\
(Z^TZ+\lambda I) &= Pdiag\{k_1+\lambda,k_2+\lambda,\ldots,k_M+\lambda\}P^T\\
(Z^TZ+\lambda I)^{-1} &= P^Tdiag\{(k_1+\lambda)^{-1},(k_2+\lambda)^{-1},\ldots,(k_M+\lambda)^{-1}\}P\\
(Z^TZ+\lambda I)^{-2} &= P^Tdiag\{(k_1+\lambda)^{-2},(k_2+\lambda)^{-2},\ldots,(k_M+\lambda)^{-2}\}P
\end{aligned}
$$

带入$w_{reg}^Tw_{reg}$的定义可得

$$w_{reg}^Tw_{reg} = u^TP^Tdiag\{(k_1+\lambda)^{-2},(k_2+\lambda)^{-2},\ldots,(k_M+\lambda)^{-2}\}Pu$$

记$v=Pu=(v_1,\ldots,v_M)$，注意P,u为常量，所以v也为常量，从而

$$w_{reg}^Tw_{reg} = v^Tdiag\{(k_1+\lambda)^{-2},(k_2+\lambda)^{-2},\ldots,(k_M+\lambda)^{-2}\}v = \sum_{i=1}^M(k_i+\lambda)^{-2}v_i^2$$

因为$k_i\ge 0$，所以$w_{reg}^Tw_{reg}=||w_{reg}||^2$关于$\lambda(\lambda\ge 0)$递减，从而$|w_{reg}||$关于关于$\lambda(\lambda\ge 0)$递减。

Problem 5

题目的意思是利用平方误差计算leave-one-out cross-validation，对于此题来说，有三个点$(x_1,y_1),(x_2,y_2),(x_3,y_3)$，首先根据其中两个点（不妨设为$(x_1,y_1),(x_2,y_2)$）训练模型$h(x)$，然后计算$(h(x_3)-y_3)^2$，下面具体看下题目。

首先看$h_0(x) = b_0$，如果有两个点$(x_1, y_1), (x_2, y_2)$，那么

$$E_{in} = (b_0 - y_1)^2 + (b_0 - y_2)^2 = 2b_0^2 - 2(y_1 + y_2)b_0 + (y_1^2 + y_2^2)$$

由二次函数性质可知，当$b_0 = \frac{y_1+y_2}{2}$时，E_{in}最小。

所以如果点为$(-1, 0), (\rho, 1)$，那么$b_0 = \frac{1}{2}$，从而误差为$(\frac{1}{2} - 0)^2 = \frac{1}{4}$；如果点为$(-1, 0), (1, 0)$，那么$b_0 = 0$，从而误差为$(1 - 0)^2 = 1$；如果点为$(\rho, 1), (1, 0)$，那么$b_0 = \frac{1}{2}$，从而误差为$(\frac{1}{2} - 0)^2 = \frac{1}{4}$。因此总误差为

$$\frac{1}{3}(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4})$$

再来看下$h_1(x) = a_1x + b_1$，如果有两个点$(x_1, y_1), (x_2, y_2)$，显然直线过这两点时E_{in}最小，从而

$$\begin{aligned} a_1x_1 + b_1 = y_1 \\ a_1x_2 + b_1 = y_2 \end{aligned}$$

解得

$$a_1 = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2}, b_1 = \frac{x_1y_2 - x_2y_1}{x_1 - x_2}$$

所以如果点为$(-1, 0), (\rho, 1)$，那么$a_1 = \frac{1}{1+\rho}, b_1 = \frac{1}{1+\rho}$，从而误差为$(\frac{1}{1+\rho} + \frac{1}{1+\rho} - 0)^2 = \frac{4}{(1+\rho)^2}$；如果点为$(-1, 0), (1, 0)$，那么$a_1 = 0, b_1 = 0$，从而误差为$(0 - 1)^2 = 1$；如果点为$(\rho, 1), (1, 0)$，那么$a_1 = \frac{1}{\rho-1}, b_1 = -\frac{1}{\rho-1}$，从而误差为$(-\frac{1}{\rho-1} - \frac{1}{\rho-1} - 0)^2 = \frac{4}{(1-\rho)^2}$。因此总误差为

$$\frac{1}{3}(\frac{4}{(1+\rho)^2} + 1 + \frac{4}{(1-\rho)^2})$$

由题设可知

$$\begin{aligned} \frac{1}{3}(\frac{4}{(1+\rho)^2} + 1 + \frac{4}{(1-\rho)^2}) = \frac{1}{3}(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4}) \\ \frac{4}{(1+\rho)^2} + \frac{4}{(1-\rho)^2} = \frac{1}{2} \\ 8[(1-\rho)^2 + (1+\rho)^2] = (1-\rho)^2(1+\rho)^2 \\ 8(2 + 2\rho^2) = (1 - \rho^2)^2 \\ 16 + 16\rho^2 = \rho^4 - 2\rho^2 + 1 \\ \rho^4 - 18\rho^2 - 15 = 0 \\ \rho^2 = 9 + 4\sqrt{6} \\ \rho = \sqrt{9 + 4\sqrt{6}} \end{aligned}$$

Problem 6

要使得至少有一个人收到的5次预测都是正确的，需要给$2^5 = 32$个人写信，方法如下，第一天告诉一半的人A队胜利，告诉另一半人B队胜利，那么第一天必然有16封信是正确的，对这16个人重复此操作，到第五天肯定有人收到的5封信都是正确的。从这个过程中可以看出在第五场比赛之前，一共需要寄送的数量为

$$2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^2 = 4(2^4 - 1) = 60$$

Problem 7

由上题可知，加上第五场以及第六场，一共要寄送

$$2^5+2^4+2^3+2^2+2+1=2^6-1=63$$

所以一共要花费$63\times 10=630$，如果别人花了1000元，那么一共可以赚$1000-630=370$

Problem 8

因为这题$a(x)$是确定的，所以此处只有一个模型，$M=1$

Problem 9

回顾公式可知

$$P(|E_{in}(g)-E_{out}(g)|>\epsilon)\le 2Me^{-2\epsilon^2 N}$$

这里$\epsilon=0.01,M=1,N=10000$，带入可得

$$P\le 0.271$$

Problem 10

我们获得$g(x)$的过程中实际上参考了$a(x)$，这是一种data snooping，所以为了好的效果，应该同时使用$g(x),a(x)$，根据两个判别函数来做决定。

Problem 11

只要代公式即可，首先做以下记号

$$X=[x_1,\ldots,x_N]^T,y=[y_1,\ldots,y_N]^T$$

所以

$$X^{'}=[x_1,\ldots,x_N,\tilde x_1,\ldots,\tilde x_K]^T=\begin{bmatrix}X\\ \tilde X\end{bmatrix}$$

$$y^{'}=[y_1,\ldots,y_N,\tilde y_1,\ldots,\tilde y_K]^T=\begin{bmatrix}y\\ \tilde y\end{bmatrix}$$

所以原问题可化为

$$\min_w \frac{1}{N+K}||X^{'}w-y||^2$$

所以最优解为

$$
\begin{aligned}
w &= ((X^{'})^TX^{'})^{-1}(X^{'})^Ty \\
&= (\begin{bmatrix} X \\ \tilde{X} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} X \\ \tilde{X} \end{bmatrix})^{-1} \begin{bmatrix} X \\ \tilde{X} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} y \\ \tilde{y} \end{bmatrix} \\
&= (X^TX + \tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}(X^Ty + \tilde{X}^T\tilde{y})
\end{aligned}
$$

Problem 12

这题的目地是为了把岭回归转换成一般的线性回归，回顾岭回归的公式

$$
w_{reg} = (X^TX + \lambda I)^{-1}X^Ty
$$

对比上题的公式，我们令

$$
\tilde{X} = \sqrt{\lambda}I, y = 0
$$

即可

Problem 13

这部分只要根据公式计算即可，注意这里是0-1误差

```python
import numpy as np
from numpy.linalg import inv

#读取数据
def read_data(file):
    x=[]
    y=[]
    with open(file) as f:
        for i in f.readlines():
            i=list(map(float,i.strip().split(' ')))
            temp=[1]
            temp+=i[:2]
            x.append(temp)
            y.append(i[-1])
    return np.array(x),np.array(y)

#计算w
def w(X,Y,k):
    N=X.shape[1]
    w=inv(X.T.dot(X)+k*np.eye(N)).dot(X.T).dot(Y)
    return w

#计算误差
def E(X,Y,w):
    N=X.shape[0]
    return np.sum(np.sign(X.dot(w))!=Y)/N
```

```
Xtrain,Ytrain=read_data('hw4_train.dat')
Xtest,Ytest=read_data('hw4_test.dat')

w1=w(Xtrain,Ytrain,11.26)
Ein=E(Xtrain,Ytrain,w1)
Eout=E(Xtest,Ytest,w1)
print("Ein="+str(Ein))
print("Eout="+str(Eout))
```

```
Ein=0.055
Eout=0.052
```

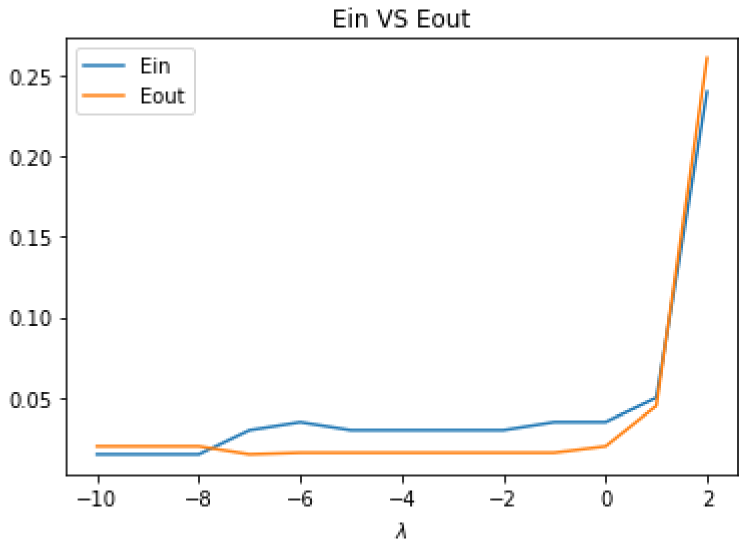
Problem 14

这题和下题是一致的，首先作图。

```
import matplotlib.pyplot as plt

K=range(-10,3)
Ein=[]
Eout=[]
for k in K:
    l=10**(k)
    w1=w(Xtrain,Ytrain,l)
    ein=E(Xtrain,Ytrain,w1)
    eout=E(Xtest,Ytest,w1)
    Ein.append(ein)
    Eout.append(eout)

plt.plot(K,Ein,label='Ein')
plt.plot(K,Eout,label='Eout')
plt.xlabel('$\lambda$')
plt.title('Ein VS Eout')
plt.legend()
plt.show()
```



从图像中可以看出当$log_{10}(\lambda)=-10,-9,-8$时，$E_{in}$最小，根据题目的要求，这里选择最大的$\lambda$， 所以$log_{10}(\lambda=-8)$，接着查看对应的$E_{in},E_{out}$

```
print("Ein="+str(Ein[2]))
print("Eout="+str(Eout[2]))
```

```
Ein=0.015
Eout=0.02
```

Problem 15

这里图像没那么明显，看一下E_{out}的大小

```
Eout
```

```
[0.02,
 0.02,
 0.02,
 0.014999999999999999,
 0.016,
 0.016,
 0.016,
 0.016,
 0.016,
 0.016,
 0.02,
 0.044999999999999998,
 0.26100000000000001]
```

所以$log_{10}(\lambda=-7)$时，E_{out}最小，的E_{in},E_{out}为

```
print("Ein="+str(Ein[3]))
print("Eout="+str(Eout[3]))
```

```
Ein=0.03
Eout=0.015
```

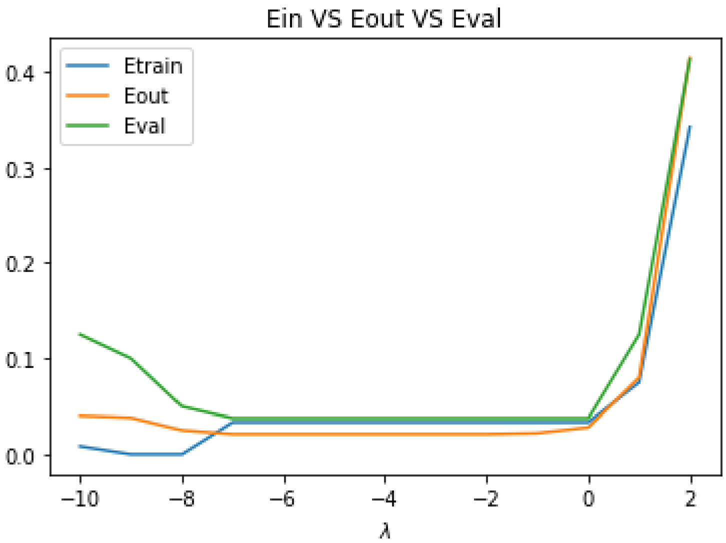
Problem 16

这题是将数据拆成训练集和验证集，步骤和上题基本一致，选择E_{in}最小的λ。

```
X1=Xtrain[:120,:]
Y1=Ytrain[:120]
Xval=Xtrain[120:,:]
Yval=Ytrain[120:]

Ein=[]
Eout=[]
Eval=[]
for k in K:
    l=10**(k)
    w1=w(X1,Y1,l)
    ein=E(X1,Y1,w1)
    eout=E(Xtest,Ytest,w1)
    eva=E(Xval,Yval,w1)
    Ein.append(ein)
    Eout.append(eout)
    Eval.append(eva)

plt.plot(K,Ein,label='Etrain')
plt.plot(K,Eout,label='Eout')
plt.plot(K,Eval,label='Eval')
plt.xlabel('$\lambda$')
plt.title('Ein VS Eout VS Eval')
plt.legend()
plt.show()
```



所以$log_{10}(\lambda) = -8$时，E_{train}最小，对应的$E_{train}, E_{out}, E_{val}$为

```
print("Etrain="+str(Ein[2]))
print("Eout="+str(Eout[2]))
print("Eval="+str(Eval[2]))
```

```
Etrain=0.0
Eout=0.025
Eval=0.05
```

Problem 17

选择E_{val}最小的λ，可以看出$log_{10}(\lambda) = 0$，对应的$E_{train}, E_{out}, E_{val}$为

```
print("Etrain="+str(Ein[-3]))
print("Eout="+str(Eout[-3]))
print("Eval="+str(Eval[-3]))
```

```
Etrain=0.0333333333333
Eout=0.028
Eval=0.0375
```

Problem 18

选择最优的λ，根据上题可得$log_{10}(\lambda) = 0, \lambda = 1$

```
w1=w(Xtrain,Ytrain,1)
Ein=E(Xtrain,Ytrain,w1)
Eout=E(Xtest,Ytest,w1)
print("Ein="+str(Ein))
print("Eout="+str(Eout))
```

```
Ein=0.035
Eout=0.02
```

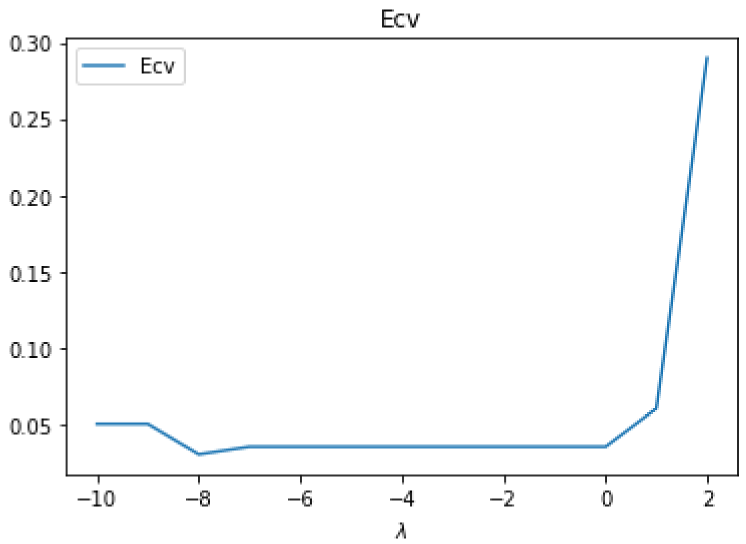
Problem 19

将数据拆成5各部分，计算E_{cv}

```
#准备数据
N=Xtrain.shape[0]//5
data=[]
for i in range(5):
    xtrain=np.concatenate((Xtrain[:i*N],Xtrain[(i+1)*N:]))
    ytrain=np.concatenate((Ytrain[:i*N],Ytrain[(i+1)*N:]))
    xval=Xtrain[i*N:(i+1)*N]
    yval=Ytrain[i*N:(i+1)*N]
    data.append([xtrain,ytrain,xval,yval])

Ecv=[]
K=range(-10,3)
for k in K:
    l=10**(k)
    ecv=0
    for i in data:
        xtrain=i[0]
        ytrain=i[1]
        xval=i[2]
        yval=i[3]
        w1=w(xtrain,ytrain,l)
        ecv+=E(xval,yval,w1)
    ecv/=5
    Ecv.append(ecv)

plt.plot(K,Ecv,label='Ecv')
plt.xlabel('$\lambda$')
plt.title('Ecv')
plt.legend()
plt.show()
```



可以看到$log_{10}(\lambda)=-8$时，E_{cv}最小

```
print("Ecv="+str(Ecv[2]))
```

```
Ecv=0.03
```

Problem 20

计算$log_{10}(\lambda)=-8$时的E_{in}, E_{out}

```
k=10**(-8)
w1=w(Xtrain,Ytrain,k)
Ein=E(Xtrain,Ytrain,w1)
Eout=E(Xtest,Ytest,w1)
print("Ein="+str(Ein))
print("Eout="+str(Eout))
```

```
Ein=0.015
Eout=0.02
```

以下两题为附加题

Problem 21

这题是需要最小化

$$E(w)=||Xw-y||^2+\lambda w^T\Gamma^T\Gamma w=w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty+\lambda w^T\Gamma^T\Gamma w$$

求梯度可得

$$\nabla E(w)=2X^TXw-2X^Ty+2\lambda\Gamma^T\Gamma w$$

令梯度为0，解得

$$w=(X^TX+\lambda\Gamma^T\Gamma)^{-1}X^Ty$$

对比11题的公式

$$w=(X^TX+\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}(X^Ty+\tilde{X}^T\tilde{y})$$

比较可得

$$\tilde{X}=\sqrt{\lambda}\Gamma,\tilde{y}=0$$

Problem 22

这题是需要最小化

$$\begin{aligned}E(w)&=||Xw-y||^2+\lambda||w-w_{hint}||^2\\&=w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty+\lambda(w-w_{hint})^T(w-w_{hint})\\&=w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty+\lambda(w^Tw-2w_{hint}^Tw+w_{hint}^Tw_{hint})\end{aligned}$$

求梯度可得

$$\nabla E(w)=2X^TXw-2X^Ty+2\lambda w-2\lambda w_{hint}$$

令梯度为0，解得

$$w=(X^TX+\lambda I)^{-1}(X^Ty+\lambda w_{hint})$$

对比11题的公式

$$w=(X^TX+\tilde{X}^T\tilde{X})^{-1}(X^Ty+\tilde{X}^T\tilde{y})$$

比较可得

$$\tilde{X}=\sqrt{\lambda}I,\tilde{y}=\sqrt{\lambda}w_{hint}$$