大家好，这篇是有关台大机器学习课程作业三的详解，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

$$\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[E_{\text{in}}(w_{\text{lin}})] = \sigma^2(1 - \frac{d+1}{N})$$

这个结论的理论推导可以参考我写的Learning from data习题Exercise 3.3,3.4。

对于此题来说，直接把N解出来即可

$$N = \frac{d+1}{1 - \frac{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[E_{\text{in}}(w_{\text{lin}})]}{\sigma^2}}$$

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 16:15:13 2019

@author: qinzhen
"""

def f(d, delta, Ein):
    return (d + 1) / (1 - Ein / (delta ** 2))

print(f(8, 0.1, 0.008))
```

```
44.99999999999996
```

所以$N \geq 45$即可。

Problem 2

这题实际上是Learning from data Exercise 3.3以及Problem 3.10的结论，这里一并给出。

(1)H是对称矩阵

(2)$H^K=H$ (K为任意正整数)

(3)H的特征值$\in\{0,1\}$

(4)H是半正定矩阵

(5)$\text{trace}(H)=d+1$

(6)H有$d+1$个特征值为1

(1)

$$
\begin{aligned}
H^T&=(X(X^TX)^{-1}X^T)^T\\
&=X((X^TX)^{-1})^TX^T\\
&=X((X^TX)^T)^{-1}X^T\\
&=X(X^TX)^{-1}X^T\\
&=H
\end{aligned}
$$

(2)直接验证即可，先来看$K=2$的情形

$$
\begin{aligned}
H^2&=X(X^TX)^{-1}X^TX(X^TX)^{-1}X^T\\
&=X(X^TX)^{-1}X^T\\
&=H
\end{aligned}
$$

那么对于任意K

$$
\begin{aligned}
H^K&=H^2H^{K-2}\\
&=HH^{K-2}\\
&=H^{K-1}\\
&=\ldots\\
&=H
\end{aligned}
$$

(3)因为$H^K=H$，所以对于H的任意特征值λ

$$
\lambda^K=\lambda\text{恒成立}\\
\lambda=0\text{或}1
$$

(4)H为对称矩阵且特征值$\in\{0,1\}$，所以由线性代数知识可知H半正定

(5)利用迹(trace)的性质$\text{trace}(AB)=\text{trace}(BA)$

$$
\begin{aligned}
\text{trace}(H)&=\text{trace}(X(X^TX)^{-1}X^T)\\
&=\text{trace}(X^TX(X^TX)^{-1})\\
&=\text{trace}(I_{d+1})(\text{注意}H^TH\text{为}(d+1)\times(d+1)\text{阶矩阵})\\
&=d+1
\end{aligned}
$$

(6)我们知道对称矩阵必然相似于对角阵，所以存在可逆矩阵P，使得$H=P^{-1}AP$，那么

$$d+1=\operatorname{trace}(H)=\operatorname{trace}(P^{-1}AP)=\operatorname{trace}(PP^{-1}A)=\operatorname{trace}(A)$$

而A为由$0,1$构成的对角阵（因为A和H相似且H的特征值$\in\{0,1\}$），所以H一共有$d+1$个特征值为1。

有了以上结论，看此题的选项就很轻松了。

(a),(d),(e)成立，(c)错误，稍微要看一下的是(b)，我们知道H的特征值$\in\{0,1\}$，所以H不一定可逆，因此(b)也错误。

Problem 3

先对原式进行变形

$$[\![y\neq\operatorname{sign}(w^Tx)]\!]\Longleftrightarrow[\![y^2\neq y\operatorname{sign}(w^Tx)]\!]\Longleftrightarrow[\![1\neq\operatorname{sign}(yw^Tx)]\!]$$

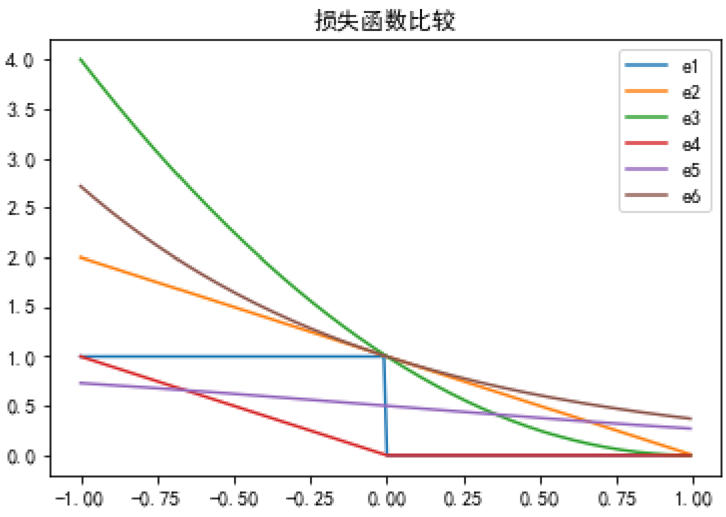
令$s=yw^Tx$，所以几个误差分别可以写成

$$\begin{aligned}
err_1&=[\![sign(s)\neq1]\!]\\
err_2&=\max(0,1-s)\\
err_3&=(\max(0,1-s))^2\\
err_4&=(\max(0,-s))\\
err_5&=\theta(-s)=\frac{e^{-s}}{1+e^{-s}}=\frac{1}{1+e^s}\\
err_6&=e^{-s}
\end{aligned}$$

接着作图。

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 16:22:27 2019

@author: qinzhen
"""

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rcParams['font.sans-serif']=['SimHei'] #用来正常显示中文标签
plt.rcParams['axes.unicode_minus']=False #用来正常显示负号

#构造损失函数
def e1(s):
    if s > 0:
        return 0
    else:
        return 1

def e2(s):
    return max(0, 1 - s)
```

```
def e3(s):
    t = max(0, 1 - s)
    return t ** 2

def e4(s):
    return max(0, -s)

def e5(s):
    return 1 / (1 + np.exp(s))

def e6(s):
    return np.exp(-s)

x = np.arange(-1, 1, 0.01)

y1 = [e1(i) for i in x]
y2 = [e2(i) for i in x]
y3 = [e3(i) for i in x]
y4 = [e4(i) for i in x]
y5 = [e5(i) for i in x]
y6 = [e6(i) for i in x]

plt.plot(x, y1, label='e1')
plt.plot(x, y2, label='e2')
plt.plot(x, y3, label='e3')
plt.plot(x, y4, label='e4')
plt.plot(x, y5, label='e5')
plt.plot(x ,y6, label='e6')
plt.legend()
plt.title('损失函数比较')
plt.show()
```



因此e2，e3，e6，即(a)，(b)，(e)为$[\![y \neq \mathrm{sign}(w^T x)]\!]$的上界。

Problem 4

这题要找哪些函数不是处处可导，(d),(e)显然是处处可导的，因为$f(s)=\max(0,s)$在原点不可导，所以(a),(c)不可导，唯一有点疑问的是(b)，我们来看下$f(s)=(\max(0,s))^2$

$$f(s)=\begin{cases} s^2 & s\ge 0\\ 0 & s<0\end{cases}$$

显然这个函数也是可导的，所以由复合函数的性质可知(b)也可导。因此这题选(a)(c)

Problem 5

$err(w)=\max(0,-y_nw^Tx_n)$的意思是对于分类正确的点$err(w)=0$，对于分类不正确的点$err(w)=-y_nw^Tx_n$，我们来求梯度(不考虑不可导点)

$$\frac{\partial(-y_nw^Tx_n)}{\partial w_i}=-y_nx_n^{(i)}(x_n^{(i)}\text{表示}x_n\text{的第}i\text{个分量})$$
$$\nabla(-y_nw^Tx_n)=-y_nx_n$$

所以对于分类错误的点(x_n,y_n)，根据SGD,更新规则为

$$w(t+1)=w(t)-\eta\nabla E_t(w)=w(t)+\eta y(t)x(t)$$

所以PLA可以被看成$err(w)=\max(0,-y_nw^Tx_n)$的SGD。

Problem 6

$$\frac{\partial E(u,v)}{\partial u}|_{(u,v)=(0,0)}=e^u+ve^{uv}+2u-2v-3|_{(u,v)=(0,0)}=-2$$
$$\frac{\partial E(u,v)}{\partial v}|_{(u,v)=(0,0)}=2e^{2v}+ue^{uv}-2u+4v-2|_{(u,v)=(0,0)}=0$$

所以

$$\nabla E(u,v)=(-2,0)^T$$

Problem 7

编程处理即可,需要利用刚刚的偏导数公式，答案为2.82500035668

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 16:51:10 2019

@author: qinzhen
"""

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

```
def E(u,v):
    return np.exp(u) + np.exp(2 * v) + np.exp(u * v) + u * u - 2 * u * v + 2 * v * v - 3 *
u - 2 * v

def partial(point):
    u = point[0]
    v = point[1]
    pu = np.exp(u) + v * np.exp(u * v) + 2 * u - 2 * v - 3
    pv = 2 * np.exp(2 * v) + u * np.exp(u * v) - 2 * u + 4 * v - 2
    return np.array([pu, pv])

####Problem 7
point = np.zeros(2)
eta = 0.01

for i in range(5):
    point -= eta * partial(point)

print(point)
print(E(point[0], point[1]))
```

```
[0.09413996 0.00178911]
2.8250003566832635
```

Problem 8

这题需要用到多元泰勒公式，可以参考维基百科

$$
\begin{aligned}
b_{uu} &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial u}\frac{\partial E(u,v)}{\partial u} = \frac{1}{2}\frac{\partial(e^u + ve^{uv} + 2u - 2v - 3)}{\partial u} = \frac{1}{2}(e^u + v^2e^{uv} + 2) \\
b_{vv} &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial v^2} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial v}\frac{\partial E(u,v)}{\partial v} = \frac{1}{2}\frac{\partial(2e^{2v} + ue^{uv} - 2u + 4v - 2)}{\partial v} = \frac{1}{2}(4e^{2v} + u^2e^{uv} + 4) \\
b_{uv} &= \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v} = \frac{\partial(e^u + ve^{uv} + 2u - 2v - 3)}{\partial v} = (e^{uv} + uve^{uv} - 2) \\
b_u &= \frac{\partial E(u,v)}{\partial u} = e^u + ve^{uv} + 2u - 2v - 3 \\
b_v &= \frac{\partial E(u,v)}{\partial v} = 2e^{2v} + ue^{uv} - 2u + 4v - 2 \\
b &= E(u,v)
\end{aligned}
$$

将$u = v = 0$带入可得

$$
\begin{aligned}
b_{uu} &= \frac{3}{2} \\
b_{vv} &= 4 \\
b_{uv} &= -1 \\
b_u &= -2 \\
b_v &= 0 \\
b &= 3
\end{aligned}
$$

Problem 9

由题设我们知道Hessian矩阵正定，此处的Hessian矩阵为

$$
\nabla^2 E(u,v) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} & \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v} \\ \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v} & \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial v^2} \end{bmatrix}
$$

那么最优方向为

$$
\begin{bmatrix} \Delta u^* \\ \Delta v^* \end{bmatrix} = -(\nabla^2 E(u,v))^{-1} \nabla E(u,v)
$$

一般性的结论可以参考凸优化的课本，关于这题可以简单证明下。

现在要对$\hat{E}_2(\Delta u, \Delta v) = b_{uu}(\Delta u)^2 + b_{vv}(\Delta v)^2 + b_{uv}(\Delta u)(\Delta v) + b_u \Delta u + b_v \Delta v + b$求最小值，令$\Delta u = t, \Delta v = s$

$$
\begin{aligned}
\hat{E}_2(\Delta u, \Delta v) &= b_{uu}(\Delta u)^2 + b_{vv}(\Delta v)^2 + b_{uv}(\Delta u)(\Delta v) + b_u \Delta u + b_v \Delta v + b \\
&= b_{uu} t^2 + b_{vv}(s^2) + b_{uv} st + b_u t + b_v s + b
\end{aligned}
$$

由Hessian矩阵的正定性我们知道

$$
\begin{aligned}
2b_{uu} &= \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} > 0 \\
2b_{vv} &= \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial v^2} > 0 \\
\frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} - (\frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v})^2 &= 4b_{uu} b_{uv} - b_{uv}^2 > 0
\end{aligned}
$$

所以可以对$\hat{E}_2(\Delta u, \Delta v)$进行配方(二次项系数不为0)，配方得

$$
\begin{aligned}
\hat{E}_2(\Delta u, \Delta v) &= b_{uu} t^2 + b_{vv}(s^2) + b_{uv} st + b_u t + b_v s + b \\
&= b_{uu}(t-a)^2 + b_{vv}(s-b)^2 + b_{uv}(s-a)(t-b) + C
\end{aligned}
$$

其中a, b, C均为常数，后续会求解出来，令$t_1 = t - a, s_1 = s - b$

$$
\begin{aligned}
\hat{E}_2(\Delta u,\Delta v) &= b_{uu}t_1^2+b_{vv}s_1^2+b_{uv}t_1s_1+C\\
&= b_{uu}(t_1+\frac{b_{uv}}{2b_{uu}}s_1)^2+(b_{vv}-\frac{b_{uv}^2}{4b_{uu}})s_1^2+C
\end{aligned}
$$

之前已经有$b_{uu}>0,b_{vv}>0,4b_{uu}b_{uv}-b_{uv}^2>0$，所以

$$
b_{vv}-\frac{b_{uv}^2}{4b_{uu}}=\frac{4b_{uu}b_{vv}-b_{uv}^2}{4b_{uu}}>0
$$

从而

$$
\begin{gathered}
\hat{E}_2(\Delta u,\Delta v)\ge C\\
\text{当且仅当}t_1+\frac{b_{uv}}{2b_{uu}}s_1=0,s_1=0\text{时等号成立}\\
\text{即}t_1=s_1=0\text{时等号成立}
\end{gathered}
$$

因为$t_1=t-a,s_1=s-b,\Delta u=t,\Delta v=s$，所以等号成立条件为

$$
\Delta u=t=a,\Delta v=s=b
$$

接下来求解a,b

$$
\begin{aligned}
b_{uu}(t-a)^2+b_{vv}(s-b)^2+b_{uv}(t-a)(s-b)+C &= b_{uu}(t^2-2at+a^2)+b_{vv}(s^2-2sb+b^2)+b_{uv}(st-as-bt+ab)+C\\
&= b_{uu}t^2+b_{vv}s^2+b_{uv}st-(2ab_{uu}+bb_{uv})t-(2bb_{vv}+ab_{uv})s+C^{'}\\
&= b_{uu}t^2+b_{vv}s^2+b_{uv}st+b_ut+b_vs+b
\end{aligned}
$$

那么

$$
\begin{gathered}
\begin{cases}
-2b_{uu}a-b_{uv}b=b_u\\
-b_{uv}a-2b_{vv}b=b_v
\end{cases}\\
\begin{bmatrix}-2b_{uu} & -b_{uv}\\ -b_{uv} & -2b_{vv}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}b_u\\ b_v\end{bmatrix}
\end{gathered}
$$

回顾之前的等式

$$
\begin{gathered}
2b_{uu}=\frac{\partial^2E(u,v)}{\partial u^2},2b_{vv}=\frac{\partial^2E(u,v)}{\partial v^2},b_{uv}=\frac{\partial^2E(u,v)}{\partial u\partial v}\\
b_u=\frac{\partial E(u,v)}{\partial u},b_v=\frac{\partial E(u,v)}{\partial v}\\
\nabla^2E(u,v)=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2E(u,v)}{\partial u^2} & \frac{\partial^2E(u,v)}{\partial u\partial v}\\ \frac{\partial^2E(u,v)}{\partial u\partial v} & \frac{\partial^2E(u,v)}{\partial v^2}\end{bmatrix}\\
\nabla E(u,v)=\begin{bmatrix}\frac{\partial E(u,v)}{\partial u}\\ \frac{\partial E(u,v)}{\partial v}\end{bmatrix}
\end{gathered}
$$

原方程可化为

$$-\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u^2} & \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v} \\ \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial u \partial v} & \frac{\partial^2 E(u,v)}{\partial v^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial E(u,v)}{\partial u} \\ \frac{\partial E(u,v)}{\partial v} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \Delta u^* \\ \Delta v^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = -(\nabla^2 E(u,v))^{-1} \nabla E(u,v)$$

这样就验证了牛顿法的正确性。

Problem 10

有了公式之后编程实现即可

```
def dpartial(point):
    u = point[0]
    v = point[1]
    puu = np.exp(u) + np.exp(u * v) * (v ** 2) + 2
    pvv = 4 * np.exp(2 * v) + np.exp(u * v) * (u ** 2) + 4
    puv = np.exp(u * v) * (1 + u * v) - 2
    return np.array([[puu, puv], [puv, pvv]])

####Problem 10
point = np.zeros(2)
eta = 0.01

for i in range(5):
    point -= inv(dpartial(point)).dot(partial(point))

print(point)
print(E(point[0], point[1]))
```

```
[0.61181172 0.07049955]
2.360823345643139
```

Problem 11

一般形式的二次转换为

$$(x_1, x_2) \to (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1 x_2, x_2^2)$$

这两个点转换后构成的矩阵为

$$X=\begin{bmatrix}1&1&1&1&1&1\\1&1&-1&1&-1&1\\1&-1&-1&1&1&1\\1&-1&1&1&-1&1\\1&0&0&0&0&0\\1&1&0&1&0&0\end{bmatrix}$$

假设对应标签为y，那么此题的问题是：对于任意y，是否存在w，使得

$$\operatorname{sign}(Xw)=y$$

计算X的行列式可得$|X|\neq 0$，所以X可逆，因此对任意y，我们可以找到w，使得

$$\begin{aligned}w&=X^{-1}y\\Xw&=y\end{aligned}$$

因此我们更有

$$\operatorname{sign}(Xw)=y$$

所以这六个点可以被shatter。

计算行列式的代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 17:05:13 2019

@author: qinzhen
"""

import numpy as np

X = np.array(
        [[1, 1, 1, 1, 1, 1],
         [1, 1, -1, 1, -1, 1],
         [1, -1, -1, 1, 1, 1],
         [1, -1, 1, 1, -1, 1],
         [1, 0, 0, 0, 0, 0],
         [1, 1, 0, 1, 0, 0]]
        )
print(np.linalg.det(X))
```

```
-15.999999999999998
```

Problem 12

先回顾题意，假设有N个点$x_1,\ldots x_N,x\in\mathbb{R}^d$，现在构造这样一个$\mathbb{R}^d$到$\mathbb{R}^N$的映射

$$(\Phi(x))_n = z_n = [\![x = x_n]\!]$$

这题有点抽象，我们举$N=3$的例子看一下

$$\begin{aligned}\Phi(x_1) &= ((\Phi(x_1))_1, (\Phi(x_1))_2, (\Phi(x_1))_3) \\ &= ([\![x_1 = x_1]\!], [\![x_1 = x_2]\!], [\![x_1 = x_3]\!]) \\ &= (1, 0, 0)\end{aligned}$$

所以其实这题很简单，只是将N个$\mathbb{R}^d$空间上的点映射到$\mathbb{R}^N$上，计算后我们可以发现，转换后的特征构成的矩阵为

$$X = I_N$$

所以对任意y，取$w=y$可得

$$\begin{aligned}Xw &= y \\ \text{sign}(Xw) &= y\end{aligned}$$

因此N个点可以shatter，由N的任意性可知

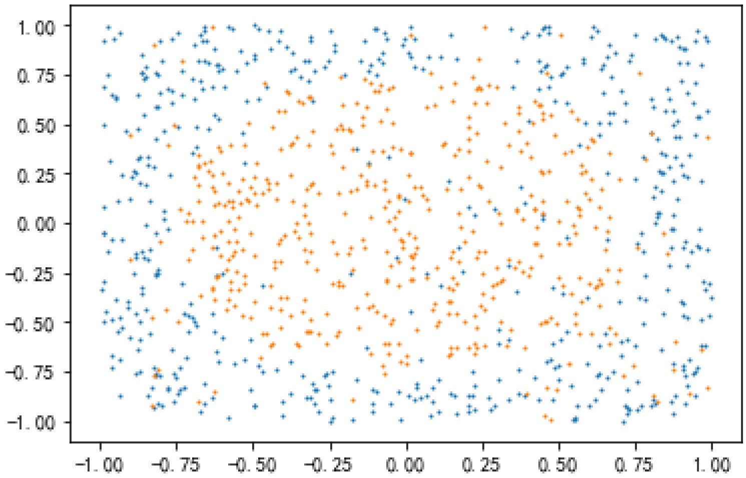
$$d_{vc}(H_\Phi) = +\infty$$

Problem 13

这里先根据题意产生一组点，作图看一下

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 17:28:37 2019

@author: qinzhen
"""

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy.linalg import inv
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
plt.rcParams['font.sans-serif']=['SimHei'] #用来正常显示中文标签
plt.rcParams['axes.unicode_minus']=False #用来正常显示负号

#产生n组点
def generate(n, p=0.1):
    X = np.random.uniform(-1, 1, size=(n, 2))
    y = np.sign(np.sum(X ** 2, axis=1) - 0.6)
    #翻转
    P = np.random.uniform(0, 1, n)
    y[P < p] *= -1
    #产生数据
    return X, y

#数据数量
n = 1000
```

```
#实验次数
m = 1000
X, y = generate(n)

plt.scatter(X[y>0][:, 0], X[y>0][:, 1], s=1)
plt.scatter(X[y<0][:, 0], X[y<0][:, 1], s=1)
plt.show()
```

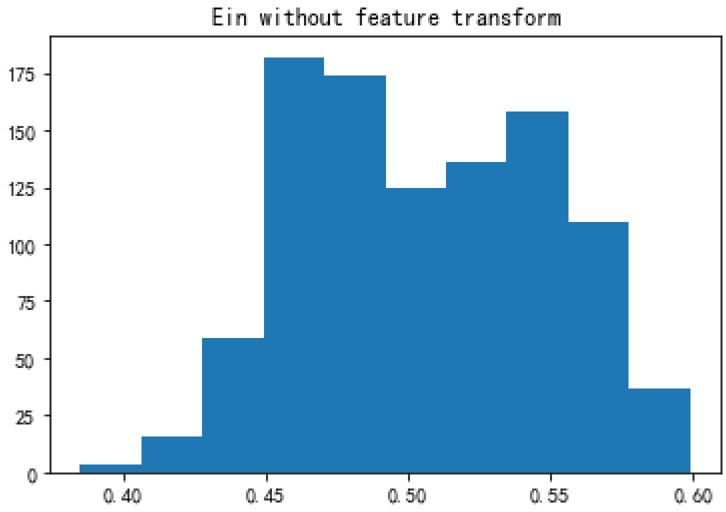


这题直接对数据做回归，需要模拟1000次。这里利用了如下公式来求回归的结果

$$w = (X^T X)^{-1} X^T y$$

```
#Problem 13
Ein = np.array([])
for i in range(m):
    X, y = generate(n)
    X = np.c_[np.ones(n), X]

    w = inv(X.T.dot(X)).dot(X.T).dot(y)

    ein = np.mean(np.sign(X.dot(w) * y) < 0 )
    Ein = np.append(Ein, ein)

print(np.average(Ein))
plt.hist(Ein)
plt.title('Ein without feature transform')
plt.show()
```

```
0.505447
```



所以E_{in}的均值约为0.5。

Problem 14

先做特征转换，再重复上题的步骤，画出$\tilde{w}_3$的直方图，这里把15题的任务一起做了。

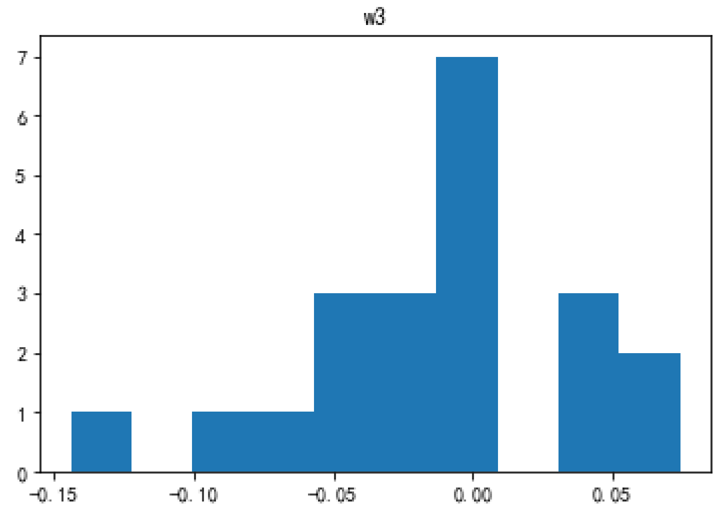
（备注，sklearn的PolynomialFeatures(2)转换结果如下：

$$(x_1, x_2) \to (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2)$$

所以$\tilde{w}_3$对应于第4个分量（0为第一个分量）。

```
#Problem 14
#多项式转换器
poly = PolynomialFeatures(2)
W = []
Eout = np.array([])
Ein = np.array([])
for i in range(m):
    X, y = generate(n)
    X_poly = poly.fit_transform(X)

    w_poly = inv(X_poly.T.dot(X_poly)).dot(X_poly.T).dot(y)

    ein = np.mean(np.sign(X_poly.dot(w_poly) * y) < 0)
    Ein = np.append(Ein, ein)
    #测试数据
    X_test, y_test = generate(n)
    X_test_poly = poly.fit_transform(X_test)
    eout = np.mean(np.sign(X_test_poly.dot(w_poly) * y_test) < 0)
    Eout  = np.append(Eout, eout)

    #记录w
    W.append(w_poly)

W = np.array(W)
w3 = W[:, 4]
```

```
plt.hist(w3)
plt.title('w3')
plt.show()
print("w3的均值{}".format(w3.mean()))
print("w的均值" + str(np.mean(W, axis=0)))
```

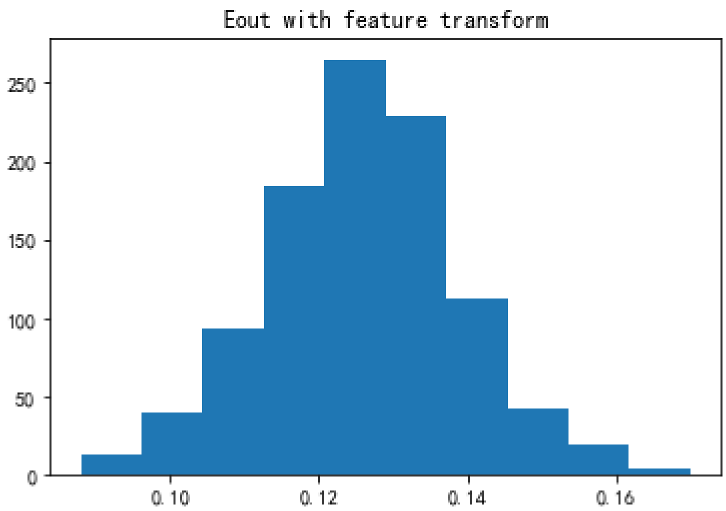



```
w3的均值-0.011925513186691142
w的均值[-0.99853694  0.00427153  0.00298056  1.55328108 -0.01192551  1.5622585 ]
```

Problem 15

做出E_{out}的直方图

```
#Problem 15
plt.hist(Eout)
plt.title('Eout with feature transform')
plt.show()
print(Eout.mean())
```



```
0.125842
```

所以E_{out}的平均值为0.126左右。

Problem 16

这题实际上是多元Logistic回归，同课件里的例子，我们要最大化似然函数，这等价于题目中所说的最小化负的对数似然函数，先把似然函数求解出来

$$L=\prod_{j=1}^{N}\frac{\exp(w_{y_j}^Tx_j)}{\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j)}$$

$$\ln(L)=\sum_{j=1}^{N}[\ln(\exp(w_{y_j}^Tx_j))-\ln(\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j))]=\sum_{j=1}^{N}[w_{y_j}^Tx_j-\ln(\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j))]$$

所以只要最小化

$$E_{\text{in}}=-\frac{\ln(L)}{N}=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}[\ln(\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j))-w_{y_j}^Tx_j]$$

即可。

Problem 17

求偏导可得（注意这里w_n为向量）

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{\text{in}}}{\partial w_n}&=\frac{\partial(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}[\ln(\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j))-w_{y_j}^Tx_j])}{\partial w_n}\\&=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\Big(\frac{\exp(w_n^Tx_j)x_j}{\sum_{i=1}^{K}\exp(w_i^Tx_j)}-[\![y_j=n]\!]x_j\Big)\\&=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\Big((h_n(x_j)-[\![y_j=n]\!])x_j\Big)\end{aligned}$$

Problem 18

使用梯度下降公式

$$\begin{aligned}\nabla E_{\text{in}}(w)&=-\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{y_nx_n}{1+e^{y_nw^Tx_n}}\\&=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_nx_n\theta(-y_nw^Tx_n)\end{aligned}$$

为了提升计算速度，对上述式子向量化，假设$x_i \in \mathbb{R}^d$

$$X=\begin{bmatrix} x_1^T \\ \vdots \\ x_N^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times d}, y=\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N}, w \in \mathbb{R}^d$$

$$Xw=\begin{bmatrix} x_1^T w \\ \vdots \\ x_N^T w \end{bmatrix}$$

所以我们可以先计算Xw，然后和$-y$进行“元素相乘”，得到

$$(-y).Xw=\begin{bmatrix} -y_1 x_1^T w \\ \vdots \\ -y_N x_N^T w \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N}$$

然后将上式喂入sigmoid函数。这两步对应代码如下

```
def sigmoid(s):
    return 1 / (np.exp(-s) + 1)

temp1 = - X.dot(w) * y
temp2 = sigmoid(temp1)
```

接着将X与$-y$进行“元素相乘”，得到

$$(-y).X=\begin{bmatrix} -y_1 x_1^T \\ \vdots \\ -y_N x_N^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times d}$$

对应代码如下

```
temp3 = - X * y
```

最后将temp2和temp3进行“元素相乘”，得到

$$\begin{bmatrix} -y_1 x_1^T \theta(-y_1 x_1^T w) \\ \vdots \\ -y_N x_N^T \theta(-y_N x_N^T w) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times d}$$

对这个矩阵按行求和取平均值即可得到

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_nx_n\theta(-y_nw^Tx_n)$$

对应代码如下

```
grad = np.mean(temp3 * temp2, axis=0).reshape(-1, 1)
```

全部代码如下

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar  6 18:14:03 2019

@author: qinzhen
"""

import numpy as np

def preprocess(X):
    """
    添加偏置项
    """
    n = X.shape[0]
    return np.c_[np.ones(n), X]

#数据读入
data_train = np.genfromtxt("hw3_train.dat")
X_train = data_train[:, :-1]
y_train = data_train[:, -1].reshape(-1, 1)
X_train = preprocess(X_train)
data_test = np.genfromtxt("hw3_test.dat")
X_test = data_test[:, :-1]
y_test = data_test[:, -1].reshape(-1, 1)
X_test = preprocess(X_test)

#定义函数
def sigmoid(s):
    return 1 / (np.exp(-s) + 1)

def gradient(X, w, y):
    temp1 = - X.dot(w) * y
    temp2 = sigmoid(temp1)
    temp3 = - X * y
    grad = np.mean(temp3 * temp2, axis=0).reshape(-1, 1)

    return grad

#数据组数和维度
n, m = X_train.shape

#Problem 18
w = np.zeros((m, 1))
```

```
k = 0.001

for i in range(2000):
    grad = gradient(X_train, w, y_train)
    w -= k * grad

#计算标签
y_test_pred = X_test.dot(w)
y_test_pred[y_test_pred > 0] = 1
y_test_pred[y_test_pred <= 0] = -1
#计算Eout
Eout = np.mean(y_test_pred != y_test)
#求出误差
print(Eout)
print(w)
```

```
0.475
[[ 0.01878417]
 [-0.01260595]
 [ 0.04084862]
 [-0.03266317]
 [ 0.01502334]
 [-0.03667437]
 [ 0.01255934]
 [ 0.04815065]
 [-0.02206419]
 [ 0.02479605]
 [ 0.06899284]
 [ 0.0193719 ]
 [-0.01988549]
 [-0.0087049 ]
 [ 0.04605863]
 [ 0.05793382]
 [ 0.061218  ]
 [-0.04720391]
 [ 0.06070375]
 [-0.01610907]
 [-0.03484607]]
```

所以E_{out}为0.475。

Problem 19

取$\eta = 0.01$

```
#Problem 19
w = np.zeros((m, 1))
k = 0.01

for i in range(2000):
    grad = gradient(X_train, w, y_train)
```

```
    w -= k * grad

#计算标签
y_test_pred = X_test.dot(w)
y_test_pred[y_test_pred > 0] = 1
y_test_pred[y_test_pred <= 0] = -1
#计算Eout
Eout = np.mean(y_test_pred != y_test)
#求出误差
print(Eout)
print(w)
```

```
0.22
[[-0.00385379]
 [-0.18914564]
 [ 0.26625908]
 [-0.35356593]
 [ 0.04088776]
 [-0.3794296 ]
 [ 0.01982783]
 [ 0.33391527]
 [-0.26386754]
 [ 0.13489328]
 [ 0.4914191 ]
 [ 0.08726107]
 [-0.25537728]
 [-0.16291797]
 [ 0.30073678]
 [ 0.40014954]
 [ 0.43218808]
 [-0.46227968]
 [ 0.43230193]
 [-0.20786372]
 [-0.36936337]]
```

所以E_{out}为0.22。

Problem 20

使用随机梯度下降，只要对之前的式子稍作修改即可。

```
#Problem 20
w = np.zeros((m, 1))
k = 0.001

#计数器
j = 0
for i in range(2000):
    x = X_train[j, :].reshape(1, -1)
    s = gradient(x, w, y_train[j])
    w -= k * s
```

```
    #更新下标
    j += 1
    j = j % n

#计算标签
y_test_pred = X_test.dot(w)
y_test_pred[y_test_pred > 0] = 1
y_test_pred[y_test_pred <= 0] = -1
#计算sign(Xw)
Eout = np.mean(y_test_pred != y_test)
#求出误差
print(Eout)
print(w)
```

```
0.473
[[ 0.01826899]
 [-0.01308051]
 [ 0.04072894]
 [-0.03295698]
 [ 0.01498363]
 [-0.03691042]
 [ 0.01232819]
 [ 0.04791334]
 [-0.02244958]
 [ 0.02470544]
 [ 0.06878235]
 [ 0.01897378]
 [-0.02032107]
 [-0.00901469]
 [ 0.04589259]
 [ 0.05776824]
 [ 0.06102487]
 [-0.04756147]
 [ 0.06035018]
 [-0.01660574]
 [-0.03509342]]
```

所以E_{out}为0.473。

以下两题为附加题。

Problem 21

先回顾题目，注意题目中是行向量，为了叙述一致，这里均改为列向量：

$$
\begin{aligned}
h &= (h(x_1), h(x_2), \ldots, h(x_N))^T \in \mathbb{R}^N \\
y &= (y_1, y_2, \ldots, y_N)^T \in \mathbb{R}^N \\
\text{RMSE}(h) &= \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_n - h(x_n))^2}
\end{aligned}
$$

题目问的是要计算$h^T y$，至少需要调用几次$\mathrm{RMSE}(h)$，注意这里只知道h。首先感觉要求出y，因为有N个未知数，所以第一感觉是要调用N次，但是$N=1$时就不成立，因为有平方项。所以推测调用N次不行，接下来证明至少需要调用$N+1$次。

对$\mathrm{RMSE}(h)$进行改写

$$\begin{aligned}
\mathrm{RMSE}(h) &= \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_n - h(x_n))^2} \\
&= \sqrt{\frac{1}{N}||h-y||^2} \\
&= \sqrt{\frac{1}{N}(h-y)^T(h-y)} \\
&= \sqrt{\frac{1}{N}(y^Ty - 2h^Ty + h^Th)}
\end{aligned}$$

两边平方移项可得

$$y^Ty - 2h^Ty + h^Th = N\times(\mathrm{RMSE}(h))^2$$

现在对两个不同的h_1,h_2调用$\mathrm{RMSE}(h)$

$$\begin{aligned}
y^Ty - 2h_1^Ty + h_1^Th_1 = N\times(\mathrm{RMSE}(h_1))^2 \\
y^Ty - 2h_2^Ty + h_2^Th_2 = N\times(\mathrm{RMSE}(h_2))^2
\end{aligned}$$

两式相减可得

$$2(h_2^T - h_1^T)y = N\times(\mathrm{RMSE}(h_1))^2 - N\times(\mathrm{RMSE}(h_2))^2 - (h_1^Th_1 - h_2^Th_2)$$

这样就得到了一个线性方程。现在对$h_1,h_2,\ldots,h_k$分别调用$\mathrm{RMSE}(h)$，计算$\mathrm{RMSE}(h_i)-\mathrm{RMSE}(h_1)$，其中$(i=2,\ldots k)$，根据之前所述可以得到$k-1$个线性方程组，有如下形式

$$\begin{gathered}
M_1y = M_2 \\
M_1\in\mathbb{R}^{(k-1)\times N}, y\in\mathbb{R}^N, M_2\in\mathbb{R}^{k-1}
\end{gathered}$$

由线性代数知识我们知道，当$k-1=N$，即$k=N+1$时，上式可能有唯一解，当$k\le N$时，上式有无穷多组解，因此至少需要调用$N+1$次$\mathrm{RMSE}(h)$。

Problem 22

为方便叙述，这里做以下记号，注意这里为列向量，和上题有所不同

$$h=\begin{pmatrix} h_1(x_1) & h_2(x_1) & \ldots & h_K(x_1) \\ h_1(x_2) & h_2(x_2) & \ldots & h_K(x_2) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ h_1(x_N) & h_2(x_N) & \ldots & h_K(x_N) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times K}$$
$$w=(w_1,w_2,\ldots,w_K)^T \in \mathbb{R}^K$$
$$y=(y_1,y_2,\ldots,y_N)^T \in \mathbb{R}^N$$

那么$\mathrm{RMSE}(H)$可以表示为

$$\mathrm{RMSE}(H)=\sqrt{\frac{1}{N}||y-hw||^2}=\sqrt{\frac{1}{N}(y-hw)^T(y-hw)}$$

由线性回归的推导我们知道最小化$\mathrm{RMSE}(H)$的w满足以下条件

$$X^TXw=X^Ty$$

X已知，y未知，所以求出y即可，由上一题我们知道至少调用$N+1$次$\mathrm{RMSE}(H)$就可以求出y，所以这题也至少需要调用$N+1$次。