模式识别作业六

数据科学与计算机学院　17大数据与人工智能

17341015　陈鸿峥

问题 1 (§5 Q4). 考虑判别中用的超平面。

(a) 证明在从超平面$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = 0$到点$\mathbf{x}_a$的距离为$|g(\mathbf{x}_a)| / \|\mathbf{w}\|$，且对应的点是约束条件$g(\mathbf{x}) = 0$下的满足使$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_a\|^2$最小的$\mathbf{x}$。

(b) 证明$\mathbf{x}_a$到超平面的投影为

$$\mathbf{x}_p = \mathbf{x}_a - \frac{g(\mathbf{x}_a)}{\|\mathbf{w}\|^2}\mathbf{w}$$

解答. (a) 构造拉格朗日函数

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{x}, \lambda) &= \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_a\|^2 + 2\lambda[g(\mathbf{x})] \\
&= \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_a\|^2 + 2\lambda\left[\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0\right] \\
&= (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^{\mathrm{T}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) + 2\lambda\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0\right) \\
&= \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + \mathbf{x}_a^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + 2\lambda\left(\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} + w_0\right)
\end{aligned}$$

分别求偏导有

$$\begin{cases}
\frac{\partial f(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_a + \lambda\mathbf{w} = 0 \\
\frac{\partial f(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + w_0 = 0
\end{cases}$$

联立可解得

$$\lambda = \frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + w_0}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}}$$

进而有

$$\begin{aligned}
\mathbf{x} &= \mathbf{x}_a - \lambda\mathbf{w} \\
&= \begin{cases}
\mathbf{x}_a - \left[\frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + w_0}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}}\right]\mathbf{w} & \mathbf{w} \neq \mathbf{0} \\
\mathbf{x}_a & \mathbf{w} = \mathbf{0}
\end{cases}
\end{aligned}$$

代入原式得到距离最小值

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_a\| &= \left\|\mathbf{x}_a - \left[\frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + w_0}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}}\right]\mathbf{w} - \mathbf{x}_a\right\| \\
&= \left\|\left(\frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + w_0}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}}\right)\mathbf{w}\right\| \\
&= \frac{|g(\mathbf{x}_a)|\,\|\mathbf{w}\|}{\|\mathbf{w}\|^2} = \frac{|g(\mathbf{x}_a)|}{\|\mathbf{w}\|}
\end{aligned}$$

(b) 由于(a)已经得到从超平面到$\mathbf{x}$的最小距离，而$\mathbf{x}_a$的投影即为拉格朗日求导等于零求出来

的$\mathbf{x}$值，即

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_p &= \mathbf{x}_a - \lambda\mathbf{w} \\ &= \mathbf{x}_a - \frac{g(\mathbf{x}_a)}{\|\mathbf{w}\|^2}\mathbf{w}\end{aligned}$$

其中

$$\lambda = \frac{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_a + w_0}{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}} = \frac{g(\mathbf{x}_a)}{\|\mathbf{w}\|^2}$$

问题 2 (§5 Q14)**.** *考虑平方误差和准则函数（式(43)）*

$$J_s(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^{n}(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i - b_i)^2$$

令$b_i = b$，取如下6个训练点：

$$\begin{array}{llll} \omega_1 & : (1,5)^{\mathrm{T}} & (2,9)^{\mathrm{T}} & (-5,-3)^{\mathrm{T}} \\ \omega_2 & : (2,-3)^{\mathrm{T}} & (-1,-4)^{\mathrm{T}} & (0,2)^{\mathrm{T}} \end{array}$$

(a) 计算它的Hessian矩阵

(b) 假定二次准则函数，计算最优学习率η

解答. 将训练集数据ω_1和ω_2构成矩阵，并扩增一个维度，得到

$$Y = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & 9 \\ 1 & -5 & -3 \\ -1 & -2 & 3 \\ -1 & 1 & 4 \\ -1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b \\ b \\ b \\ b \\ b \\ b \end{pmatrix}$$

平方误差准则函数为

$$\mathbf{J}_s(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i - b\right)^2 = \frac{(Y\mathbf{a}-\mathbf{b})^{\mathrm{T}}(Y\mathbf{a}-\mathbf{b})}{2}$$

(a) 对准则函数求导得到

$$\nabla J_s(\mathbf{a}) = Y^{\mathrm{T}}(Y\mathbf{a}-\mathbf{b}) = \begin{pmatrix} 6a_1 & - & a_2 & + & 6a_3 & + & 0 \\ -a_1 & + & 35a_2 & + & 36a_3 & + & 3b \\ 6a_1 & + & 36a_2 & + & 144a_3 & - & 16b \end{pmatrix}$$

进而Hessian矩阵为

$$H = Y^{\mathrm{T}}Y = \begin{pmatrix} 6 & -1 & 6 \\ -1 & 35 & 36 \\ 6 & 36 & 144 \end{pmatrix}$$

(b) 最优学习率

$$\eta = \frac{[\boldsymbol{\nabla} J_s(\mathbf{a})]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} J_s(\mathbf{a})}{[\boldsymbol{\nabla} J_s(\mathbf{a})]^{\mathrm{T}} H \nabla J_s(\mathbf{a})}$$

通过求解特征方程，得到$\mathbf{H}$的特征值为$5.417, 24.57, 155.0$，进而$0.006452 \leq \eta \leq 0.1846$

问题 3 (§5 Q21)**.** *证明MSE解法中的尺度因子α和Fisher线性判别（5.8.2节）的对应关系为*

$$\alpha = \left[1 + \frac{n_1 n_2}{n} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)\right]^{-1}$$

解答. 由等式(54)有权重向量

$$\mathbf{w} = \alpha n \mathbf{S}_w^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$$

其中$\mathbf{w}$满足

$$\left[\frac{1}{n}\mathbf{S}_w + \frac{n_1 n_2}{n^2} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^{\mathrm{T}}\right] \mathbf{w} = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$$

将$\mathbf{w}$代入上式得到

$$\left[\frac{1}{n}\mathbf{S}_w + \frac{n_1 n_2}{n^2} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^{\mathrm{T}}\right] \alpha n \mathbf{S}_w^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$$

进而

$$\alpha\theta (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) = \mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2$$

其中

$$\theta = 1 + \frac{n_1 n_2}{n^2} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$$

由于这条等式对于所有$\mathbf{m}_1$和$\mathbf{m}_2$成立，因此我们有$\alpha\theta = 1$，或者下式成立

$$\alpha = \left[1 + \frac{n_1 n_2}{n^2} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_w^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)\right]^{-1}$$

问题 4 (§5 Q28)**.** *在5.10.2节给出的线性规划公式包含了一个极小化的人工变量τ，且满足约束条件$\mathbf{a}^{\mathrm{T}} y_i + \tau > b_i$及$\tau \geq 0$。证明得到的权向量使得以下准则函数极小化：*

$$J_\tau(\mathbf{a}) = \max_{\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i \leq b_i} [b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i]$$

解答. 实际上即找

$$\forall i : \min \left\{ t : t \geq 0, \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i \right\}$$

而目标是使权重向量$\mathbf{a}$最小化准则函数

$$J_t(\mathbf{a}) = \max_{i:\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i \leq b_i} \left(b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right)$$

将其分为线性可分和线性不可分两种情况处理。

(a) 线性可分情况下，存在$\mathbf{a}_o$使得$\mathbf{a}_o^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i = b_i$，那么显然

$$\forall t > 0, i : \ \mathbf{a}_o^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i$$

因此我们有对于所有的i

$$\begin{aligned} 0 &\leq \min \left\{ t : t \geq 0, \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i \right\} \\ &\leq \min \left\{ t : t \geq 0, \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i \right\} = 0 \end{aligned}$$

进而

$$\min \left\{ t : t \geq 0, \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i \right\} = 0$$

得到的权重向量即为$\mathbf{a}_o$。由$J_t(\mathbf{a}) \geq 0, \forall \mathbf{a}$且$J_t(\mathbf{a}_o) = 0$，可知

$$\arg\min_{\mathbf{a}} J_t(\mathbf{a}) = \mathbf{a}_o$$

这说明使$\mathbf{a}$最小化$J_t(\mathbf{a})$等价于解决修改后的问题。

(b) 线性不可分下，不存在$\mathbf{a}_o$使得$\mathbf{a}_o^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i = b_i$，那么

$$\begin{aligned} \forall i : \ \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ t : t \geq 0, \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i + t > b_i \right\} &= \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ t : t \geq 0, t > b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right\} \\ &= \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ t : t \geq 0, t > \max_i \left(b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right) \right\} \\ &= \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ t : t > 0, t > \max_i \left(b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right) \right\} \\ &= \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ t : t > \max_{i:\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i \leq b_i} \left(b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right) \right\} \\ &= \min_{t,\mathbf{a}} \left\{ \max_{i:\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_i \leq b_i} \left(b_i - \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_i \right) \right\} \\ &= \min_{\mathbf{a}} J_t(\mathbf{a}) \end{aligned}$$

问题 5 (§5 Q32). 考虑支持向量机和分属两类的训练样本:

$$\omega_1\text{:}\quad (1,1)^{\mathrm{T}}\quad (2,2)^{\mathrm{T}}\quad (2,0)^{\mathrm{T}}$$
$$\omega_2\text{:}\quad (0,0)^{\mathrm{T}}\quad (1,0)^{\mathrm{T}}\quad (0,1)^{\mathrm{T}}$$

(a) 在图中作出这6个训练点，构造具有最优超平面和最优间隔的权向量。

(b) 哪些是支持向量？

(c) 通过寻找拉格朗日待定系数α_i来构造在对偶空间的解，并将它与*(a)*中的结果比较。

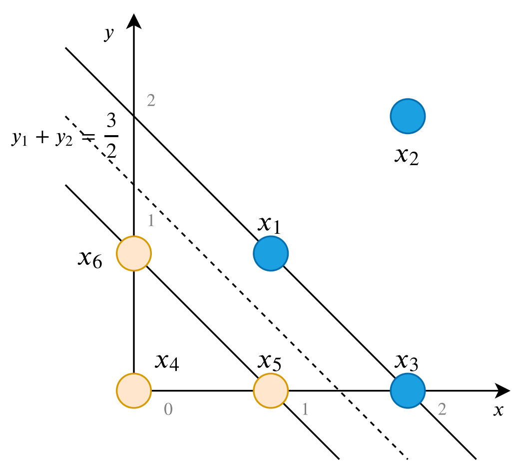
解答. (a) 按序编号

$$\omega_1 : \mathrm{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathrm{x}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \mathrm{x}_3 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\omega_2 : \mathrm{x}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathrm{x}_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathrm{x}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

且$z_1 = z_2 = z_3 = -1, z_4 = z_5 = z_6 = 1$。最优超平面为$y_1 + y_2 = 3/2$，即

$$(3/2, -1, -1)^{\mathrm{T}}\,(1, y_1, y_2) = 0$$

将其做放缩变换$(\times 2)$，得到权向量为$(3, -2, -2)^{\mathrm{T}}$。



最优间隔为从样本点到超平面的最小距离，如上图所示，为$\sqrt{2}/4$。

(b) 从上图可以清晰看出，支持向量为

$$\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6\} = \left\{(1,1)^{\mathrm{T}}, (2,0)^{\mathrm{T}}, (1,0)^{\mathrm{T}}, (0,1)^{\mathrm{T}}\right\}$$

(c) 最大化式(109)给出的准则函数

$$L(\boldsymbol{\alpha})=\sum_{k=1}^{n}\alpha_k-\frac{1}{2}\sum_{k,j}^{n}\alpha_k\alpha_j z_k z_j \mathbf{y}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{y}_k$$
$$\text{s.t.}\sum_{k=1}^{n}z_k\alpha_k=0,\ \alpha_k\geq 0$$

使用约束条件，可用下式消除一个元

$$\alpha_6=\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3-\alpha_4-\alpha_5$$

求偏导得到

$$\begin{bmatrix}-1&-2&-2&0&1\\-2&-5&2&-1&1\\-2&2&-5&1&1\\0&-1&1&-1&-1\\1&1&3&-1&-2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\\\alpha_3\\\alpha_4\\\alpha_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2\\-2\\-2\\0\\0\end{bmatrix}$$

但是这个方程组不相容，因此最大值一定在边界处取到（即有些α_i消失了）。接下来尝试分别令每一个$\alpha_i=0$来求解。

- $\alpha_1=0$时，
$$\frac{\partial L\left(0,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4,\alpha_5\right)}{\partial\alpha_i}=0$$
可解得$\boldsymbol{\alpha}=(0,-1/10,-1/10,8/5,-8/5,-4/5)^{\mathrm{T}}$
- $\alpha_2=0$时，下式导致不相容
$$\frac{\partial L\left(\alpha_1,0,\alpha_3,\alpha_4,\alpha_5\right)}{\partial\alpha_i}=0$$
- $\alpha_3=0$时，下式导致不相容
$$\frac{\partial L\left(\alpha_1,\alpha_2,0,\alpha_4,\alpha_5\right)}{\partial\alpha_i}=0$$
- $\alpha_4=0$时，
$$\frac{\partial L\left(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,0,\alpha_5\right)}{\partial\alpha_i}=0$$
解得$\boldsymbol{\alpha}=1/5(16,0,4,0,14,6)^{\mathrm{T}}$，满足$\alpha_i\geq 0$的限制，此时准则函数$L(\boldsymbol{\alpha})=4$
- $\alpha_5=0$时，
$$\frac{\partial L\left(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4,0\right)}{\partial\alpha_i}=0$$

得到$\boldsymbol{\alpha} = 1/5(2,2,2,0,0,6)^{\mathrm{T}}$，满足$\alpha_i \geq 0$的限制，此时准则函数$L(\boldsymbol{\alpha}) = 1.2$

故$\boldsymbol{\alpha} = 1/5(16,0,4,0,14,6)^{\mathrm{T}}$时，准则函数$L$取得最大值，且满足限制条件。

接下来计算权向量$\mathbf{a}$。视$\mathbf{a}$为变量，尝试最小化式(108)中的

$$L(\mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{a}\|^2 - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left[z_k \mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_k - 1 \right]$$

求导有

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{a} - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k z_k \mathbf{y}_k = \mathbf{0}$$

进而$\mathbf{a} = (0,-2,-2)^{\mathrm{T}}$。

最后确定a_0。使用支持向量$\mathbf{y} = (1,1,1)^{\mathrm{T}}$，满足$\mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{y}_1 z_1 = 1$，得到

$$-\begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} (1,1,1) = -a_0 + 4 = 1$$

求得$a_0 = 3$，最终的权向量为$\mathbf{a} = (3,-2,-2)^{\mathrm{T}}$。