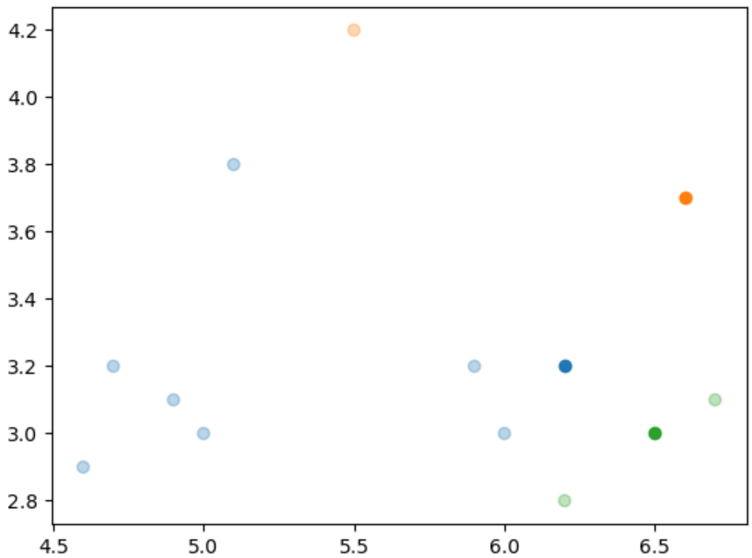
hw4

1. 考虑如下数据集，运行 K-Means 算法对其进行聚类，K 设置为 3，距离度量采用欧氏距离，三个聚类的类中心分别初始化为 $(6.2, 3.2), (6.6, 3.7), (6.5, 3.0)$。请给出在前三轮迭代过程中，三个聚类中心以及每个聚类所包含的样本的变化。

$$X = \begin{bmatrix} 5.9 & 3.2 \\ 4.6 & 2.9 \\ 6.2 & 2.8 \\ 4.7 & 3.2 \\ 5.5 & 4.2 \\ 5.0 & 3.0 \\ 4.9 & 3.1 \\ 6.7 & 3.1 \\ 5.1 & 3.8 \\ 6.0 & 3.0 \end{bmatrix}$$

答：第一轮迭代：

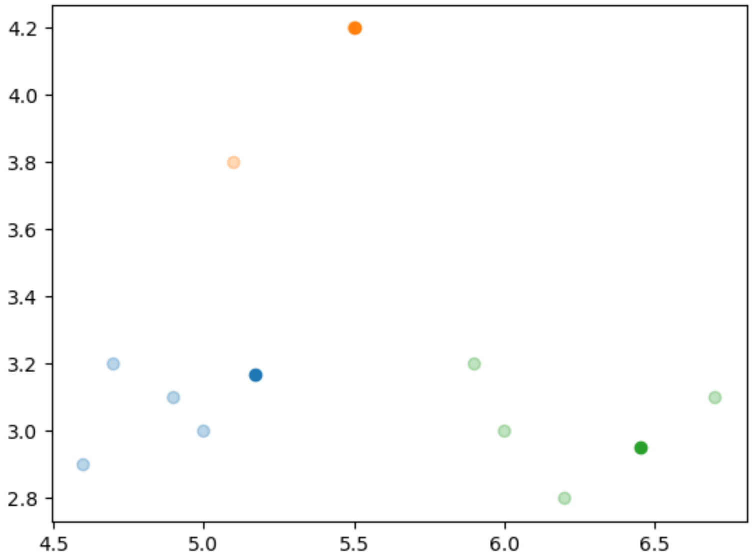
$$X_{(6.2,3.2)} = \begin{bmatrix} 5.9 & 3.2 \\ 4.6 & 2.9 \\ 4.7 & 3.2 \\ 5.0 & 3.0 \\ 4.9 & 3.1 \\ 5.1 & 3.8 \\ 6.0 & 3.0 \end{bmatrix} \quad X_{(6.6,3.7)} = \begin{bmatrix} 5.5 & 4.2 \end{bmatrix} \quad X_{(6.5,3.0)} = \begin{bmatrix} 6.2 & 2.8 \\ 6.7 & 3.1 \end{bmatrix}$$



聚类中心：$(5.17, 3.17), (5.50, 4.20), (6.45, 2.95)$

第二轮迭代：

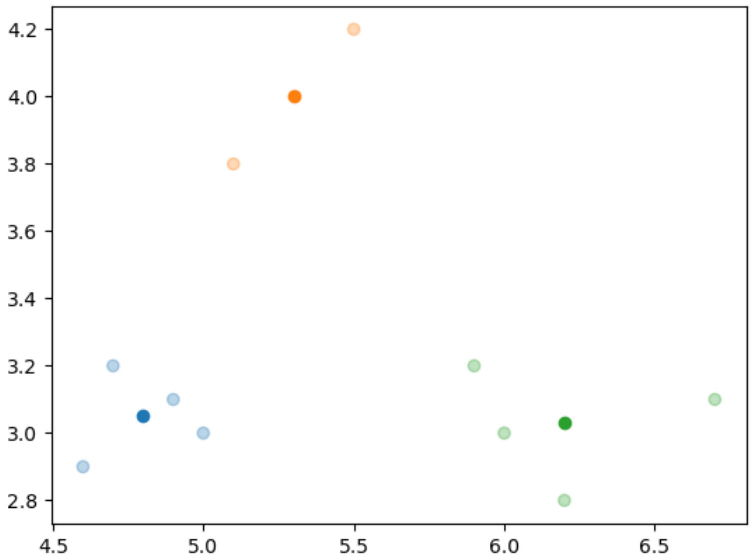
$$X_{(5.17,3.17)} = \begin{bmatrix} 4.6 & 2.9 \\ 4.7 & 3.2 \\ 5.0 & 3.0 \\ 4.9 & 3.1 \end{bmatrix} \quad X_{(5.50,4.20)} = \begin{bmatrix} 5.5 & 4.2 \\ 5.1 & 3.8 \end{bmatrix} \quad X_{(6.45,2.95)} = \begin{bmatrix} 5.9 & 3.2 \\ 6.2 & 2.8 \\ 6.7 & 3.1 \\ 6.0 & 3.0 \end{bmatrix}$$



聚类中心：$(4.80, 3.05), (5.30, 4.00), (6.20, 3.03)$

第三轮迭代：

$$X_{(4.80,3.05)} = \begin{bmatrix} 4.6 & 2.9 \\ 4.7 & 3.2 \\ 5.0 & 3.0 \\ 4.9 & 3.1 \end{bmatrix} \quad X_{(5.30,\ 4.00)} = \begin{bmatrix} 5.5 & 4.2 \\ 5.1 & 3.8 \end{bmatrix} \quad X_{(6.20,3.03)} = \begin{bmatrix} 5.9 & 3.2 \\ 6.2 & 2.8 \\ 6.7 & 3.1 \\ 6.0 & 3.0 \end{bmatrix}$$



聚类中心：$(4.80, 3.05), (5.30, 4.00), (6.20, 3.03)$

2. 考虑一个包含 4 个维度为 2 的样本的数据集：$(-1,-1), (0.5,-0.5), (1,1), (-0.5,0.5)$，采用 PCA 算法将其降维到 1维，请计算降维后样本的方差。

答：已知 $X=\begin{bmatrix}-1 & 0.5 & 1 & -0.5\\ -1 & -0.5 & 1 & 0.5\end{bmatrix}$，则 $XX^T=\begin{bmatrix}2.5 & 1.5\\ 1.5 & 2.5\end{bmatrix}$，特征值为 $4,1$，因此选取特征值为 4 的特征向量 $\eta=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^T$ 作为 W，故降维后的点为：$W^TX=\begin{bmatrix}-\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 0\end{bmatrix}$，均值为 0，无偏方差为 $\frac{4}{3}$

3. 基于 PCA 的优化目标，给出 PCA 的解的形式。
   答：对于优化问题：

$$
\begin{array}{c}
\texttt{minimize}(\text{over } W) \quad -\operatorname{tr}(W^TXX^TW) \\
\texttt{subject to } \; W^TW=I
\end{array}
$$

   构造拉格朗日函数：

$$
\begin{aligned}
L(W,Z) &= -\operatorname{tr}(W^TXX^TW)+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}Z_{ij}(W^TW-I)_{ij} \\
&= -\operatorname{tr}(W^TXX^TW)+\operatorname{tr}(W^TWZ^T)+\operatorname{tr}(Z) \\
&= \operatorname{tr}(W^TWZ^T-W^TXX^TW)+\operatorname{tr}(Z)
\end{aligned}
$$

   求梯度：

$$
\nabla_W L(W,Z)=WZ^T-XX^TW
$$

   令梯度为 0，得到 $XX^TW=WZ^T$。若设 XX^T 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_n$，则 $Z=\operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_{d'})$，而 W 为对应的特征向量。且有对偶函数 $g(Z)=\operatorname{tr}(Z)$，对偶问题为：

$$
\begin{array}{ll}
\texttt{maximize} & \operatorname{tr}(Z) \\
\texttt{subject to} & Z=\operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_{d'})
\end{array}
$$

   只需将 XX^T 的特征值从大到小排序，选择最大的 d' 个特征值（重根按重数计）组成 Z，即可得到对偶问题的最优解。同时其也是原问题的最优解。此时 W 是对应的特征向量组成的矩阵。

4. 在作业二的第三题，我们讨论了一个小镇汽车模拟的场景，探索了基于规则的解决方案，在学习了强化学习之后，试论述如何基于强化学习方法学得车辆的控制策略，讨论基于规则的方法和基于强化学习方法的优劣，并尝试思考能否设计一个算法同时结合两者的优势？
   答：

- 基于强化学习的策略：通过设计状态（例如小车观察的信息）、动作（行驶、停车）和奖励函数（例如未发生事故，持续运行时间），使用强化学习方法学习到状态-动作值函数，从而得到小车运行策略。
- 优劣：基于规则的方法计算更加高效，无需预训练，且具有可解释性，但人为设计规则比较复杂且繁琐；基于强化学习的方法计算更加复杂，需要预训练，且可解释

性较弱甚至难以解释，但能够通过学习习得策略。

- 结合两者优势的算法：
  - 可以设计基于规则的奖励函数，从而使得智能体习得的策略更加符合预期。
  - 在智能体训练过程中，可以使用基于规则的算法生成训练数据，从而使智能体有更多的数据进行模仿学习。
  - 可以使用基于规则的算法进行边界判断，确保极端情况下智能体行为的可控。