

Python Homework

郑志浩 (11521075)

June 1, 2016

1 Homework1

Goal: Implement polynomial curve fitting in python.

1.1 思路或原理

多项式为下式

$$y(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1x + w_2x^2 + \dots + w_Mx^M = \sum_{j=0}^M w_jx^j \quad (1)$$

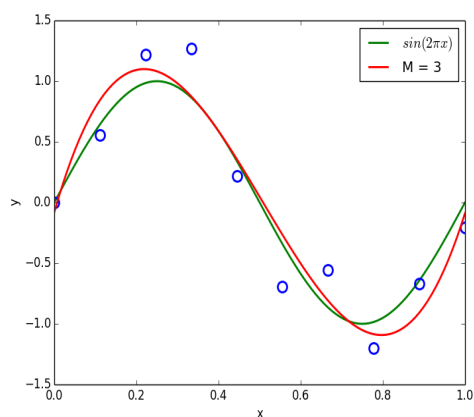
来拟合离散的点。拟合程度用二次函数来表示,等式右边的第二项是正则项,用于惩罚大系数值

$$E(w) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{y(x_n, w) - t_n\}^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (2)$$

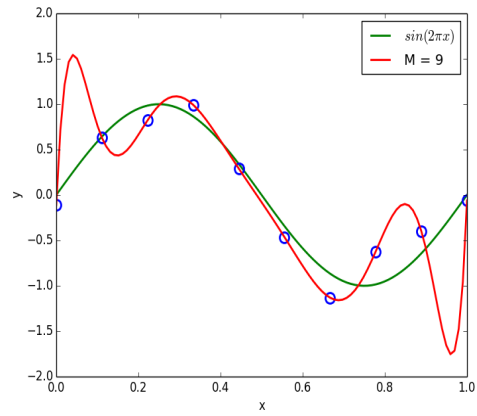
上述多项式化为矩阵形式为 $\mathbf{y} = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}$, 要求的目标为 $\arg \min_w \|\mathbf{y} - \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}\|^2$, 最终得到 $\mathbf{w} = (\mathbf{P}^T \mathbf{P} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{y}$, 其中 $\mathbf{p}(x) = (x^0, x^1, \dots, x^M)^T$, $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \dots, w_M)^T$, $\mathbf{y} = (y_0, y_1, \dots, y_M)^T$, $y_j = \mathbf{p}(\mathbf{x}_j) \mathbf{w}$ 。

1.2 实验结果

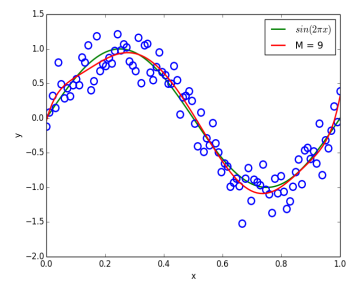
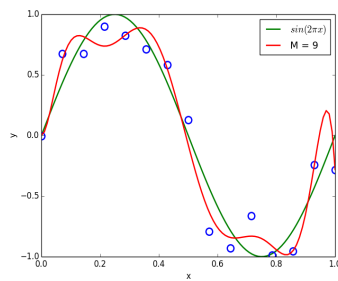
1. sample the function curve of $y = \sin(x)$ with Gaussian noise



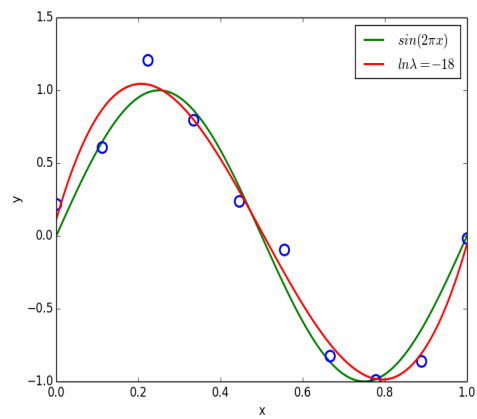
2. fit degree 3 and 9 curves in 10 samples



3.fit degree 9 curves in 15 and 100 samples



4.fit degree 9 curve in 10 samples but with regularization term



2 Homework2

Goal:Represent digits '3' in 2D

- (1)convert data from the UCI
- (2)perform PCA over all digit '3' with 2 components
- (3)plot the PCA results as below

2.1 思路或原理

PCA的作用是用降维的数据来表示原始数据，同时尽可能地保留原始数据样貌，若将数据降为到 p 维的话，数据点 y 可以看作特征空间基的线性组合：

$$y \approx \tilde{x} + \sum_{i=1}^p w_i x_i, y, x_i \in \mathbb{R}^{d \times 1}$$

所以将PCA形式化后即为

$$\arg \min_{X, W} \|Y - X^T W\|, Y \in \mathbb{R}^{d \times N}, X \in \mathbb{R}^{p \times d}, W \in \mathbb{R}^{p \times N}$$

于是采用特征分解的方法来求解上述问题，证明细节不给出，下面给出算法过程。

输入：样本集 $D = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$

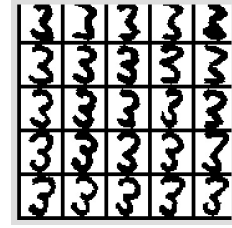
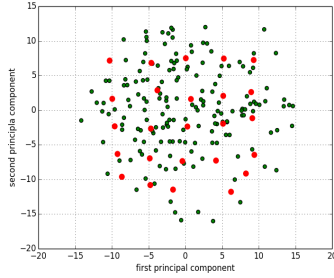
过程：

1. 对所有样本进行中心化： $x_i \leftarrow x_i - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i$ ；
2. 计算样本协方差矩阵 XX^T ；
3. 协方差矩阵 XX^T 做特征分解；
4. 取最大的 d' 个特征值所对应的特征向量 $w_1, w_2, \dots, w_{d'}$

输出：投影矩阵 $W = (w_1, w_2, \dots, w_{d'})$ 。

2.2 实验结果

取199个数据点最小包围框，六等分每个边界，取最靠近内部交织出的网格点附近的点作为显示的数据点，具体点的位置用红点标出，实验的输出如下图所示：



3 Homework3

Goal: implement MOG in 2D case

1. Generate 2D Gaussian distribution
2. E-M method.

3.1 思路或原理

1. 利用`numpy.random.multivariate_normal(mean, cov, size)`来生成size维度的高斯分布
2. 利用E-step和M-step两步迭代直到收敛为止

其中E-step为：

$$Q^i(z^{(i)}) = p(z^{(i)} | x^{(i)}; \theta) \quad (3)$$

M-step为：

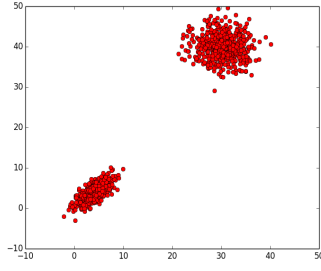
$$\theta := \arg \max_{\theta} \sum_{i=1}^m \sum_{z^{(i)}} Q^i(z^{(i)}) \log \frac{p(x^{(i)})}{Q^i(z^{(i)})} \quad (4)$$

3.2 代码说明

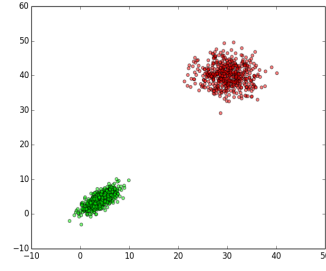
通过改变main里面的mean1, cov1, mean2和cov2等来调整高斯分布，最后通过将组合等数据投入到EM函数里就能获得结果

3.3 实验结果

通过EM算法迭代得到的试验结果如下：



(e) 输入未分类数据



(f) 得到分类数据

图 1: EM算法实验结果。

4 Homework4

Goal: Implement the Levenberg-Marquardt method

4.1 思路或原理

利用符号记录函数，然后通过下述算法求解最优解：

```

begin
  k := 0;  ν := 2;  x := x0
  A := J(x)TJ(x);  g := J(x)Tf(x)
  found := (||g||∞ ≤ ε1);  μ := τ * max{aii}
  while (not found) and (k < kmax)
    k := k+1;  Solve (A + μI)hlm = -g
    if ||hlm|| ≤ ε2(||x|| + ε2)
      found := true
    else
      xnew := x + hlm
      ρ := (F(x) - F(xnew))/(L(0) - L(hlm))
      if ρ > 0 {step acceptable}
        x := xnew
        A := J(x)TJ(x);  g := J(x)Tf(x)
        found := (||g||∞ ≤ ε1)
        μ := μ * max{1/3, 1 - (2ρ - 1)3};  ν := 2
      else
        μ := μ * ν;  ν := 2 * ν
  end

```

其中 $J(x)_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$, $\rho = \frac{F(x) - F(x+h_{lm})}{L(0) - L(h_{lm})}$, 以及

$$\begin{aligned}
 L(0) - L(h_{lm}) &= -\mathbf{h}_{lm}^T \mathbf{J}^T \mathbf{f} - \frac{1}{2} \mathbf{h}_{lm}^T \mathbf{J}^T \mathbf{J} \mathbf{h}_{lm} \\
 &= -\frac{1}{2} \mathbf{h}_{lm}^T (2\mathbf{g} + (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I} - \mu \mathbf{I}) \mathbf{h}_{lm}) \\
 &= \frac{1}{2} \mathbf{h}_{lm}^T (\mu \mathbf{h}_{lm} - \mathbf{g})
 \end{aligned}$$

4.2 实验结果

在LMA.py中提供了两个例子，其中例子2就是著名的Powell's问题，迭代次数达到了最大次数100次，得到的值为 $[-3.30676797 \times 10^{-07}, -4.06964635 \times 10^{-03}]^T$ 。例子1较简单就不详述，只需要25次就迭代收敛了，当然也可以自己再再LMA.py文件中写更多的测试函数。

5 Homework5

Goal: Implement (simplified) SVM method

1. input 2D data and their label (in two classes)

2. implement quadratic programming

3. output (and plot) classification results

5.1 思路或原理

SVM问题形式化：

原问题：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2$$

$$s.t. \quad y_i(w^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, m$$

对偶问题：

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle$$

$$s.t. \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0$$

$$s.t. \quad \alpha_i \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$$

求解后即可得到

$$f(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i \langle x, x_i \rangle + b$$

其中 $\langle x_i, x_j \rangle$ 若是简化的SVM即为线性核 $x_i^T x_j$ ，若需要将他们投到高维空间需要一些核函数，例如高斯核函数。

拉格朗日乘子法求解等式二次规划问题

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T G x + r^T x$$

$$Ax = b$$

定理 当上述问题中的矩阵 G 是半正定（正定）矩阵时，局部解 x^* 是全局最优解，这时 λ^* 为相应的乘子的充分必要条件是： x^*, λ^* 是线性方程组

$$\begin{pmatrix} G & A^T \\ A & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \\ b \end{pmatrix}$$

的解。有效集法求解凸二次规划问题(ESM)：

(1)取初始可行点 x^1 （一般都是比较难获取，在SVM的环境下，比较好取得），即 x^1 满足

$$\alpha_i^T x^1 - b_i = 0, i \in E, \alpha_i^T x^1 - b_i \leq 0, i \in I,$$

确定 x^1 处的有效集约束指标集

$$I(x^1) = \{i | \alpha_i^T x^1 - b_i = 0, i \in I\},$$

置 $k = 1$ 。

(2)通过拉格朗日乘子法求解等式二次规划问题：

$$\min \frac{1}{2} d^T G d + \nabla f(x^k)^T d;$$

$$s.t. \quad \alpha_i^T d = 0, i \in E \cup I(x^k),$$

得到 d^k 。(3)若 $d^k = 0$,则计算相应的拉格朗日乘子 λ^k (λ^k 为上述拉格朗日乘子法求的的相应乘子)。若 $\lambda_i^k \geq 0, \forall i \in I(x^k)$, 则停止计算; 否则求

$$\lambda_q^k = \min \lambda_i^k | i \in I(x^k),$$

并置 $x^{k+1} = x^k, I(x^{k+1}) = I(x^k) - \{q\}, k := k + 1$, 转步骤 (2)。

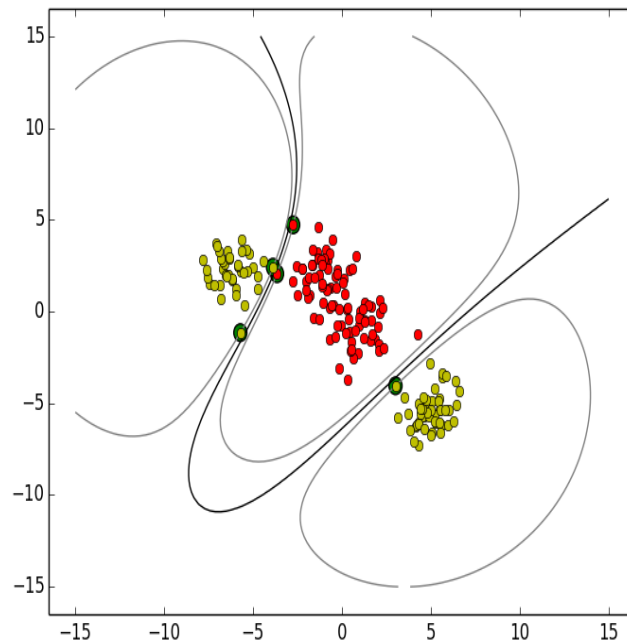
(4)若 $d^k \neq 0$,则计算

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_k &= \min \left\{ \frac{b_i - \alpha_i^T x^k}{\alpha_i^T d^k} \mid \alpha_i^T d^k > 0, i \in I(x^k) \right\} \\ &= \frac{b_p - \alpha_p^T x^k}{\alpha_p^T d^k}. \end{aligned}$$

取 $\alpha_k = \min\{\hat{\alpha}_k, 1\}$, 置 $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d^k$ 。若 $\alpha_k = \hat{\alpha}_k$,则置 $I(x^{k+1}) = I(x^k) + \{p\}$; 否则置 $I(x^{k+1}) = I(x^k)$, 置 $k := k + 1$, 转步骤 (2)。

5.2 实验结果

利用`numpy.random.multivariate_normal(mean, cov, point_number)`函数生成数据, 将各50个点, 分别以mean为[-1,2]和[1,-1]作为第一类数据集, mean为[5,-5]和[-6,2]各50个点作为第二类数据集, 其中cov矩阵均为 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, 将两类型数据各取10% 的数据作为检测数据, 剩下数据都拿来作为训练数据。实验结果如下图示。



其中红色和黄色分别表示两种类型的数据, 加粗加绿的点是支持向量, 共有5个点, 因为采用了高斯核函数, 所以SVM的分类超平面不是直线, 图中的加粗的轮廓线就是分类超平面。用于测试点20个点都用SVM分类器分类正确了。

参考文献

- [1] 《机器学习》，周志华，清华大学出版社，2016年版
- [2] Madsen K, Nielsen H B, Tingleff O. Methods for non-linear least squares problems[J]. 2004.
- [3] 《最优化基础理论与方法》，王燕军，梁治安，复旦大学出版社，2011年版