机器学习及其在化学中的应用

(2023 秋)

第1次书面作业答案

01002522

1. Galton 的"回归效应".

授课教师: 刘志荣

助教: 昌珺涵、崔畅

- (a) 略. Happy reading!
- (b) 根据线性回归参数 a, b 的计算公式,

$$a = \frac{\langle ts \rangle_{\mathcal{D}} - \langle t \rangle_{\mathcal{D}} \langle s \rangle_{\mathcal{D}}}{\langle t^2 \rangle_{\mathcal{D}} - \langle t \rangle_{\mathcal{D}}^2},$$

$$b = \frac{\langle t^2 \rangle_{\mathcal{D}} \langle s \rangle_{\mathcal{D}} - \langle t \rangle_{\mathcal{D}} \langle ts \rangle_{\mathcal{D}}}{\langle t^2 \rangle_{\mathcal{D}} - \langle t \rangle_{\mathcal{D}}^2}.$$
(1)

其中 (均值号的下标 D 略去不写, 认为数据集规模足够大, 可以复现原题表述的正态分布),

$$\langle t \rangle = \langle t \rangle = \mu, \tag{2}$$

$$\langle (t - \langle t \rangle)^2 \rangle = \langle t^2 \rangle - \langle t \rangle^2 = \sigma^2,$$
 (3)

$$\langle (s - \langle s \rangle)^2 \rangle = \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2 = \sigma^2,$$
 (4)

$$\langle (t - \langle t \rangle)(s - \langle s \rangle) \rangle = \langle ts \rangle - \langle t \rangle \langle s \rangle = r\sigma^2.$$
 (5)

于是,

$$a = \frac{r\sigma^2}{\sigma^2} = r,$$

$$b = \frac{(\sigma^2 + \mu^2)\mu - \mu(r\sigma^2 + \mu^2)}{\sigma^2} = \mu(1 - r).$$
(6)

现在, 求解得到的回归模型为

$$\hat{s} = rt + \mu(1 - r),\tag{7}$$

式中, \hat{s} 代表身高预测值. 下面讨论回归效应.

• 从全体平均而言, 注意到

$$\langle \hat{s} \rangle = r \langle t \rangle + \mu (1 - r) = \mu = \langle t \rangle,$$
 (8)

所以, 预测得到的身高. (原题表述不太准确, 考虑到这一层面即可得满分)

• 考虑那些 $t > \mu$ 的数据点. 记 $\mathcal{D}' = \{(t,s) \in \mathcal{D} : t > \mu\}$. 此时, 不等式

$$\langle \hat{s} \rangle_{\mathcal{D}'} = r \langle t \rangle_{\mathcal{D}'} + \mu (1 - r) < \langle t \rangle_{\mathcal{D}'}$$
 (9)

成立, 这是因为 $\langle t \rangle_{\mathcal{D}'} > \mu$. 所以, 在高于平均身高 μ 的群体 \mathcal{D}' 中, 儿子的平均身高 $\langle \hat{s} \rangle_{\mathcal{D}'}$ 矮于父亲的平均身高 $\langle t \rangle_{\mathcal{D}'}$. 这就是 Galton 发现的回归效应.

(c) 这里 s 和 t 是对称的, 上述的一切结果将 s,t 交换地位后依然成立. 回归模型为

$$\hat{t} = as + b,\tag{10}$$

而同样地:全体样本点上,父亲与儿子有着相等的平均身高;在高于平均身高的儿子群体上,父亲的平均身高矮于他们的平均身高.

(d) 这是一个"文字游戏"! 这两句话同时成立, 但各自所考察的 (用于计算均值的) 样本集 (阅读材料中的"总体") 存在区别. "父亲平均矮于儿子" 是在样本集 $\mathcal{D}'' = \{(t,s) \in \mathcal{D} : s > \mu\}$ 上成立, "儿子平均矮于父亲" 是在样本集 $\mathcal{D}' = \{(t,s) \in \mathcal{D} : t > \mu\}$ 上成立.

2. 这枚铜钱 "是否" 为狄青钱分别记为 H 与 \bar{H} , 单次 "正面朝上" 为 E. 此时, 先验分布与 (单次试验的) 似然函数为

$$p(H) = p(\bar{H}) = \frac{1}{2},$$
 (11)

$$p(E|H) = 1, (12)$$

$$p(E|\bar{H}) = \frac{1}{2}.\tag{13}$$

(a) 记 $E_1 := E^3$ 代表连续抛掷 3 次都为正面朝上. 由于各次试验是条件独立的, 我们有

$$p(E_1|H) = p^3(E|H) = 1, (14)$$

$$p(E_1|\bar{H}) = p^3(E|\bar{H}) = \frac{1}{8}.$$
 (15)

所以,

$$p(H|E_1) = \frac{p(E_1|H)p(H)}{p(E_1|H)p(H) + p(E_1|\bar{H})p(\bar{H})}$$

$$= \frac{1 \times \frac{1}{2}}{1 \times \frac{1}{2} + \frac{1}{8} \times \frac{1}{2}}$$

$$= \frac{8}{9}.$$
(16)

(b) 记 $E_2 := E^4$ 代表连续抛掷 4 次都为正面朝上. 同理, 有

$$p(H|E_2) = \frac{1 \times \frac{1}{2}}{1 \times \frac{1}{2} + \frac{1}{16} \times \frac{1}{2}}$$
$$= \frac{16}{17}.$$
 (17)

读者不难算出其通式

$$p(H|E^n) = \frac{2^n}{2^n + 1}. (18)$$

(c) 记 $E_3 := E^3 \bar{E}$, 代表"正正正反"的试验结果. 由于

$$p(E_3|H) = p^3(E|H)p(\bar{E}|H) = 0,$$
 (19)

所以 $p(H|E_3) = 0$. 这是显然的, 狄青钱不可能反面朝上.