

机器学习导论

作业二

参考答案

2018 年 4 月 26 日

1 [25pts] Multi-Class Logistic Regression

教材的章节3.3介绍了对数几率回归解决二分类问题的具体做法。假定现在的任务不再是二分类问题，而是多分类问题，其中 $y \in \{1, 2, \dots, K\}$ 。请将对数几率回归算法拓展到该多分类问题。

- (1) [15pts] 给出该对率回归模型的“对数似然”(log-likelihood);
- (2) [10pts] 计算出该“对数似然”的梯度。

提示1: 假设该多分类问题满足如下 $K - 1$ 个对数几率,

$$\begin{aligned}\ln \frac{p(y=1|\mathbf{x})}{p(y=K|\mathbf{x})} &= \mathbf{w}_1^T \mathbf{x} + b_1 \\ \ln \frac{p(y=2|\mathbf{x})}{p(y=K|\mathbf{x})} &= \mathbf{w}_2^T \mathbf{x} + b_2 \\ &\dots \\ \ln \frac{p(y=K-1|\mathbf{x})}{p(y=K|\mathbf{x})} &= \mathbf{w}_{K-1}^T \mathbf{x} + b_{K-1}\end{aligned}$$

提示2: 定义指示函数 $\mathbb{I}(\cdot)$,

$$\mathbb{I}(y=j) = \begin{cases} 1 & \text{若 } y \text{ 等于 } j \\ 0 & \text{若 } y \text{ 不等于 } j \end{cases}$$

Solution.

(1) [15pts] 由提示可知,

$$p(y=k|\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{e^{\mathbf{w}_k^T \mathbf{x} + b_k}}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} e^{\mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + b_i}}, & \text{if } k \leq K-1 \\ \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{K-1} e^{\mathbf{w}_i^T \mathbf{x} + b_i}}, & \text{if } k = K \end{cases} \quad (1.1)$$

由此可得对数似然如下,

$$\ell(\mathbf{w}, \mathbf{b}) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^K \mathbb{I}(y_i = j) \ln p(y_i = j | \mathbf{x}_i) \quad (1.2)$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{K-1} \mathbb{I}(y_i = j) (\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}_i + b_j) - \sum_{i=1}^m \ln \left(1 + \sum_{i=1}^{K-1} e^{\mathbf{w}_i^T \mathbf{x}_i + b_i} \right) \quad (1.3)$$

(2) [10pts] 为便于讨论, 令 $\beta_j = (\mathbf{w}_j; b_j)$, $\hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}; 1)$, 从而计算出该对数似然的梯度如下,

$$\frac{\partial \ell(\beta)}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^m (\mathbb{I}(y_i = j) - p(y_i = j | \hat{\mathbf{x}}_i)) \hat{\mathbf{x}}_i \quad (1.4)$$

2 [20pts] Linear Discriminant Analysis

假设有两类数据, 正例独立同分布地从高斯分布 $\mathcal{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ 采样得到, 负例独立同分布地从另一高斯分布 $\mathcal{N}(\mu_2, \Sigma_2)$ 采样得到, 其中参数 μ_1, Σ_1 及 μ_2, Σ_2 均已知。现在, 我们定义“最优分类”: 若对空间中的任意样本点, 分别计算已知该样本采样于正例时该样本出现的概率与已知该样本采样于负例时该样本出现的概率后, 取概率较大的所采类别作为最终预测的类别输出, 则我们说这样的分类方式满足“最优分类”性质。

试证明: 当两类数据的分布参数 $\Sigma_1 = \Sigma_2 = \Sigma$ 时, 线性判别分析(LDA)方法满足“最优分类”性质。(提示: 找到满足最优分类性质的分类平面。)

Solution.

首先我们考虑定义的分类器的分类平面, 有

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} |\Sigma_1|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_1)^T \Sigma_1^{-1} (\mathbf{x} - \mu_1)\right) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} |\Sigma_2|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_2)^T \Sigma_2^{-1} (\mathbf{x} - \mu_2)\right)$$

化简可得

$$2\mathbf{x}^T \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1) = (\mu_2^T + \mu_1^T) \Sigma^{-1} (\mu_2 - \mu_1)$$

所以分类平面是

$$(\mu_2^T - \mu_1^T) \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)) = 0. \quad (2.1)$$

而对于LDA的最优平面, 满足如下式

$$\mathbf{w}^T (\mathbf{x} - \mu_1) = \mathbf{w}^T (\mu_2 - \mathbf{x})$$

由书中计算的 $\mathbf{w} = \mathbf{S}_w^{-1} (\mu_1 - \mu_2)$ 代入上式 (在作业中这个式子要求同学们推导), 可得LDA的分类平面为

$$(\mu_2^T - \mu_1^T) \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)) = 0. \quad (2.2)$$

3 [55+10*pts] Logistic Regression Programming

在本题中, 我们将初步接触机器学习编程, 首先我们需要初步了解机器学习编程的主要步骤, 然后结合对数几率回归, 在UCI数据集上进行实战。机器学习编程的主要步骤可参见博客。

本次实验选取UCI数据集Page Blocks (下载链接)。数据集基本信息如表 1所示, 此数据集特征维度为10维, 共有5类样本, 并且类别间样本数量不平衡。

Table 1: Page Blocks数据集中每个类别的样本数量。

标记	1	2	3	4	5	total
训练集	4431	292	25	84	103	4935
测试集	482	37	3	4	12	538

对数几率回归 (Logistic Regression, LR) 是一种常用的分类算法。面对多分类问题, 结合处理多分类问题技术, 利用常规的LR算法便能解决这类问题。

- (1) [5pts] 此次编程作业要求使用Python 3或者MATLAB编写，请将main函数所在文件命名为LR_main.py或者LR_main.m，效果为运行此文件便能完成整个训练过程，并输出测试结果，方便作业批改时直接调用；
- (2) [30pts] 本题要求编程实现如下实验功能：
- [10pts] 根据《机器学习》3.3节，实现LR算法，优化算法可选择梯度下降，亦可选择牛顿法；
 - [10pts] 根据《机器学习》3.5节，利用“一对其余”（One vs. Rest, OvR）策略对分类LR算法进行改进，处理此多分类任务；
 - [10pts] 根据《机器学习》3.6节，在训练之前，请使用“过采样”（oversampling）策略进行样本类别平衡；
- (3) [20pts] 实验报告中报告算法的实现过程（能够清晰地体现(1)中实验要求，请勿张贴源码），如优化算法选择、相关超参数设置等，并填写表2，在<http://www.tablesgenerator.com/>上能够方便的制作LaTex表格；
- (4) [附加题10pts] 尝试其他类别不平衡问题处理策略（尝试方法可以来自《机器学习》也可来自其他参考材料），尽可能提高对少数样本的分类准确率，并在实验报告中给出实验设置、比较结果及参考文献。

[注意**]** 本次实验除了numpy等数值处理工具包外禁止调用任何开源机器学习工具包，一经发现此实验题分数为0，请将实验所需所有源码文件与作业pdf文件放在同一个目录下，请勿将数据集放在提交目录中。

实验报告.

Table 2: 算法在测试数据集上泛化性能测试结果，先报告在每个类别上的查全率和查准率，最后报告在整个测试数据集上的准确率。

标记	1	2	3	4	5	准确率
查全率	0.xx	0.xx	0.xx	0.xx	0.xx	0.xx
查准率	0.xx	0.xx	0.xx	0.xx	0.xx	

实验题共性问题.

- (1) 还有人提交.rar文件，请按照主页上要求将文件夹压缩为.zip文件上传；
- (2) 作业中有人遗漏学号姓名邮箱，请大家记得在作业中写上自己的学号姓名，方便助教在登记分数的时候验证作业归属，避免成绩登记错误；
- (3) 编程题中，作业中会规定主函数入口文件的文件名，请大家严格遵循要求命名主函数文件，如本次作业要求命名为LR_main.py/LR_main.m，有同学将此文件命名为LR_main1.py，给作业批改造成了一定的不便；
- (4) 一个代码小规范，python每个文件由一个个类、函数或者一段可执行代码等构成，每个文件的类或者函数都能被其他文件import，为了避免在import某个文件中类或者函数的时候执行被import文件中的可执行代码，python文件中的可执行代码一般放置在如下语句中：

```
1  if __name__ == '__main__':  
2      # the codes of main function  
3      print 'hello world!'  
4
```

- (5) 本次作业大家第一次在本课程中写了实验报告，很多同学的实验报告写的比较粗糙，只写出了方法名称随便贴了点实验结果，这样的实验报告得分一般都不会高。一般实验报告需要从方法-实现-实验结果三方面来写，在方法中需要简要介绍方法的思想，过程，如此次实验，需要介绍LR, OvR, oversampling方法等，最关键的是要介绍如何将这三种方法结合起来完成实验的过程，最好用伪代码的形式给出。在实现中，需要结合方法部分给出算法实现的模块划分，显示出自己代码实现的条理性。实验结果中，给出题目中要求的实验结果只能说达到了基本要求，方法只有通过对比才能展示其有效性，所以大家可以给出实验的对比效果，如没有oversampling和用SMOTE方法的对比等，参数调查也是一项比较重要的内容，如优化方法中的超参设置调查等，有此项内容的同学往往得分比较高。最后我们也鼓励大家对实验提出自己的感想或者改进思路。