

AI HW8

✳ PB21111733 牛庆源

1. 试证明对于不含冲突数据集（即特征向量完全相同但标记不同）的训练集，必存在与训练集一致（即训练误差为 0）的决策树。

- 1 设训练集 D 包含 n 个样本，每个样本由特征向量和标记组成。即对于特征向量 $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$ ，对应的标记 $y_i = y_j$ 。
- 2 选择特征 x_1 作为根节点分裂标准，根据特征 x_1 的取值将训练集分为若干子集。对于每一个特征值 v ，得到一个子集 D_v ，其中所有样本在 x_1 上的值都为 v 。
- 3 对于每一个子集 D_v ，继续选择下一个特征 x_2 进行下一步划分。不断递归直到所有特征都被用完或者子集中的样本全部具有相同的标记。
- 4 当划分到某一层，子集中所有的样本都具有相同的标记时，将该子集对应的节点设置为叶节点，并将叶节点标记为该标记。由于训练集中没有冲突数据，这种情况一定会出现。
- 5 递归过程中如果某个子集中的样本都具有相同的特征向量，则它们的标记也必然相同，可以直接将该子集划分为一个叶节点，并标记为该标记。

通过这样的构造，可以保证生成的决策树可以完全匹配训练集中的每一个样本。

2.

2. 最小二乘学习方法在求解 $\min_w (Xw - y)^2$ 问题后得到闭式解 $w^* = (X^T X)^{-1} X^T y$ （为简化问题，我们忽略偏差项 b ）。如果我们知道数据中部分特征有较大的误差，在不修改损失函数的情况下，引入规范化项 $\lambda w^T D w$ ，其中 D 为对角矩阵，由我们取值。相应的最小二乘分类学习问题转换为以下形式的优化问题：

$$\min_w (Xw - y)^2 + \lambda w^T D w$$

(1). 请说明选择规范化项 $w^T D w$ 而非 L_2 规范化项 $w^T w$ 的理由是什么。 D 的对角线元素 D_{ii} 有何意义，它的取值越大意味着什么？

(2). 请对以上问题进行求解。

- 相较于 L_2 规范化项 $w^T w$ ， $w^T D w$ 引入了对角矩阵 D ， L_2 规范化所有特征的权重收到的惩罚程度相同，而加入对角矩阵 D 可以给不同特征以不同权重，调整惩罚力度，降低了这些特征对模型的影响。

D 的对角元素 D_{ii} 的值反应了对第 i 个特征权重 w_{ii} 的惩罚强度。取值越大代表施加更大的惩罚。

- $$F(w) = (Xw - y)^T (Xw - y) + \lambda w^T D w$$
$$F'(w) = 2X^T X w - 2X^T y + 2\lambda D w$$
令 $F'(w) = 0$ 得
$$w^* = (X^T X + \lambda D)^{-1} X^T y$$

3.

3. 假设有 n 个数据点 x_1, \dots, x_n 以及一个映射 $\varphi: x \rightarrow \varphi(x)$ ，以此定义核函数 $K(x, x') = \varphi(x) \cdot \varphi(x')$ 。试证明由该核函数所决定的核矩阵 $K: K_{i,j} = K(x_i, x_j)$ 有以下性质:

(1). K 是一个对称矩阵;

(2). K 是一个半正定矩阵, 即 $\forall z \in R^n, z^T K z \geq 0$ 。

$$\circ K_{i,j} = K(x_i, x_j) = \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j)$$

$$K_{j,i} = K(x_j, x_i) = \varphi(x_j) \cdot \varphi(x_i)$$

$$\text{由 } \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j) = \varphi(x_j) \cdot \varphi(x_i)$$

则 $K_{i,j} = K_{j,i}$, 是对称矩阵。

\circ

$$\begin{aligned} z^T K z &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_i K_{ij} z_j \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_i \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j) z_j \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (z_i \varphi(x_i)) \cdot (z_j \varphi(x_j)) \end{aligned}$$

$$\text{另 } \phi = (\varphi(x_1)z_1, \dots, \varphi(x_n)z_n)$$

$$\text{则 } z^T K z = \phi^T \phi = \|z'\|^2 \geq 0$$

所以半正定。

4.

4. 已知正例点 $x_1 = (1, 2)^T, x_2 = (2, 3)^T, x_3 = (3, 3)^T$, 负例点 $x_4 = (2, 1)^T, x_5 = (3, 2)^T$, 试求 Hard Margin SVM 的最大间隔分离超平面和分类决策函数, 并在图上画出分离超平面、间隔边界及支持向量。

线性规划求解 $\min(w_1^2 + w_2^2)$

约束条件为:

$$w_1 + 2w_2 + b \geq 1$$

$$2w_1 + 3w_2 + b \geq 1$$

$$3w_1 + 3w_2 + b \geq 1$$

$$-2w_1 - w_2 - b \geq 1$$

$$-3w_1 - 2w_2 - b \geq 1$$

结果为: $w_1 = -1, w_2 = 2, b = -2$ 。

绘图代码如下:



```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.svm import SVC

# 定义数据点
positive_points = np.array([[1, 2], [2, 3], [3, 3]])
negative_points = np.array([[2, 1], [3, 2]])

X = np.vstack((positive_points, negative_points))
y = np.array([1, 1, 1, -1, -1])

# 拟合模型
clf = SVC(kernel='linear', C=1e10) # 大C值表示硬边界
clf.fit(X, y)

# 获取分离超平面
w = clf.coef_[0]
b = clf.intercept_[0]
print(f'最优超平面: w = {w}, b = {b}')

# 创建网格以绘制决策边界
xx = np.linspace(0, 4, 500)
yy = np.linspace(0, 4, 500)
YY, XX = np.meshgrid(yy, xx)
xy = np.vstack([XX.ravel(), YY.ravel()]).T
Z = clf.decision_function(xy).reshape(XX.shape)

# 绘图
plt.figure(figsize=(8, 6))

# 绘制决策边界和间隔边界
plt.contour(XX, YY, Z, levels=[-1, 0, 1], linestyles=['--', '-', '--'],
           colors='k')

# 绘制数据点
plt.scatter(positive_points[:, 0], positive_points[:, 1], color='b',
           marker='o', label='正类')
plt.scatter(negative_points[:, 0], negative_points[:, 1], color='r',
           marker='x', label='负类')

# 绘制支持向量
plt.scatter(clf.support_vectors_[:, 0], clf.support_vectors_[:, 1], s=100,
           facecolors='none', edgecolors='k', label='支持向量')
```

```
# 图形格式设置
```

```
plt.legend()
```

```
plt.xlabel('x1')
```

```
plt.ylabel('x2')
```

```
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei'] # 显示中文
```

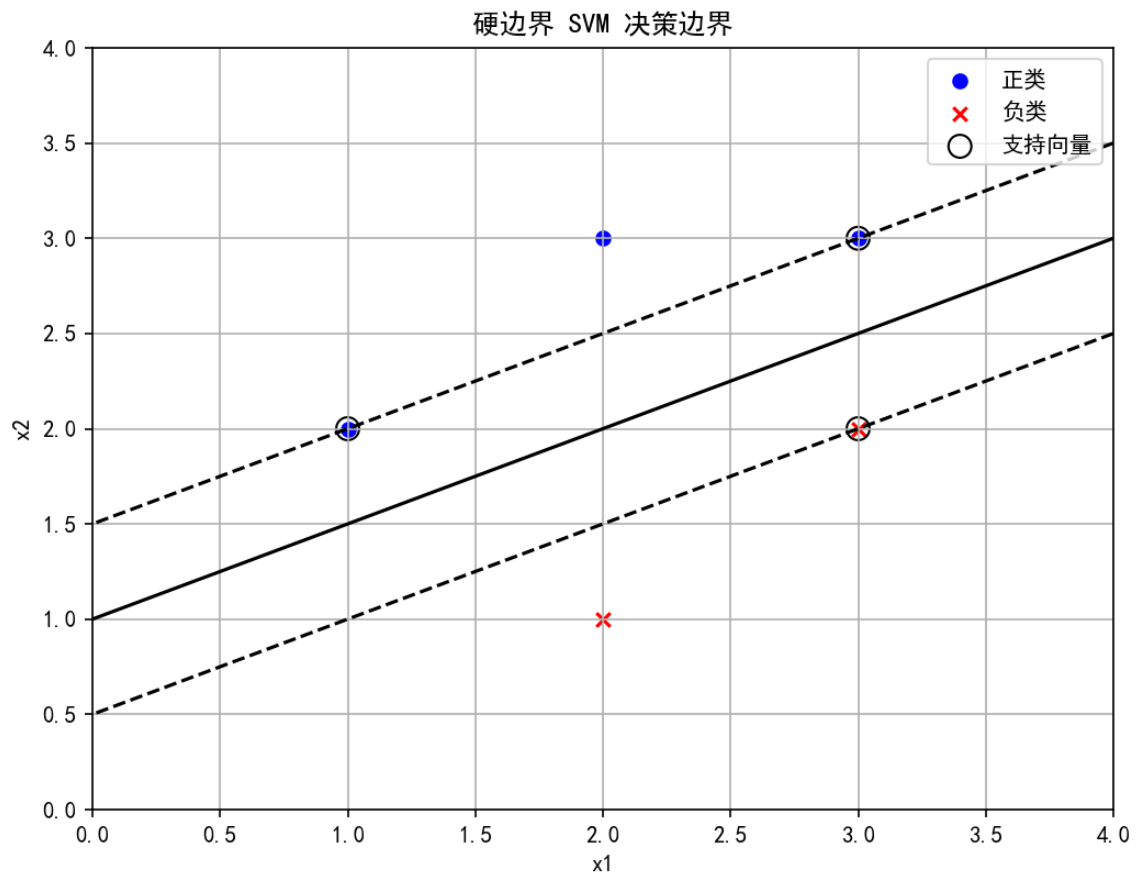
```
plt.title('硬边界 SVM 决策边界')
```

```
plt.grid(True)
```

```
plt.show()
```

运行结果如下：

```
PS F:\code> & C:/Users/23186/AppData/Local/Microsoft/WindowsApps/python3.11.exe f:/code/AI_hw8.py  
最优超平面:  $w = [-1. \ 2.]$ ,  $b = -2.0000000000000004$ 
```



5.

5. 计算 $\frac{\partial}{\partial w_j} L_{CE}(w, b)$, 其中

$$L_{CE}(w, b) = -[y \log \sigma(w \cdot x + b) + (1 - y) \log(1 - \sigma(w \cdot x + b))]$$

为Logistic Regression的Loss Function。

已知

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \sigma(z) &= \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{1+e^{-z}} = -\left(\frac{1}{1+e^{-z}}\right)^2 \times (-e^{-z}) \\ &= \sigma^2(z) \left(\frac{1-\sigma(z)}{\sigma(z)}\right) = \sigma(z)(1 - \sigma(z)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial L_{CE}(w, b)}{\partial w_j} \\ &= - \left[y \cdot \frac{1}{\sigma(w \cdot x + b)} \cdot \frac{\partial \sigma(w \cdot x + b)}{\partial w_j} + (1 - y) \cdot \frac{1}{1 - \sigma(w \cdot x + b)} \cdot \frac{\partial (1 - \sigma(w \cdot x + b))}{\partial w_j} \right] \\ &= - \left[y \cdot \frac{1}{\sigma z} \cdot \sigma z (1 - \sigma z) x_j - (1 - y) \cdot \frac{1}{1 - \sigma z} \cdot (-\sigma z) (1 - \sigma z) (-x_j) \right] \quad (\text{令 } z = w \cdot x + b) \\ &= -(y - \sigma z) x_j = [\sigma(w \cdot x + b) - y] x_j \end{aligned}$$

6. K-means算法是否一定会收敛？如果是，给出证明过程，如果不是，给出说明。

一定收敛，证明：

① 目标函数定义为：

$$J = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in C_i} \|x - \mu_i\|^2$$

其中， C_i 是第*i*个聚类， μ_i 是第*i*个聚类的质心。

- ② 将每个点分配到最近的质心的过程中，不会增加目标函数的值；在重新计算每个聚类的质心时，由均值性质可知，也不会增加目标函数的值。因此在K-means算法过程中每次迭代，目标函数J非增。
- ③ 由于目标函数J非负，且在每次迭代中非增，则必须在某个点收敛。