机器学习导论 习题三

211300044, 吴羽珩, 211300044@smail.nju.edu.cn

2023 年 4 月 26 日

作业提交注意事项

1. 请在 LaTeX 模板中第一页填写个人的学号、姓名、邮箱;
2. 本次作业需提交作答后的该 pdf 文件、编程题代码 (.py 文件); **请将二者打包为 .zip 文件上传**. 注意命名规则, 三个文件均命名为“学号_姓名”+“.后缀”(例如“211300001_张三”+“.pdf”、“.py”、“.zip”);
3. 若多次提交作业, 则在命名 .zip 文件时加上版本号, 例如“211300001_张三_v1.zip”(批改时以版本号最高的文件为准);
4. 本次作业提交截止时间为 **5 月 2 日 23:59:59**. 未按照要求提交作业, 提交作业格式不正确, **作业命名不规范**, 将会被扣除部分作业分数; 除特殊原因 (如因病缓交, 需出示医院假条) 逾期未交作业, 本次作业记 0 分; **如发现抄袭, 抄袭和被抄袭双方成绩全部取消**;
5. 本次作业提交地址为 here, 请大家预留时间提前上交, 以防在临近截止日期时, 因网络等原因无法按时提交作业.

1 [20pts] Representor Theorem

表示定理告诉我们, 对于一般的损失函数和正则化项，优化问题的最优解都可以表示为核函数的线性组合. 我们将尝试证明表示定理的简化版本, 并在一个实际例子中对其进行应用. 请仔细阅读《机器学习》第六章 6.6 节, 并回答如下问题.

(1) **[10pts]** 考虑通过引入核函数来将线性学习器拓展为非线性学习器, 优化目标由结构风险和经验风险组成:

$$\min_{\boldsymbol{w}} \ J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \mathcal{L}\left(\boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}_i), y_i\right) + \frac{\lambda}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2,$$

其中映射 $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{H}$ 将样本映射到特征空间 $\mathbb{H}$, $\mathcal{L}$ 为常见的损失函数, 并记 $\boldsymbol{X} = [\phi(\boldsymbol{x}_1), \cdots, \phi(\boldsymbol{x}_m)]$ 为映射后的数据矩阵. 请证明: 优化问题的最优解 $\boldsymbol{w}^\star$ 属于矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的列空间, 即 $\boldsymbol{w}^\star \in \mathcal{C}(\boldsymbol{X})$.

(提示: 给定线性子空间 $\mathcal{S}$, 任意向量 $\boldsymbol{u}$ 有唯一的正交分解 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v} + \boldsymbol{s}(\boldsymbol{v} \in \mathcal{S}, \boldsymbol{s} \in \mathcal{S}^\perp)$. 你需要选取合适的线性子空间, 对 $\boldsymbol{w}$ 进行正交分解)

(2) **[10pts]** 在核岭回归问题 (KRR, kernel ridge regression) 中, 优化目标为:

$$\min_{\boldsymbol{w}} \ F(\boldsymbol{w}) = \lambda\|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{i=1}^{m}\left(\boldsymbol{w}^T\phi(\boldsymbol{x}_i) - y_i\right)^2.$$

根据第一问的结论, 该优化问题的最优解满足 $\boldsymbol{w}^\star_{\mathrm{KRR}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\alpha}$. 请给出此处 $\boldsymbol{\alpha}$ 的具体形式. 值得一提的是, $\boldsymbol{\alpha}$ 是 KRR 问题对偶问题的最优解.

(提示: 你需要先求出 $\boldsymbol{w}^\star_{\mathrm{KRR}}$ 的具体形式)

Solution. 此处用于写解答 (中英文均可)

(1) 给定线性子空间 $\mathcal{S}$, 任意向量 $\boldsymbol{u}$ 有唯一的正交分解 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v} + \boldsymbol{s}(\boldsymbol{v} \in \mathcal{S}, \boldsymbol{s} \in \mathcal{S}^\perp)$ 所以将 $\boldsymbol{w}$ 在 $\mathcal{C}(\boldsymbol{X})$ 上正交分解得到 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{v} + \boldsymbol{s}$，其中 $\boldsymbol{v} \in \mathcal{C}(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{s} \in (\mathcal{C}(\boldsymbol{X}))^\perp$
由 $\boldsymbol{s} \in (\mathcal{C}(\boldsymbol{X}))^\perp$ 可知, 对于 $\forall \phi(\boldsymbol{x}_i) \in \mathcal{C}(\boldsymbol{X})$, 均有 $\boldsymbol{s}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) = 0$。

所以

$$\begin{aligned}
\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathcal{L}(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i), y_i) &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathcal{L}((\boldsymbol{v}^\top + \boldsymbol{s}^\top)\phi(\boldsymbol{x}_i), y_i) \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathcal{L}(\boldsymbol{v}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{s}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i), y_i) \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathcal{L}(\boldsymbol{v}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i), y_i)
\end{aligned}$$

又因为 $\|\boldsymbol{w}\|^2 = \|\boldsymbol{v}\|^2 + \|\boldsymbol{s}\|^2 \geq \|\boldsymbol{v}\|^2$(当 $\boldsymbol{s} = \overrightarrow{\boldsymbol{0}}$ 时取等), 所以我们一定有 $J(\boldsymbol{w}) \geq J(\boldsymbol{v})$
设优化目标 $\min\limits_{\boldsymbol{w}} F(\boldsymbol{w})$ 最优解为 $\boldsymbol{w}^\star$，同样有 $J(\boldsymbol{w}^\star) \geq J(\boldsymbol{v}^\star)$
而根据最优解的定义: $\boldsymbol{w}^\star$ 最小化了 $F(\boldsymbol{w})$, 所以又有 $F(\boldsymbol{w}^\star) \leq F(\boldsymbol{v}^\star)$
所以得到 $F(\boldsymbol{w}^\star) = F(\boldsymbol{v}^\star)$，即 $\boldsymbol{s}^\star = \boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{w}^\star = \boldsymbol{v}^\star \in \mathcal{C}(\boldsymbol{X})$

(2) 首先, 对原问题进行转化, 将 $F(\boldsymbol{w})$ 转化为向量和矩阵的形式.

$$
\begin{aligned}
F(\boldsymbol{w}) &= \lambda\|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{i=1}^{m}\left(\boldsymbol{w}^T\phi(\boldsymbol{x}_i) - y_i\right)^2 \\
&= \lambda\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{w} + (\mathbf{X}^T\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y})^T(\mathbf{X}^T\boldsymbol{w} - \boldsymbol{y})
\end{aligned}
$$

显然，$F(\boldsymbol{w})$ 是凸函数, 下面求解 $\boldsymbol{w}^\star$, 将 $F(\boldsymbol{w})$ 对 $\boldsymbol{w}$ 求导得:

$$2\lambda\boldsymbol{w} + 2\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w} - 2\boldsymbol{X}\boldsymbol{y}$$

令其为 0 解得:

$$\boldsymbol{w}^\star = (\lambda\boldsymbol{I}_m + \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^\top)^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{y}$$

注意到矩阵 $\mathbf{X}^{-1}$ 不一定存在, 故不能简单的左右同时左乘 $\mathbf{X}^{-1}$
进一步转化

$$\boldsymbol{w}^\star = -(\boldsymbol{I}_m - (-\boldsymbol{X})(\lambda^{-1}\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{X}^\top)^{-1}(-\boldsymbol{X})(\lambda\boldsymbol{I}_n)^{-1}\boldsymbol{y}$$

其中 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{m\times n}$,$\boldsymbol{I}_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\boldsymbol{I}_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$
由结论

$$(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C})^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B})^{-1}$$

可得

$$-(\boldsymbol{I}_m - (-\boldsymbol{X})(\lambda^{-1}\boldsymbol{I}_n)\boldsymbol{X}^\top)^{-1}(-\boldsymbol{X})(\lambda\boldsymbol{I}_n)^{-1} = -\boldsymbol{I}_m^{-1}(-\boldsymbol{X})((\lambda\boldsymbol{I}_n) - \boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{I}_m^{-1}(-\boldsymbol{X}))^{-1}$$

所以

$$\boldsymbol{w}^\star = -\boldsymbol{I}_m^{-1}(-\boldsymbol{X})((\lambda\boldsymbol{I}_n) - \boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{I}_m^{-1}(-\boldsymbol{X}))^{-1}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}(\lambda\boldsymbol{I}_n + \boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{y}$$

也即

$$\boldsymbol{\alpha} = (\lambda\boldsymbol{I}_n + \boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{y}$$

2 [20pts] Leave-One-Out error in SVM

《机器学习》第 2.2.2 节中我们接触到了留一法 (Leave-One-Out), 使用留一损失作为分类器泛化错误率的估计, 即: 每次将一个样本作为测试集, 其余样本作为训练集, 最后对所有的测试误差取平均. 对于 SVM 算法 $\mathcal{A}$, 令 h_S 为该算法在训练集 S 上的输出, 则 $\mathcal{A}$ 的经验留一损失可形式化为

$$\hat{R}_{\mathrm{LOO}}(\mathcal{A})=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}1_{h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}_i\}}(\boldsymbol{x}_i)\neq y_i}.$$

本题将通过探索留一损失的一些数学性质, 分析 SVM 泛化误差与支持向量个数的联系, 并给出一个期望意义下的泛化误差界. (注: 本题仅考虑可分情形, 即数据集是线性可分的)

(1) **[5pts]** 在实际应用中, 测试误差相比于泛化误差是很容易获取的. 我们往往希望测试误差是泛化误差较为准确的估计, 至少应该是无偏估计. 试证明留一损失是数据集大小为 $m-1$ 时泛化误差的无偏估计, 即

$$\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[\hat{R}_{\mathrm{LOO}}(\mathcal{A})]=\mathbb{E}_{S'\sim\mathcal{D}^{m-1}}\left[R\left(h_{S'}\right)\right].$$

(2) **[5pts]** SVM 的最终模型仅与支持向量有关, 支持向量完全刻画了决策边界. 这一现象可以抽象表示为, 如果样本 $\boldsymbol{x}$ 并非 h_S 的支持向量, 则移除该样本不会改变 SVM 模型, 即 $h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}\}}=h_S$. 这一性质在分析误差时有关键作用, 考虑如下问题: 如果 $\boldsymbol{x}$ 不是 h_S 的支持向量, $h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}\}}$ 会将 x 正确分类吗, 为什么? 该问题的结论的逆否命题是什么?

(3) **[10pts]** 基于上一小问的结果, 试证明下述 SVM 的泛化误差界限:

$$\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}\left[R(h_S)\right]\leq\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^{m+1}}\left[\frac{N_{SV}(S)}{m+1}\right],$$

其中 $N_{SV}(S)$ 为模型 h_S 支持向量的个数. 从这一泛化误差界中, 我们能够看到 SVM 的泛化能力与支持向量个数之间有紧密的联系.

Solution. 此处用于写解答 (中英文均可)

(1) 泛化误差（Generalization Error）即模型在总体上的误差.
注意到样本是独立的, 所以有 $\mathbb{E}(\sum X_i)=\sum\mathbb{E}(X_i)$

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[\hat{R}_{LOO}(\mathcal{A})]&=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[1_{h_{S\setminus\{x_i\}}(x_i)\neq y_i}]\\&=\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[1_{h_{S\setminus\{x_1\}}(x_1)\neq y_1}]\quad\text{(因为样本是同分布的)}\\&=\mathbb{E}_{S'\sim\mathcal{D}^{m-1}}[R(h_{S'})]\quad\text{（}S'\leftarrow S\setminus\{x_1\}\text{）}\end{aligned}$$

(2) 能够正确分类。原因如下:
由书上最终推导出的结论 (KKT 条件):

$$\begin{cases}\alpha_i\geq 0\\ y_if(\boldsymbol{x}_i)-1\geq 0\\ \alpha_i(y_if(\boldsymbol{x_i})-1)=0\end{cases}$$

对任意训练样本 $(\boldsymbol{x_i}, y_i)$, 总有 $\alpha_i = 0$ 或 $y_i f(\boldsymbol{x_i}) = 1$。当 $\alpha_i = 0$ 时，样本点 $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 不会影响最终模型, 当 $y_i f(\boldsymbol{x_i}) = 1$ 时, 所对应的样本点位于最大间隔边界上, 是一个支撑向量. 所以只要原模型能正确分类, 删除任一非支撑向量, 仍然能正确分类。

逆否命题仍为真：若 $h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}\}}$ 不能正确分类，那么 $\boldsymbol{x}$ 是 h_S 的支持向量。

(3) 根据 (1) 得到的结论

$$\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}\left[R(h_S)\right] = \mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^{m+1}}[\hat{R}_{\mathrm{LOO}}(\mathcal{A})] = \mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^{m+1}}[1_{h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}_i\}}(\boldsymbol{x}_i)\neq y_i}]$$

实际上 $\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^{m+1}}[1_{h_{S\setminus\{\boldsymbol{x}_i\}}(\boldsymbol{x}_i)\neq y_i}]$ 即为 $S \sim \mathcal{D}^{m+1}$ 当中某元素 $\boldsymbol{x_i}$ 不能被 $h_{S\setminus\boldsymbol{x_i}}$ 正确分类的概率，根据 (2) 中得到的结论的逆否命题所以 $\mathcal{D}^{m+1}$ 当中不能被正确分类的元素个数不大于支持向量的个数，即只有从 $m-1$ 个数据中选到支持向量的概率, 由此可得概率不大于 $\frac{N_{SV}(S)}{m+1}$

所以

$$\mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^m}[R(h_S)] \leq \mathbb{E}_{S\sim\mathcal{D}^{m+1}}[\frac{N_{SV}(S)}{m+1}]$$

3 [30pts] Margin Distribution

SVM 的核心思想是最大化最小间隔, 以获得最鲁棒的分类决策边界. 然而, 近年来的一些理论研究表明, 最大化最小间隔并不一定会带来更好的泛化能力, 反而优化样本间隔的分布可以更好地提高泛化性能. 为了刻画间隔的分布, 我们可以使用样本间隔的一阶信息和二阶信息, 即间隔均值和间隔方差.

给定训练数据集 $\mathcal{S} = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), \cdots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}$, $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{H}$ 为映射函数, 我们记 $\boldsymbol{X} = [\phi(\boldsymbol{x}_1), \cdots, \phi(\boldsymbol{x}_m)]$ 为映射后的数据矩阵, $\boldsymbol{y}^T = [y_1, \cdots, y_m]$ 为标签向量, $\boldsymbol{Y}$ 是对角元素为 $y_1, \cdots, y_m$ 的对角矩阵. 请回答如下问题.

(1) **[5pts]** 间隔均值与间隔方差分别定义为:

$$\gamma_m = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}_i),$$
$$\gamma_v = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} (y_i \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}_i) - \gamma_m)^2.$$

请使用题给记号, 化简上述表达式.

(2) **[5pts]** 考虑标准的软间隔 SVM(课本公式 (6.35)) 且引入核函数. 现在, 我们希望在其基础上进行改进: 最大化样本间隔的均值, 并且最小化样本间隔的方差. 令间隔均值的相对权重为 μ_1, 间隔方差的相对权重为 μ_2, 请给出相应的优化问题.

(3) **[20pts]** 第二问中的想法十分直接, 但是由于优化问题中的目标函数形式较为复杂, 导致对偶问题难以表示. 借鉴 SVM 中固定最小间隔为 1 的思路, 我们固定间隔均值为 $\gamma_m = 1$, 每个样本 $(\boldsymbol{x}_i, y_i)$ 的间隔相较于均值的偏移为 $|y_i \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}_i) - 1|$. 此时仅需最小化间隔方差, 相应的优化问题为

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{w}, \xi_i, \epsilon_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \frac{C}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(\xi_i^2 + \epsilon_i^2\right) \\ \text{s.t.} \quad & y_i \boldsymbol{w}^\top \phi\left(\boldsymbol{x}_i\right) \geq 1 - \xi_i, y_i \boldsymbol{w}^\top \phi\left(\boldsymbol{x}_i\right) \leq 1 + \epsilon_i, \forall i. \end{aligned}$$

其中 $C > 0$ 为正则化系数, ξ_i 和 ϵ_i 为松弛变量, 刻画了样本相较于均值的偏移程度. 进一步地, 我们借鉴支持向量回归 (SVR) 中的做法, 引入 θ-不敏感损失函数, 容忍偏移小于 θ 的样本. 同时, 间隔均值两侧的松弛程度可有所不同, 使用参数 μ 进行平衡. 最终我们得到了最优间隔分布机 (Optimal margin Distribution Machine) 的优化问题:

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{w}, \xi_i, \epsilon_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \frac{C}{m}\sum_{i=1}^{m}\frac{\xi_i^2 + \mu\epsilon_i^2}{(1-\theta)^2} \\ \text{s.t.} \quad & y_i \boldsymbol{w}^\top \phi\left(\boldsymbol{x}_i\right) \geq 1 - \theta - \xi_i \\ & y_i \boldsymbol{w}^\top \phi\left(\boldsymbol{x}_i\right) \leq 1 + \theta + \epsilon_i, \forall i. \end{aligned}$$

试推导该问题的对偶问题, 要求详细的推导步骤. (提示: 借助题干中的记号, 将该优化问题表达成矩阵的形式. 你也可以引入额外的记号)

Solution. 此处用于写解答 (中英文均可)

(1)

$$
\begin{aligned}
\gamma_m &= \frac{1}{m}\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{X}\boldsymbol{y} \\
\gamma_v &= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(y_i\boldsymbol{w}^T\phi(\boldsymbol{x}_i)-\gamma_m)^2 \\
&= \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(y_i^2\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\boldsymbol{w}-2y_i\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)\gamma_m+\gamma_m^2\right) \\
&= \frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\left(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\boldsymbol{w}\right)-2\gamma_m\sum_{i=1}^{m}y_i\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)+\sum_{i=1}^{m}\gamma_m^2\right] \\
&= \frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\left(\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i)\phi(\boldsymbol{x}_i)^\top\boldsymbol{w}\right)-2m\gamma_m(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}y_i\boldsymbol{w}^\top\phi(\boldsymbol{x}_i))+m\gamma_m^2\right] \\
&= \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}+(m-2m)\gamma_m^2\right) \\
&= \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}-\frac{1}{m}\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Y}^\top\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}\right)
\end{aligned}
$$

(2) 相应优化问题为

$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{w},b,\xi_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2-\mu_1\gamma_m+\mu_2\gamma_v+C\sum_{i=1}^{m}\xi_i \\
\text{s.t.} \quad & y_i(\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x}_i+b)\geq 1-\xi_i \\
& \xi_i\geq 0, i=1,2,...,m
\end{aligned}
$$

(3) 引入符号 $\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,...,\xi_m)^\top$, $\boldsymbol{\epsilon}=(\epsilon_1,...,\epsilon_m)^\top$，由此可以将优化问题改写为

$$
\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{w},\xi_i,\epsilon_i} \quad & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2+\frac{C}{m(1-\theta)^2}(\boldsymbol{\xi}^\top\boldsymbol{\xi}+\mu\boldsymbol{\epsilon}^\top\boldsymbol{\epsilon}) \\
\text{s.t.}(1-\theta)\mathbf{I}-\boldsymbol{\xi}\preceq \quad & \boldsymbol{Y}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w} \\
& \boldsymbol{Y}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}\preceq(1+\theta)\mathbf{I}+\boldsymbol{\epsilon}
\end{aligned}
$$

为了得到原问题的拉格朗日对偶问题，引入针对两个约束的拉格朗日乘子 α,β，得到 Lagrange 函数

$$
\begin{aligned}
L(\boldsymbol{w},\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\epsilon},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) =& \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2+\frac{C}{m(1-\theta)^2}(\boldsymbol{\xi}^\top\boldsymbol{\xi}+\mu\boldsymbol{\epsilon}^\top\boldsymbol{\epsilon})+\boldsymbol{\alpha}^\top\left[(1-\theta)\mathbf{I}-\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{Y}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}\right] \\
&+\boldsymbol{\beta}^\top\left[\boldsymbol{Y}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w}-(1+\theta)\mathbf{I}-\boldsymbol{\epsilon}\right] \\
=& \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2+\frac{C}{m(1-\theta)^2}(\boldsymbol{\xi}^\top\boldsymbol{\xi}+\mu\boldsymbol{\epsilon}^\top\boldsymbol{\epsilon})-(\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta})^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{w} \\
&+\boldsymbol{\alpha}^\top((1-\theta)\mathbf{I}-\boldsymbol{\xi})-\boldsymbol{\beta}^\top((1+\theta)\mathbf{I}+\boldsymbol{\epsilon})
\end{aligned}
$$

对上式分别求 $\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\epsilon}$ 的偏导数

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{w}} &= \boldsymbol{w} - (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{Y} \boldsymbol{X}^\top \\
\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\xi}} &= \frac{2C}{m(1-\theta)^2} \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\alpha} \\
\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} &= \frac{2C\mu}{m(1-\theta)^2} \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\beta}
\end{aligned}$$

令以上偏导数等于 0, 可以解得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w} &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}) \\
\boldsymbol{\xi} &= \frac{m(1-\theta)^2 \boldsymbol{\alpha}}{2C} \\
\boldsymbol{\epsilon} &= \frac{m(1-\theta)^2 \boldsymbol{\beta}}{2C\mu}
\end{aligned}$$

将解代入拉格朗日函数，即可得到拉格朗日对偶函数, 进一步地, 得到对偶问题:

$$\begin{aligned}
\min_{\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}} \quad & -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{Y}^\top \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}) - \frac{m(1-\theta)^2(\mu\boldsymbol{\alpha}^\top\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}^\top\boldsymbol{\beta})}{4C\mu} \\
& + (1-\theta)(\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{I} - (1+\theta)\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{I}) \\
\text{s.t.} \quad & \boldsymbol{\alpha} \succeq 0 \\
& \boldsymbol{\beta} \succeq 0.
\end{aligned}$$

4 [30pts] Classification Models

编程实现不同的分类算法, 并对比其表现. 详细编程题指南请参见链接: here.

(1) 请填写下表, 记录不同模型的精度与 AUC 值. (保留 4 位小数)

(2) 请将绘制好的, 不同模型在同一测试数据集上的 ROC 曲线图放在此处.

再次提醒, 请注意加入图例.

Solution. (1) 不同模型的精度与 AUC 值记录 (2) 不同模型在测试数据集上的 ROC 曲线

表 1: 不同模型的精度、AUC 值

模型 / 指标	Logistic Regression	Decision Tree	SVM
acc. on train	0.7656	0.7498	0.7987
acc. on test	0.7642	0.6804	0.7580
AUC on test	0.8246	0.6953	0.8202

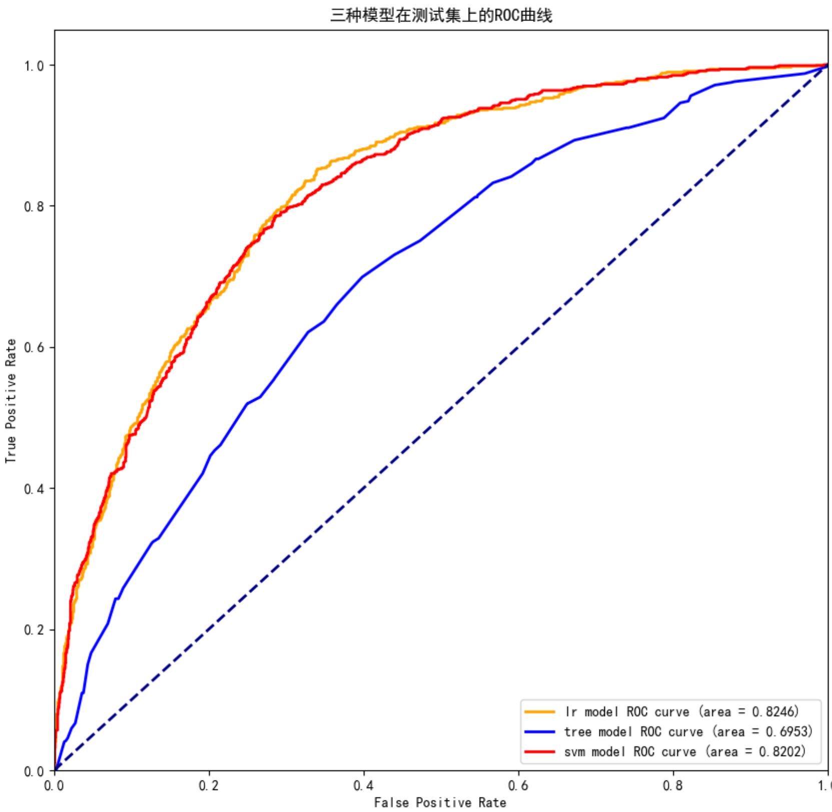
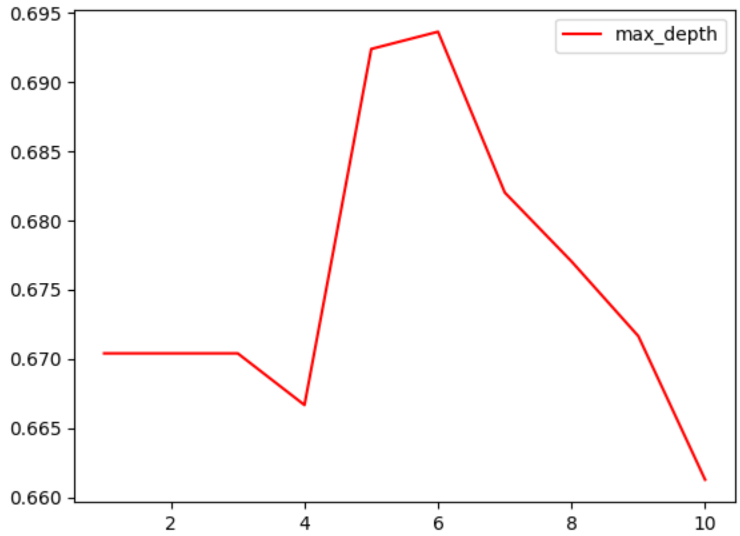


图 1: ROCs of test set

注: 在实现中$tree_clf = DecisionTreeClassifier(criterion = "gini", max_depth = 6, random_state = 30)$, 中决策树深度 depth=6 由以下最优剪枝参数学习曲线获得



SVM 的参数选择为:$svm\_clf = svm.SVC(gamma = "scale", C = 1.0, kernel = "rbf", probability = True)$