机器学习导论 习题一

学号, 姓名, 邮箱

2023 年 3 月 18 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 **3 月 29 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 [15pts] Derivatives of Matrices

有 $\alpha \in \mathbb{R}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{m\times 1}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n\times 1}$, 试完成下题, 并给出计算过程.

(1) **[4pts]** 此问中假设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 且 $\alpha = \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}$, 试求 $\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{x}}$.

(2) **[5pts]** 此问中假设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 且 $\alpha = \mathbf{y}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}$, 同时 $\mathbf{y}$、$\mathbf{x}$ 为 $\mathbf{z}$ 的函数, 试求 $\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{z}}$.

(3) **[6pts]** 此问中假设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 且 $\mathbf{A}$ 可逆, $\mathbf{A}$ 为 α 的函数同时 $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \alpha}$ 已知. 试求 $\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial \alpha}$.

(提示: 可以参考 The Matrix Cookbook.)

Solution.

(1)$\alpha = \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j$

对于 $x_k, \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^{n}(a_{ik} + a_{ki})x_k$

所以,$\frac{\partial \alpha}{\partial x} = (A + A^T)x$

(2)$\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{z}} = \frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{x}}\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}} + \frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{y}}\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{z}} = (y^T A)^T \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}} + (Ax)\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{z}} = (A^T y)\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}} + (Ax)\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{z}}$

(3) 已知 $I = AA^-1$

那么,$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \frac{\partial A}{\partial \alpha}A^{-1} + \frac{\partial A^{-1}}{\partial \alpha}A = 0$

所以,$\frac{\partial A}{\partial \alpha}A^{-1} = -\frac{\partial A^{-1}}{\partial \alpha}A \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial A^{-1}}{\partial \alpha} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial \alpha}A^{-1}$

2 [15pts] Performance Measure

性能度量是衡量模型泛化能力的评价标准, 在对比不同模型的能力时, 使用不同的性能度量往往会导致不同的评判结果. 请仔细阅读《机器学习》第二章 2.3.3 节. 在书中, 我们学习并计算了模型的二分类性能度量. 下面我们给出一个多分类 (四分类) 的例子, 请根据学习器的具体表现, 回答如下问题.

表 1: 类别的真实标记与预测

真实类别 \ 预测类别	第一类	第二类	第三类	第四类
第一类	7	2	1	0
第二类	0	9	0	1
第三类	1	0	8	1
第四类	1	2	1	6

(1) **[5pts]** 如表 1 所示, 请计算该学习器的错误率及精度.

(2) **[5pts]** 请分别计算宏查准率, 宏查全率, 微查准率, 微查全率, 并两两比较大小.

(3) **[5pts]** 分别使用宏查准率, 宏查全率, 微查准率, 微查全率计算宏 $F1$ 度量, 微 $F1$ 度量, 并比较大小.

Solution.

(1) 类比二元形式, 进行定义 F_iP_j 实际 i 类预测为 j 类,FP_i 表示非 i 类预测为 i 类, 实际上是一列中错误的个数

$errorrate = \frac{\sum_{i=1}^{4} FP_i}{40} = 0.25$

$accuracy = 1 - errorrate = 0.75$

(2) 先算 $P_i = \frac{TP_i}{TP_i + FP_i}$

$P_1 = \frac{7}{9}, P_2 = \frac{9}{13}, P_3 = \frac{4}{5}, P_4 = \frac{3}{4}$

宏查准率 $= \frac{1}{4}(P_1 + P_2 + P_3 + P_4) = \frac{7067}{9360} = 0.755$

再算 $R_i = \frac{TP_i}{TP_i + FN_i}$

$R_1 = 0.7, R_2 = 0.9, R_3 = 0.8, R_4 = 0.6$

宏查全率 $= \frac{1}{4}(R_1 + R_2 + R_3 + R_4) = 0.75$

$\overline{TP} = 7.5, \overline{FP} = 2.5, \overline{FN} = 2.5$

微查准率 $= \frac{\overline{TP}}{\overline{TP} + \overline{FP}} = 0.75$

微查全率 $= \frac{\overline{TP}}{\overline{TP} + \overline{FN}} = 0.75$

(3) 宏 F1 度量 $= \frac{2 * macro-P * macro-R}{macro-P + macro-R} = 0.7525$

微 F1 度量 $= \frac{2 * micro-P * micro-R}{micro-P + micro-R} = 0.75$

3 [15pts] ROC & AUC

ROC 曲线与其对应的 AUC 值可以反应分类器在“一般情况下”泛化性能的好坏. 请仔细阅读《机器学习》第二章 2.3.3 节, 并完成本题.

表 2: 样例的真实标记与预测

样例	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
标记	0	1	0	1	0	0	1	1	0
分类器输出值	0.4	0.9	0.7	0.4	0.2	0.8	0.8	0.6	0.5

(1) **[5pts]** 如表 2 所示, 第二行为样例对应的真实标记, 第三行为某分类器对样例的预测结果. 请根据上述结果, 绘制分类器在该样例集合上的 ROC 曲线, 并写出绘图中使用到的节点 (在坐标系中的) 坐标及其对应的阈值与样例编号.

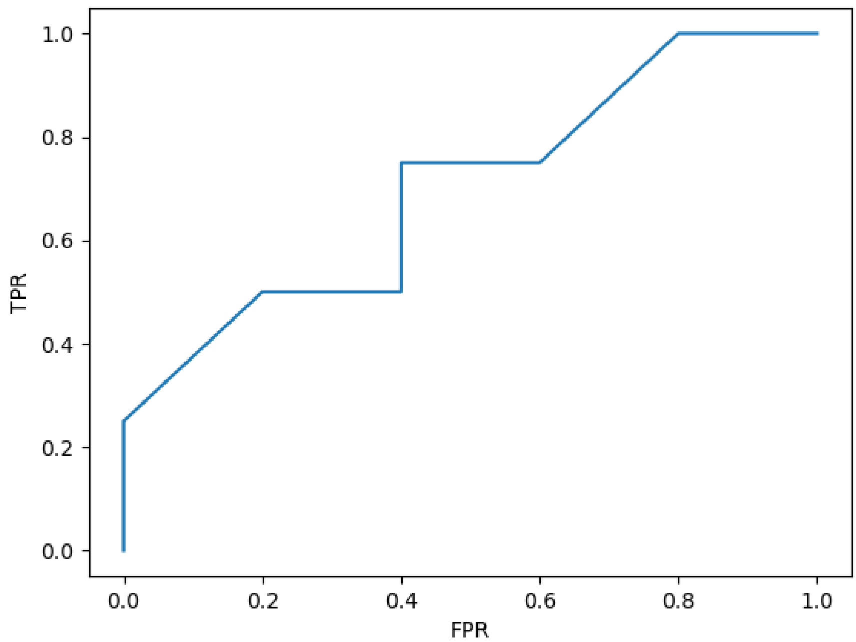
(2) **[3pts]** 根据上题中的 ROC 曲线, 计算其对应的 AUC 值 (请给出具体的计算步骤).

(3) **[7pts]** 结合前两问使用的例子 (可以借助图片示意), 试证明对有限样例成立:

$$\mathrm{AUC} = \frac{1}{m^+m^-}\sum_{x^+\in D^+}\sum_{x^-\in D^-}\left(\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\} + \frac{1}{2}\mathbb{I}\left\{f(x^+) = f(x^-)\right\}\right). \quad (3.1)$$

Solution.

(1) 坐标如下:[(0, 0), (0.0, 0.25), (0.2, 0.5), (0.4, 0.5), (0.4, 0.75), (0.6, 0.75), (0.8, 1.0), (1.0, 1.0)],ROC 曲线如下:



(2) 坐标中每一项元素为 (x_i, y_i)

那么 AUC=$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{7}(x_{i+1}-x_i)(y_{i+1}-y_i) = 0.075+0.1+0.15+0.175+0.2 = 0.7$

(3) 首先对于 l_{rank} 进行简单变形

$$l_{rank} = \sum_{x^+\in D^+} \frac{1}{2}\frac{1}{m^+} \sum_{x^-\in D^-} \left(\frac{2}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\} + \frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) = f(x^-)\right\}\right)$$

考虑新增真正例后的变化, 记当前标记点为 (x, y), 那么下一个标记点为 $(x, y+\frac{1}{m^+})$ 考虑 l_{rank} 的含义, 可以理解为 ROC 曲线和 y 轴所围城的面积, 在绘制 ROC 曲线的过程中, 如果新增点, 那么用梯形面积的公式来计算 l_{rank} 新增加的面积, 那么梯形的高为 $\frac{1}{m^+}$

再看梯形的底, 在绘制的过程中每增加一个假正例会在 x 方向增加一个步长 $\frac{1}{m^-}$, 那么就看当前阈值为 $f(x^+)$ 时假正例的个数

较短的一个底的长度为 $\sum_{x^-\in D^-}(\frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\}$

对于较长的一个底的长度为 $\sum_{x^-\in D^-}\left(\frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\} + \frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) = f(x^-)\right\}\right)$

那么新增一个真正例后, 增加的梯形的面积为

$$\frac{1}{2}\frac{1}{m^+} \sum_{x^-\in D^-} \left(\frac{2}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\} + \frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) = f(x^-)\right\}\right)$$

l_{rank} 的计算过程可以视为是不断新增真正例, 不断增加面积的过程

所以

$$l_{rank} = \sum_{x^+\in D^+} \frac{1}{2}\frac{1}{m^+} \sum_{x^-\in D^-} \left(\frac{2}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) > f(x^-)\right\} + \frac{1}{m^-}\mathbb{I}\left\{f(x^+) = f(x^-)\right\}\right)$$

得证

这个形式和原题目中形式等价, 原题得证

4 [20pts] Linear Regression

线性回归模型是一类常见的机器学习方法, 其基础形式与变体常应用在回归任务中. 根据《机器学习》第三章 3.2 节中的定义, 可以将收集到的 d 维数据及其标签如下表示:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1d} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2d} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{md} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^\top & 1 \\ \mathbf{x}_2^\top & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_m^\top & 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

将参数项与截距项合在一起, 定义为 $\hat{\boldsymbol{w}} = \left(\boldsymbol{w}^\top; b\right)^\top$. 此时成立 $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}$.《机器学习》式 (3.11) 给出了最小二乘估计 (Least Square Estimator, LSE) 的闭式解:

$$\hat{\boldsymbol{w}}^*_{\mathbf{LSE}} = \left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}. \tag{4.1}$$

(1) **[8pts]** (投影矩阵的性质) 容易验证, 当采用最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{w}}^*_{\mathbf{LSE}}$ 时, 成立:

$$\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}^*_{\mathbf{LSE}} = \mathbf{X}\left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

记 $\mathbf{H} = \mathbf{X}\left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top$, 则有 $\widehat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y}$. $\mathbf{H}$ 被称为 "Hat Matrix" , 其存在可以从空间的角度, 把 $\widehat{\mathbf{y}}$ 看作是 $\mathbf{y}$ 在矩阵 $\mathbf{H}$ 空间中的投影. $\mathbf{H}$ 矩阵有着许多良好的性质. 已知此时 $\mathbf{X}$ 矩阵列满秩, $\mathbf{I}$ 为单位阵, 试求 $\mathbf{I} - \mathbf{H}$ 的全部特征值并注明特征值的重数.

(提示: 利用 $\mathbf{H}$ 矩阵的投影性质与对称性.)

(2) **[5pts]** (岭回归) 当数据量 m 较小或数据维度 d 较高时, 矩阵 $\mathbf{X}^\top\mathbf{X}$ 可能不满秩, 4.1 中的取逆操作难以实现. 此时可使用岭回归代替原始回归问题, 其形式如下:

$$\hat{\boldsymbol{w}}^*_{\mathbf{Ridge}} = \underset{\hat{\boldsymbol{w}}}{\arg\min} \frac{1}{2}\left(\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{w}}\|_2^2 + \lambda\|\hat{\boldsymbol{w}}\|_2^2\right). \tag{4.2}$$

试求岭回归问题的闭式解, 并简述其对原问题的改进.

(3) **[7pts]** 定义 $\tilde{\mathbf{x}}_i = \left(\mathbf{x}_i^\top; 1\right)^\top$, $\widehat{y}_i = \tilde{\mathbf{x}}_i^\top \hat{\boldsymbol{w}}^*_{\mathbf{LSE}}$, $\bar{y} = \frac{1}{m}\sum\limits_{i=1}^{m} y_i$.

对线性回归模型进行统计分析时, 会涉及如下三个基础定义:

$$\begin{cases} \text{Total sum of squares (SST):} & \sum\limits_{i=1}^{m}\left(y_i - \bar{y}\right)^2 \\ \text{Regression sum of squares (SSR):} & \sum\limits_{i=1}^{m}\left(\widehat{y}_i - y_i\right)^2 \\ \text{Residual sum of squares (SSE):} & \sum\limits_{i=1}^{m}\left(\widehat{y}_i - \bar{y}\right)^2 \end{cases}$$

试证明 SST = SSR + SSE. (提示: 使用向量形式可以简化证明步骤.)

Solution.

(1)H 具有幂等性, 即 $H^2 = X(X^TX)^{-1}X^TX(X^TX)^{-1}X^T = X(X^TX)^{-1}(X^TX)(X^TX)^{-1}X^T =$

$X(X^TX)^{-1}X^T=H$
那么,$(I-H)^2y=I-2H+H^2=I-H$ 也具有幂等性
所以 $(I-H)^2y=(I-H)y=\lambda^2y=\lambda y$, 可得 $\lambda=0,1$
0 的重数为 1,1 的重数为 n-1,n 是矩阵的阶数
(2) 记需要最小化的部分为 L

$$\frac{\partial L}{\partial w}=-2X^T(y-Xw)+2\lambda w=0$$

得到

$$w_{ridge}=(X^TX+\lambda I)^{-1}X^Ty$$

(3)

$$\begin{aligned}SST=&\sum_{i=1}^{m}(y_i-\hat{y}_i+\hat{y}_i-\overline{y})\\=&SSR+SSE+2\sum_{i=1}^{m}(y_i-\hat{y}_i)(\hat{y}_i-\overline{y})\end{aligned}$$

另外, 最优化的结果最小化了 SSR, 所以还满足下面的条件:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial SSR}{\partial w}=\frac{\partial\sum_{i=1}^{m}(w^Tx_i+b-y_i)^2}{\partial w}=2\sum_{i=1}^{m}x_i(w^Tx_i+b-y_i)=\vec{0}\\&\frac{\partial SSR}{\partial b}=\frac{\partial\sum_{i=1}^{m}(w^Tx_i+b-y_i)^2}{\partial b}=2\sum_{i=1}^{m}(w^Tx_i+b-y_i)=\vec{0}\\&\sum_{i=1}^{m}(y_i-\hat{y}_i)(\hat{y}_i-\overline{y})=\sum_{i=1}^{m}(y_i-\hat{y}_i)(w^Tx_i+b-\overline{y})\\&=\sum_{i=1}^{m}w^Tx_i(y_i-\hat{y}_i)+\sum_{i=1}^{m}(b-\overline{y})(y_i-\hat{y}_i)=0\end{aligned}$$

SST=SSR+SSE 得证

5 [35pts] Logistic Regression in Practice

对数几率回归 (Logistic Regression, 简称 LR) 是实际应用中非常常用的分类学习算法.

(1) **[30pts]** 请编程实现二分类的 LR, 要求采用牛顿法进行优化求解. 详细编程题指南请参见链接: here. 请将绘制好的 ROC 曲线放在解答处, 并记录模型的精度与 AUC (保留 4 位小数).

(2) **[5pts]** 试简述在对数几率回归中, 相比梯度下降方法, 使用牛顿法的优点和缺点.

Solution. 此处用于写解答 (中英文均可)