Project 3: Classification & Clustering

电02 肖锦松 2020010563

Getting Started

run `python dataClassifier.py -c lr`

该命令调用Linear Regression Classifier，运行结果如下，准确率为77.9%. 该分类器的实现在 `LinearRegressionClassifier.train/classify` in `classifiers.py`。

```
Doing classification
--------------------
data:		digits
classifier:		lr
training set size:	5000
Extracting features...
Training...
Validating...
807 correct out of 1000 (80.7%).
Testing...
779 correct out of 1000 (77.9%).
```

这个分类器的目标函数为$\min\|Y-W^TX\|_F^2+\frac{\lambda}{2}\|W\|_F^2$

解析解为：$\mathrm{W}=(XX^T+\lambda I)^{-1}XY^T$

对每个特征向量x，我们有评估函数：$\mathrm{score}(x,y)=\|y-W^Tx\|^2$

MNIST数据集：每个数据为28*28=784灰度数字图像，并且所有功能和标签都是numpy格式。

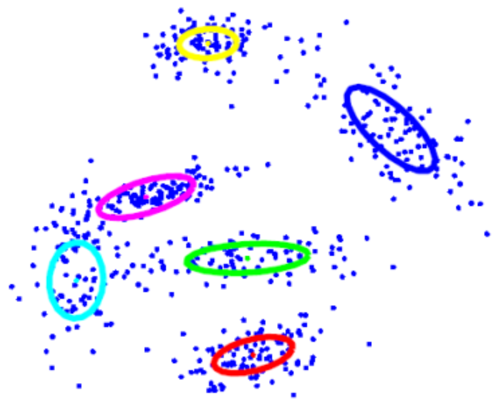
Question 1: K-Means clustering (4 points)

K-Means算法简单过程如下：

Initialize: $\mu_j \leftarrow \mathrm{Random}(\boldsymbol{x}_i), j=1,\dots,k$

Repeat until convergence: （首先定义特征x,y之间的距离：$\mathrm{dist}(x,y)=\|x-y\|^2$）

- Compute cluster assignment (labels): $y_i=h(\boldsymbol{x}_i)=\underset{j}{\mathrm{argmin}}\,\|\boldsymbol{\mu}_j-\boldsymbol{x}_i\|_2^2, i=1,\dots,n$
- Compute means: $\mu_j \longleftarrow \mathrm{Mean}(\{\boldsymbol{x}_i|y_i=j\}), j=1,\dots,k$



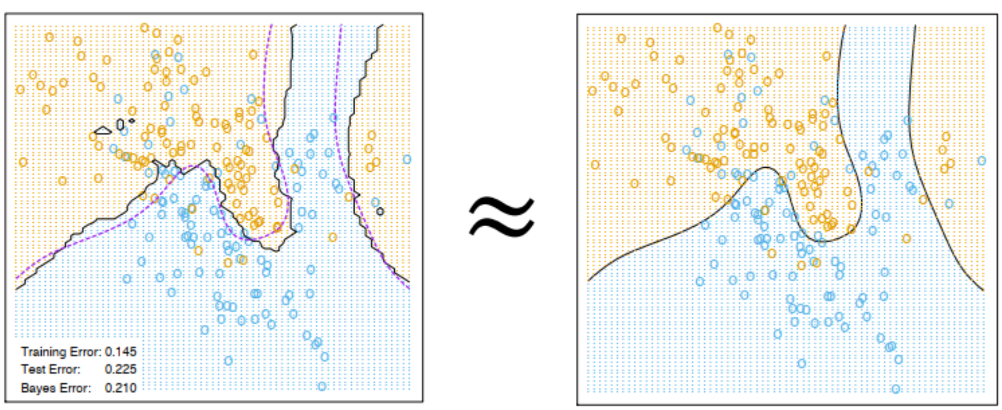
在完成作业的过程中，我发现充分了解数据变量的shape非常重要，既有助于帮助我们理解数据的意义，也能够避免进行维度错误的计算。数据变量的shape情况如下：

- `trainingData`: n x dim，用于训练的数据一共n个，每个数据为dim元；
- `cluster_no`: n x 1，表示当前每个训练数据对应的簇标号；
- `self.clusters`: k x dim，对应k个簇中心。

算法的实现主要是利用Numpy库中的函数来完成，其中计算特征之间的dist比较困难。由于μ_j与x_i二者维度不同，可以将`trainingData` reshape 为(n, 1, dim)，而将`self.clusters` reshape 为(1, k, dim)，二者相减得到维度为(n, k, dim)的差向量，该差向量只需要在`ord = 2, axis = 2的`条件下求范数即可得到特征之间的dist。

Question 2: KNN classifier (3 points)

K-Nearest-Neighbors (KNN)算法原理为: Find k nearest neighbors of $\boldsymbol{x}$. Label $\boldsymbol{x}$ with the majority label within the k nearest neighbors. 其中，特征x, y之间的距离：$\mathrm{dist}(x, y) = \|x - y\|^2$



7-Nearest-Neighbor　　Target Decision Boundary

数据变量的shape情况如下：

- `self.trainingData`: training(5000) x dim(784)，用于训练的数据一共5000个，每个数据为784元。
- `data`: training(5000) x dim(784)，表示验证集的数据，一共有5000个，每个数据为784元（即像素个数）

- `dist`：validation(1000) x training(5000)，`dist[i][j]`就代表距离`(validationData[i] - trainingData[j])^2`

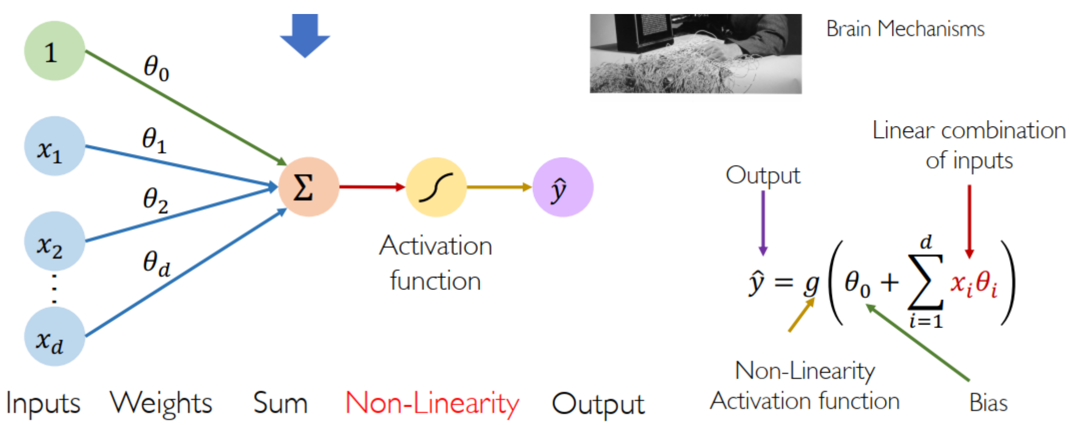
但在这里使用question1的方法计算dist，会开辟出一个大小为(1000, 5000, 786)float数组，这会造成**内存问题**。因此我们只能采用循环，每次对一个验证集数据到所有训练数据的dist，然后根据knn算法算出该验证集数据的预测label，最后返回一个大小为1000的label数组。

run `python dataClassifier.py -c knn -n 5`

该命令调用KNN Classifier，运行结果如下，准确率为91.0%.

```
data:           digits
classifier:             knn
training set size:      5000
Extracting features...
Training...
Validating...
917 correct out of 1000 (91.7%).
Testing...
910 correct out of 1000 (91.0%).
```

Question 3: Perceptron (or Softmax Regression) (4 points)



Perceptron算法如下：

Test perceptron algorithm with5000 training data, 1000 validation data and 1000 test data.

Perceptron

$$t = f(x) = g\left(W^T x + b\right) = [f_1(x), \ldots, f_i(x)]^T$$
$$f_i(x) = g_i(w_i^T x + b_i)$$

The output of $f(x)$ can be regarded as the following multinomial distribution:

$$p(y = i|x) = f_i(x) = \frac{e^{w_i^T x + b_i}}{\sum_{j=1}^{l} e^{w_j^T x + b_j}}$$

Weight and bias is updated as follows:

$$w_j^{(t+1)} = w_j^{(t)} - \eta\lambda w_j^{(t)} - \frac{\eta}{k}\sum_{i=1}^{k}\nabla_{w_j} - \log p(y = y_i|x_i)|_{w_j = w_j^{(t)}}$$

$$b_j^{(t+1)} = b_j^{(t)} - n\lambda b_j^{(t)} - \frac{\eta}{k}\sum_{i=1}^{k}\nabla_{b_j} - \log p(y = y_i|x_i)|_{y_j = a_j^{(t)}}$$

where:

$$\nabla_{w_j} - \log p(y = y_i|x_i) = \begin{cases} p(y = j|x_i)x_i, j \neq y_i \\ (p(y = j|x_i) - 1)x_i, j = y_i \end{cases}$$

$$\nabla_{b_j} - \log p(y = y_i|x_i) = \begin{cases} p(y = j|x_i), j \neq y_i \\ p(y = j|x_i) - 1, j = y_i \end{cases}$$

根据上述公式计算$p(y = j|x_i)$，以及更新权重w 和偏置b 即可。

---

run `python dataClassifier.py -c perceptron`

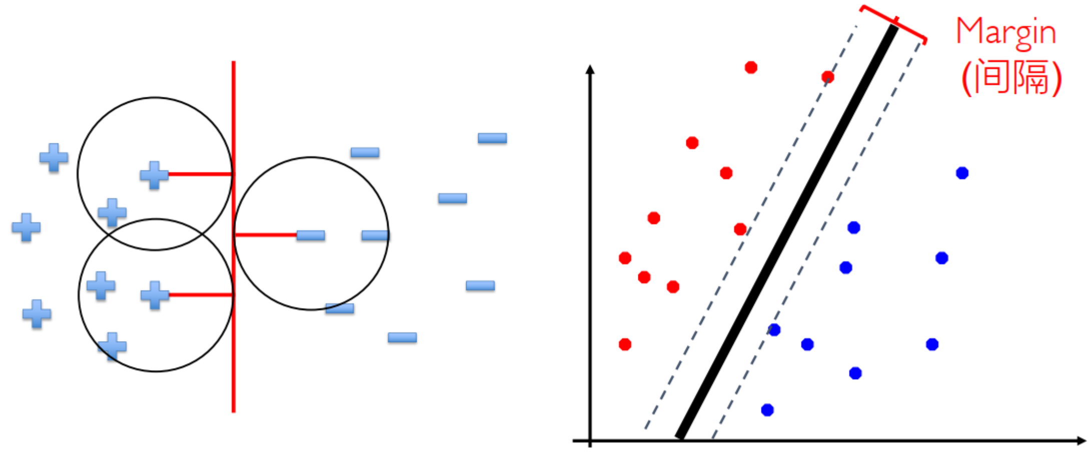
该命令调用Perceptron Classifier，运行结果如下，准确率为87.7%.

```
data:           digits
classifier:             perceptron
training set size:      5000
Extracting features...
Training...
Starting iteration  0 ...
Starting iteration  10 ...
Starting iteration  20 ...
Starting iteration  30 ...
Starting iteration  40 ...
Validating...
902 correct out of 1000 (90.2%).
Testing...
877 correct out of 1000 (87.7%).
```

Which following images is most likely represent the weights learned by the perception?

(a) 可以发现a 中对应的是一个"相对模糊"的手写数字，而b 中对应的是比较清晰的手写数字，对于一个训练后的模型，权重图实际上表示的是每个输入像素对于输出类别的重要程度，训练的模型需要识别不同人写出的不同样子的数字，因此权重图不可能如同b 一样这么清晰。b 可能对应的是刚开始训练时的权重图，而a 则对应训练结束后的权重图。实际权重图如下：

Question 4: SVM with sklearn (2 points)



SVM算法：基于训练集D在样本空间中找到一个划分超平面，将不同类别的样本分开。这个超平面需要满足间隔最大这个条件。

$$\max_{w,b} \operatorname{margin}(w,b)$$
$$\text{s.t.} y_i(w - x_i + b) \geq 1, 1 \leq i \leq n$$

等价于：

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}||w||_2^2$$
$$s.t.\ y_i(wx_i + b) \geq 1, 1 \leq i \leq n$$

用拉格朗日法求解其对偶问题，拉格朗日函数为：

$$L(\boldsymbol{w}, b, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2} \| \boldsymbol{w} \|^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(1 - y_i \left(\boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}_i + b\right)\right)$$

令其偏导数为零，得到两个关系式，带入原式有：

$$\begin{aligned} \max \quad & \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \boldsymbol{x}_i^T \boldsymbol{x}_j \\ s.t. \quad & \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = \mathbf{0}, \alpha_i \geq 0 \end{aligned}$$

也就是任务指导书中给定的优化问题：

$$\min_{\alpha} \frac{1}{2} \alpha^T A \alpha - \mathbf{1}^T \alpha$$
$$\text{s.t.} \begin{matrix} y^T \alpha = 0 \\ 0 \leq \alpha_i \leq C \end{matrix}$$

---

implement a SVM algorithm with the following hyperparameters:

$C = 5$

kernel type: $RBF(K(x,y) = \exp -\frac{(x-y)^2}{2\sigma^2}) \quad \text{with } \sigma = 10$

在sklearn的SVM函数中，关键函数就是`sklearn.svm.SVC(*, C=1.0, kernel='rbf', degree=3, gamma='scale', coef0=0.0, shrinking=True, probability=False, tol=0.001, cache_size=200, class_weight=None, verbose=False, max_iter=-1, decision_function_shape='ovr', break_ties=False, random_state=None)`

题目与注释中要求设置四个参数，其中直接设置`c=5.0`，`kernel='rbf'`，`decision_function_shape='ovr'`，对于RBF函数，`K(x, x') = exp(-gamma * ||x - x'||^2)`，因此`gamma`参数直接设置为`gamma=1/(2*(10.0)**2)`。

The relationship between the gamma parameter in the API and σ in original RBF

$$\text{gamma} = \frac{1}{2\sigma^2}$$

---

run `python dataClassifier.py -c svm`，最终正确率为93.1%

```
Doing classification
--------------------
data:           digits
classifier:             svm
training set size:      5000
Extracting features...
Training...
Validating...
944 correct out of 1000 (94.4%).
Testing...
931 correct out of 1000 (93.1%).
```

Question 5: Better Classification Accuracy (2 points + 1 bonus)

起初采用SVM模型，并且反复改进超参数后训练出来的最终正确率为94.8%，于是决定采用神经网络模型，经过反复改进超参数可以达到95.6%的正确率。

整体基于多层感知机（Multilayer Perceptron，MLP）模型，也就是前馈神经网络（Feedforward Neural Network）模型。经过尝试发现设置2个隐藏层，每层均为256个神经元，同时`batch_size`设置为16。

run `python dataClassifier.py -c best`，最终正确率为95.6%

```
Doing classification
--------------------
data:           digits
classifier:             best
training set size:      5000
Extracting features...
Training...
Validating...
Testing...
956 correct out of 1000 (95.6%).
```