# lec08 Regularisation

## Regularisation (正则化)

正则化是通过约束模型来减少模型过度拟合的过程 (降低参数的复杂性/数量)。对于使用权重向量的分类器，可以通过最小化权重向量的范数 (norm) (长度) 来完成正则化

常见的正则化算法：

- L2 regularisation (ridge regression 岭回归 or Tikhonov regularisation 吉洪诺夫正则化)
- L1 regularisation (Lasso regression)
- L1 + L2 regularisation (mixed regularisation)

### 她 PPT 👆写的一坨，我来解释

#### 正则化的形式

正则化的作用是减少权重向量的幅度；对于较大的权重，正则化会惩罚权重的大值。

- L1 正则化（Lasso 正则化）添加的惩罚项是权重的绝对值之和，即 $\lambda\sum|w_i|$
  这种形式倾向于生成稀疏权重矩阵，即很多权重会变为零，从而在模型中进行特征选择（没有这个特征，直接就是0）
- L2 正则化（岭回归或 Tikhonov 正则化）添加的惩罚项是权重的平方和，即 $\lambda\sum w_i^2$
  这种形式倾向于将权重均匀地减小，而不会将它们减到零，这有助于处理因特征之间的相关性而引起的问题（如多重共线性）

#### 惩罚机制

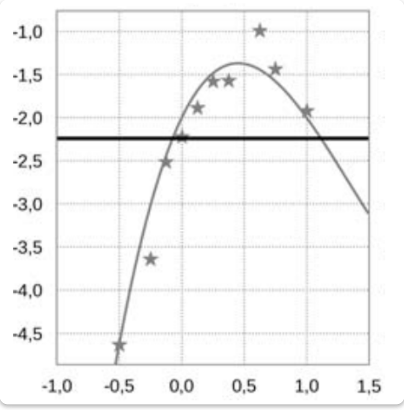
总成本函数包含了原始的损失函数和正则化项（下面有介绍），增加正则化项实际上是增加了对大权重的惩罚。这意味着如果权重值增大，模型的总损失也会增大（可以从损失函数的计算公式中发现，权重过大的项对损失函数的结果有着非常大的影响），因此在训练过程中算法会倾向于选择较小的权重值，以最小化总成本。

训练模型时，权重的更新不仅受到数据误差（由损失函数衡量）的影响，还受到正则化项的影响。对于 L2 正则化，每次权重更新都会减小一定比例的当前权重值，从而有效控制权重不会变得过大

通过惩罚大的权重值，正则化帮助模型避免对训练数据中的噪声或非代表性特征过度敏感。较小的权重减少了模型的复杂度，使模型更容易泛化到新数据上

## 回到第一个标题

*举例来说*，对于函数 $f(x)=x^3-4x^2+3x-2$，我们在其上面采样若干点，并且在 $y$ 方向上加入一些噪声，结果如下图



我们的目的是在不知道原函数的情况下，根据这些加入了噪声的点，进行多项式拟合：

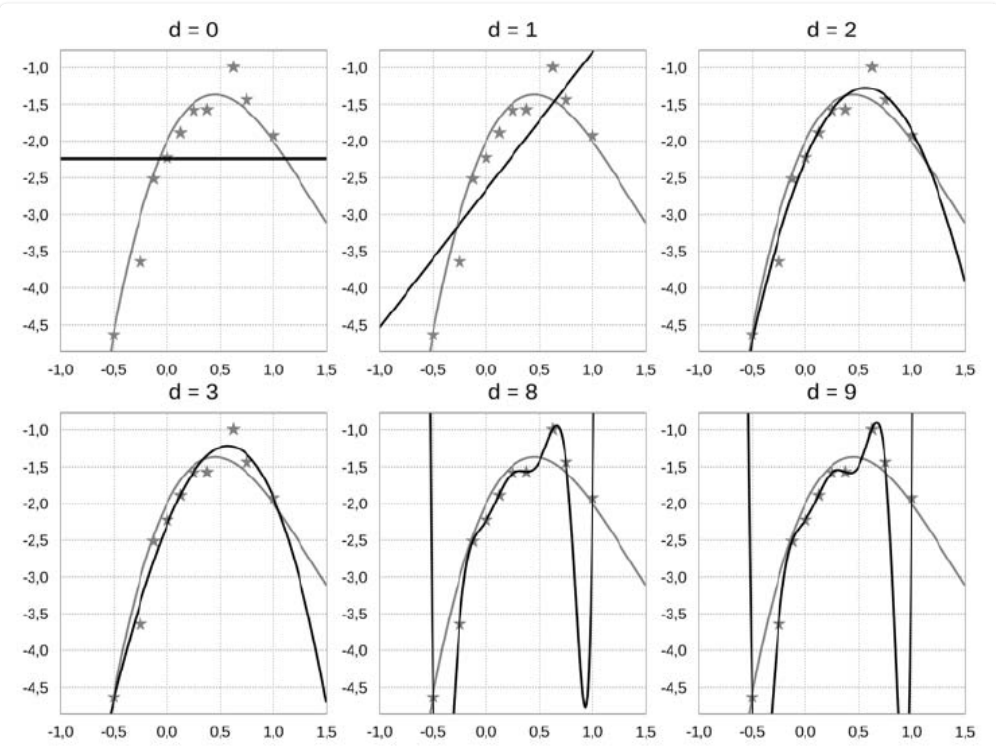
$$\hat{y}(x,W)=w_0+\sum_{j=1}^{d} w_j x^j=(1,x,x^2,\ldots,x^d)\cdot W$$

使得下面的损失函数最小化：

$$L(\mathscr{D},W)=\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{y}(x_i,W)-y_i\right)^2$$

其中，$\mathscr{D}=\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^{n}$ 是原函数中加入噪声的采样点，$d$ 是多项式的最高次幂

*之后*，观察拟合结果：




但是：

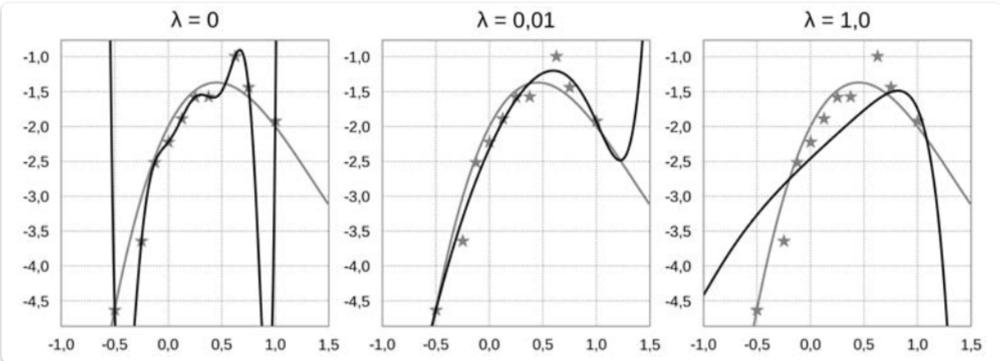
$$\begin{aligned}
f_0(x)&=-2.2393\\
f_1(x)&=-2.6617+1.8775x\\
f_2(x)&=-2.2528+3.4604x-3.0603x^2\\
f_3(x)&=-2.2937+3.5898x-2.6538x^2-0.5639x^3\\
f_8(x)&=-2.2324+2.2326x+6.2543x^2+15.5996x^4-239.9751x^4+322.8516x^5\\
&\quad+621.0952x^6-1478.6505x^7+750.9032x^8\\
f_9(x)&=-2.225+2.014x+4.882x^2+31.13x^3-230.31x^4+103.72x^5+869.22x^6\\
&\quad-966.67x^7-319.31x^8+505.64x^9
\end{aligned}$$

参数增长的幅度过大，我们需要进行约束，增加 $\lambda||W||^2$ 项：

$$L(\mathscr{D}, W) = \sum_{i=1}^{n} \left(\hat{y}(x_i, W) - y_i\right)^2 + \lambda\|W\|^2$$

对于 $d = 9$，有

$$\begin{aligned} f_{\lambda=0}(x) =& -2.22 + 2.01x + 4.88x^2 + 31.13x^3 - 230.31x^4 + 103.72x^5 + 869.22x^6 \\ & - 966.67x^7 - 319.31x^8 + 505.64x^9 \\ f_{\lambda=0.01}(x) =& -2.32 + 3.40x - 2.33x^2 + 0.05x^3 - 0.51x^4 - 0.29x^5 - 0.22x^6 \\ & - 0.06x^7 + 0.09x^8 + 0.24x^9 \\ f_{\lambda=1}(x) =& -2.46 + 1.45x - 0.19x^2 + 0.22x^3 - 0.13x^4 - 0.05x^5 - 0.14x^6 \\ & - 0.13x^7 - 0.16x^8 - 0.16x^9 \end{aligned}$$




可以发现，多项式系数的绝对值显著减小，同时拟合程度也有提高

这正是因为正则化使得每次梯度更新不会得着大权重硬薅，转而去修改小权重，最后得到更好的效果

## L2 regularisation

我们希望对 $W$ 施加 L2 正则化，要最小化的整体目标可以写成如下形式：

$$J(\mathscr{D}, W) = L(\mathscr{D}, W) + \lambda\|W\|_2^2 = L(\mathscr{D}, W) + \lambda\sum_{i=1}^{d} w_i^2$$

其中，$\lambda$ 被称为正则化系数，通常通过交叉验证来设定

整体目标的梯度就变成了损失梯度与权重向量 $W$ 的和：

$$\nabla_W J(\mathscr{D}, W) = \nabla_W L(\mathscr{D}, W) + 2\lambda W$$

*而 SGD*（随机梯度下降）更新规则会通过一个负的学习率 $\mu$ 乘以损失梯度，因此，L2 正则化的更新规则将包含一个 $-2\mu\lambda W$ 的项，如下例所示

$$\begin{aligned} W \leftarrow & W - \mu(y_i \cdot X_i + 2\lambda W) \\ =& W + \mu \cdot y_i \cdot X_i - 2\mu\lambda W \\ =& W + y_i \cdot X_i - 2\lambda W \\ =& (1 - 2\lambda) \cdot W + y_i \cdot W \end{aligned}$$

其中，对于第三行的变换，$\mu = 1$；$y_i$ 指样本标签，这里应该是 $-1$ 或 $1$；$W \leftarrow W + \mu y_i X_i$ 是基本感知机更新规则

## 设置 $\lambda$

将数据集分为训练集和验证集，在对数尺度上尝试不同的 $\lambda$，分别训练后验证

# K-Nearest Neighbours

训练：储存整个训练集
分类：对于一个输入 $X'$，找到模型中 $k$ 个最邻近的对象，这 $k$ 个对象中占主导的标签就是 $X'$ 的预测结果

## 衡量相似性/距离

### 矩阵

$X = (x_1, \ldots, x_d)$，$Y = (y_i, \ldots, y_d)$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的向量

### 范数

- L1 范数是向量中各个元素绝对值的总和
- L2 范数是向量元素平方和的平方根
- 无穷范数表示向量中的最大元素的绝对值
- L0 范数是向量中非 0 元素的个数

Cosine：

$$\mathrm{CosSim}(X, Y) = \frac{X^T Y}{\|X\|\|Y\|} = \cos(\theta)$$

其中，$\|X\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}$，$\theta$ 是 $X$ 和 $Y$ 的夹角

Euclidean：

$$\mathrm{EucDist}(X, Y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x_i - y_i)^2} = \sqrt{(X - Y)^T (X - Y)}$$

Manhattan：

$$\mathrm{ManDist}(X, Y) = \|X - Y\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$$

### 集合

Jaccard similarity coefficient：

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = \frac{|A \cap B|}{|A| + |B| - |A \cap B|}$$

Overlap Coefficient：

$$\mathrm{overlap}(X, Y) = \frac{|X \cap Y|}{\min(|X|, |Y|)}$$

Hamming distance：

$$d_H(A, B) = |A \triangle B| = (A \setminus B) \cup (B \setminus A)$$