lec08 Regularisation and Classification

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

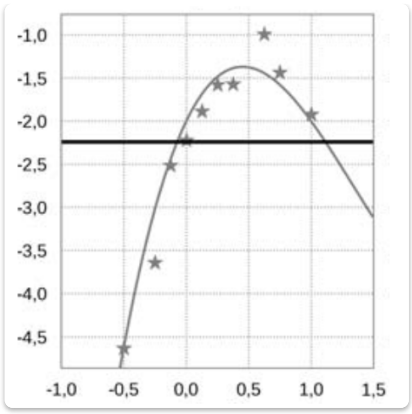
总成本函数包含了原始的损失函数和正则化项（下面有介绍），增加正则化项实际上是增加了对大权重的惩罚。这意味着如果权重值增大，模型的总损失也会增大（可以从损失函数的计算公式中发现，权重过大的项对损失函数的结果有着非常大的影响），因此在训练过程中算法会倾向于选择较小的权重值，以最小化总成本。

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：

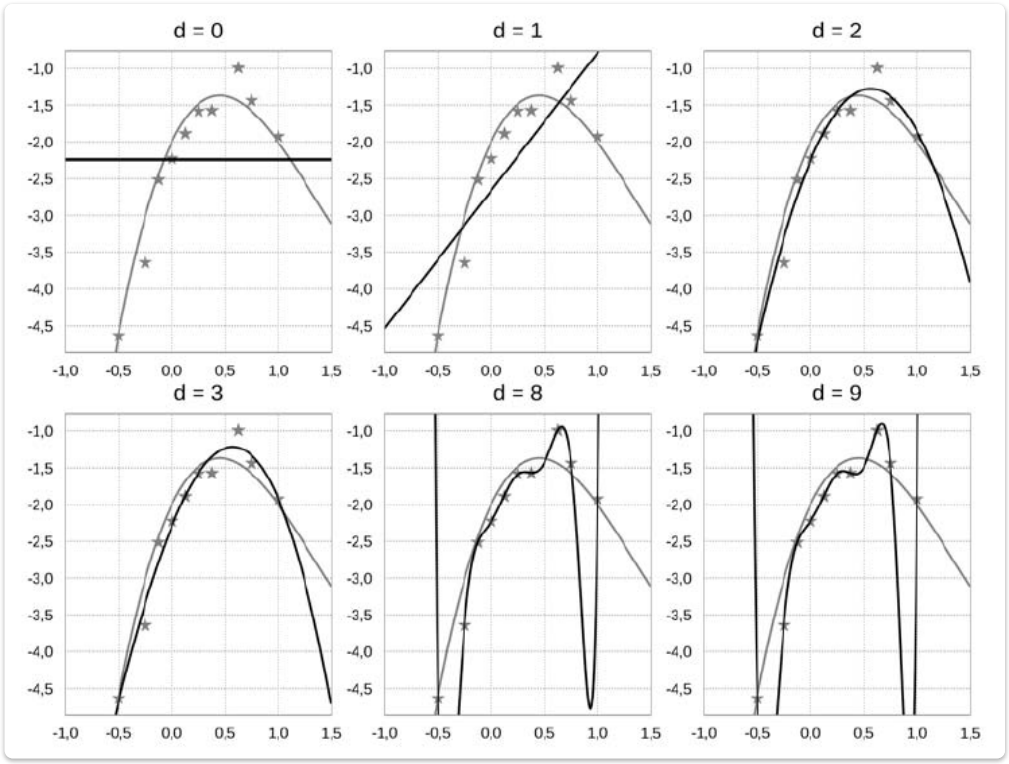
$$\hat{y}(x, W) = w_0 + \sum_{j=1}^{d} w_j x^j = (1, x, x^2, \ldots, x^d) \cdot W$$

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：

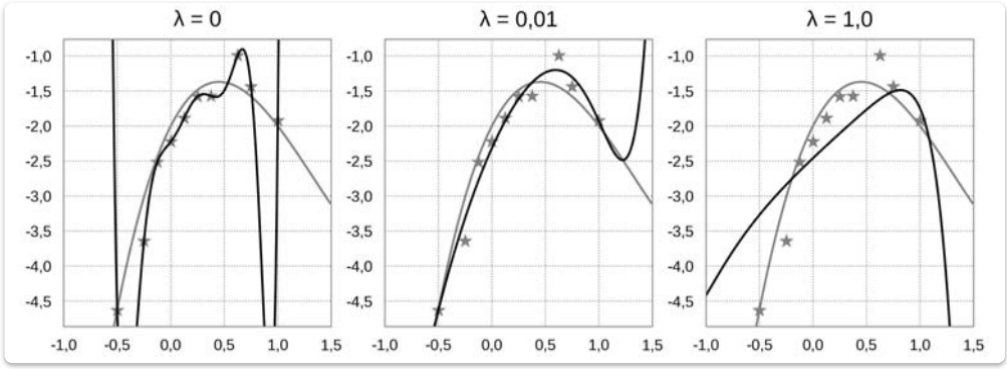
$$\begin{aligned}
f_0(x) &= -2.2393 \\
f_1(x) &= -2.6617 + 1.8775x \\
f_2(x) &= -2.2528 + 3.4604x - 3.0603x^2 \\
f_3(x) &= -2.2937 + 3.5898x - 2.6538x^2 - 0.5639x^3 \\
f_8(x) &= -2.2324 + 2.2326x + 6.2543x^2 + 15.5996x^4 - 239.9751x^4 + 322.8516x^5 \\
&\quad + 621.0952x^6 - 1478.6505x^7 + 750.9032x^8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

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，λ 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 μ 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 λ

将数据集分为训练集和验证集，在对数尺度上尝试不同的 λ，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

$X=(x_1,\dots,x_d)$，$Y=(y_i,\dots,y_d)$ 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：

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

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

Euclidean：

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

Manhattan：

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

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：

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

Hamming distance：

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