Regularizations

Ngoc Hoang Luong

University of Information Technology (UIT), VNU-HCM

April 13, 2023

Chính quy hóa

Lương Ngọc Hoàng

Trường Đại học Công nghệ Thông tin (UIT), ĐHQG-HCM

Ngày 13 tháng 4 năm 2023



• In **linear regression**, the overall error function E() is the mean squared error (MSE).

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính •

Trong hồi quy tuyến tính, hàm lỗi tổng thể E() là lỗi bình phương trung bình (MSE).

- In linear regression, the overall error function E() is the mean squared error (MSE).
- From the perspective of the parameters (i.e., the regression coefficients), we denote the error function as $E(\mathbf{b})$.

$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính •

Trong hồi quy tuyến tính, hàm lỗi tổng thể E() là lỗi bình phương trung bình (MSE).

• Từ quan điểm của các tham số (nghĩa là các hệ số hồi quy), chúng ta ký hiệu hàm sai số là E(b).

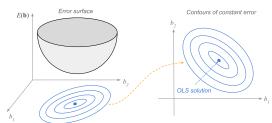
$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \quad (Xb \ y)$$



- In linear regression, the overall error function E() is the mean squared error (MSE).
- From the perspective of the parameters (i.e., the regression coefficients), we denote the error function as $E(\mathbf{b})$.

$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

• Let's consider two inputs X_1 and X_2 , and their corresponding parameters b_1 and b_2 . The error function $E(\mathbf{b})$ generates a convex error surface with the shape of a bowl (or a paraboloid).



Machine Translated by Google

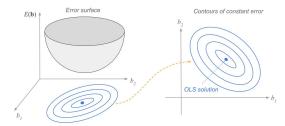
Hồi quy tuyến tính •

Trong hồi quy tuyến tính, hàm lỗi tổng thể E() là lỗi bình phương trung bình (MSE).

• Từ quan điểm của các tham số (nghĩa là các hệ số hồi quy), chúng ta ký hiệu hàm sai số là E(b).

$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \qquad (Xb \ y)$$

 Hãy xem xét hai đầu vào X1 và X2 và tương ứng của chúng thông số b1 và b2. Hàm lỗi E(b) tạo ra một bề mặt lỗi lồi với hình dạng của một cái bát (hoặc một paraboloid).



$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

• In ordinary least squares (OLS), we minimize $E(\mathbf{b})$ unconditionally: without any restriction.

Machine Translated by Google

hồi quy tuyến tính

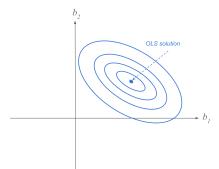
$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \quad (Xb \ y)$$

Trong bình phương nhỏ nhất thông thường (OLS), chúng ta tối thiểu hóa
 E(b) một cách vô điều kiện: không có bất kỳ hạn chế nào.

UNIVERSITY OF I

$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

- In ordinary least squares (OLS), we minimize $E(\mathbf{b})$ unconditionally: without any restriction.
- The solution is indicated with a blue dot at the center of the elliptical contours of constant error.

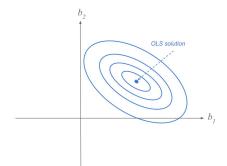


Machine Translated by Google

hồi quy tuyến tính

$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \qquad (Xb \ y)$$

- Trong bình phương nhỏ nhất thông thường (OLS), chúng ta tối thiểu hóa
 E(b) một cách vô điều kiện: không có bất kỳ hạn chế nào.
- Dung dịch được biểu thị bằng một chấm màu xanh lam ở giữa đường viền elip của lỗi liên tục.



$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

• We would like now to impose a restriction on the squared magnitude of the regression coefficients.

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Hệ số hồi quy ràng buộc

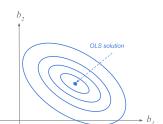
$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \qquad (Xb \ y)$$

Bây giờ chúng tôi muốn áp đặt một hạn chế đối với bình phương độ lớn của các hệ số hồi quy.

$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

- We would like now to impose a restriction on the squared magnitude of the regression coefficients.
- We still minimize $E(\mathbf{b})$, but now we require the following condition on b_1, b_2, \dots, b_p :

$$\sum_{j=1}^{p} b_j^2 \le c \tag{1}$$



Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Hệ số hồi quy ràng buộc

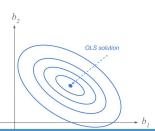
$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \quad (Xb \ y)$$

- Bây giờ chúng tôi muốn áp đặt một hạn chế đối với bình phương độ lớn của các hệ số hồi quy.
- Ta vẫn giảm thiểu E(b), nhưng bây giờ ta cần điều kiện sau trên b1, b2, . . . , bp:

$$P$$

$$2 b \le cj$$

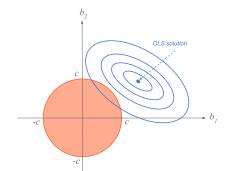
$$j=1$$
(1)



$$E(\mathbf{b}) = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})$$

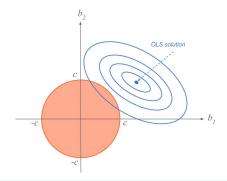
• We have a constrained minimization of $E(\mathbf{b})$ for some "budget" c:

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \le c$$



$$E(b) = \frac{1}{N} (Xb \ y) \quad (Xb \ y)$$

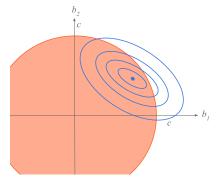
• Chúng tôi có mức tối thiểu hóa hạn chế của E(b) đối với một số "ngân sách" c:



Machine Translated by Google

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \le c$$

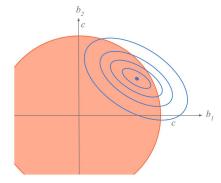
• If we choose too big values of c, we could have a big enough constraint that includes the OLS solution.



Machine Translated by Google

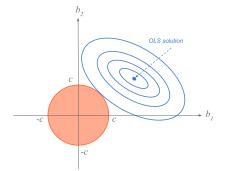
Hồi quy tuyến tính - Hệ số hồi quy ràng buộc

Nếu chúng ta chọn giá trị c quá lớn, chúng ta có thể có một ràng buộc bao gồm giải pháp OLS.



$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\top} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\top} \mathbf{b} \le c$$

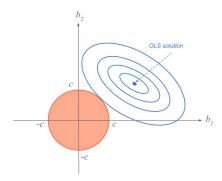
We could make the budget stricter by reducing the value of c



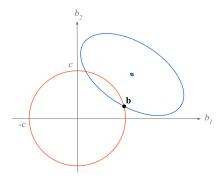
Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Hệ số hồi quy ràng buộc

• Chúng ta có thể thắt chặt ngân sách hơn bằng cách giảm giá trị của c



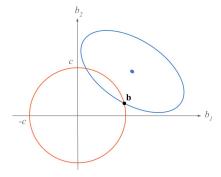
• Let's consider one elliptical contour of constant error, a given budget c_i and a point **b** satisfying the budget constraint



Machine Translated by Google

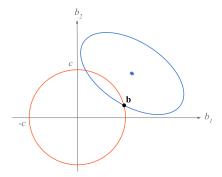
Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

 Hãy xem xét một đường bao hình elip có sai số không đổi, ngân sách c cho trước và điểm b thỏa mãn giới hạn ngân sách





• Let's consider one elliptical contour of constant error, a given budget c, and a point b satisfying the budget constraint

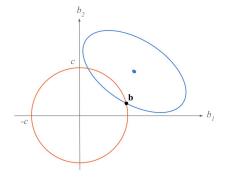


• $\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{b} = c$. However, this point does not fully minimize $E(\mathbf{b})$.

Machine Translated by Google

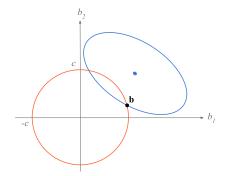
Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

 Hãy xem xét một đường bao hình elip có sai số không đổi, ngân sách c cho trước và điểm b thỏa mãn giới hạn ngân sách



b = c. Tuy nhiên, điểm này không giảm thiểu hoàn toàn E(b).

• Let's consider one elliptical contour of constant error, a given budget c, and a point **b** satisfying the budget constraint

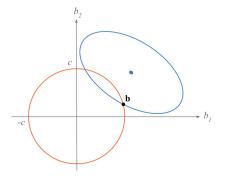


- $\mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{b} = c$. However, this point does not fully minimize $E(\mathbf{b})$.
- We could still find other b along the circle that would give us smaller $E(\mathbf{b})$.

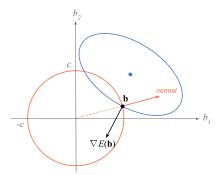
Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một qiải pháp tối thiểu hóa mới

• Hãy xem xét một đường bao hình elip có sai số không đổi, ngân sách c cho trước và điểm b thỏa mãn giới hạn ngân sách



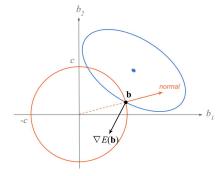
b = c. Tuy nhiên, điểm này không giảm thiểu hoàn toàn E(b). Chúng tôi vẫn có thể tìm thấy các b khác dọc theo vòng tròn sẽ cho chúng tôi E(b) nhỏ hơn.



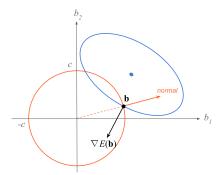
• The gradient $\nabla E(\mathbf{b})$ points in the direction orthogonal to the contour ellipse, i.e., the direction of largest change of $E(\mathbf{b})$.

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới



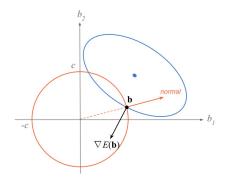
• Độ dốc E(b) chỉ theo hướng trực giao với đường bao elip, tức là hướng thay đổi lớn nhất của E(b).



- The gradient $\nabla E(\mathbf{b})$ points in the direction orthogonal to the contour ellipse, i.e., the direction of largest change of $E(\mathbf{b})$.
- The direction of b is orthogonal to the circumference of the constraint (normal vector). The angle between the gradient and the normal vector is less than 180 degrees. We can find better b points that make the error smaller. Where is that optimal b^* ?

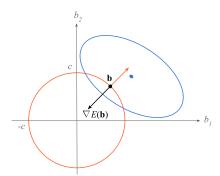
Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một qiải pháp tối thiểu hóa mới



• Độ dốc E(b) chỉ theo hướng trực giao với đường bao elip, tức là hướng thay đổi lớn nhất của E(b). • Hướng của b là trực giao với chu vi của

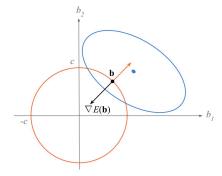
ràng buộc (vectơ pháp tuyến). Góc giữa gradient và vector pháp tuyến nhỏ hơn 180 độ. Chúng ta có thể tìm thấy điểm b tốt hơn làm cho sai số nhỏ hơn. Đó là tối ưu ở đâu b



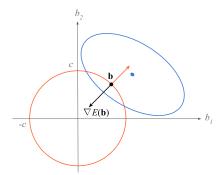
• The optimal vector \mathbf{b}^* corresponds to the one that is exactly the opposite of $\nabla E(\mathbf{b})$. The gradient and the normal vectors are anti-parallel: $\nabla E(\mathbf{b}^*) \propto -\mathbf{b}^*$.

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới



Vectơ b tối ưu đối của tương ứng với một trong đó là chính xác
 E(b). Độ dốc và các vectơ pháp tuyến là phản song song: E(b)
 b

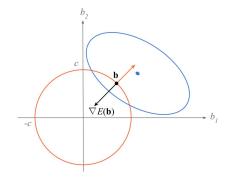


- The optimal vector \mathbf{b}^* corresponds to the one that is exactly the opposite of $\nabla E(\mathbf{b})$. The gradient and the normal vectors are anti-parallel: $\nabla E(\mathbf{b}^*) \propto -\mathbf{b}^*$.
- We choose a proportionality constant of $-2(\lambda/n)$

$$\nabla E(\mathbf{b}^*) = -2\frac{\lambda}{n}\mathbf{b}^*$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới



- Vectơ b tối ưu đối tương ứng với một trong đó là chính xác của E(b). Độ dốc và các vectơ pháp tuyến là phản song song: E(b) b
- Chúng tôi chọn hằng số tỷ lệ là 2(λ/n)

$$E(b) = 2\frac{\lambda}{N}$$

$$\nabla E(\mathbf{b}^*) = -2\frac{\lambda}{n}\mathbf{b}^*$$
$$\nabla E(\mathbf{b}^*) + 2\frac{\lambda}{n}\mathbf{b}^* = \mathbf{0}$$

• The above expression is the gradient of the following function:

$$f(\mathbf{b}) = E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$
$$\nabla f(\mathbf{b}^*) = \nabla E(\mathbf{b}^*) + 2 \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^*$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

$$E(b \quad \lambda) = \frac{2^{-}b}{N}b$$

$$E(b \quad \lambda) + \frac{2^{-}b}{N} = \emptyset$$

• Biểu thức trên là gradient của hàm sau:

$$f(b) = E(b) + \frac{\lambda - b}{N} b$$

$$f(b) = E(b \lambda) + \frac{2}{N} b$$

$$\nabla E(\mathbf{b}^*) = -2\frac{\lambda}{n}\mathbf{b}^*$$
$$\nabla E(\mathbf{b}^*) + 2\frac{\lambda}{n}\mathbf{b}^* = \mathbf{0}$$

• The above expression is the gradient of the following function:

$$f(\mathbf{b}) = E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$
$$\nabla f(\mathbf{b}^*) = \nabla E(\mathbf{b}^*) + 2 \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^*$$

• Now, our minimization problem becomes:

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \right\}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

$$E(b \quad \lambda) = \frac{2}{N}b$$

$$E(b \quad \lambda) + \frac{2}{N}b \quad = 0$$

• Biểu thức trên là gradient của hàm sau:

$$f(b) = E(b) + \frac{\lambda - b}{N} b$$

$$f(b) = E(b \lambda) + \frac{2 - b}{N}$$

Bây giờ, bài toán tối thiểu hóa của chúng ta trở thành:

$$f(\mathbf{b}) = E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} = \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$
$$= \frac{1}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} \mathbf{b} - \frac{2}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{1}{n} \mathbf{y}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$

Compute the gradient:

$$\nabla f(\mathbf{b}) = \frac{2}{n} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} \mathbf{b} - \frac{2}{n} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{2\lambda}{n} \mathbf{b}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

$$f(b) = E(b) + \frac{1}{N}b = \frac{1}{N}(Xb \ y) \quad (Xb \ y) + \frac{1}{N}b = b$$

$$= \frac{1}{N} \frac{2 \ b}{N} \frac{X \ Xb}{N} \frac{1}{N}b = X \ y + \frac{1}{N}\lambda y y + \frac{1}{N}b = b$$

Tính đô dốc:

$$f(b) = \frac{2}{N} X \quad Xb \qquad \frac{1}{N} X \quad y + \frac{2\lambda}{N} b$$

$$f(\mathbf{b}) = E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} = \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$
$$= \frac{1}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} \mathbf{b} - \frac{2}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{1}{n} \mathbf{y}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$$

Compute the gradient:

$$\nabla f(\mathbf{b}) = \frac{2}{n} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} \mathbf{b} - \frac{2}{n} \mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{y} + \frac{2\lambda}{n} \mathbf{b}$$

• Setting $\nabla f(\mathbf{b})$ to 0, and solve for the ridge regression of \mathbf{b} :

$$\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} + \lambda\mathbf{b} = \mathbf{0}$$
$$\mathbf{b}(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I}) = \mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}$$
$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy tuyến tính - Một giải pháp tối thiểu hóa mới

$$f(b) = E(b) + \frac{\lambda}{N}b \quad b = \frac{1}{N}(Xb \quad y) \quad (Xb \quad y) + \frac{\lambda}{N}b \quad b$$

$$= \frac{1}{N} \frac{2b}{N} \quad X \quad Xb \quad \frac{1}{N}b \quad X \quad y + \frac{1}{N}\lambda y \quad y + \frac{1}{N}b \quad b$$

Tính độ dốc:

$$f(b) = \frac{2}{N} X \quad Xb \qquad \frac{1}{N} X \quad y + \frac{2\lambda}{N} b$$

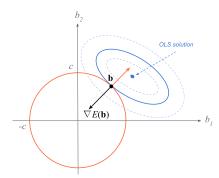
f(b) thành 0 và giải hồi quy sườn của b:

$$X \times Xb$$
 $X \times y + \lambda b =$

$$0 \times b(X \times X + \lambda I) =$$

$$X \times y \times bRR = (X \times X + \lambda I) \quad 1X \times y$$

Ridge Regression

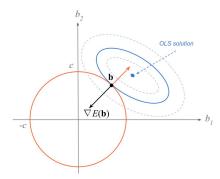


ridge coefficients
$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}$$

• The optimal vector \mathbf{b} that minimizes $E(\mathbf{b})$ and satisfies the constraint will be on a contour of constant error.

Machine Translated by Google

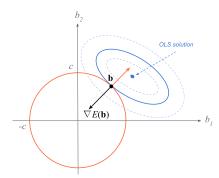
Hối quy sườn



hệ số sườn bRR =
$$(X X + \lambda I)$$
 1X y

 Vectơ b tối ưu làm cực tiểu E(b) và thỏa mãn ràng buộc sẽ nằm trên một đường bao có sai số không đổi.

Ridge Regression

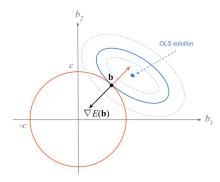


ridge coefficients
$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}$$

- The optimal vector \mathbf{b} that minimizes $E(\mathbf{b})$ and satisfies the constraint will be on a contour of constant error.
- The above illustration shows that the direction of the optimal vector **b** does not point in the direction of the OLS solution.

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn



hệ số sườn bRR =
$$(X X + \lambda I)$$
 1X y

- Vectơ b tối ưu làm cực tiểu E(b) và thỏa mãn ràng buộc sẽ nằm trên một đường bao có sai số không đổi.
- Hình minh họa trên cho thấy hướng của vectơ b không chỉ theo hướng của giải pháp OLS.

$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + 0\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = \mathbf{b}_{OLS}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn

• Nếu chúng ta đặt siêu tham số $\lambda = 0$, giải pháp sườn giống như giải pháp OLS.

$$bRR = (X X + 0I)$$
 1X $y = (X X)$ 1X $y = bOLS$

$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + 0\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = \mathbf{b}_{OLS}$$

• If λ becomes larger and larger, the terms on the diagonal of $(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})$ will be dominated by such λ values.

Machine Translated by Google

Hối quy sườn

• Nếu chúng ta đặt siêu tham số $\lambda = 0$, giải pháp sườn giống như qiải pháp OLS.

$$bRR = (X X + 0I)$$
 $1X y = (X X)$ $1X y = bOLS$

• Nếu λ ngày càng lớn thì các số hạng trên đường chéo của $(X \ X + \lambda I)$ sẽ bị chi phối bởi các qiá trị λ đó.



Ridge Regression

• If we set the hyperparameter $\lambda = 0$, the ridge solution is the same as the OLS solution.

$$\mathbf{b}_{RR} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + 0\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = \mathbf{b}_{OLS}$$

- If λ becomes larger and larger, the terms on the diagonal of $(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})$ will be dominated by such λ values.
- The matrix inverse, $(\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}$, will be dominated by the inverse of the terms on its diagonal:

$$\lambda \gg 0 \Rightarrow (\mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \to \frac{1}{\lambda} \mathbf{I}$$
$$\lambda \to \infty \Rightarrow (\mathbf{X}^{\mathsf{T}} \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \to \mathbf{0}_{(p,p)}$$
$$\lambda \to \infty \Rightarrow \mathbf{b}_{RR} = \mathbf{0}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn

• Nếu chúng ta đặt siêu tham số $\lambda = 0$, giải pháp sườn giống như giải pháp OLS.

$$bRR = (X X + 0I)$$
 1X $y = (X X)$ 1X $y = bOLS$

- Nếu λ ngày càng lớn thì các số hạng trên đường chéo của (X X + λΙ) sẽ bị chi phối bởi các giá trị λ đó. sẽ bị chi
- Ma trận nghịch đảo, (X X + λΙ) ¹, phối bởi nghịch đảo của các điều khoản trên đường chéo của nó:

$$\lambda \quad 0 \quad (X \quad X + \lambda I) \qquad \frac{1}{\text{tôi}}$$

$$\lambda \quad \infty \quad (X \quad X + \lambda I) \quad \lambda \qquad 0 (p,p)$$

$$\infty \quad bRR = 0$$

• Our two minimization problems:

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\top} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\top}\mathbf{b} \le c$$

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\top}\mathbf{b} \right\}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Mối quan hệ giữa λ và c

• Hai vấn đề giảm thiểu của chúng tôi:

• Our two minimization problems:

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \le c$$

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \right\}$$

• Imposing a large budget constraint c causes λ to become smaller. The smaller the λ , the closer \mathbf{b}_{RR} to the OLS solution.

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Mối quan hệ giữa λ và c

• Hai vấn đề giảm thiểu của chúng tôi:

• Áp đặt một ràng buộc ngân sách lớn c làm cho λ trở nên nhỏ hơn. λ càng nhỏ, bRR càng gần nghiệm OLS.

• Our two minimization problems:

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X}\mathbf{b} - \mathbf{y}) \right\} \text{ st } \|\mathbf{b}\|_{2}^{2} = \mathbf{b}^{\mathsf{T}}\mathbf{b} \le c$$

$$\min_{\mathbf{b}} \left\{ E(\mathbf{b}) + \frac{\lambda}{n} \mathbf{b}^{\mathsf{T}} \mathbf{b} \right\}$$

- Imposing a large budget constraint c causes λ to become smaller. The smaller the λ , the closer \mathbf{b}_{RR} to the OLS solution.
- Imposing a small budget constraint c causes λ to become larger. The larger the λ , the smaller the ridge coefficients.

$$\uparrow c \Rightarrow \downarrow \lambda$$

$$\downarrow c \Rightarrow \uparrow \lambda$$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Mối quan hệ qiữa λ và c

Hai vấn đề giảm thiểu của chúng tôi:

- Áp đặt một ràng buộc ngân sách lớn c làm cho λ trở nên nhỏ hơn. λ càng nhỏ, bRR càng gần nghiệm OLS.
- Áp đặt một ràng buộc ngân sách nhỏ c làm cho λ trở nên lớn hơn. λ càng lớn thì hệ số sườn núi càng nhỏ.

• In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.

Hồi quy sườn - Cách tìm λ ?

ullet Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh.

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Cách tìm λ ?

- Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh.
- · Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), \dots, (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

Dtrain = Df old 1 Df old 2 ... Df già K

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

• Each fold set \mathcal{D}_{fold-k} plays the role of an evaluation \mathcal{D}_{eval-k} . The corresponding \hat{K} training sets:

Hối quy sườn - Cách tìm λ?

• Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh. • Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), ..., (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

• Mỗi tập hợp nếp gấp Df old k đóng vai trò của một Deval k đánh giá. Các tập huấn luyện K tương ứng:

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

- Each fold set \mathcal{D}_{fold-k} plays the role of an evaluation \mathcal{D}_{eval-k} . The corresponding K training sets:
 - $\mathcal{D}_{train-1} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-1}$

Hồi quy sườn - Cách tìm λ ?

• Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh. • Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), ..., (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

 Mỗi tập hợp nếp gấp Df old k đóng vai trò của một Deval k đánh giá. K tập huấn luyện tương ứng:
 Dtrain 1 =

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

- Each fold set \mathcal{D}_{fold-k} plays the role of an evaluation \mathcal{D}_{eval-k} . The corresponding K training sets:
 - $\mathcal{D}_{train-1} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-1}$
 - $\mathcal{D}_{train-2} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-2}$

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

 \bullet Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh. \bullet

Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), ..., (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

Mỗi tập hợp nếp gấp Df old k đóng vai trò của một Deval k đánh giá.
 K tập huấn luyện tương ứng:

• Dtrain 2 = Dtrain / Dfold 2

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

- Each fold set \mathcal{D}_{fold-k} plays the role of an evaluation \mathcal{D}_{eval-k} . The corresponding \check{K} training sets:
 - $\mathcal{D}_{train-1} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-1}$
 - $\mathcal{D}_{train-2} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-2}$

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

• Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh. •

Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), \dots, (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

• Mỗi tập hợp nếp gấp Df old k đóng vai trò của một Deval k đánh giá. K tập huấn luyện tương ứng: •

```
Dtrain 1 = Dtrain / Dfold 1
• Dtrain 2 = Dtrain / Dfold 2
```

Machine Translated by Google

Ridge Regression - How to find λ ?

- In ridge regression, λ is a hyperparameter that we need to tune.
- We randomly split the training data:

$$\mathcal{D}_{train} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}\$$

into K folds:

$$\mathcal{D}_{train} = \mathcal{D}_{fold-1} \cup \mathcal{D}_{fold-2} \cup \ldots \cup \mathcal{D}_{fold-K}$$

- Each fold set \mathcal{D}_{fold-k} plays the role of an evaluation \mathcal{D}_{eval-k} . The corresponding \hat{K} training sets:
 - $\mathcal{D}_{train-1} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-1}$
 - $\mathcal{D}_{train-2} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-2}$

 - $\mathcal{D}_{train-K} = \mathcal{D}_{train} \setminus \mathcal{D}_{fold-K}$

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

• Trong hồi quy sườn núi, λ là một siêu tham số mà chúng ta cần điều chỉnh. •

Chúng tôi chia ngẫu nhiên dữ liệu huấn luyện:

Dtrain =
$$\{(x1, y1), \dots, (xn, yn)\}$$

thành K nếp gấp:

• Mỗi tập hợp nếp gấp Df old k đóng vai trò của một Deval k đánh giá. K tập huấn luyện tương ứng: •

```
Dtrain 1 = Dtrain / Dfold 1
```

Dtrain K = Dtrain / Dfold K

1 For
$$\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$$
:

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

① Với λb = 0,001, 0,002, . . . , λB:

1 For $\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$: • For $k = 1, \dots, K$: Hồi quy sườn - Cách tìm λ ?

- **1** For $\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$:
 - For k = 1, ..., K:
 - Fit RR model $h_{b,k}$ with λ_b on $\mathcal{D}_{train-k}$

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

- **1** For $\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$:
 - For k = 1, ..., K:
 - Fit RR model $h_{b,k}$ with λ_b on $\mathcal{D}_{train-k}$
 - Compute and store $E_{eval-k}(h_{b,k})$ using \mathcal{D}_{eval-k}

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Cách tìm λ?

- Khớp mô hình RR hb,k với λb trên Dtrain k
- Tính toán và lưu trữ Eeval k(hb,k) bằng Deval k

- **1** For $\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$:
 - For k = 1, ..., K:
 - Fit RR model $h_{b,k}$ with λ_b on $\mathcal{D}_{train-k}$
 - Compute and store $E_{eval-k}(h_{b,k})$ using \mathcal{D}_{eval-k}
 - Compute and store $E_{cv_b} = \frac{1}{K} \sum_k E_{eval-k}(h_{b,k})$

Machine Translated by Google

Hồi quy sườn - Cách tìm λ ?

- Khớp mô hình RR hb,k với λb trên Dtrain k
- Tính toán và lưu trữ Eeval k(hb,k) bằng Deval k
- Tính toán và lưu trữ Ecvb = $\frac{1}{K}$ k Eeval k(hb,k)

- **1** For $\lambda_b = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$:
 - For k = 1, ..., K:
 - Fit RR model $h_{b,k}$ with λ_b on $\mathcal{D}_{train-k}$
 - Compute and store $E_{eval-k}(h_{b,k})$ using \mathcal{D}_{eval-k}
 - Compute and store $E_{cv_b} = \frac{1}{K} \sum_k E_{eval-k}(h_{b,k})$
- 2 Compute all cross validation errors $E_{cv_1}, E_{cv_2}, \dots, E_{cv_R}$ and choose the smallest $E_{cv_{**}}$.

Hối quy sườn - Cách tìm λ?

```
1 Với λb = 0,001, 0,002, . . . , λB: •
      Với k = 1, . . . . . K:
            • Khớp mô hình RR hb,k với λb trên
            Dtrain k • Tính toán và lưu trữ Eeval k(hb.k)
      bằng Deval k • Tính toán và lưu ‡rữ Ecvb = k Eeval k(hb,k)
```

2 Tính toán tất cả các lỗi xác thực chéo Ecv1 , Ecv2 , . . . , EcvB và chọn Ecvb nhỏ nhất .

1 For $\lambda_h = 0.001, 0.002, \dots, \lambda_B$:

- For k = 1, ..., K:
 - Fit RR model $h_{b,k}$ with λ_b on $\mathcal{D}_{train-k}$
 - Compute and store $E_{eval-k}(h_{b,k})$ using \mathcal{D}_{eval-k}
- Compute and store $E_{cv_b} = \frac{1}{K} \sum_k E_{eval-k}(h_{b,k})$
- 2 Compute all cross validation errors $E_{cv_1}, E_{cv_2}, \dots, E_{cv_R}$ and choose the smallest $E_{cv_{l*}}$.
- 3 Use λ^* to fit the final Ridge Regression model:

$$\hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{X} + \lambda^*\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}$$

Machine Translated by Google

Hối quy sườn - Cách tìm λ?

Với λb = 0.001. 0.002. λB: • $V\acute{\sigma}i k = 1, ..., K:$ • Khớp mô hình RR hb.k với λb trên Dtrain k • Tính toán và lưu trữ Eeval k(hb.k)

5 Tính toán tất cả các lỗi xác thực chéo Ecv1 , Ecv2 , . . . , EcvB và chọn Ecvb nhỏ nhất .

bằng Deval k • Tính toán và lưu ‡rữ Ecvb = k Eeval k(hb,k)

3 Sử dụng λ để phù hợp với mô hình Hồi quy sườn cuối cùng:

$$y^{-} = (X X + \lambda tôi) 1X y$$

• Instead of using L_2 norm as in Ridge Regression:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\} \quad \text{subject to} \quad \| \mathbf{b} \|_2^2 \le c$$

Toán tử lựa chọn và co rút tuyệt đối nhỏ nhất - LASSO

• Thay vì sử dụng định mức L2 như trong Hồi quy độ dốc:

• Instead of using L_2 norm as in Ridge Regression:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\} \quad \text{subject to} \quad \| \mathbf{b} \|_2^2 \le c$$

• We use L_1 norm:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\}$$
 subject to $\| \mathbf{b} \|_1 \le c$

Toán tử lựa chọn và co rút tuyệt đối nhỏ nhất - LASSO

• Thay vì sử dụng định mức L2 như trong Hồi quy độ dốc:

• Ta sử dụng định mức L1 :

• Instead of using L_2 norm as in Ridge Regression:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\} \quad \text{subject to} \quad \| \mathbf{b} \|_2^2 \le c$$

• We use L_1 norm:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\}$$
 subject to $\| \mathbf{b} \|_1 \le c$

• The L_1 norm constraint is:

$$\|\mathbf{b}\|_1 \le c \iff \sum_{j=1}^p |b_j| \le c$$

Toán tử lựa chọn và co rút tuyệt đối nhỏ nhất - LASSO

• Thay vì sử dụng định mức L2 như trong Hồi quy độ dốc:

• Ta sử dụng định mức L1 :

Ràng buộc định mức L1 là:

• Instead of using L_2 norm as in Ridge Regression:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\} \quad \text{subject to} \quad \| \mathbf{b} \|_2^2 \le c$$

• We use L_1 norm:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} \| \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y} \|_2^2 \right\}$$
 subject to $\| \mathbf{b} \|_1 \le c$

The L₁ norm constraint is:

$$\|\mathbf{b}\|_1 \le c \iff \sum_{j=1}^p |b_j| \le c$$

Our minimization problem then becomes:

$$\min_{\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{n} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y})^{\mathsf{T}} (\mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{y}) + \lambda \sum_{j=1}^p |b_j| \right\}$$

Toán tử lựa chọn và co rút tuyệt đối nhỏ nhất - LASSO

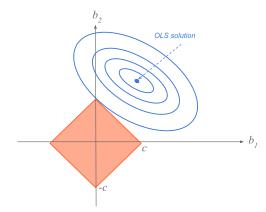
• Thay vì sử dụng định mức L2 như trong Hồi quy độ dốc:

· Ta sử dụng định mức L1 :

Ràng buộc định mức L1 là:

• Khi đó bài toán tối thiểu hóa của chúng ta trở thành:

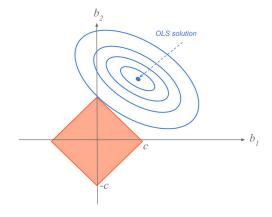
LASSO - Variable Selection



- The ideal point has b_1 coordinate equal to 0.
- LASSO completely zero-ed out b_1 in the model, reducing the number of coefficients from 2 down to 1.

Machine Translated by Google

LASSO - Lựa chọn biến



Điểm lý tưởng có tọa độ b1 bằng 0.
 LASSO loại bỏ hoàn
 toàn b1 trong mô hình, giảm
 số hệ số từ 2 xuống còn 1.