מבוא למערכות לומדות תרגיל 5

עמית בסקין 312259013

חלק I

חלק תיאורתי

1 ואלידציה

בשאלה זו נראה מתי לפרדיגמת "בחירת מודל" יש יתרון על פני השיטה הסטנדרטית כאשר בוחרים בין k מחלקות היפותיזות אפשריות:

$$\mathcal{H}_1 \subseteq \mathcal{H}_2 \subseteq \ldots \subseteq \mathcal{H}_k$$

עבור $\mathcal{H}_k$ סופית.

תהא $S_{all} = \{(x_i, y_i)\}_1^m$ קבוצת דגימות. כרגיל, נרצה ללמוד היפותיזה עם שגיאת הכללה קטנה ככל האפשר.

בכיתה דנו בבעיית התאמת פולינום, שם היו לנו k מחלקות היפותיזות לבחור מביניהן:

$$\mathcal{H}_1 \subseteq \mathcal{H}_2 \subseteq \ldots \subseteq \mathcal{H}_k$$

בשאלה זו נשווה בין שתי שיטות לבחירת היפותיזה:

- השיטה הסטנדרטית: לבחור את ההיפותיזה הטובה ביותר ב־ $\mathcal{H}_k$ על ידי שימוש בדגימות הנתונות ובכלל ה־ ERM.
- שיטת "בחירת מודל":
  - ניקח איזשהי $\alpha \in (0,1)$ ונחלק את m הדגימות לקבוצת אימון S מגודל $(1-\alpha)\,m$ וקבוצת ואלידציה V מגודל αm, עבור αm מספר שלם.
  - לכל מחלקת היפותיזות $\mathcal{H}_i$ עם $i \in [k]$, נמצא $h_i \in ERM_{\mathcal{H}_i}(S)$.
  - נחזיר $h^* \in ERM_{\mathcal{H}}(V)$ כאשר $\mathcal{H} = \{h_i\}_1^k$.

נניח ש־ $\mathcal{H}_k$ סופית ופונקציית ההפסד חסומה מלמעלה על ידי 1.

א. צ.לחסום את שגיאת ההכללה שמתקבלת בשיטה הסטדנרטית: להוכיח שלמידה־PAC־אגנוסיטית של $\mathcal{H}_k$, מקיימת את החסם הבא:

עבור $h^* \in ERM_{\mathcal{H}_k}(S_{all})$, עם הסתברות של $1-\delta$ לכל הפחות, מתקיים:

$$L_{\mathcal{D}}(h^*) \leq \min_{h \in \mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{m}}$$

פיתרון:

באמצעות חסם הופדינג, הוכחנו בתרגול שלכל $\delta \in (0,1)$, בהסתברות של $1-\delta$ לכל הפחות, ולכל היפותיזה $h \in \mathcal{H}_k$, מתקיים:

$$\left|L_{S_{all}}\left(h\right)-L_{\mathcal{D}}\left(h\right)\right| \leq \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\right)}{2m}}$$

ובפרט בהסתברות של $1-\frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|}$ לכל הפחות, מתקיים:

$$\left|L_{S_{all}}\left(h\right)-L_{\mathcal{D}}\left(h\right)\right| \leq \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\frac{2}{\delta}\right)}{2m}}$$

אז בהסתברות של $\frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|}$ לכל היותר מתקיים:

$$\left|L_{S_{all}}\left(h\right)-L_{\mathcal{D}}\left(h\right)\right| \geq \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{2m}}$$

ומחסם האיחוד, ההסתברות ש**קיימת** היפותיזה h ב־ $\mathcal{H}_k$ עם הא"ש לעיל, היא לכל היותר $\frac{\delta}{|\mathcal{H}_k|}\left|\mathcal{H}_k\right|$ קרי δ, ולכן ההסתברות ש**לכל** היפותיזה h ב־ $\mathcal{H}_k$ מתקיים:

$$\left|L_{S_{all}}\left(h\right)-L_{\mathcal{D}}\left(h\right)\right| \leq \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{2m}}$$

היא לכל הפחות $1-\delta$, ובפרט לכל $h \in \mathcal{H}_k$ ההסתברות שמתקיים הא"ש הנ"ל היא לכל הפחות $1-\delta$.

אם כן, מאחר ששגיאת ההכללה גדולה יותר באופן טיפוסי, אזי שבפרט עבור h^* מתקיים בהסתברות של $1-\delta$ לכל הפחות הא"ש:

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq L_{S_{all}}\left(h^*\right)+\sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{2m}}$$

אבל $h^* \in ERM_{\mathcal{H}_k}\left(S_{all}\right)$ ולכן לכל $h \in \mathcal{H}_k$:

$$\leq L_{S_{all}}\left(h\right)+\sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{2m}}$$

ומקיום הא"ש לעיל עבור כל $h \in \mathcal{H}_k$:

$$\leq L_{\mathcal{D}}\left(h\right)+2\sqrt{\frac{\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{2m}}$$

נכניס את ה־ 2 לתוך השורש:

$$= L_{\mathcal{D}}\left(h\right)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{m}}$$

ומאחר שזה נכון לכל $h \in \mathcal{H}_k$, אזי ש־

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{m}}$$

כאמור בהסתברות של $1-\delta$ לכל הפחות. מש"ל

ב. צ.לחסום את שגיאת ההכללה על ידי שימוש בשיטת "בחירת מודל":

נסמן: $h' = \underset{h\in\mathcal{H}_k}{\arg\min} L_{\mathcal{D}}\left(h\right)$. יהא j מינימלי עם $h' \in \mathcal{H}_j$.

צ.להוכיח שבהסתברות של לפחות $1-\delta$ מתקיים כי:

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2}{\alpha m}\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)} + \sqrt{\frac{2}{\left(1-\alpha\right)m}\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_j\right|\right)}$$

פיתרון:

מהסעיף הקודם, על ידי לקיחת $\delta/2$ והפעלת המסקנה על כל $\mathcal{H}_i$ בנפרד, נקבל שלכל $i\in[k]$ ו־ $h_i \in ERM_{\mathcal{H}_i}\left(S\right)$ מתקיים:

$$\mathbb{P}\left(L_{\mathcal{D}}\left(h_i\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_i} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_i\right|\right)}{\left(1-\alpha\right)m}}\right) \geq 1-\frac{\delta}{2}$$

ועבור h^* שנבחרה בשלב הואלידציה:

$$\mathbb{P}\left(L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}\right) \geq 1-\frac{\delta}{2}$$

(כי משווים בין k היפותיזות)

אבל $h' = \underset{h\in\mathcal{H}_k}{\arg\min} L_{\mathcal{D}}\left(h\right)$, ולכן בהסתברות של לכל הפחות $1-\delta$, מתקיים:

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq L_{\mathcal{D}}\left(h'\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$

ומקיום הא"ש הנ"ל עבור $\mathcal{H}_j$:

$$\leq \min_{h\in\mathcal{H}_j} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_j\right|\right)}{\left(1-\alpha\right)m}} + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$

אבל $\min_{h\in\mathcal{H}_j} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) = \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right)$ ולכן:

$$= \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_j\right|\right)}{\left(1-\alpha\right)m}} + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$

וזאת כאמור בהסתברות של $1-\delta$ לכל הפחות. מש"ל

ג. צ.להראות ששני החסמים אינם בני־השוואה: כלומר צ.לתאר מקרה שבו השיטה הסטנדרטית עדיפה ומקרה הפוך.

הוכחה:

עבור השיטה הסטנדרטית קיבלנו:

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}\left|\mathcal{H}_k\right|\right)}{m}}$$

ועבור שיטת "בחירת מודל":

$$L_{\mathcal{D}}\left(h^*\right) \leq \min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}\left(h\right) + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}\left|\mathcal{H}_j\right|\right)}{\left(1-\alpha\right)m}} + \sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$

אז נרצה לתת דוגמה לשני הבאים:

$$\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}<\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{(1-\alpha)m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$

ו־

$$\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{(1-\alpha)m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}<\min_{h\in\mathcal{H}_k} L_{\mathcal{D}}(h)+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}$$

קרי:

$$\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}<\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{(1-\alpha)m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}$$
$$\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{(1-\alpha)m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}<\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}$$

- אם מתקיים $j=k$ ו־ $\alpha=\frac{1}{2}$, אז עבור הא"ש הראשון מתקיים:

$$\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{0.5m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{0.5m}}=$$

$$=2\sqrt{\frac{\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}+2\sqrt{\frac{\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{m}}$$

אבל:

$$2\sqrt{\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}+2\sqrt{\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}>\sqrt{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}$$

ולכן מתקיים הא"ש הראשון במקרה הזה.

- עבור הא"ש השני:

אם $k,|\mathcal{H}_j|<e^8\delta$ ו־ $|\mathcal{H}_k|>\frac{1}{2}\delta e^{50}$, ו־ $\alpha=0.5$, אז:

$$\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}|\mathcal{H}_j|\right)}{(1-\alpha)m}}+\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{4}{\delta}k\right)}{\alpha m}}<$$

$$<2\sqrt{\frac{8}{0.5m}}=2\sqrt{\frac{16}{m}}=\frac{8}{\sqrt{m}}$$

ואילו:

$$\sqrt{\frac{2\ln\left(\frac{2}{\delta}|\mathcal{H}_k|\right)}{m}}>\sqrt{\frac{2\ln\left(e^{50}\right)}{m}}=\frac{10}{\sqrt{m}}$$

ולכן מתקיים הא"ש השני במקרה הזה.

2 תכנון אורתוגונלי

במקרה המיוחד של מטריצת תכנון אורתוגונלית, קרי $XX^t = Id$, ניתן לגזור נוסחאות סגורות עבור Best Subset, Lasso ו־ Ridge, כפוקנציה של LS.

תהא $\lambda > 0$. נסמן ב־ $\hat{w}^{LS}, \hat{w}_{\lambda}^{ridge}, \hat{w}_{\lambda}^{lasso}, \hat{w}_{\lambda}^{subset}$ את הפתרונות עבור רגרסיה לינארית סטנדרטית, Ridge, Lasso ו־ Best Subset, בהתאמה.

ניזכר בפונקציות הבאות:

$$\eta_{\lambda}^{soft}\left(x\right) = \begin{cases} x-\lambda & x\geq0\\ 0 & |x|<\lambda\\ x+\lambda & x\leq-\lambda \end{cases}$$

$$\eta_{\lambda}^{hard}\left(x\right) = \mathbf{1}\left[|x|\geq\lambda\right]\cdot x$$

צ.להוכיח ש־

א.

$$\hat{w}_{\lambda}^{ridge} = \frac{\hat{w}^{LS}}{1+\lambda}$$

ב.

$$\hat{w}_{\lambda}^{subset} = \eta_{\sqrt{\lambda}}^{hard}\left(\hat{w}^{LS}\right)$$

הוכחה:

א. בתרגול ראינו ש־

$$\hat{\mathrm{w}}_{\lambda}^{ridge} = \left(XX^t+\lambda I\right)^{-1}Xy$$

ומכך ש־ $XX^t = I$:

$$\hat{\mathrm{w}}_{\lambda}^{ridge} = \left(I+\lambda I\right)^{-1}Xy = \frac{1}{1+\lambda}Xy$$

אבל:

$$\hat{\mathrm{w}}^{LS} = \left(XX^t\right)^{-1}Xy = Xy$$

ולכן:

$$\hat{\mathrm{w}}_{\lambda}^{ridge} = \frac{\hat{w}^{LS}}{1+\lambda}$$

כנדרש.

ב. בדומה לטענה 2 בתרגול, נכתוב:

$$f_{l_0}(w) = \left\|y - X^t w\right\|_2^2 + \lambda \|w\|_0 =$$

$$= \|y\|_2^2 - 2y^t X^t w + w^t X X^t w + \lambda \|w\|_0 =$$

$$= \|y\|_2^2 + \left(w^t - 2\hat{w}^t\right) w + \lambda \|w\|_0 =$$

$$= \|y\|_2^2 + \sum_1^d \left(w_i^2 - 2\hat{w}_i w_i + \lambda \|w_i\|_0\right)$$

אם $w_i = 0$ אז הנסכם מתאפס ואם $w_i \neq 0$ אז מתקבל בנסכם:

$$w_i^2 - 2\hat{w}_i w_i + \lambda$$

נגזור לפי w_i ונשווה לאפס:

$$w_i = \hat{w}_i$$

קרי:

$$\hat{w}_i^2 - 2\hat{w}_i^2 + \lambda = -\hat{w}_i^2 + \lambda$$

וזה קטן מאפס אםם $\sqrt{\lambda} \leq |\hat{w}_i|$, ולכן $\hat{w}_i \neq 0$ אםם $\sqrt{\lambda} \leq |\hat{w}_i|$.

ובסה"כ קיבלנו:

$$\hat{w}_\lambda^{subset} = \eta_{\sqrt{2\lambda}}^{hard}\left(\hat{w}^{LS}\right)$$

3 רגיולריזציה

בשאלה זו נראה שלמרות ש־ Ridge מוסיפה $bias$ להערכה של w, היא עדיין מקטינה את ה־ MSE:

תהא $X \in \mathbb{R}_{d\times m}$ מטריצת רגרסיה קבועה כך ש־ XX^t הפיכה.

יהא

$$\hat{w}(\lambda) = \arg\min_{\mathrm{w}} \left(\left\|\mathrm{y} - X^t \mathrm{w}\right\|_2^2 + \lambda \|\mathrm{w}\|_2^2\right)$$

הפיתרון של Ridge וכן יהא $\hat{\mathrm{w}} \equiv \hat{\mathrm{w}}(\lambda = 0)$ הפיתרון של LS.

- נניח שהמודל הלינארי הוא נכון, קרי:

$$\mathrm{y} = X^t \hat{\mathrm{w}} + \epsilon$$

כאשר $\epsilon_i \overset{iid}{\sim} \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$

- ניזכר כי במקרה זה מתקיים ש־ $\mathbb{E}\left[\hat{\mathrm{w}}\right]=\hat{\mathrm{w}}$

א. צ.להראות שמתקיים כי

$$\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)=A_{\lambda}\hat{\mathrm{w}}$$

כאשר

$$A_{\lambda}=\left(XX^{t}+\lambda Id\right)^{-1}XX^{t}$$

הוכחה:

$$A_{\lambda}\hat{\mathrm{w}}=\left(XX^{t}+\lambda Id\right)^{-1}XX^{t}\cdot\left(XX^{t}\right)^{-1}Xy=\left(XX^{t}+\lambda Id\right)^{-1}Xy$$

ואכן ראינו בהרצאה כי:

$$Xy=\left(XX^{t}+\lambda I\right)\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)$$

ומאחר ש־ $\left(XX^{t}+\lambda I\right)$ הפיכה אזי שקיבלנו את הנדרש.

ב. צ.להסיק מהסעיף הקודם הפיתרון של Ridge הוא עם $bias$ לכל $\lambda>0$, קרי להראות שאם $\lambda>0$ אז $\mathbb{E}\left[\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)\right]\neq\hat{\mathrm{w}}$.

הוכחה:

$$\mathbb{E}\left[\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)\right]=\mathbb{E}\left[A_{\lambda}\hat{\mathrm{w}}\right]=A_{\lambda}\mathbb{E}\left[\hat{\mathrm{w}}\right]=A_{\lambda}\hat{\mathrm{w}}\neq\hat{\mathrm{w}}$$

ג. צ.להראות ש־

$$\mathrm{Var}\left(\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)\right)=\sigma^{2}A_{\lambda}\left(XX^{t}\right)^{-1}A_{\lambda}^{t}$$

הוכחה:

נשתמש בעובדה שעבור מטריצה B שאינה אקראית ווקטור אקראי z, מתקיים:

$$\mathrm{Var}\left(B\mathrm{z}\right)=B\mathrm{Var}\left(\mathrm{z}\right)B^{t}$$

$$\mathrm{Var}\left(\hat{\mathrm{w}}\right)=\sigma^{2}\left(XX^{t}\right)^{-1}$$

קרי:

$$\mathrm{Var}\left(\hat{\mathrm{w}}\left(\lambda\right)\right)=\mathrm{Var}\left(A_{\lambda}\hat{\mathrm{w}}\right)=A_{\lambda}\mathrm{Var}\left(\hat{\mathrm{w}}\right)A_{\lambda}^{t}=$$

$$= A_\lambda \sigma^2 \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t = \sigma^2 A_\lambda \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t$$

ד. צ.לגזור ביטויים מפורשים עבור ה־ $bias$ (בריבוע) והשונות של $\hat{\mathrm{w}}(\lambda)$, כפונקציה של λ, קרי, לכתוב פירוק של bias-variance עבור ה־ MSE של $\hat{\mathrm{w}}(\lambda)$.

כמו כן צ.להראות באמצעות גזירה ש־

$$\frac{d}{d\lambda}\mathrm{MSE}(\lambda)|_{\lambda=0} = \frac{d}{d\lambda}\mathrm{bias}^2(\lambda)|_{\lambda=0} + \frac{d}{d\lambda}\mathrm{Var}(\lambda)|_{\lambda=0} < 0$$

פיתרון:

$$\mathrm{MSE}(\lambda) = \left(A_\lambda \hat{\mathrm{w}} - \hat{\mathrm{w}}\right)\left(A_\lambda \hat{\mathrm{w}} - \hat{\mathrm{w}}\right)^t + \sigma^2 A_\lambda \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t =$$

$$= \left(A_\lambda - I\right)\hat{\mathrm{w}}\left(\left(A_\lambda - I\right)\hat{\mathrm{w}}\right)^t + \sigma^2 A_\lambda \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t =$$

$$= \left(A_\lambda - I\right)\hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(A_\lambda - I\right)^t + \sigma^2 A_\lambda \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t =$$

$$= \left(A_\lambda - I\right)\hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(A_\lambda - I\right) + \sigma^2 A_\lambda \left(XX^t\right)^{-1} A_\lambda^t =$$

$$= \hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t - I\right)^2$$

$$+\sigma^2 \left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t \left(XX^t\right)^{-1} XX^t \left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1}\right)^t =$$

$$= \hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t - I\right)^2 +$$

$$+\sigma^2 \left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t \left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1}\right)$$

ועתה:

$$\frac{d}{d\lambda}\hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t - I\right)^2$$

$$= -2\hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} \frac{d}{d\lambda}\left(-XX^t + \lambda Id\right)\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1}\left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t - I\right) =$$

$$= -2\hat{\mathrm{w}}\hat{\mathrm{w}}^t \left(XX^t + \lambda Id\right)^{-2}\left(\left(XX^t + \lambda Id\right)^{-1} XX^t - I\right) =$$

ולכן:

$$\frac{d}{d\lambda}\text{bias}^2\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} =$$

$$= -2\hat{\text{w}}\hat{\text{w}}^t\left(XX^t\right)^{-2}\left(\left(XX^t\right)^{-1}XX^t - I\right) =$$

$$= -2\hat{\text{w}}\hat{\text{w}}^t\left(XX^t\right)^{-2}\left(I - I\right) = 0$$

ומצד שני:

$$\left(\frac{d}{d\lambda}\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\right)\right)|_{\lambda=0} =$$

$$= -\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\frac{d}{d\lambda}\left[\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)\right]\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\right) -$$

$$-\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\right)\frac{d}{d\lambda}\left[\left(XX^t\right)^{-1}\left(XX^t+\lambda Id\right)\right]XX^t\left(\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\right) =$$

$$= -\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\sigma^2\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1} -$$

$$-\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}\left(XX^t\right)^{-1}XX^t\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1} =$$

$$= -\sigma^6\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-2}XX^t\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1} -$$

$$-\sigma^2\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-1}XX^t\left(XX^t+\lambda Id\right)^{-2}$$

ולכן:

$$\frac{d}{d\lambda}\text{Var}\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} =$$

$$= -\sigma^6\left(XX^t\right)^{-2}XX^t\left(XX^t\right)^{-1} -$$

$$-\sigma^2\left(XX^t\right)^{-1}XX^t\left(XX^t\right)^{-2} =$$

$$= -\sigma^6 \left(XX^t\right)^{-2} - \sigma^2 \left(XX^t\right)^{-2} =$$

$$= -\sigma^6 \left(\left(XX^t\right)^{-1}\right)^2 - \sigma^2 \left(\left(XX^t\right)^{-1}\right)^2$$

ובסה"כ קיבלנו:

$$\frac{d}{d\lambda}\mathrm{MSE}\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} = \frac{d}{d\lambda}\mathrm{bias}^2\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} + \frac{d}{d\lambda}\mathrm{Var}\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} =$$

$$= \frac{d}{d\lambda}\mathrm{Var}\left(\lambda\right)|_{\lambda=0} = -\sigma^6 \left(\left(XX^t\right)^{-1}\right)^2 - \sigma^2 \left(\left(XX^t\right)^{-1}\right)^2 < 0$$

כנדרש.

ה. צ.להסיק שאם המודל הלינארי הוא נכון, אז מעט רגיורליזציה של $Ridge$, מסייעת להורדת ה־ MSE. הוכחה:

מהסעיף הקודם מתקבל שבסביבת $\lambda = 0$, פונקציית ה־ MSE יורדת, ומכאן שיש λ כך ש־ $MSE\left(\lambda\right) < MSE\left(0\right)$.

חלק II

חלק מעשי

4 k-Fold Cross Validation על התאמת פולינום

יהיו $\mathcal{X}, \mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}$. נניח שהקשר בין $\mathcal{X}$ ו־ $\mathcal{Y}$ ניתן לתיאור על ידי פולינום מגדרה $d \in [15]$.

לכל $d \in [15]$, נסמן ב־ $\mathcal{H}_d$ את מחלקת הפולינומים מדרגה d.

המשימה היא לאמן כל אחת מהמחלקות על קבוצת האימון ולבצע ואלידציה על 15 ההיפותיזות שהתקבלו, בשביל לבחור את הפלט הסופי.

לבסוף, נבחן את הביצועים של הפרדיקטור שהתקבל, על קבוצת המבחן.

א. צ.לייצר דאטא באופן הבא:

i. ניקח $\mathcal{X} = [-3.2, 2.2]$ ונדגום מתוכו בהתפלגות אחידה.

ii. נקבע את הקשר בין y ו־ x על ידי:

$$y\left(x\right) = f\left(x\right) + \epsilon$$

כאשר:

$$f\left(x\right) = \prod_{i=-2}^{3} \left(x + i\right)$$

ו־ $\epsilon \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$.

iii. ניקח $\sigma = 1$ ונייצר $m = 1,500$ דגימות.

iv. נחלק את m הדגימות לשתי קבוצות: $1,000$ דגימות עבור קבוצת האימון וקבוצת הואלידציה, נסמנה D, ו־ 500 עבור קבוצת המבחן, נסמנה T.

ב. נחלק את D לשתי קבוצות של 500 דגימות כל אחת: קבוצה אחת עבור קבוצת האימון - S וקבוצה שנייה עבור קבוצת הואלידציה - V.

נאמן כל אחת מהמחלקות באמצעות S בשביל לקבל היפותיזה h_d, לכל $d \in [15]$, שממזערת את ה־ $loss$ על פני S.

ג. צ.לבצע ואלידציה בעבור $\{h_i\}_1^{15}$ בשביל לקבל h^* שממזערת את ה־ $loss$ על פני קבוצת הואלידציה, V:

תוצאה:

```
The best degree with two folds for polynomial regression on the given data is:  7
```

כלומר, הרעש משפיע והחלוקה של קבוצת האימון לשני חלקים אינה מספיקה על מנת להתגבר עליו. אכן התוצאה הטובה ביותר מתקבלת עבור פולינום ממעלה שבע בעוד שהפולינום המקורי הוא ממעלה חמש.

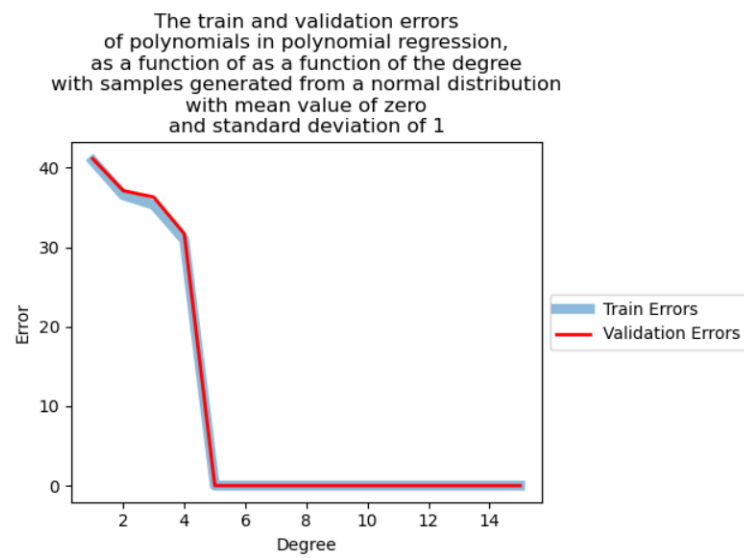
ד. סעיפים א עד ג הם k-fold cross validation עם $k = 2$.

צ.לבצע k-fold cross validation אבל הפעם עם $k = 5$ על הקבוצה D.

ה. צ.לשרטט את השגיאות על פני קבוצת האימון וקבוצת הואלידציה, כממוצע על פני k־החלקים, של הפולינומים מדרגות $d \in [15]$, שכפונקציה של d. צ.לבדוק עבור איזו דרגה מתקבלת השגיאה הנמוכה ביותר, נסמנה d^*.

פיתרון:

הגרף להלן:




```
The best degree with cross validation for polynomial regression on the given data is:  5
```

כלומר התוצאה הטובה ביותר היא עבור פולינום מדרגה 5. כמו כן יש הבדל מזערי בין השגיאה על קבוצת המבחן ובין השגיאה על קבוצת הואלידציה, קרי יש מעט מאוד $overfit$, כלומר למדנו מתוך מידע מספיק גדול.

ו. צ.לבצע $ERM_{\mathcal{H}_{d^*}}$ על הקבוצה D: למצוא פולינום מדרגה d^* בעל שגיאה מינימלית על הדגימות הללו, נסמנו ב־ h^*.

ז. צ.לבחון את הביצועים של h^* על קבוצת המבחן T: לחשב את השגיאה של h^* על פני T. צ.לבדוק האם השגיאה שונה בהרבה מהשגיאה שמצאנו בסעיף הקודם.

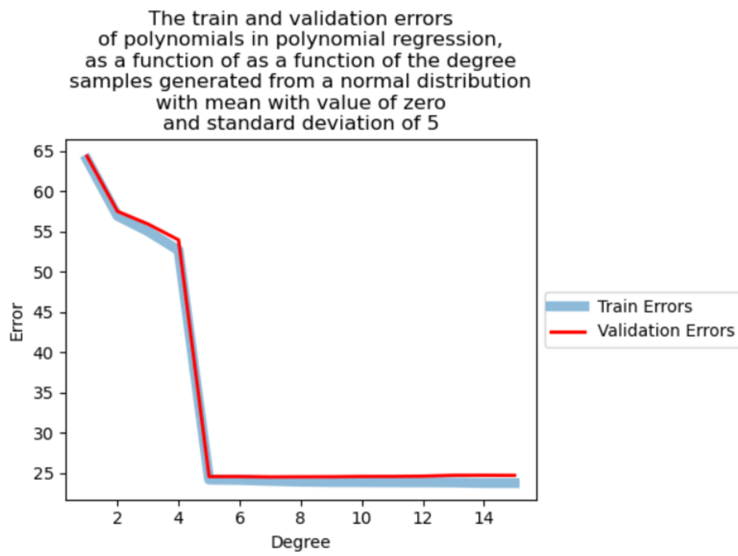
פיתרון:

```
The train error is: 0.9813278322975978
The test error is: 0.9726685025411308
The difference between the train error and the test error is: 0.008659329756466994
```

כפי שניתן לראות, ההבדל הוא מזערי, כלומר ה־ $overfit$ הינו קטן ביותר, כלומר ה־ Cross Validation עושה את העבודה.

ח. צ.לחזור על השלבים הקודמים עבור $\sigma = 5$ ולבדוק מה השתנה.

פיתרון:




```
The best degree with two folds for polynomial regression on the given data is:  6

The best degree with cross validation for polynomial regression on the given data is:  7
The train error is: 24.09464342161084
The test error is: 21.74461657093929
The difference between the train error and the test error is: 2.3500268506715507
```

הפעם הרעש יותר משמעותי, ולכן השגיאה גדלה, וכן ה־ Cross Validation לא מצליח להתגבר עליו.

5 k-fold ורגיולריזציה

בשאלה זו נערוך השוואה בין רגיולזריזציות $Lasso$ ו־ $Ridge$. נשתמש בדאטא שמעריך את מידת הגלוקוז בדם של מטופלי סוכרת.

א. נטען את הדאטא.

ב. רגיולריזציה היא שימושית כאשר קבוצת האימון קטנה. אז ניצור את קבוצת האימון להיות $m = 50$ הדגימות הראשונות, והשאר יהוו את קבוצת המבחן.

ג. צ.לבצע את הבאים פעמיים: פעם אחת עבור $Ridge$ ופעם שנייהה עבור $Lasso$:

i. צ.לערוך k-fold cross-validation מעל קבוצת האימון עם $k = 5$, תוך שימוש בערכים שונים עבור פרמטר הרגיולריזציה λ: צ.לחקור את הטווח של הערכים האפשריים.

ii. צ.לציין איזה ערכים של λ בחרתי לבדיקה על פני קבוצת הואלידציה, ולהסביר מדוע.

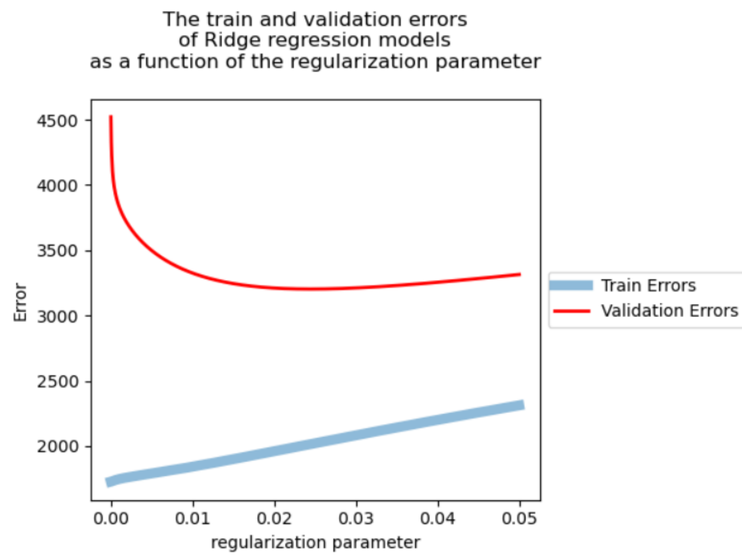
תשובה:

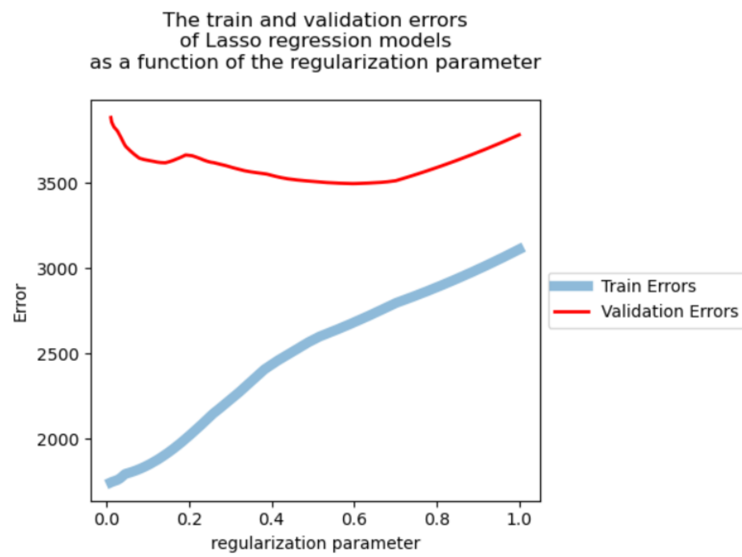
עבור $Ridge$ בחרתי בערכים בין 0 ל־ 0.05 על מנת שיהיה ניתן לראות במדוייק את האזור שבו השגיאה על ה־ Validation Set עובר מירידה לעלייה, שם פרמטר הרגיורליזציה אופטימלי (באזור ה־ 0.025).

עבור $Lasso$ בחרתי בערכים בין 0.01 ל־ 1, ראשית על מנת שיהיה ניתן לראות שערכים שקרובים מדי לאפס אינם מטיבים עמו ושנית על מנת שיהיה ניתן לראות במדוייק את האזור שבו השגיאה על ה־ Validation Set עובר מירידה לעלייה, שם פרמטר הרגיורליזציה אופטימלי (באזור ה־ 0.6).

ד. צ.לשרטט את השגיאות על פני קבוצות האימון והואלידציה (ממוצע השגיאות על פני k־החלקים) כפונקציה של λ, על פני הטווח שבחרתי.

פיתרון:





ה. צ.למצוא את ה־ λ הטובה ביותר עבור $Ridge$ וכנ"ל עבור $Lasso$.

תשובה:

```
Best regularization parameter for Ridge:  0.024424424424424426
Best regularization parameter for Lasso:  0.5966666666666667
```

ו. צ.לחשב את השגיאה של ההיפותיזות הבאות, על פני קבוצת המבחן:

i. ההיפותיזה הטובה ביותר של $Ridge$.

ii. ההיפותיזה הטובה ביותר של $Lasso$.

iii. רגרסיה לינארית.

תשובה:

```
The test error for the best Ridge model is: 3245.464541008676
The test error for a linear regression model is: 3612.249688324901
The test error for the best Lasso model is: 3640.7959659482776
```

ז. צ.לבדוק לאיזו היפותיזה יש את השגיאה הקטנה ביותר, ולבדוק האם הרגיולריזציה עזרה לשפר את התוצאות על פני קבוצת המבחן, בהשוואה לתוצאות שהתקבלו ללא רגיולריזציה על אותו הדאטא.

תשובה:

ל־ $Ridge$ יש את השגיאה הקטנה ביותר, כלומר הרגיולריזציה עזרה לשפר את התוצאות של פני קבוצת המבחן במקרה של $Ridge$, אך במקרה של $Lasso$ השגיאה גדלה, קרי הרגילריזציה לא תרמה במקרה של $Lasso$.