Φ_{M} 3TEX 1 A3

1 A3

1.1 L_2 -регуляризация

В качестве некоторой эфристики рассмотрим введение дополнительного штрафа к «обучению» в виде

$$R(w) = \tau ||w||^2 = \tau w^{\mathrm{T}} w, \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} = ||Xw - y||^2 + \tau ||w||^2.$$

Всё также есть выпуклая функция, так что её экстремум

$$\partial_w \mathcal{L} = 2X^{\mathrm{T}}(Xw - y) + 2\tau w = 0, \quad \Rightarrow \quad X^{\mathrm{T}}X + \tau \cdot \mathbb{1} = X^{\mathrm{T}}y, \quad \Rightarrow \quad w = \left(X^{\mathrm{T}}X + \tau \cdot \mathbb{1}\right)^{-1}X^{\mathrm{T}}y.$$

Остается только определиться с выбором параметра au, которая происходит через кроссвалидацию.

1.2 L_1 -регуляризация

В качестве альтернативной эвристики можно рассмотреть L_1 -регуляризацию:

$$R(w) = \mu \|w\|_1 = \mu \sum_{\alpha=1}^F |w_{\alpha}|, \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} = \|Xw - y\|^2 + \mu \sum_{\alpha} |w_{\alpha}|.$$

Теперь функцию потерь не аналитична. Теперь минимум может располагаться на изломах, что будет соответствовать обнулению некоторых признаков. То есть L_1 -регуляризация — отбор признаков.

Можно совместить $L_2 + L_1$, тогда получится ElasticNet, что в среднем работает лучше.

1.3 Гауссова вероятностная модель

Рассмотрим некоторую модель

$$y = Xw + \varepsilon, \quad \Leftrightarrow \quad y_i = X_{i\alpha}w_\alpha + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}[0, \sigma^2].$$

Для поиска оптимальных весов попробуем применить принцип максимизации правдоподобия. Пусть зафиксирован некоторые x_i , тогда

$$P_w(y) \to \max_{w} \quad \Leftrightarrow \quad \log P_w(y) \to \max_{w}$$
.

Вероятность можно переписать, как

$$P_w(y) = \prod_{i=1}^l \mathcal{N}[0, \sigma^2][\varepsilon_i] = \prod_{i=1}^l \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - X_{i\alpha}w_\alpha)}{2\sigma^2}\right),$$

логарифмируя, получаем плюшку:

$$\log P_w(y) = \sum_{i=1}^l \left(-\frac{1}{2} \log 2\pi \sigma^2 - \frac{(y_i - X_{i\alpha} w_\alpha)}{2\sigma^2} \right) \Longrightarrow \max_w,$$

где $(y_i - X_{i\alpha} w_{\alpha}) \sim \mathcal{L}$.

То есть можно утвеждать, что МНК ~ максимизацияя правдоподобия с гауссовой ошибкой:

$$L = -2\sigma^2 \log P_w(y) + \text{const.}$$

Дифференцируя, находим

$$\frac{\partial \log P_w(y)}{\partial \sigma^2} = -\frac{l}{\sigma^2} + \frac{\mathrm{RSS}}{2\sigma^4} = 0, \quad \Rightarrow \quad \hat{\sigma^2} = \frac{\mathrm{RSS}}{l}.$$

Вообще, можно встретить

$$\hat{\sigma^2} = \frac{\text{RSS}}{l - F},$$

где l – объем выборки, F – количество параметров, l – F – количество степеней свободы.

1.4 Вероятностный смысл регуляризации

Пусть также зафиксированы x_i , а правдоподие – вероятность пронаблюдать y при выбранных w. Тогда

$$P_w(y) = P(y|w, x), \quad P(A|B) = \frac{P(A, B)}{P(B)}.$$

A3 $\Phi_{\rm W}$ 3 $T_{\rm F}$ X

Можно модифицировать эту схему, введя априорное распределение $p_{\gamma}(w)$, где γ – гиперпараметр, тогда w – случайная величина. В таких моделях обычно максимизируют правдоподобие данных + модели:

$$\tilde{P}(y,w|x) \to \max_{w}, \quad \ \tilde{P}(y,w|x) = \underbrace{p(y|x,w)}_{P_{w}(y)} \cdot \underbrace{p_{\gamma}(w)}_{\text{anp. no }w}.$$

Отсуюда найдём, что

$$\log \tilde{P} = \log P + \log p_{\gamma}(w) = \text{const} - \frac{1}{2\sigma^{2}} \mathcal{L} + \log p_{\gamma}(w).$$

Занятно, при p_{γ} – гауссово, получим L_2 -регуляризацию:

$$p_{\gamma}(w_{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{w_{\alpha}^2}{2\gamma}\right), \quad \Rightarrow \quad \log p_{\gamma} = \text{const} - \frac{w_{\alpha}^2}{\gamma},$$

и получившийся параметр регуляризации – $\tau = \frac{\sigma^2}{\gamma}$. Альтернативный вариант – распределение p_{γ} по Лапласу:

$$p_{\tilde{\gamma}} = \frac{1}{2\tilde{\gamma}} \exp\left(-\frac{|w_{\alpha}|}{\tilde{\gamma}}\right), \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{2\sigma^2}{\tilde{\gamma}},$$

то есть получили L_1 -регуляризацию.

Подчеркнем, что регуляризация эквивалентна некоторому априорному распредлению.

1.5 Погрешность весов

Вспомним теорему Байеса:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)} = \frac{P(B|A) \cdot P(A)}{\sum_{A} P(B|A) \cdot P(A)}.$$

Действительно,

$$P(A, B) = P(A|B) \cdot P(B) = P(B|A) \cdot P(A).$$

Также можно записать, что

$$P(B) = \sum_{A} P(A,B) = \sum_{A} P(B|A) \cdot P(A).$$

Итого: априорное распределение на $A-p_{\gamma}(w)$; функция апостериорного распределения на A-p(w|x,y); и модель p(y|w,x) - P(B|A). Тогда

$$p(w|x,y) = \frac{p(y|w,x) \cdot p_{\gamma}(w)}{\int dw \, p(y|w,x) p_{\gamma}(w)}.$$