

多项式曲线拟合

本文参照PRML第一章与第三章，实作验证了多项式曲线拟合的例子

线性基函数模型

现在假设一个训练集，这个训练集由 \mathbf{x} 的 N 的观测组成，写作 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^\top$ ，与之对应的 \mathbf{t} 的观测值记作 $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_N)^\top$ 。现在，从 $[0, 1]$ 之间均匀选取 N 个 x_n ，目标数据 \mathbf{t} 的获取方式是：首先计算函数 $\sin(2\pi x)$ 的对应值，然后给得到的每个数据点增加一个小的满足高斯分布的随机噪声，从而得到对应的 t_n 值，即

$$t_n = \sin(2\pi x_n) + \varepsilon$$

其中 ε 采样自 $\mathcal{N}(\varepsilon | 0, \sigma^2)$ 。

我们的目标是利用这个训练集预测对于新的输入变量 x 的目标变量值 t 。这本质上是一个困难的问题，因为我们不得不从有限的数据生成对应的模型。而且，观测到的数据被噪声干扰，因此对于一个给定的 x ，合适的 t 值具有不确定性。但是现在，我们可以使用一种不太正式的，相当简单的方式来进行曲线的拟合。我们考虑如下的线性模型

$$y(\mathbf{x}, \omega) = \omega_0 + \sum_{j=1}^{M-1} \omega_j \phi_j(\mathbf{x})$$

其中 $\phi_j(\mathbf{x})$ 被称为基函数，且这个模型中的参数总数为 M 。

在本例中，基函数 $\phi_j(\mathbf{x})$ 设为

$$\phi_j(\mathbf{x}) = x^j$$

如果我们设定 $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$ ，则可将上式模型写作

$$y(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{j=0}^{M-1} \omega_j \phi_j(\mathbf{x}) = \omega^\top \phi(\mathbf{x})$$

其中 $\omega = (\omega_0, \dots, \omega_{M-1})^\top$ 且 $\phi = (\phi_0, \dots, \phi_{M-1})^\top$

我们可以使用非线性的基函数，使得 $y(\mathbf{x}, \omega)$ 为输入向量 \mathbf{x} 的一个非线性函数，但是这样的情况依然被称作是线性函数，因为这个函数是 ω 的线性函数。

模型的参数估计

最小平方误差估计

系数 ω 的估计可以通过最小化误差函数来获得。一个简单的广泛应用的与差函数是每个数据点 x_n 的预测值 $y(x_n, \omega)$ 与目标值 t_n 相差的平方和

$$\mathbf{E}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \omega) - t_n\}^2$$

其中， $\frac{1}{2}$ 是为了计算方便。现在我们要选取使得 $\mathbf{E}(\omega)$ 最小的 ω 值，因为，若所有数据均预测正确，那么误差值就为零。即

$$\omega^* = \arg \min_{\omega} \mathbf{E}(\omega)$$

由于误差函数是 ω 的二次函数，所以关于 ω 的导数是线性函数，令其等于零，只有一解，也即误差函数的最小值有一个唯一解。

现在将上一节所述模型代入误差函数求解，即

$$\mathbf{E}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \omega^\top \phi(x_n)\}^2$$

对其关于 ω 求导，得

$$\nabla_{\omega} \mathbf{E}(\omega) = \sum_{n=1}^N \{t_n - \omega^\top \phi(x_n)\} \phi(x_n)^\top$$

令其等于零，可得

$$0 = \sum_{n=1}^N t_n \phi(x_n)^\top - \omega^\top \left(\sum_{n=1}^N \phi(x_n) \phi(x_n)^\top \right)$$

求解 ω ，有

$$\omega^* = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t}$$

这里 Φ 是一个 $N \times M$ 的矩阵，其元素 $\Phi_{nj} = \phi_j(x_n)$ ，即

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_{M-1}(x_1) \\ \phi_0(x_2) & \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_{M-1}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(x_N) & \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_{M-1}(x_N) \end{pmatrix}$$

式中

$$(\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top$$

被定义为 Φ 的MP伪逆。

之后预测模型可以写作

$$y(\mathbf{x}, \omega) = \omega^{*\top} \phi(\mathbf{x})$$

最大似然估计

最小平方误差的解可以看成高斯噪声模型假设下的最大似然解。

与一开始一样，假设目标变量 t 由确定的函数 $y(\mathbf{x}, \omega)$ 给出，这个函数被附加了一个高斯噪声，即

$$t = \sin(2\pi x) + \varepsilon$$

其中 ε 是一个零均值，精度(方差的倒数)为 $\beta = \frac{1}{\sigma^2}$ 的高斯随机变量。因此，有

$$p(t | x, \omega, \beta) = \mathcal{N}(t | y(\mathbf{x}, \omega), \beta^{-1})$$

考虑现在有给定的输入数据集 $\mathbf{X} = \{x_1, \dots, x_N\}$ ，对应的目标值为 $\mathbf{t} = \{t_1, \dots, t_N\}$ 。那么观测数据的似然函数为

$$p(\mathbf{t} | \mathbf{X}, \omega, \beta) = \prod_{n=1}^N \mathcal{N}(t_n | \omega^\top \phi(x_n), \beta^{-1})$$

取对数，并且使用一元高斯分布的标准形式，有

$$\begin{aligned} \log p(\mathbf{t} | \omega, \beta^{-1}) &= \sum_{n=1}^N \log \mathcal{N}(t_n | \omega^\top \phi(x_n), \beta^{-1}) \\ &= \frac{N}{2} \log \beta - \frac{N}{2} \log(2\pi) - \beta E_D(\omega) \end{aligned}$$

其中平方和误差函数被定义为

$$E_D(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \omega^\top \phi(x_n)\}^2$$

写出了似然函数，我们可以使用最大似然函数的方法确定 ω 。

在这里，关于 ω 求最大值，与之前求最小平方误差等价。求解 ω 有

$$\omega_{ML} = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t}$$

正则化

可以通过给误差函数添加正则化项来控制过拟合，因此需要最小化的误差函数为

$$\mathbf{E}(\omega) + \lambda \mathbf{E}_\omega(\omega)$$

其中 λ 是正则化系数。正则化项一个简单的形式是 ℓ_2 正则

$$\mathbf{E}_\omega(\omega) = \frac{1}{2} \omega^\top \omega$$

考虑 ℓ_2 正则化，那么整个误差函数就变为

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{t_n - \omega^\top \phi(x_n)\}^2 + \frac{\lambda}{2} \omega^\top \omega$$

令其关于 ω 的导数等于零，可得

$$\omega = (\lambda \mathbf{I} + \Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t}$$

实验

使用 *Python* 模拟实验。

导入必要的数据包

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from numpy.linalg import inv
from functools import partial
```

生成具有高斯噪声的目标数据值 t_n

```
RANGE = [0, 1]
X = np.linspace(*RANGE, 10)
target = np.sin(2*np.pi*X) + np.random.normal(0, 0.2, len(X))
```

定义 $\phi(x_n)$ 与 Φ

```
def phi(x, m):
    _phi = [ 1 ]
    for i in range(m):
        _phi.append(x**(i+1))
    return _phi

def Phi(X, m):
    _Phi = [ ]
    for x in X:
        _Phi.append(phi(x, m))
    return np.array(_Phi)
```

定义预测函数，以及预测模型的绘制函数

```
def predict(x, omega):
    return omega.dot(phi(x, len(omega)-1))

def plot_predict(func, range, label='', resolution=0.02, color='red'):
    _x = np.arange(range[0], range[1], 0.02)
    _y = [ func(x) for x in _x ]
    plt.plot(_x, _y, color=color, label=label)
```

对比各种参数个数的模型，以及正则化模型之间的对比

```

for idx, dim in enumerate([2, 3, 6, 9]):
    # 计算模型参数
    _Phi = Phi(X, dim)
    omega = inv(_Phi.T.dot(_Phi)).dot(_Phi.T).dot(target)
    ## 正则化
    lambda_ = 1e-3
    omega_r = inv(lambda_*np.eye(dim+1) + _Phi.T.dot(_Phi)).dot(_Phi.T).dot(target)

    # 预测函数
    predict = partial(predict, omega=omega)
    predict_r = partial(predict, omega=omega_r)

    # 绘制图像
    ax = plt.subplot(2, 2, idx+1)
    plot_predict(predict, RANGE, label='no regularization', color='red')
    plot_predict(predict_r, RANGE, label='regularization', color='green')
    plt.scatter(X, target)
    plt.title('Dim = %d$' % dim)
    plt.legend()

plt.show()

```

实验结果

