模型调优——基本概念，调参方法等

Mia Feng

2018 年 3 月 7 日

1 概述

模型过拟合时，有高方差，可能是因为使用了相关数据中过多的参数；模型欠拟合时，有高偏差，意味着模型过于简单，无法发现训练数据集中隐含的模式，这会使得模型应用于未知数据时性能不佳。

当在不同的训练数据集上多次重建模型时，偏差可以从总体上衡量预测值和实际值的差异，此时的偏差衡量的是系统误差。但是当在同一训练集的不同子集上训练是，方差用来衡量模型对特定样本示例预测的一致性（或者说变化）。可以说模型对训练数据中的随机性是敏感的。基于此，有两种方法进行模型选择（fine tuning）。一种是 holdout，将数据分为训练集，验证集和测试集。根据在验证集上的预测评分来调优拟合训练集的参数，最终在测试集上预测。但是缺点是模型对训练数据的随机性敏感。相比之下，k 折交叉验证评价的鲁棒性更好。通过将数据不放回抽样分为 k 个子集，每次选取其中的 k-1 个子集组成训练集拟合，另外的一个子集作为验证集评分，总共迭代 k 次。最后以 k 次评分的均值作为模型的平均性能估计。注意 k 值过大会使得评价方差过高。当数据中类别比例相差较大时，推荐分层交叉验证，sklearn 中为 StratifiedKFold

Bias-variance tradeoff 是通过引入正则化调整模型的复杂度。正则化可以有效的解决特征间高度相关的问题。增加正则化的强度会导致权重系数逐渐收缩。

如何判断是高偏差还是高方差，以及根据此选择参数，见下图

tradeoff.png tradeoff.bb

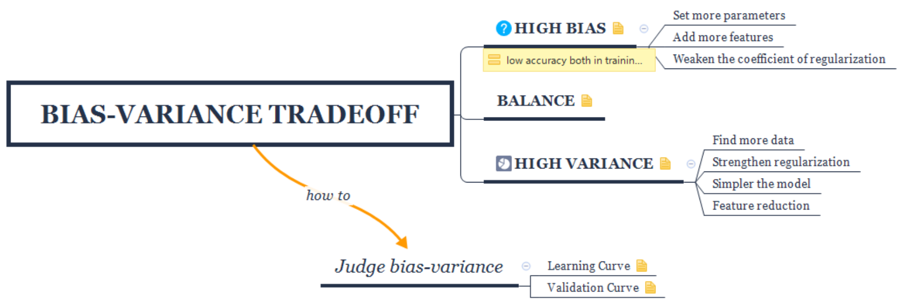


图 1: 模型调优策略

求解目标：分类超平面，以二维空间为例，求解一条直线

$$y = b + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 = \theta^{\mathbf{T}} x + b \tag{1}$$

求解思路：最小化误分类点数（由其可以扩展到 SVM 最大化最小几何距离）。Concretely, 通过最小化代价函数 [1]：

$$L(\theta, b) = -\sum_{x_i \in M} y_i(\theta \cdot x_i + b) \tag{2}$$

求解方法：最小化误分类点数，stochastic gradient descent

1.1 推导

误分类点数 当分类结果正确时，类标乘以分类平面 $(\theta \cdot x_i + b)$ 所得符号为正，反之所得符号为负。所以，对类标乘以分类平面值的结果取负，记为误分类的点数目。目标要对其求极小

$$\arg\min_{\theta, b} L(\theta, b) = -\arg\min_{\theta, b} \sum_{x_i \in M} y_i(\theta \cdot x_i + b) \tag{3}$$

Stochastic gradient descent 每次随机选取一个误分类点使其梯度下降，因为对所有样本点的梯度下降是耗时的（这种叫做 Batch Gradient Descent）。神经网络采用 SGD 与 Batch Gradient Desecent 的中间版，或者这种中间版的改进版。为了降低运算量，采用 mini-batch gradient descent（对数据分批次求极小）。算法在期望上收敛，所以不一定是全

局最优。即使代价函数是强凸且光滑，收敛速度也只有 $O\left(\frac{1}{T}\right)$，where T 是样本点数。运用随机梯度下降后，每当一个实例点被误分，即位于超平面错误的一侧时，即调整 θ, b 使得分类平面向该误分类点的一侧移动，以减少该误分类点与超平面的距离，甚至超平面越过该误分类点使其被正确分类 [1]。

$$\begin{aligned}\nabla_\theta L\big(\theta, b\big) &= -\sum_{x_i \in M} y_i x_i \\ \nabla_b L\big(\theta, b\big) &= -\sum_{x_i \in M} y_i\end{aligned} \tag{4}$$

2 算法实现

见 [1]

1. 初始化 θ, b

2. 迭代直至训练集中无误分类点 {

   a. 从样本集中随机选取数据点 $\big(x_i, y_i\big)$

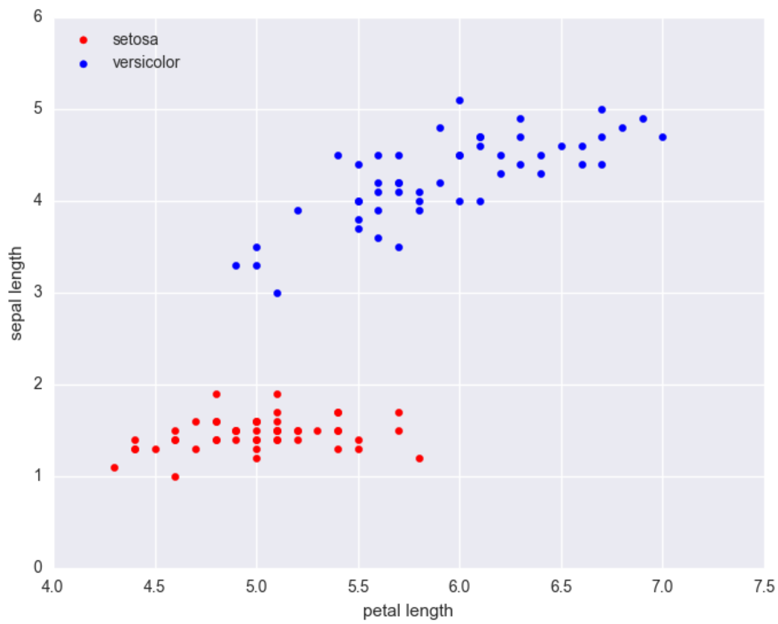
   b. 如果 $y_i\big(\theta \cdot x_i + b\big) \leq 0$

$$\begin{aligned}\theta &\leftarrow \theta + \eta y_i x_i \\ b &\leftarrow b + \eta y_i\end{aligned} \tag{5}$$

}

3 Implementation

分类测试：数据在 flowers.csv



setosa
versicolor
sepal length
petal length
0
1
2
3
4
5
6
4.0
4.5
5.0
5.5
6.0
6.5
7.0
7.5

图 2: 训练数据

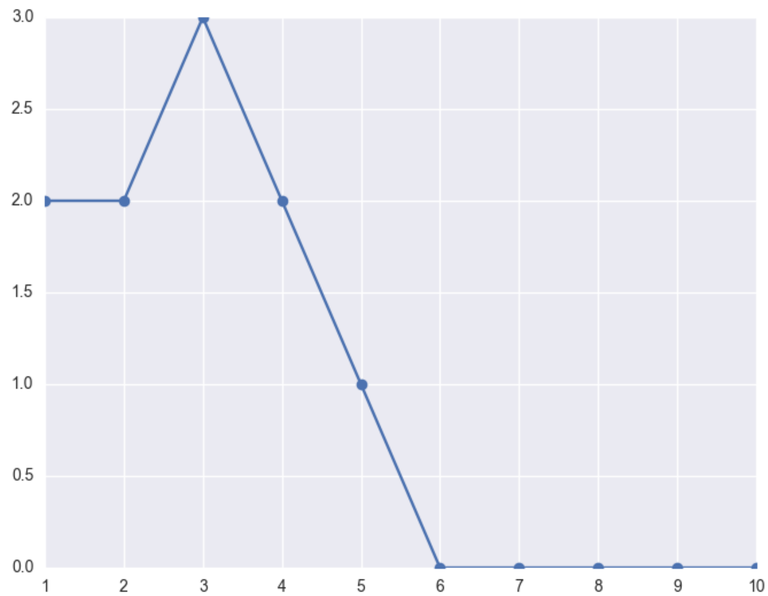


图 3: 每次迭代被错分的数目

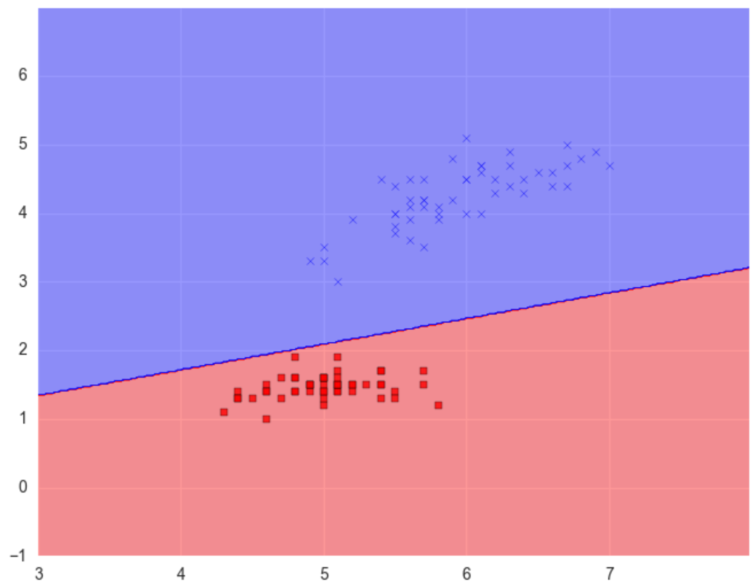


图 4: Perceptron 分类平面

参考文献

[1] 李航. 统计学习方法. 清华大学出版社, 2012.