PRML学习笔记——第三章

Linear Models for Regression

3.1 Linear Basis Function Models

最简单的用于回归的线性模型：

$$y(\mathbf{x},\mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + \ldots + w_D x_D$$

被称为*linear regression*.这个model关于parameter是linear的，关于input variable也是linear的。一个一般的linear model只需要关于parameter线性：

$$y(\mathbf{x},\mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x})$$

其中的$\phi_i(\mathbf{x})$可以是non-linear的，被称为basis funtion.这里的w_0是’bias’，我们也可以改写成：

$$y(\mathbf{x},\mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

3.1.1 Maximum likelihood and least squares

假设target t有确定的函数$y(\mathbf{x}, \mathbf{w})$给出：

$$t = y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) + \epsilon$$

其中ϵ是一个服从mean是0,precision是β的gaussian random noise.可以写成：

$$p(t \mid \mathbf{x}, \mathbf{w}, \beta) = \mathcal{N}\left(t \mid y(\mathbf{x}, \mathbf{w}), \beta^{-1}\right)$$

对于一个dataset，$\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N\}$，target $t_1, \ldots, t_N$,基于i.i.d Gaussian的假设，有：

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta) = \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}\left(t_n \mid \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right), \beta^{-1}\right)$$

求使该表达式最大的$\mathbf{w}$等价于least square:

$$E_D(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{t_n - \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)\right\}^2$$

可以解出：

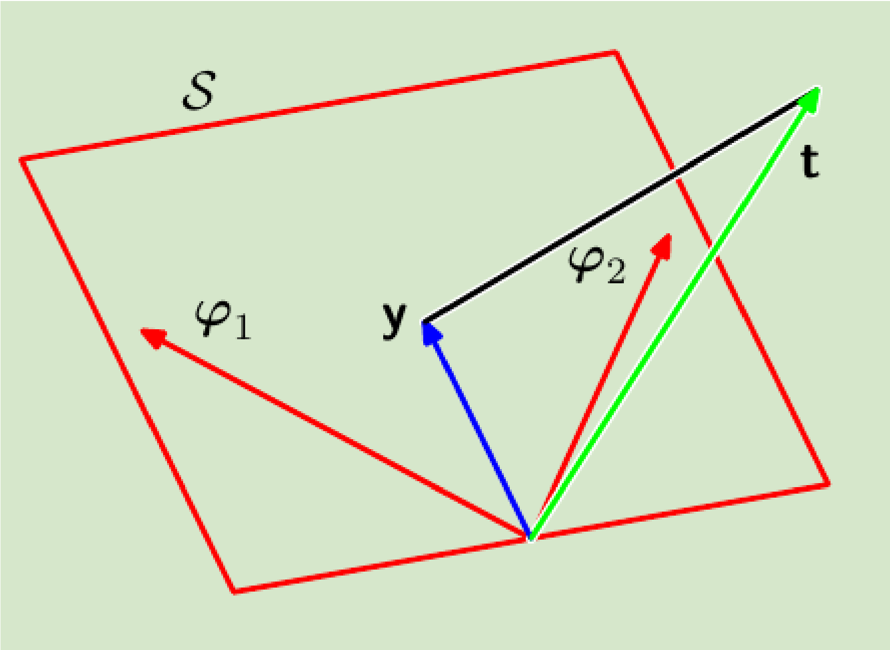
$$\mathbf{w}_{\mathrm{ML}} = \left(\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Phi}\right)^{-1} \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{t}$$

这被称为*normal equations* for least squares problem，$\boldsymbol{\Phi}$被称为*design matrix*.其中

$$\boldsymbol{\Phi}^{\dagger} \equiv \left(\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Phi}\right)^{-1} \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}$$

被称为*Moore-Penrose pseudo-inverse*.

3.1.2 Geometry of least squares



在一个N-dimensional space（axes是$t_1, \ldots, t_N$*）*，least-square regression function就是找一个orthogonal projection，把data vector $\mathbf{t}$投影到由basis function所span得到的subspace上。

3.1.3 Sequential learning

当data多的时候，用Sequential method就变得值得。假设我们现在要minimize SSE：$E = \sum_n E_n$，使用stochastic gradient descent(*sequential gradient descent*)求最优parameters $\mathbf{w}$的一般形式：

$$\mathbf{w}^{(\tau+1)} = \mathbf{w}^{(\tau)} - \eta \nabla E_n$$

对于SSE最小的问题来说就是：

$$\mathbf{w}^{(\tau+1)} = \mathbf{w}^{(\tau)} + \eta \left(t_n - \mathbf{w}^{(\tau)\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}_n \right) \boldsymbol{\phi}_n$$

这也被称为*least-mean-squares*(LMS) algorithm.

3.1.4 Regularized least squares

在第一章的时候已经谈过在error function上增加regularization term防止over-fitting，总的error function是$E_D(\mathbf{w}) + \lambda E_W(\mathbf{w})$,其中的λ用来控制两者的relative importance.一个SSE问题带正则项的最简单形式是：

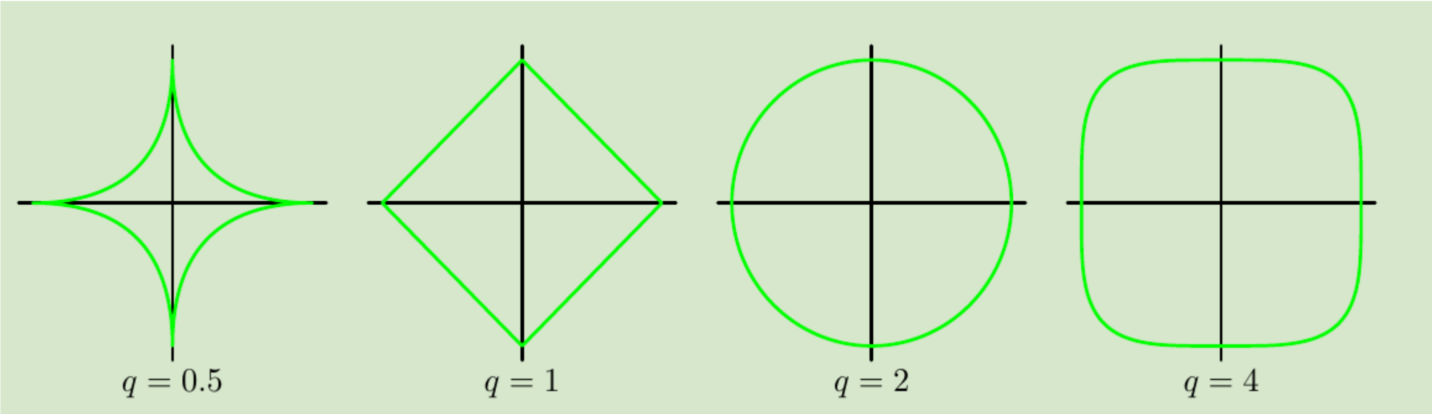
$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)\}^2 + \frac{\lambda}{2} \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{w}$$

这个问题有closed-form solution:

$$\mathbf{w} = \left(\lambda \mathbf{I} + \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Phi} \right)^{-1} \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{t}$$

更一般的正则化是：

$$\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left\{t_n-\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right)\right\}^2+\frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{M}\left|w_j\right|^q$$



对q取不同值时，regular term的contours

3.1.5 Multiple outputs

当我们需要predict $K>1$的target的时候，我们可以选择对每个K选择相同的basis function：

$$\mathbf{y}(\mathbf{x},\mathbf{w})=\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

假设conditional distribution是isotropic Gaussian:

$$p(\mathbf{t}\mid\mathbf{x},\mathbf{W},\beta)=\mathcal{N}\left(\mathbf{t}\mid\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}),\beta^{-1}\mathbf{I}\right)$$

同样maximum likelihood可以得到解：

$$\mathbf{W}_{\mathrm{ML}}=\left(\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}\right)^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}$$

3.2. The Bias-Variance Decomposition

在已知$p(t|\mathbf{x})$下，$h(\mathbf{x})$是最优Regression function：

$$h(\mathbf{x})=\mathbb{E}[t\mid\mathbf{x}]=\int tp(t\mid\mathbf{x})\mathrm{d}t$$

但实际中并不知道$p(t|\mathbf{x})$，我们可以让expected Loss 最小来选择model $y(\mathbf{x})$.

$$\mathbb{E}[L]=\int\{y(\mathbf{x})-h(\mathbf{x})\}^2p(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}+\int\{h(\mathbf{x})-t\}^2p(\mathbf{x},t)\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}t$$

这里面第二项与model无关，是data上的intrinsic noise.

假设我们在data $\mathcal{D}$下得到一个prediction function $y(\mathbf{x};\mathcal{D})$，那么expected loss中第一项的平方损失可以写成：

$$
\begin{gathered}
\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]+\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]-h(\mathbf{x})\}^2 \\
\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]\}^2+\{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]-h(\mathbf{x})\}^2 \\
+2\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]\}\{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]-h(\mathbf{x})\}
\end{gathered}
$$

若关于data求expectation：

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-h(\mathbf{x})\}^2\right] \\
&=\underbrace{\{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]-h(\mathbf{x})\}^2}_{(\text{bias})^2}+\underbrace{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]\}^2\right]}_{\text{variance}}.
\end{aligned}
$$

如此可以把开始的式子分解成三个部分：

expected loss $=(\text{ bias })^2+$ variance $+$ noise

where

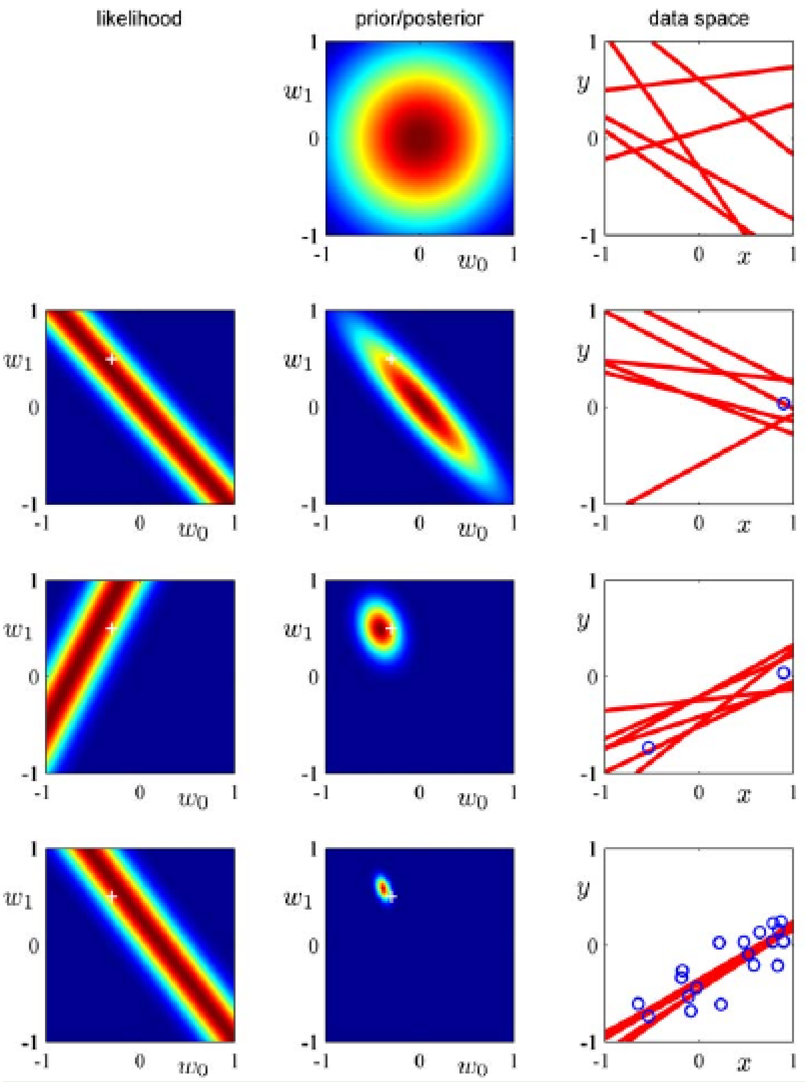
$$
\begin{aligned}
(\text{ bias })^2 &=\int\{\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]-h(\mathbf{x})\}^2 p(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \\
\text{variance } &=\int \mathbb{E}_{\mathcal{D}}\left[\{y(\mathbf{x};\mathcal{D})-\mathbb{E}_{\mathcal{D}}[y(\mathbf{x};\mathcal{D})]\}^2\right] p(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x} \\
\text{noise } &=\int\{h(\mathbf{x})-t\}^2 p(\mathbf{x},t)\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

所以最终的问题是如何在$bias$和$variance$之间找一个balance，这是一个trade-off的问题。具体来说就是控制模型的complex和拟合效果。

3.3. Bayesian Linear Regression

3.3.1 Parameter distribution

考虑一个最简单的拟合线性函数$y(x,\mathbf{w})=w_0+w_1x$的例子.



仍然使用Gaussian和对应的共轭先验。使用sequential method估计posterior。图中可以看到随着data point增加，posterior越来越sharp.

3.3.2 Predictive distribution

实际中，我们感兴趣的是$p(t|\mathbf{t}, \alpha, \beta)$,该predictive distribution的variance为

$$\sigma_N^2(\mathbf{x}) = \frac{1}{\beta} + \phi(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_N \phi(\mathbf{x})$$

随着data point增加，第二项会逐渐趋向0.并且data point附近的variance会更小。

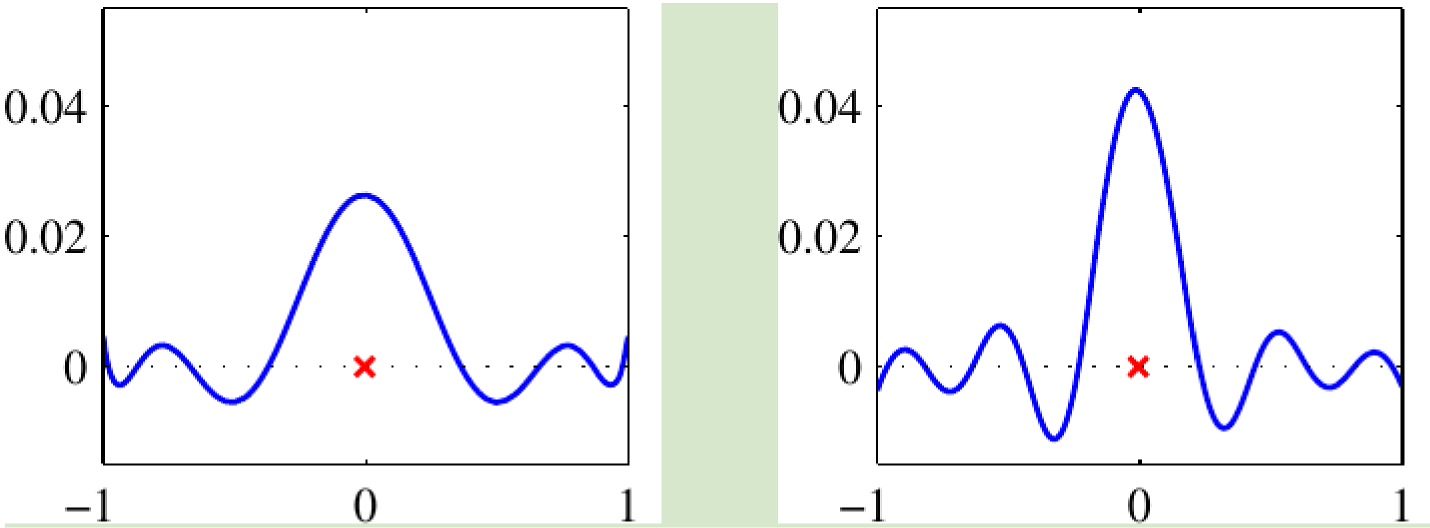
3.3.3 Equivalent kernel

predictive mean($\mathbf{w}$取posterior的mean)能够写成：

$$y\left(\mathbf{x}, \mathbf{m}_N\right) = \mathbf{m}_N^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = \beta \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_N \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \mathbf{t} = \sum_{n=1}^{N} \beta \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_N \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}_n\right) t_n$$

$$y\left(\mathbf{x}, \mathbf{m}_N\right)=\sum_{n=1}^N k\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n\right) t_n$$

其中$k\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right)=\beta \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{S}_N \boldsymbol{\phi}\left(\mathbf{x}'\right)$被称为*smoother matrix* or *equivalent kernel*.
`note:` K做的就是对所有train data里的target做一个weighted sum.也可以称为*linear smoothers*.



左边的是basis function取Gaussian，右边是取sigmoid，可以看到最终的equivalent kernel是相似的，都是在$\mathbf{x}$附近的data point具有更大的weight.

3.4. Bayesian Model Comparison

假设有不同的models $\{\mathcal{M}_i\}$，evaluate不同model的posterior:

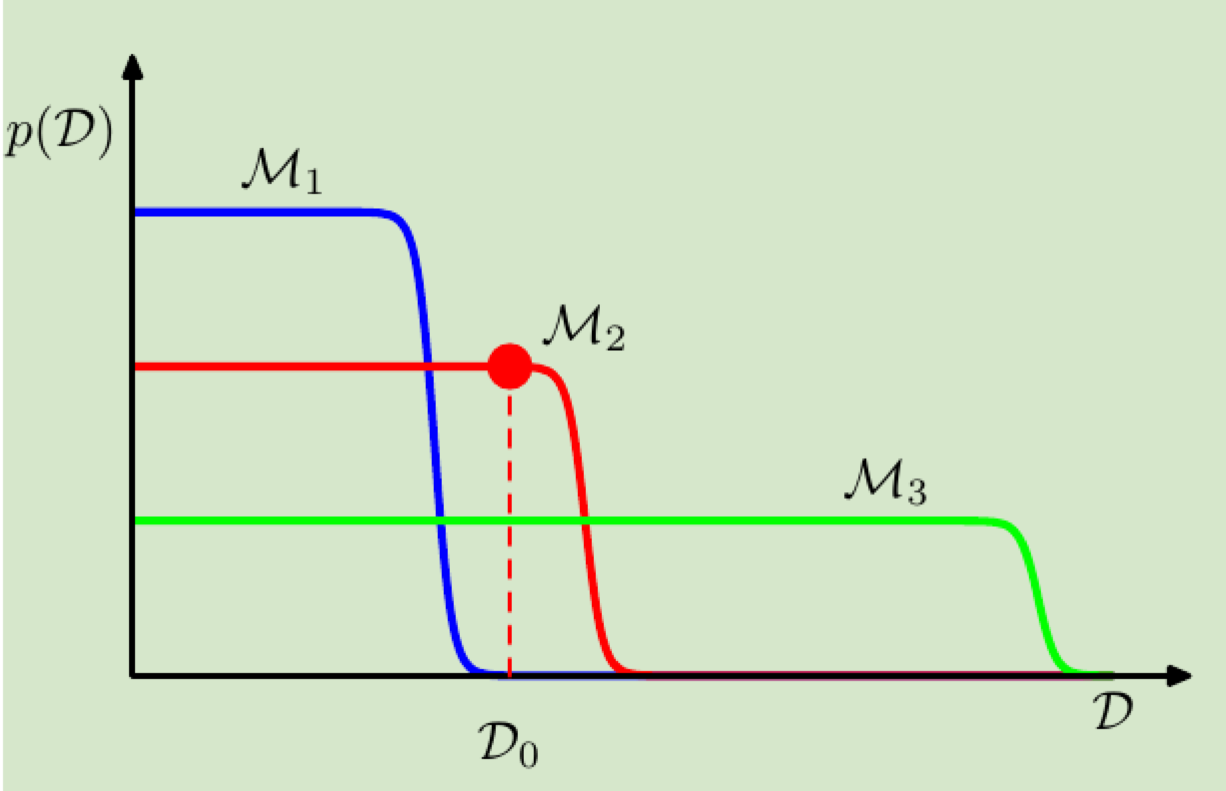
$$p\left(\mathcal{M}_i \mid \mathcal{D}\right) \propto p\left(\mathcal{M}_i\right) p\left(\mathcal{D} \mid \mathcal{M}_i\right)$$

帮助我们*model selection/model averaging*.其中的$p(\mathcal{M}_i)$是prior，$p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_i)$是*model evidence*.*model evidence*有时也称*marginal likelihood*.

`note:` marginal 体现在：

$$p\left(\mathcal{D} \mid \mathcal{M}_i\right)=\int p\left(\mathcal{D} \mid \mathbf{w}, \mathcal{M}_i\right) p\left(\mathbf{w} \mid \mathcal{M}_i\right) \mathrm{d} \mathbf{w}$$

这其中$\mathcal{M}_i$是hyper parameter，$\mathbf{w}$是确定某个model类型后的parameter.我们要做的model comparison的核心就是model evidence $p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_i)$.



假设我们观测到的data是$\mathcal{D}_0$，现在有三种model $\{\mathcal{M}_1,\mathcal{M}_2,\mathcal{M}_3\}$,complexity依次增加。图中可以看到，小的model complexity只在小部分类型的data里可能性大，而最complex的模型虽然表达能力强，在各种data下都有概率，但是由于$p(\mathcal{D})$是normalize的，所以在某个具体观测data下，适当模型complex的是最可能的。(这也就说明了Bayes视角下对待over-fit的手段)

3.5. The Evidence Approximation

由于fully Bayesian treatment需要对parameter $\mathbf{w}$和hyper-parameter α、β积分，这是intractable.我们考虑一种近似手段，将hyper parameter的值由maximizing marginal likelihood先确定.predictive function为:

$$p(t \mid \mathbf{t})=\iiint p(t \mid \mathbf{w},\beta)p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t},\alpha,\beta)p(\alpha,\beta \mid \mathbf{t})\mathrm{d}\mathbf{w}\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta$$

接着approximate：

$$p(t \mid \mathbf{t}) \simeq p(t \mid \mathbf{t},\widehat{\alpha},\widehat{\beta})=\int p(t \mid \mathbf{w},\widehat{\beta})p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t},\widehat{\alpha},\widehat{\beta})\mathrm{d}\mathbf{w}$$

其中$\widehat{\alpha}$、$\widehat{\beta}$是$p(\alpha,\beta \mid \mathbf{t})$的尖峰.