Linear Regression 和 Gradient Descent

假設有 n 筆資料, 有 m 筆 features, 則第 i 筆資料的回歸式如下:

$$y_i = w_0 + w_1 x_{i,1} + w_2 x_{i,2} + \dots + w_n x_{i,m}$$

我用 MSE (Mean Squared Error) 和 L2-regularization 計算 error:

$$e = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (l_i - y_i)^2 + \alpha \sum_{j=1}^{m} w_j^2$$

把 e 對每個參數 w_i 偏微分,即得 w_i 的更新法則:

$$\frac{\partial e}{\partial w_j} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - l_i) x_{i,j} + 2\alpha w_j$$
$$w_j^{t+1} = w_j^t - \frac{\eta^t}{\sigma^t} \frac{\partial e}{\partial w_j}$$

其中 η 是 learning rate, 除以 σ 則是 adaptive gradient descent。

方法

機器學習重點是選好的 model, 例如要用 linear regression 或 SVM 或 neural network? 要選擇哪些 features? 如何設定 regularization 參數? 在不要 overfitting 前提下,選一個 model 讓 error function 值為最小。

也就是,我排列組合過不同方法,看看 error 有沒有變小。例如我試著刪除 p-value 大的 features,若 error 變小,之後就也刪除它們;我也試過 neural network(自己實作!),可惜 error 變大,也就沒保留了。

但 error 變小可能是 overfitting 所造成。為減緩 overfitting, 我把 training 資料進一步切成 training 和 validation。我改變 model 時,利用 n-fold 方法觀察 training 和 validation 的 error 變化。詳細流程如下:

- 1. 修改方法(例如改成 neural network、刪除 feature)
- 2. 使用 n-fold 交叉驗證:
 - a. 把資料 shuffle, 分成 training 和 validation
 - b. 計算 training 和 validation 的 error
 - c. 回到 a 再做一次, 共重複 n 次
 - d. 把 n 次的 error 做平均

3. 如果平均的 training 和 validation error 同時下降,則保留此方法;反之 若 training error 下降,但 validation error 上升,則很有可能 overfitting,因此就不保留此方法。

Regularization

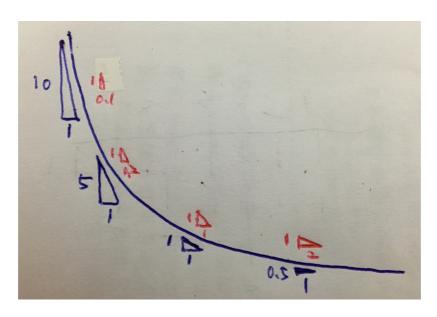
不論 linear regression 或是 neural network 我都是使用 L2-regularization,最前面的 error 公式後面那項即是。

因為 neural network 因為能 fit 任何函式,故極容易 overfitting,我嘗試 regularization 針對 NN 效果不錯,可惜 NN 似乎不是用這次作業。然而 linear regression 我發現效果並不明顯,當 $\alpha > 1.0$ 訓練和驗證 error 都很大,設得很小則和沒有差不多,因此 linear regression 我後乾脆不用 regularization 或是設 $\alpha = 0.01$ 意思一下。

但 regularization 另外的好處是,收斂較快! 因為參數(權重)被縮在比較小的範圍。

Learning Rate

我用兩種 adaptive gradient descent 來調整 learning rate, 如下圖藍色和紅色。



藍色是固定的 step size, 紅色是固定的 error 下降,一般的 AdaGrad 比較接近藍色的。紅色的方法概念是,在比較陡的坡,走小步一點,在平滑地方則走比較快。我嘗試過兩者速度沒差太多,但藍色的後期會比較穩定!