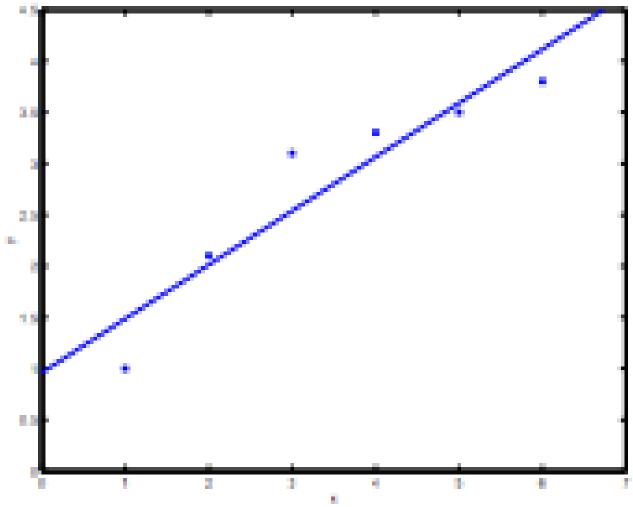
Регуляризация

Доц. д-р Ивайло Пенев

Кат. „Компютърни науки и технологии“

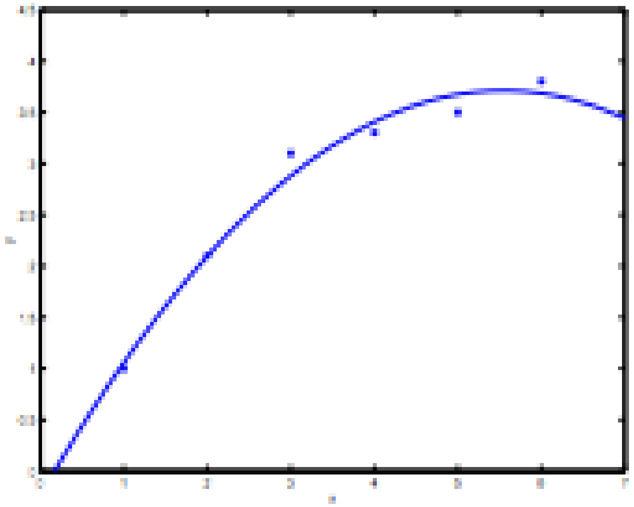
Overfitting

- Предсказваме y от $x \in R$

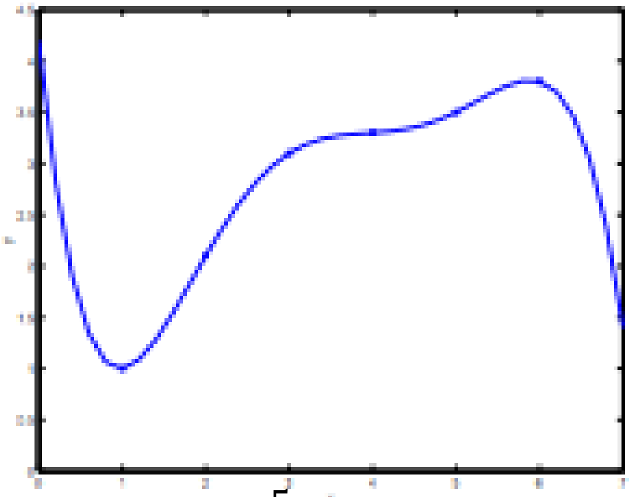


$y = \theta_0 + \theta_1 x$

Underfitting



$y = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$



$$y = \sum_{j=0}^{5} \theta_j x^j$$

Overfitting

Underfitting - overfitting

- Underfitting (high bias) – формата на функцията на хипотезата не описва точно тренда на обучителните данни – функцията е твърде проста или се състои от малко променливи
- Overfitting (high variance) – хипотезата описва точно обучителните данни, но не предсказва вярно нови данни, т.е. не е обобщаваща за нови данни – функцията е твърде сложна
- Тези проблеми са характерни за линейна и логаритмична регресия

Методи за справяне с overfitting

1. Намаляване на броя на променливите
    - Избираме кои променливи да останат в хипотезата
    - Използваме алгоритъм за избор на модел (model selection algorithm)
2. Регуляризация (regularization)
    - Запазваме всички променливи, но намаляваме степента на параметрите θ_j
    - Регуляризацията се използва, когато в хипотезата имаме променливи с по-малка важност

Регуляризация на параметри

- При overfitting на хипотезата можем да намалим степента на някои терми ($\theta_j x$), като увеличим тяхната цена
- $\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$+$\theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$ - **намаляваме влиянието на $\boldsymbol{\theta_3 x^3}$ и $\boldsymbol{\theta_4 x^4}$ без да ги премахваме от функцията и без да променяме формата на кривата**
- Функцията на цената може да придобие например следния вид:

$$min_\theta \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)})^2 + 1000.\,\theta_3^2 + 1000.\,\theta_4^2$$

- За да приближим цената към нула, трябва да намалим θ_3, θ_4 =>$\theta_3 \approx 0, \theta_4 \approx 0$ – в резултат ще намалим стойностите на термите $\theta_3 x^3, \theta_4 x^4$ в хипотезата

Обобщение на регуляризацията

- Можем да приложим регуляризация на всички параметри в цената, т.е.:

$$min_\theta \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{m}(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)})^2 + \lambda\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$$

- λ – параметър на регуляризацията – определя колко да се увеличи стойността на параметрите θ
- С използване на регуляризацията можем да „изгладим“ кривата на хипотезата, за да намалим overfitting
- Ако λ има много голяма стойност, може да се получи underfitting

Регуляризирана линейна регресия – градиентно спускане

Повтаряй до достигане на минимум на ф-та на цената $J(\theta)$

{

$$\theta_0 \coloneqq \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) x_0^{(i)}$$

$\theta_j \coloneqq \theta_1 - \alpha[(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) x_j^{(i)}) + \frac{\lambda}{m} \theta_j]$ за $j = 1,2, \dots, n$

}

- Термът $\frac{\lambda}{m}\theta_j$ представлява регуляризацията
- С известни преобразувания правилото за θ_j може да се представи така:

$$\theta_j \coloneqq \theta_j \left(1 - \alpha \frac{\lambda}{m}\right) - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) x_j^{(i)}$$

Нормално уравнение с регуляризация

$$\theta = (X^T X + \lambda . L)^{-1} X^T y$$

, където

$$L = \begin{bmatrix} 0 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

- L има размерност (n+1)x(n+1) – идентичната матрица, умножена с единствено реално число λ
- Ако m<n, то матрицата $X^T X$ е неинвертируема
- Когато добавим терм $\lambda . L$, то $X^T X + \lambda . L$ става инвертируема

Функция на цената с регуляризация

$$J(\theta) = -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[y^{(i)}\log(h_\theta\left(x^{(i)}\right) + \left(1 - y^{(i)}\right)\log(1 - h_\theta\left(x^{(i)}\right))]$$

- Регуляризирана функция на цената

$$J(\theta)$$
$$= -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}[y^{(i)}\log\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) + \left(1 - y^{(i)}\right)\log\left(1 - h_\theta\left(x^{(i)}\right)\right)\right] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$$

- Второто събираемо $\frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2$ изключва от сумата параметъра θ_0

Градиентно спускане при регуляризирана логаритмична регресия

Повтаряй до достигане на минимум на ф-та на цената $J(\theta)$

{

$$\theta_0 \coloneqq \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) x_0^{(i)}$$

$\theta_j \coloneqq \theta_1 - \alpha[(\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right)x_j^{(i)}) + \frac{\lambda}{m}\theta_j]$ за $j = 1,2, \ldots, n$

}

, където

$$h_\theta(x) = \frac{1}{1 + e^{-\theta^T x}}$$