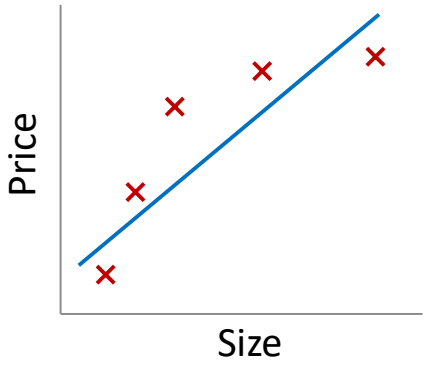
تنظیم: برخورد با بیش‌برازش

سید ناصر رضوی www.snrazavi.ir

۱۳۹۶

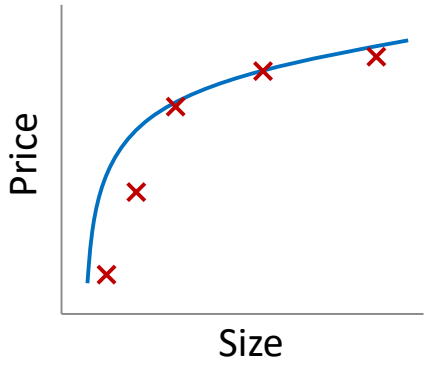
مثال: رگرسیون چند جمله‌ای

$\theta_0 + \theta_1 x$



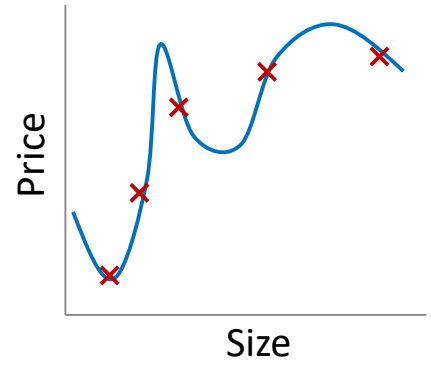
کم برازش (بایاس بالا)

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



مدل صحیح

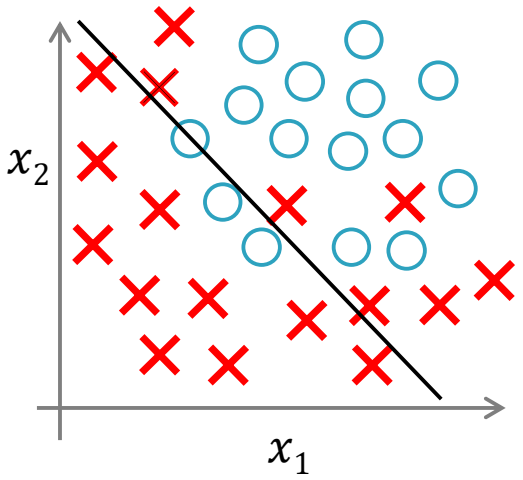
$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$



بیش برازش (واریانس بالا)

- بیش‌برازش. اگر تعداد ویژگی‌ها بسیار زیاد باشد، فرضیه یاد گرفته شده ممکن است داده‌های آموزشی را خیلی خوب یاد بگیرد، اما این امکان نیز وجود دارد که این فرضیه در پیش‌بینی داده‌های جدید شکست بخورد. [عدم قابلیت تعمیم]

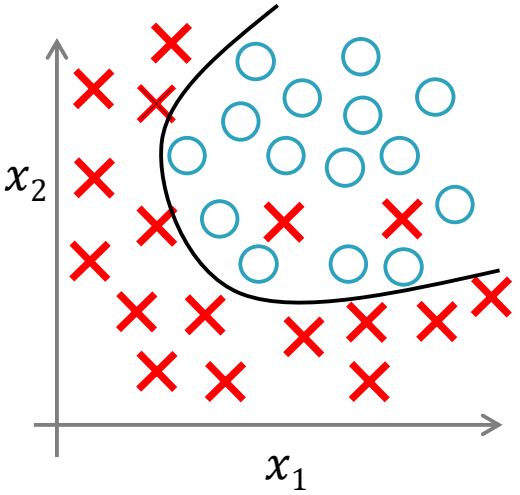
مثال: رگرسیون لجستیکی



$$h_\theta(x) = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)$$

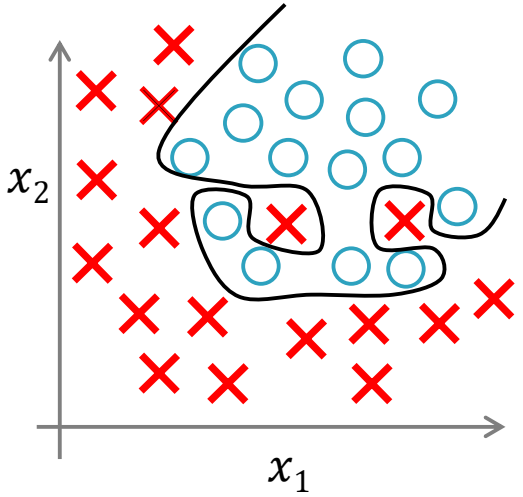
(g = sigmoid function)

کم‌برازش (بایاس بالا)



$$g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2$$

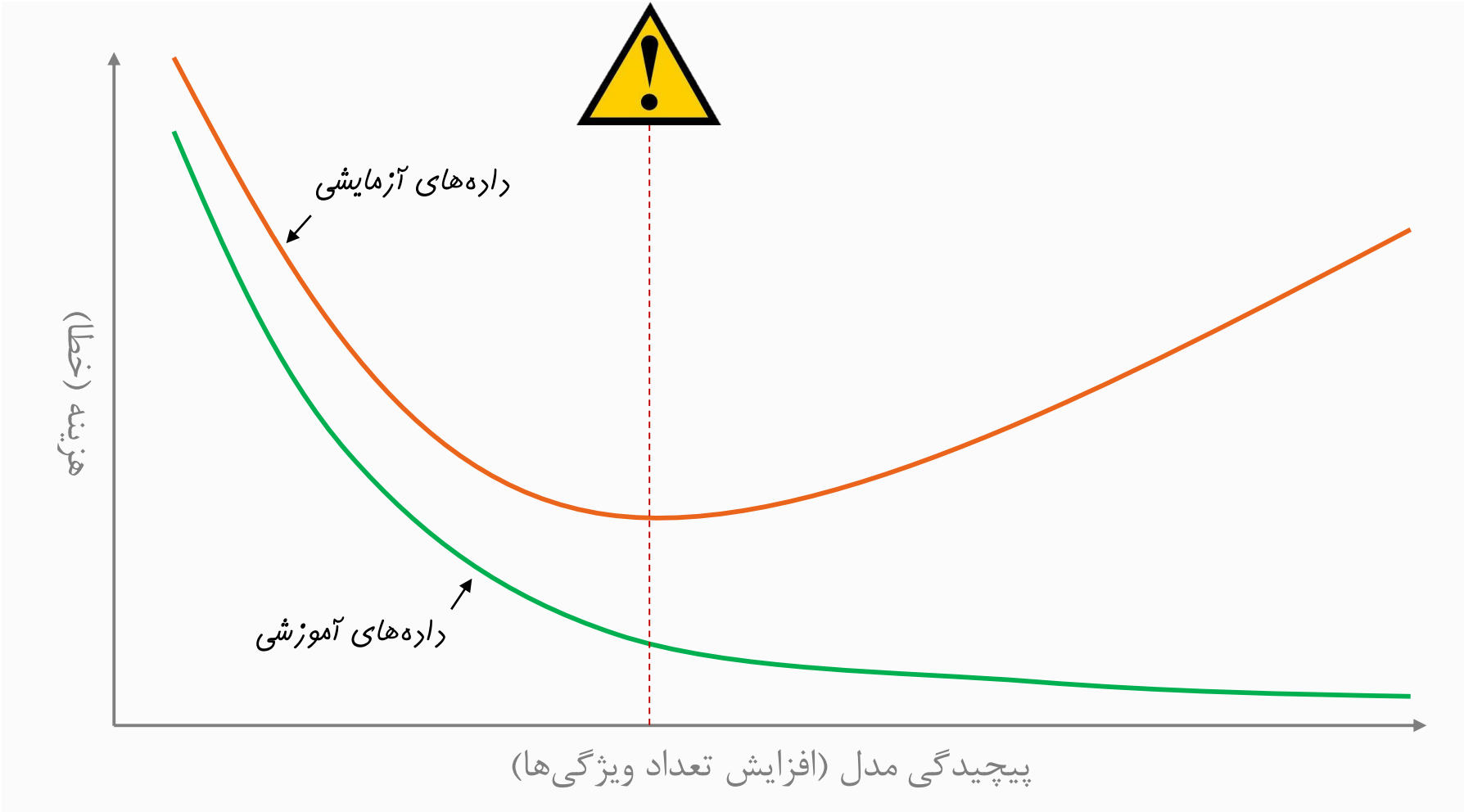
مدل صحیح



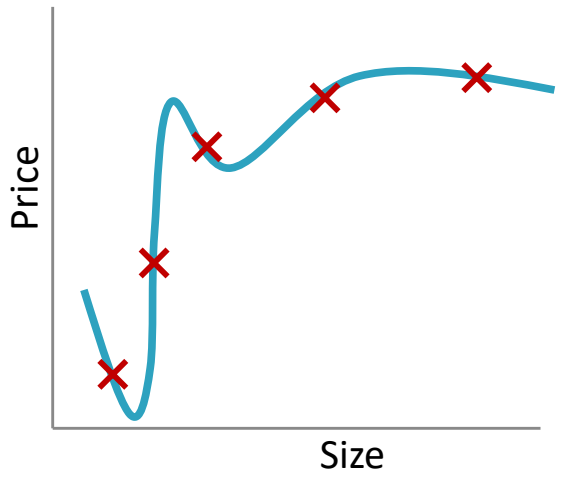
$$g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_1^2 + \theta_3 x_1^2 x_2 + \theta_4 x_1^2 x_2^2 + \theta_5 x_1^2 x_2^3 + \theta_6 x_1^3 x_2$$

بیش‌برازش (واریانس بالا)

بیش‌برازش


داده‌های آزمایشی
داده‌های آموزشی
هزینه (خطا)
پیچیدگی مدل (افزایش تعداد ویژگی‌ها)

برخورد با بیش‌برازش



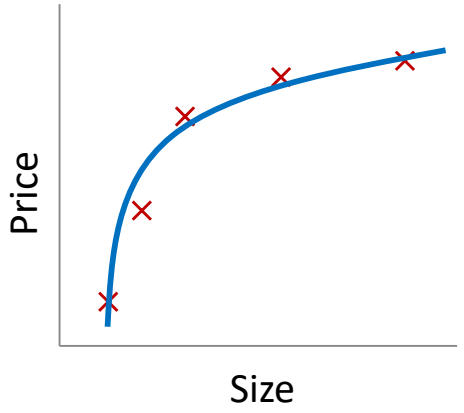
- ویژگی‌ها.
  - x_1 : اندازه خانه
  - x_2 : تعداد اتاق‌ها
  - x_3 : تعداد طبقات
  - x_4 : قدمت
  - x_5 : اندازه آشپزخانه
  - x_6 : تعداد سرویس‌ها
  - ...
  - x_{100} : میانگین درآمد همسایه‌ها

برخورد با بیش‌برازش

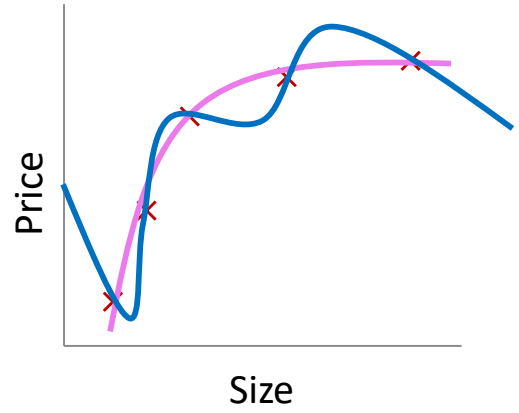
- راه‌حل‌های ممکن.
  - کاهش تعداد ویژگی‌ها.
    - به صورت دستی ویژگی‌های مهم‌تر را انتخاب و بقیه را حذف کن.
    - الگوریتم‌های انتخاب مدل [در ادامه]
  - تنظیم. (رگولاریزاسیون)
    - همه ویژگی‌ها را نگهدار، اما مقدار پارامترهای θ_j را کاهش بده.
    - زمانی که ویژگی‌های بسیاری داریم که هر کدام سهم اندکی در پیش‌بینی مقدار خروجی دارند، این روش به خوبی عمل می‌کند.

۷ تابع هزینه

مفهوم تنظیم



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

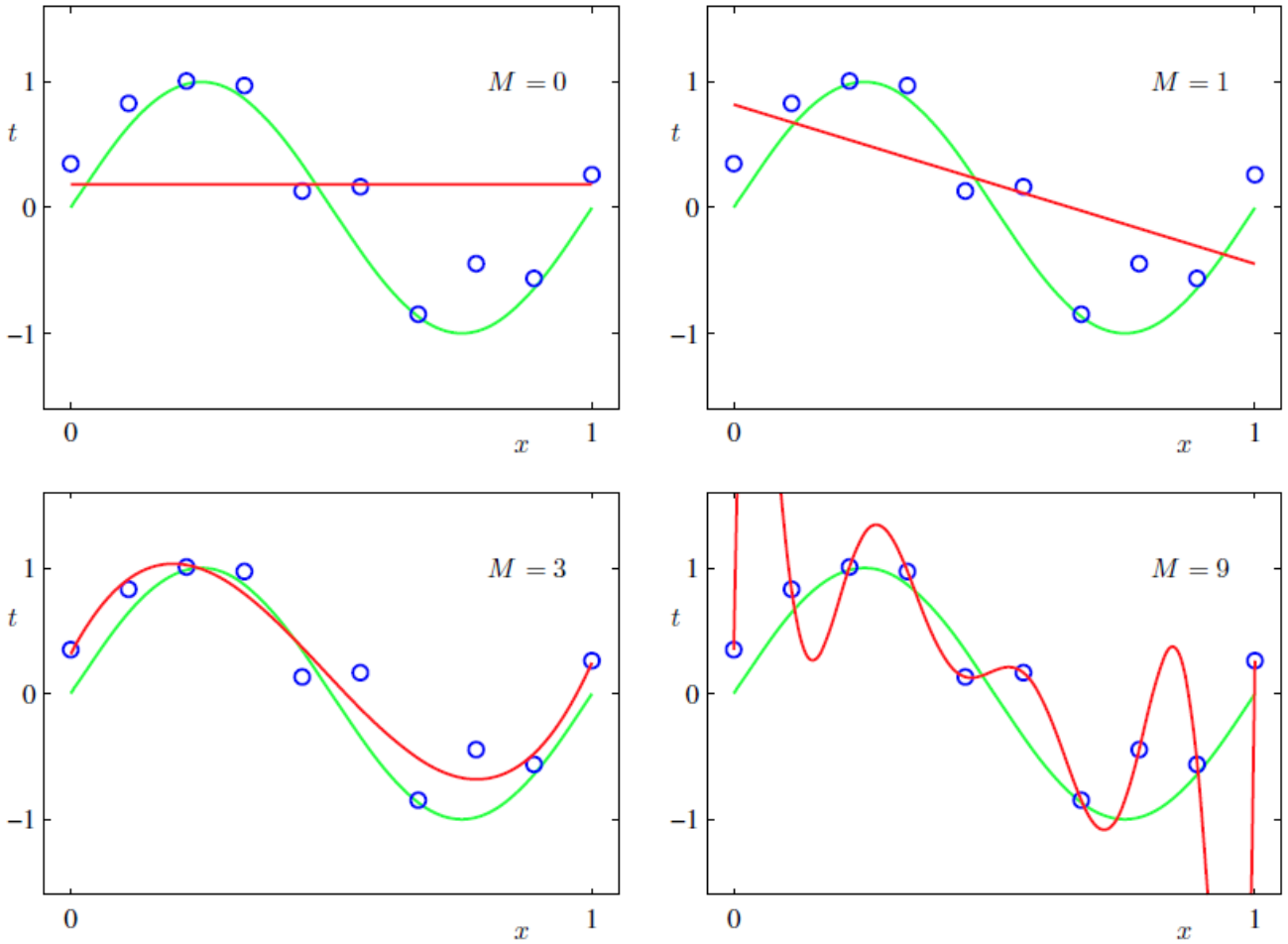


$\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3 + \theta_4 x^4$

- تابع هزینه.
  - می‌توان با جریمه کردن تابع هزینه، مقادیر پارامترهای θ_3 و θ_4 را بسیار کوچک نمود:

$$\min_{\theta} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)} \right)^2 + \underbrace{1000\theta_3^2}_{\approx 0} + \underbrace{1000\theta_4^2}_{\approx 0}$$

مفهوم تنظیم



	$M=0$	$M=1$	$M=6$	$M=9$
$w_0^\star$	0.19	0.82	0.31	0.35
$w_1^\star$		-1.27	7.99	232.37
$w_2^\star$			-25.43	-5321.83
$w_3^\star$			17.37	48568.31
$w_4^\star$				-231639.30
$w_5^\star$				640042.26
$w_6^\star$				-1061800.52
$w_7^\star$				1042400.18
$w_8^\star$				-557682.99
$w_9^\star$				125201.43

تنظیم

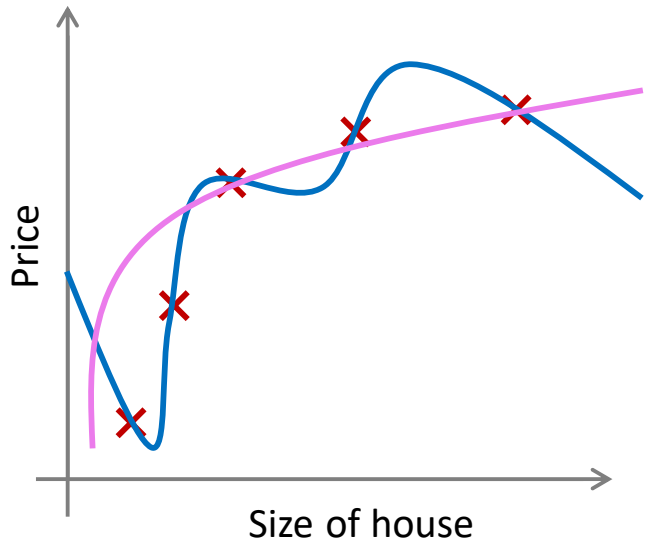
- تنظیم. استفاده از مقادیر کوچک برای پارامترهای «تتا»
  - ایجاد فرضیه‌های «ساده‌تر»
  - «اصل تراش اوکام»: تراشیدن اجزای غیر ضروری از مدل
  - کاهش خطر بیش‌برازش

- مثال.
  - ویژگی‌ها: x_1، x_2، ... و x_{100}
  - پارامترها: θ_0، θ_1، θ_2، ... و θ_{100}

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

تنظیم

- تنظیم.



ضریب تنظیم

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

$$\min_\theta J(\theta)$$

پرسش کلاسی

- در رگرسیون خطی تنظیم شده، مقادیر پارامترها به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که مقدار تابع هزینه کمینه گردد.

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

س. اگر ضریب تنظیم λ را با یک مقدار بسیار بزرگ مقداردهی کنیم (مثلاً $۱۰^{۱۰}$)، در این صورت چه خواهد شد؟

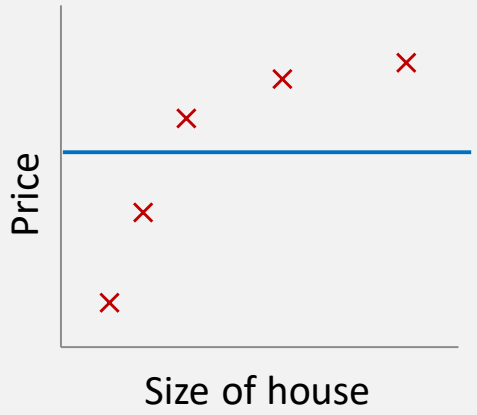
- الگوریتم به خوبی کار می‌کند و مقدار بزرگ λ آسیبی به آن وارد نمی‌کند.
- الگوریتم در برخورد با بیش‌برازش شکست می‌خورد.
- الگوریتم با کم‌برازش پایان می‌پذیرد.
- الگوریتم گرادیان کاهشی همگرا نمی‌شود.

پرسش کلاسی

- در رگرسیون خطی تنظیم شده، مقادیر پارامترها به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که مقدار تابع هزینه کمینه گردد.

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

س. اگر ضریب تنظیم λ را با یک مقدار بسیار بزرگ مقداردهی کنیم (مثلاً $۱۰^{۱۰}$)، در این صورت چه خواهد شد؟



$$\theta_0 + \underset{\approx 0}{\theta_1 x} + \underset{\approx 0}{\theta_2 x^2} + \underset{\approx 0}{\theta_3 x^3} + \underset{\approx 0}{\theta_4 x^4}$$

رگرسیون خطی تنظیم شده

رگرسیون خطی تنظیم شده

- تابع هزینه.

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

$$\min_\theta J(\theta)$$

گرادیان کاهشی (بدون تنظیم)

- بدون استفاده از تنظیم.

repeat until convergence {

$$\theta_j = \theta_j - \alpha \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot x_j^{(i)} \qquad (j = 0,1,2, \dots, n)$$

}

گرادیان کاهشی (با تنظیم)

- با استفاده از تنظیم.

repeat until convergence {

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

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

}

$$\theta_j = \theta_j \underbrace{(1 - \alpha\lambda)}_{<1} - \alpha \sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot x_j^{(i)}$$

معادله نرمال

$$X = \begin{bmatrix} (x^{(1)})^T \\ \vdots \\ (x^{(m)})^T \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \vdots \\ y^{(m)} \end{bmatrix}$$

$$X\,\theta = y$$

عدم استفاده از تنظیم برای پارامتر θ_0

$$\theta = \left(X^T X + \lambda \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} X^T y$$

معکوس ناپذیری

- فرض کنید $m < n$:

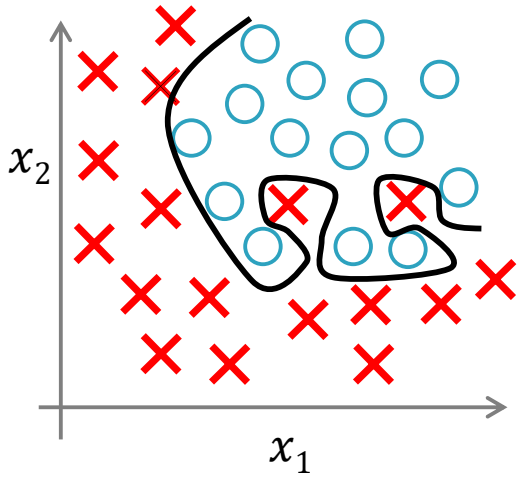
$$\theta = \underbrace{(X^T X)^{-1}}_{\text{معکوس ناپذیر}} X^T y$$

- اگر $\lambda > 0$:

$$\overbrace{\theta = \left(X^T X + \lambda \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} X^T y}^{\text{معکوس پذیر}}$$

رگرسیون لجستیکی تنظیم شده

رگرسیون لجستیکی



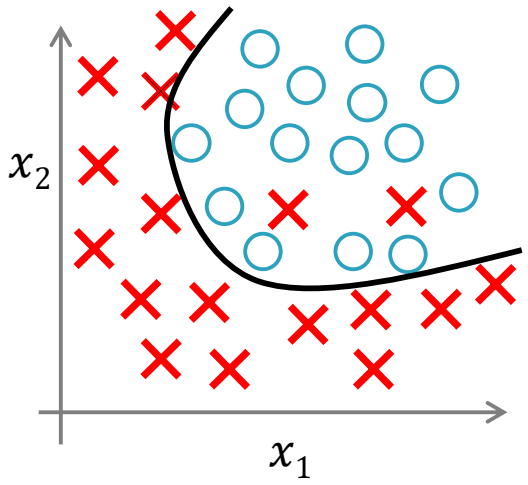
- فرضیه.

$$h_\theta(x) = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_1^2 + \theta_3 x_1^2 x_2 + \theta_4 x_1^2 x_2^2 + \theta_5 x_1^2 x_2^3 + \cdots)$$

- تابع هزینه.

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

رگرسیون لجستیکی



- فرضیه.

$$h_\theta(x) = g(\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_1^2 + \theta_3 x_1^2 x_2 + \theta_4 x_1^2 x_2^2 + \theta_5 x_1^2 x_2^3 + \cdots)$$

- تابع هزینه.

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

گرادیان کاهشی

- با استفاده از تنظیم.

repeat until convergence {

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

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

}

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

بهینه‌سازی پیشرفته


```
function [jVal, gradient] = costFunction(theta)
```

jVal = [code to compute $J(\theta)$];

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

gradient(1) = [code to compute $\frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta)$];

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

gradient(2) = [code to compute $\frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta)$];

$$\sum_{i=1}^{m} \left(h_\theta\left(x^{(i)}\right) - y^{(i)}\right) \cdot x_1^{(i)} + \lambda \theta_1$$

...

gradient(n+1) = [code to compute $\frac{\partial}{\partial \theta_n} J(\theta)$];