回归的正则化方法:岭回归、Lasso与 Elastic Net

2025年9月6日

目录

1 引言

正则化用于控制模型复杂度,以缓解过拟合并提升泛化。在线性回归中,常见方法包括岭回归(ℓ_2)、Lasso(ℓ_1)与 Elastic Net(两者的组合)。它们通过将系数向零收缩来降低方差;其中 Lasso 还能产生稀疏性,从而实现嵌入式特征选择。

2 原理与公式

2.1 模型

给定特征 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, 预测 $\hat{y} = \mathbf{w}^{\mathsf{T}} \mathbf{x} + b$ 。通常不对截距 b 加正则。

2.2 岭回归(ℓ_2)

$$\min_{\mathbf{w}, b} \ \frac{1}{2n} \|\mathbf{X}\mathbf{w} + b\mathbf{1} - \mathbf{y}\|_{2}^{2} + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|_{2}^{2}. \tag{1}$$

在不惩罚截距时,可写闭式解 $\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top (\mathbf{y} - \bar{y}\mathbf{1})$ 。岭回归连续收缩系数、缓解多重共线性,但不产生严格的零系数。

2.3 Lasso (ℓ_1)

$$\min_{\mathbf{w},b} \frac{1}{2n} \|\mathbf{X}\mathbf{w} + b\mathbf{1} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|_1.$$
 (2)

3 应用场景与要点 2

鼓励稀疏(部分 $w_j = 0$)。由次梯度/KKT条件可知:当残差与特征的相关性落入 $[-\lambda, \lambda]$ 带内时,对应系数会被压为零。

2.4 Elastic Net

结合 ℓ_1 与 ℓ_2 :

$$\min_{\mathbf{w}, b} \ \frac{1}{2n} \|\mathbf{X}\mathbf{w} + b\mathbf{1} - \mathbf{y}\|_{2}^{2} + \lambda \left(\alpha \|\mathbf{w}\|_{1} + \frac{1 - \alpha}{2} \|\mathbf{w}\|_{2}^{2}\right), \ \alpha \in [0, 1].$$
 (3)

在强相关特征场景下更稳健: ℓ_2 部分提升稳定性, ℓ_1 保持稀疏。

2.5 标准化与截距

建议对特征逐列标准化、对 y 去中心化; 截距 b 不加正则并在居中数据上单独估计。

2.6 优化

岭回归可用闭式解或 QR/SVD; Lasso 与 Elastic Net 常用坐标下降与软阈值(配合热启动与递减 λ 路径)。

3 应用场景与要点

- 多重共线性: 优先考虑岭回归或 Elastic Net 提升稳定性;
- 特征选择与可解释性: Lasso/Elastic Net 能产生稀疏解;
- **模型选择**: 通过交叉验证选择 λ/α ,结合系数路径与验证曲线判断;
- 预处理: 标准化、异常值处理、根据业务对特征进行分组与筛选。

4 Python 实战: Ridge 与 Lasso 系数路径

本示例生成合成数据,并分别绘制 Lasso 与岭回归的系数路径,保存为 figures/lasso_path.png 与 figures/ridge_path.png。

Listing 1: $gen_regularization_figures.py$

```
import os
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.linear_model import lasso_path, Ridge
```

```
6 np.random.seed(7)
 n, d = 120, 12
 X raw = np.random.randn(n, d)
10 X_raw[:, 1] = 0.7*X_raw[:, 0] + 0.3*np.random.randn(n)
12 true_w = np.zeros(d)
13 true_w[[0, 3, 7]] = [2.0, -3.0, 1.5]
  y = X_raw @ true_w + 0.8*np.random.randn(n)
14
15
  |# 标准化特征、去中心化 y
 X = (X_raw - X_raw.mean(axis=0)) / X_raw.std(axis=0)
  y = y - y.mean()
19
  # Lasso 路径 (alpha 递减)
20
  alphas_lasso, coefs_lasso, _ = lasso_path(X, y, alphas=None)
21
  fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 4.5))
  for j in range(d):
24
      ax.plot(alphas_lasso, coefs_lasso[j, :], lw=1.6, label=f"w{j}")
25
  ax.set_xscale('log'); ax.invert_xaxis()
26
  ax.set_xlabel('alpha (log)'); ax.set_ylabel('coefficient')
27
  ax.set_title('Lasso coefficient paths')
  handles, labels = ax.get_legend_handles_labels()
  ax.legend(handles[:6], labels[:6], loc='best', fontsize=8)
31
  fig_dir = os.path.join(
32
      "O_Machine Learning", "O_Supervised Learning", "1_Regularization
33
         Methods in Regression", "figures")
  os.makedirs(fig_dir, exist_ok=True)
  plt.tight_layout(); plt.savefig(os.path.join(fig_dir, 'lasso_path.png')
      , dpi=160)
36
  # 岭回归路径: 不同 alpha 的系数
37
  alphas_ridge = np.logspace(-3, 2, 40)
38
  coefs_ridge = []
  for a in alphas_ridge:
40
      model = Ridge(alpha=a, fit_intercept=False)
41
      model.fit(X, y)
42
      coefs_ridge.append(model.coef_)
43
  coefs_ridge = np.array(coefs_ridge)
44
45
 fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 4.5))
```

5 运行效果 4

```
for j in range(d):
      ax.plot(alphas_ridge, coefs_ridge[:, j], lw=1.6, label=f"w{j}")
48
  ax.set_xscale('log'); ax.invert_xaxis()
49
  ax.set_xlabel('alpha (log)'); ax.set_ylabel('coefficient')
50
  ax.set_title('Ridge coefficient paths')
51
  handles, labels = ax.get_legend_handles_labels()
  ax.legend(handles[:6], labels[:6], loc='best', fontsize=8)
53
54
  plt.tight_layout(); plt.savefig(os.path.join(fig_dir, 'ridge_path.png')
55
      , dpi=160)
  print('saved to', os.path.join(fig_dir, 'lasso_path.png'), 'and
     ridge_path.png')
```

5 运行效果

图 ?? 与图 ?? 展示了系数随正则强度变化的路径: Lasso 产生稀疏; 岭回归连续收缩但不为零。

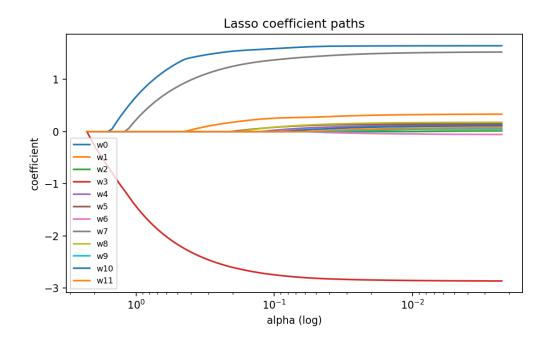


图 1: Lasso 系数路径(合成数据)

6 小结 5

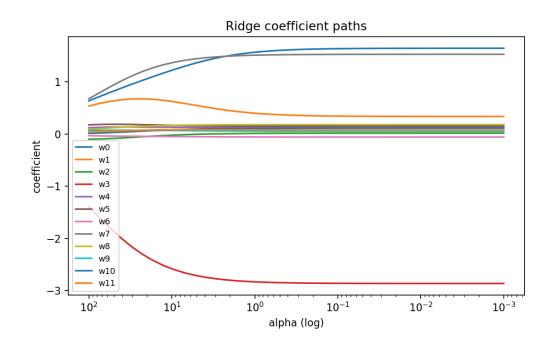


图 2: 岭回归系数路径(合成数据)

6 小结

正则化通过收缩系数来控制方差并提升泛化:多重共线性偏好岭回归,追求稀疏与可解释性使用 Lasso,强相关特征时考虑 Elastic Net。务必进行标准化,并通过交叉验证选择超参数。