深入理解L1、L2正则化

阅读目录

过节福利，我们来深入理解下L1与L2正则化。

回到顶部

1 正则化的概念

- **正则化(Regularization)** 是机器学习中对原始损失函数引入额外信息，以便防止过拟合和提高模型泛化性能的一类方法的统称。也就是目标函数变成了**原始损失函数+额外项**，常用的额外项一般有两种，英文称作$\ell 1-norm$和$\ell 2-norm$，中文称作**L1正则化**和**L2正则化**，或者L1范数和L2范数（实际是L2范数的平方）。
- L1正则化和L2正则化可以看做是**损失函数的惩罚项**。所谓**惩罚**是指对损失函数中的**某些参数做一些限制**。对于线性回归模型，**使用L1正则化的模型叫做Lasso回归，使用L2正则化的模型叫做Ridge回归（岭回归）**。
- 线性回归L1正则化损失函数：

$$\min_w [\sum_{i=1}^{N}(w^T x_i - y_i)^2 + \lambda \|w\|_1] \ldots\ldots\ldots (1)$$

- 线性回归L2正则化损失函数：

$$\min_w [\sum_{i=1}^{N}(w^T x_i - y_i)^2 + \lambda \|w\|_2^2] \ldots\ldots\ldots (2)$$

- **公式(1)(2)中w表示特征的系数（x的参数）**，可以看到正则化项是对系数做了限制。L1正则化和L2正则化的说明如下：
  - L1正则化是指权值向量w中各个元素的绝对值之和，通常表示为$\|w\|_1$。

- L2正则化是指权值向量w中各个元素的平方和然后再求平方根（可以看到Ridge回归的L2正则化项有平方符号），通常表示为$\|w\|_2^2$。
- 一般都会在正则化项之前添加一个系数λ。Python中用α表示，这个系数需要用户指定（也就是我们要调的超参）。

回到顶部

2 正则化的作用

- L1正则化可以使得参数稀疏化，即得到的参数是一个稀疏矩阵，可以用于特征选择。
  - **稀疏性**，说白了就是模型的很多参数是0。通常机器学习中特征数量很多，例如文本处理时，如果将一个词组（term）作为一个特征，那么特征数量会达到上万个（bigram）。在预测或分类时，那么多特征显然难以选择，但是如果代入这些特征得到的模型是一个稀疏模型，很多参数是0，表示只有少数特征对这个模型有贡献，绝大部分特征是没有贡献的，即使去掉对模型也没有什么影响，此时我们就可以只关注系数是非零值的特征。这相当于对模型进行了一次特征选择，只留下一些比较重要的特征，提高模型的泛化能力，降低过拟合的可能。
- L2正则化可以防止模型过拟合（overfitting）；一定程度上，L1也可以防止过拟合。

回到顶部

3 L1正则化与稀疏性

- 事实上,**"带正则项"和"带约束条件"是等价的**。
- 为了约束w的可能取值空间从而防止过拟合，我们为该最优化问题加上一个约束，就是w的L1范数不能大于m：

$$\begin{cases} \min \sum_{i=1}^{N}(w^T x_i - y_i)^2 \\ s.t. \ \|w\|_1 \leqslant m. \end{cases} \quad \ldots\ldots\ldots (3)$$

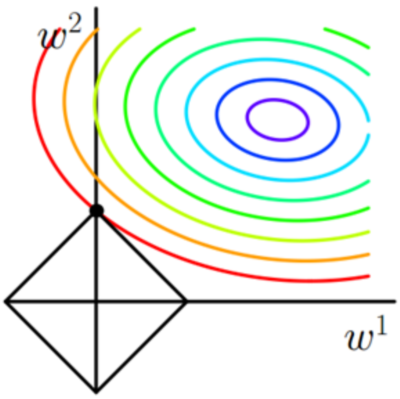
- 问题转化成了**带约束条件的凸优化问题**，写出拉格朗日函数:

$$\sum_{i=1}^{N}(w^T x_i - y_i)^2 + \lambda(\|w\|_1 - m)\ldots\ldots\ldots(4)$$

- 设W_*和λ_*是原问题的最优解，则根据KKT条件得：

$$\begin{cases} 0 = \nabla_w[\sum_{i=1}^{N}(W_*^T x_i - y_i)^2 + \lambda_*(\|w\|_1 - m)] \\ 0 \leqslant \lambda_*. \end{cases} \quad \ldots\ldots\ldots (5)$$

- **仔细看上面第一个式子，与公式(1)其实是等价的，等价于(3)式**。
- 设L1正则化损失函数：$J = J_0 + \lambda \sum_w |w|$，其中$J_0 = \sum_{i=1}^{N}(w^T x_i - y_i)^2$是**原始损失函数**，加号后面的一项是L1正则化项，λ是**正则化系数**。
- 注意到L1正则化是权值的绝对值之和，J是带有绝对值符号的函数，因此J是不完全可微的。机器学习的任务就是要通过一些方法（比如梯度下降）求出损失函数的最小值。当我们在原始损失函数J_0后添加L1正则化项时，相当于对J_0做了一个约束。令$L = \lambda \sum_w |w|$，则$J = J_0 + L$，此时我们的任务变成在L约束下求出J_0取最小值的解。
- 考虑二维的情况，即只有两个权值w_1和w_2，此时$L = |w_1| + |w_2|$对于梯度下降法，求解J_0的过程可以画出等值线，同时L1正则化的函数L也可以在w_1、w_2的二维平面上画出来。如下图：

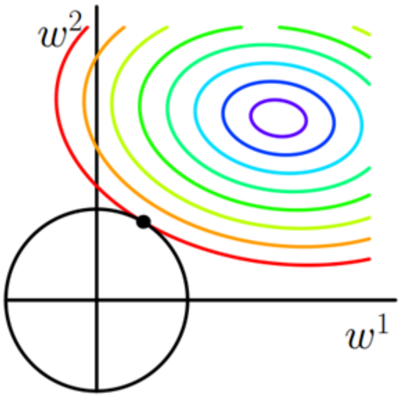


- 上图中等值线是J_0的等值线，黑色方形是L函数的图形。在图中，当J_0等值线与L图形首次相交的地方就是最优解。上图中J_0与L在L的一个顶点处相交，这个顶点就是最优解。注意到这个顶点的

值是$(w_1, w_2) = (0, w_2)$。可以直观想象，因为L函数有很多**突出的角**（二维情况下四个，多维情况下更多），J_0与这些角接触的机率会远大于与L其它部位接触的机率，而在这些角上，会有很多权值等于0，这就是为什么L1正则化可以产生稀疏模型，进而可以用于特征选择。

- 而正则化前面的系数λ，可以控制L图形的大小。λ越小，L的图形越大（上图中的黑色方框）；λ越大，L的图形就越小，可以小到黑色方框只超出原点范围一点点，这是最优点的值$(w_1, w_2) = (0, w_2)$中的w_2可以取到很小的值。

- 同理，又L2正则化损失函数：$J = J_0 + \lambda \sum_w w^2$,同样可画出其在二维平面的图像，如下：



- 二维平面下L2正则化的函数图形是个圆，与方形相比，被磨去了棱角。因此J_0与L相交时使得w_1或w_2等于零的机率小了许多，这就是为什么L2正则化不具有稀疏性的原因。

回到顶部

4 L2正则化为什么能防止过拟合

- **拟合过程中通常都倾向于让权值尽可能小**，最后构造一个所有参数都比较小的模型。因为一般认为参数值小的模型比较简单，能适应不同的数据集，也在一定程度上避免了过拟合现象。**可以设想一下对于一个线性回归方程，若参数很大，那么只要数据偏移一点点，就会对结果造成很大的影响；但如果参数足够小，数据偏移得多一点也不会对结果造成什么影响**，专业一点的说法是**抗扰动能力强**。

- 为什么L2正则化可以获得值很小的参数？

- (1) 以线性回归中的梯度下降法为例。假设要求的参数为θ，$h\theta(x)$是我们的假设函数，那么线性回归的代价函数如下：

$$J_\theta = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (h\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \ldots\ldots..(6)$$

- (2)在梯度下降中θ的迭代公式为：

$$\theta_j = \theta_j - \alpha \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (h\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} \ldots\ldots..(7)$$

- (3) 其中α是learning rate。 上式是没有添加L2正则化项的迭代公式，如果在原始代价函数之后添加L2正则化，则迭代公式为：

$$\theta_j = \theta_j (1 - \alpha \frac{\lambda}{n}) - \alpha \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (h\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} \ldots\ldots..(8)$$

- **其中λ就是正则化参数**。从上式可以看到，与未添加L2正则化的迭代公式相比，每一次迭代，θ_j都要先乘以一个小于1的因子，从而使得θ_j不断减小，因此总得来看，θ是不断减小的。
最开始也提到L1正则化一定程度上也可以防止过拟合。之前做了解释，当L1的正则化系数很小时，得到的最优解会很小，可以达到和L2正则化类似的效果。

回到顶部

5 正则化项的参数选择

- **L1、L2的参数λ如何选择好**？

- 以L2正则化参数为例：从公式(8)可以看到，λ越大，θ_j衰减得越快。另一个理解可以参考L2求解图， **λ越大，L2圆的半径越小，最后求得代价函数最值时各参数也会变得很小**；当然也不是越大越好，太大容易引起欠拟合。

- **经验**
  从0开始，逐渐增大λ。在训练集上学习到参数，然后在测试集上验证误差。反复进行这个过程，直到测试集上的误差最小。一般的说，随着λ从0开始增大，测试集的误分类率应该是先减小后增大，交叉验证的目的，就是为了找到误分类率最小的那个位置。建议一开始将正则项系数λ设置为0，先确定一个比较好的learning rate。然后固定该learning rate，给λ一个值（比如1.0），然后根据validation accuracy，将λ增大或者减小10倍，增减10倍是粗调节，当你确定了λ的合适的数量级后，比如$\lambda = 0.01$，再进一步地细调节，比如调节为0.02，0.03，0.009之类。

回到顶部

参考文献

- https://blog.csdn.net/jinping_shi/article/details/52433975
- 《百面机器学习》

分类: 机器学习

标签: 正则化，L1，L2，稀疏矩阵，过拟合，机器学习，特征选择

« 上一篇： 梯度下降法原理与python实现
» 下一篇： 过拟合及其对策