L1正则化与L2正则化



30 人赞了该文章

在腾讯互娱的两面,和百度的一面中,都问到了这个问题:

讲讲正则化为什么能降低过拟合程度,并且说明下下L1正则化和L2正则化。

(要想看答案请直接看文章结尾)

L1和L2正则化:

我们所说的正则化,就是在原来的loss function的基础上,加上了一些正则化项或者称为惩罚项。 现在我们还是以最熟悉的线性回归为例子。

优化目标:

min
$$1/N*\sum_{i=1}^N (y_i-\omega^Tx_i)^2$$
 式子(1)

加上L1正则项(lasso回归):

min
$$1/N * \sum_{i=1}^{N} (y_i - \omega^T x_i)^2 + C||\omega||_1$$
 式子 (2)

加上L2正则项(岭回归):

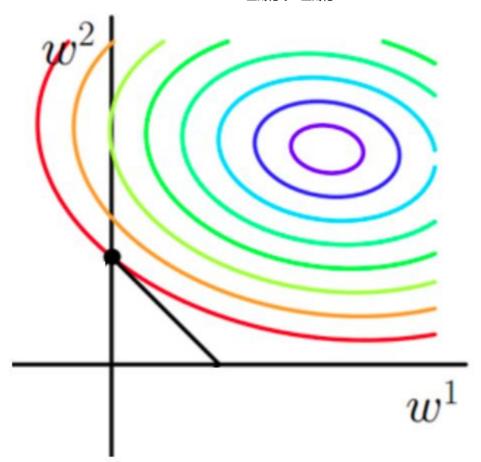
结构风险最小化角度:

结构风险最小化: 在经验风险最小化的基础上(也就是训练误差最小化),尽可能采用简单的模型,以此提高泛化预测精度。

那现在我们就看看加了L1正则化和L2正则化之后,目标函数求解的时候,最终解有什么变化。

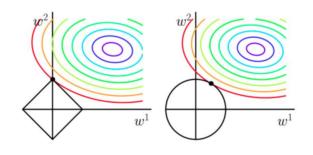
图像解释(假设X为一个二维样本,那么要求解参数 ω 也是二维):

• 原函数曲线等高线(同颜色曲线上,每一组 ω_1 , ω_2 带入值都相同)



目标函数等高线

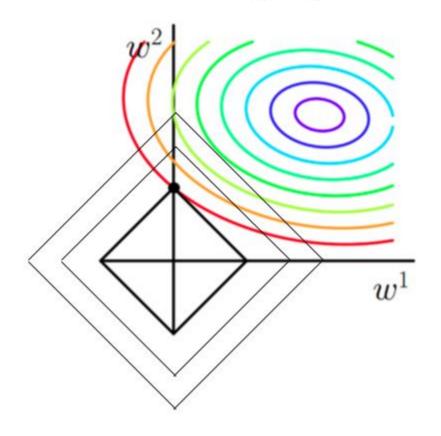
• L1和L2加入后的函数图像:



加入L1和L2正则的等高线

从上边两幅图中我们可以看出:

- 如果不加L1和L2正则化的时候,对于线性回归这种目标函数凸函数的话,我们最终的结果就是最里边的紫色的小圈圈等高线上的点。
- 当加入L1正则化的时候,我们先画出 $|\omega_1| + |\omega_2| = F$ 的图像,也就是一个菱形,代表这些曲线上的点算出来的 1范数 $|\omega_1| + |\omega_2|$ 都为F。那我们现在的目标是不仅是原曲线算得值要小(越来越接近中心的紫色圈圈),还要使得这个菱形越小越好(F越小越好)。那么还和原来一样的话,过中心紫色圈圈的那个菱形明显很大,因此我们要取到一个恰好的值。那么如何求值呢?



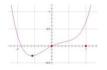
带L1正则化的目标函数求解

- 1. 以同一条原曲线目标等高线来说,现在以最外圈的红色等高线为例,我们看到,对于红色曲线上的每个点都可以做一个菱形,根据上图可知,当这个菱形与某条等高线相切(仅有一个交点)的时候,这个菱形最小,上图相割对比较大的两个菱形对应的1范数更大。用公式说这个时候能使得在相同的 $1/N*\sum_{i=1}^{N}(y_i-\omega^Tx_i)^2$ 下,由于相切的时候的 $C||\omega||_1$ 小,即 $|\omega_1|+|\omega_2|$ 小,所以:能够使得 $1/N*\sum_{i=1}^{N}(y_i-\omega^Tx_i)^2+C||\omega||_1$ 更小。
- 2. 有了1.的说明,我们可以看出,最终加入L1范数得到的解,一定是某个 菱形和某条原函数等高线的切点。现在有个比较重要的结论来了,我们 经过观察可以看到,几乎对于很多原函数等高曲线,和某个菱形相交的 时候及其容易相交在坐标轴(比如上图),也就是说最终的结果,解的 某些维度及其容易是0,比如上图最终解是 $\omega = (0, x)$,这也就 是我们所说的L1更容易得到稀疏解(解向量中0比较多)的原因。
- 3. 当然了, 光看着图说, L1的菱形更容易和等高线相交在坐标轴, 一点都没

说服力,只是个感性的认识,不过不要紧,其实是很严谨的,我们直接用求导来证明,具体的证明这里有一个很好的答案了,简而言之就是假设现在我们是一维的情况下 $h(\omega)=f(\omega)+C|\omega|$,其中 $h(\omega)$ 是目标函数, $f(\omega)$ 是没加L1正则化项前的目标函数, $C|\omega|$ 是L1正则项,那么要使得0点成为最值可能的点,虽然在0点不可导,但是我们只需要让0点左右的导数异号,即 $h_{\pm}'(0)*h_{\pm}'(0)=(f'(0)+C)(f'(0)-C)<0$ 即可也就是 C>|f'(0)| 的情况下,0点都是可能的最值点。

I1 相比于 I2 为什么容易获得稀疏解?

@www.zhihu.com



当加入L2正则化的时候,分析和L1正则化是类似的,也就是说我们仅仅是从菱形变成了圆形而已,同样还是求原曲线和圆形的切点作为最终解。当然与L1范数比,我们这样求的L2范数的从图上来看,不容易交在坐标轴上,但是仍然比较靠近坐标轴。因此这也就是我们老说的,L2范数能让解比较小(靠近0),但是比较平滑(不等于0)。

综上所述,我们可以看见,加入正则化项,在最小化经验误差的情况下,可以让我们选择解更简单 (趋向于0)的解。

结构风险最小化: 在经验风险最小化的基础上(也就是训练误差最小化),尽可能采用简单的模型,以此提高泛化预测精度。

因此,加正则化项就是结构风险最小化的一种实现。

贝叶斯先验概率的角度:

现在再从贝叶斯学派的观点来看看正则化,即是我们先假设要求的参数服从某种先验分布,以线性回归为例子,我们之前讲过,用高斯分布的极大似然估计求线性回归。

bingo酱:线性回归求解的两种表示 (最小化均方误差和基于高斯分布…

@ zhuanlan.zhihu.com

1. 在我们求解的时候,我们假设Y|X; ω 服从 $N(\omega^T X, \sigma)$ 的正太分布 ,即概率密度函数 $p(Y|X;\omega) = N(\omega^T X, \sigma)$,然后利用极大似然估计求解参数 ω :

max
$$log \prod_{i=1}^m p(y_i|x_i;\omega)$$
 式子 (4)



或者表示成常用的求极小值:

min
$$-log \prod_{i=1}^m p(y_i|x_i;\omega)$$
 式子 (5)

2. 在贝叶斯学派的观点看来,如果我们先假设参数 ω 服从一种先验分布 $P(\omega)$,那么根据贝叶斯公式 $P(\omega|(X,Y)) \sim P(Y|X;\omega) * P(\omega)$,那我们利用极大似然估计求参数 ω 的时候,现在我们的极大似然函数就变成了:

max
$$log \prod_{i=1}^{m} p(y_i|x_i;\omega) * p(\omega) = log \prod_{i=1}^{m} p(y_i|x_i;\omega) + log \prod_{i=1}^{m} p(\omega)$$
 $\vec{\exists} \vec{\vdash}$ (6)

表示成求极小的情况就是:

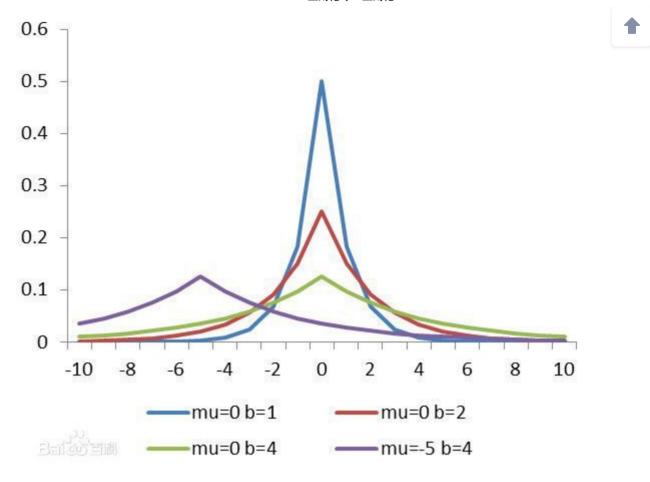
min
$$log \prod_{i=1}^{m} p(y_i|x_i;\omega) * p(\omega) = -log \prod_{i=1}^{m} p(y_i|x_i;\omega) - log \prod_{i=1}^{m} p(\omega)$$
 \exists (7)

对比式子(5)和式子(7),我们看到,式子(7)比式子(5)多了最后的一个求和项。

L1范数:

假设我们让 ω 服从的分布为标准拉普拉斯分布,即概率密度函数为 1/2*exp(-|x|) ,那么式子(7)多出的项就变成了 $C||\omega||_1$,其中C为常数了,重写式子(7):

熟悉吧,这不就是加了L1范数的优化目标函数么。假设 ω 服从拉普拉斯分布的话,从下图可以看出 ω 的值取到0的概率特别大。也就是说我们提前先假设了 ω 的解更容易取到0。



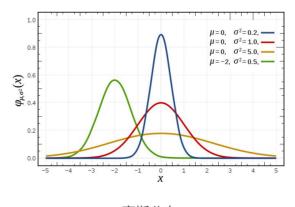
拉普拉斯分布

L2范数:

假设我们让 ω 服从的分布为标准正太分布,即概率密度为 $1/\sqrt{2\pi}*exp(-(x)^2/2)$,那么式子 (7) 多出的项就成了 $C||\omega||_2^2$,其中C为常数,重写式子(7):

min
$$log \prod_{i=1}^m p(y_i|x_i;\omega) * p(\omega) = -log \prod_{i=1}^m p(y_i|x_i;\omega) + C||\omega|_2^2$$
 $\overrightarrow{\mathbb{R}}$ (9)

熟悉吧,这不就是加了L2范数的优化目标函数么。假设 ω 服从标准正太分布的话,根据图我们可以看出,其实我们就是预先假设了 ω 的最终值可能取到0附近的概率特别大。



高斯分布

因此最后来回答问题:

降低过拟合程度:



正则化之所以能够降低过拟合的原因在于,正则化是结构风险最小化的一种策略实现。

给loss function加上正则化项,能使得新得到的优化目标函数h = f+normal,需要在f和normal 中做一个权衡(trade-off),如果还像原来只优化f的情况下,那可能得到一组解比较复杂,使得正则项normal比较大,那么h就不是最优的,因此可以看出加正则项能让解更加简单,符合奥卡姆剃刀理论,同时也比较符合在偏差和方差(方差表示模型的复杂度)分析中,通过降低模型复杂度,得到更小的泛化误差,降低过拟合程度。

L1正则化和L2正则化:

L1正则化就是在loss function后边所加正则项为L1范数,加上L1范数容易得到稀疏解(0比较多)。L2正则化就是loss function后边所加正则项为L2范数,加上L2范数相比于L1范数来说,得到的解比较平滑(不是稀疏),但是同样能够保证解中接近于0(但不是等于0,所以相对平滑)的维度比较多,降低模型的复杂度。