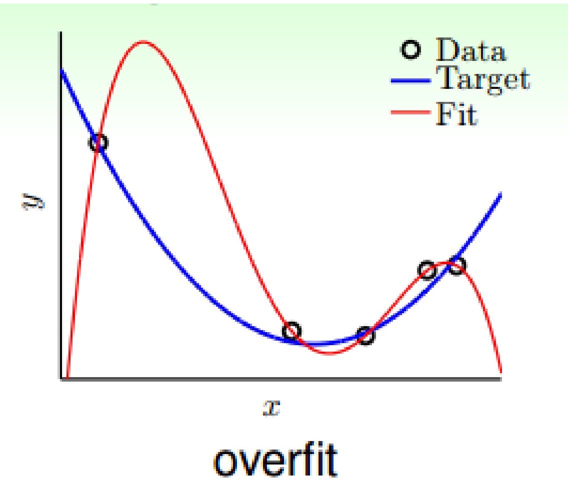
台湾大学林轩田机器学习基石课程学习笔记14 -- Regularization

> 作者：红色石头
> 微信公众号：AI有道（ID：redstonewill）

上节课我们介绍了过拟合发生的原因：excessive power, stochastic/deterministic noise 和limited data。并介绍了解决overfitting的简单方法。本节课，我们将介绍解决overfitting的另一种非常重要的方法：Regularization规则化。

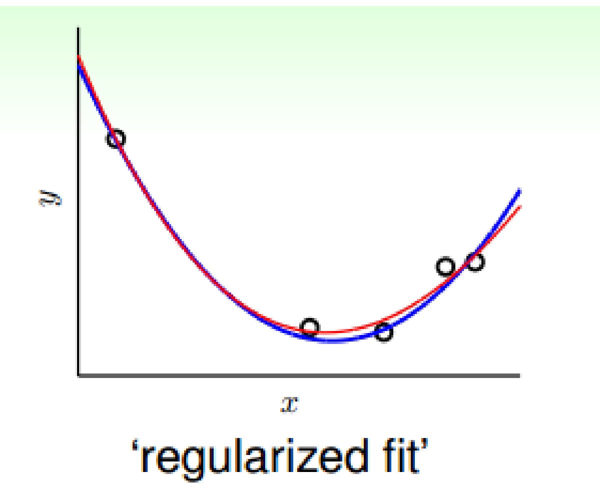
一、Regularized Hypothesis Set

先来看一个典型的overfitting的例子：

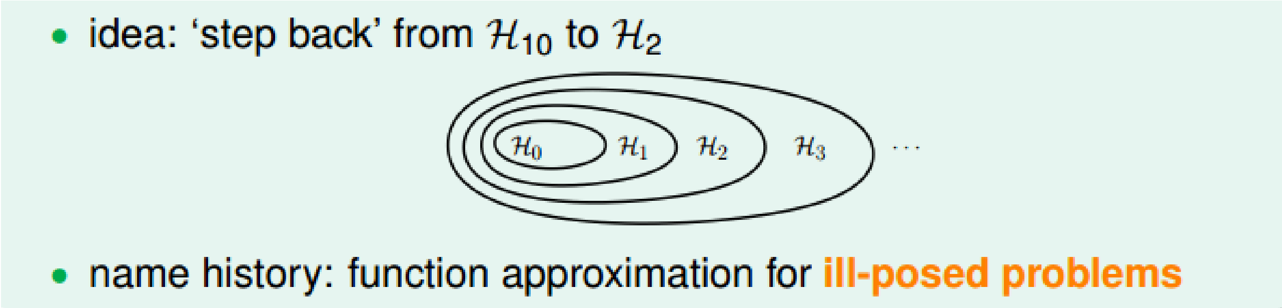


如图所示，在数据量不够大的情况下，如果我们使用一个高阶多项式（图中红色曲线所示），例如10阶，对目标函数（蓝色曲线）进行拟合。拟合曲线波动很大，虽然E_{in}很小，但是E_{out}很大，也就造成了过拟合现象。

那么如何对过拟合现象进行修正，使hypothesis更接近于target function呢？一种方法就是regularized fit。



这种方法得到的红色fit曲线，要比overfit的红色曲线平滑很多，更接近与目标函数，它的阶数要更低一些。那么问题就变成了我们要把高阶（10阶）的hypothesis sets转换为低阶（2阶）的hypothesis sets。通过下图我们发现，不同阶数的hypothesis存在如下包含关系：



我们发现10阶多项式hypothesis sets里包含了2阶多项式hypothesis sets的所有项，那么在H_{10}中加入一些限定条件，使它近似为H_2即可。这种函数近似曾被称之为不适定问题（ill-posed problem）。

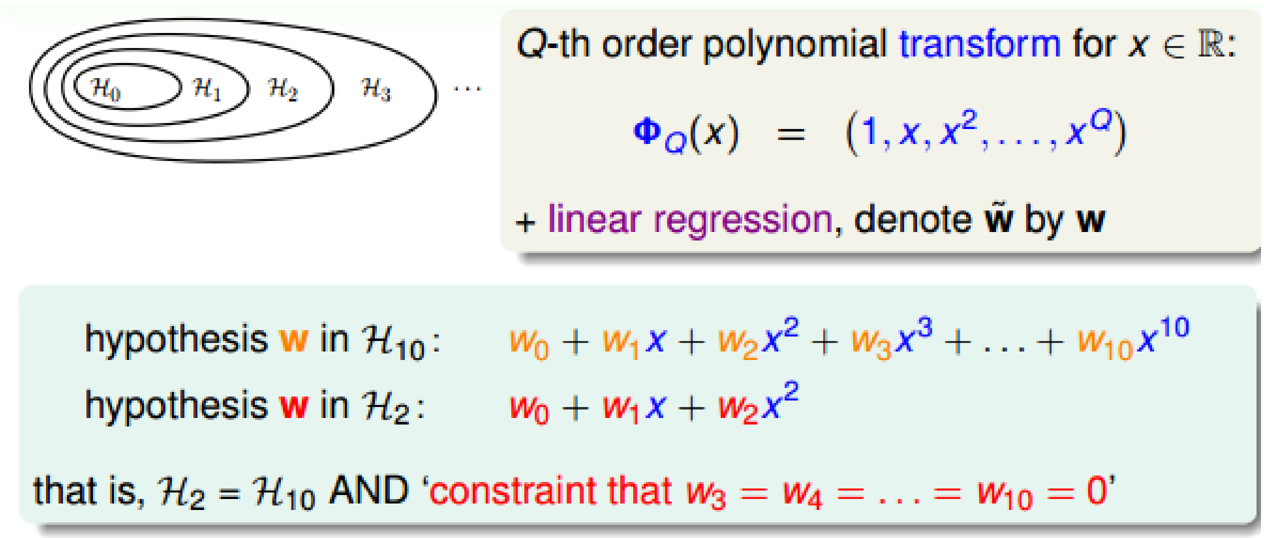
如何从10阶转换为2阶呢？首先，H_{10}可表示为：

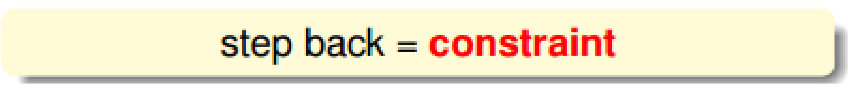
$$H_{10}=w_0+w_1x+w_2x^2+w_3x^3+\cdots+w_{10}x^{10}$$

而H_2可表示为：

$$H_2=w_0+w_1x+w_2x^2$$

所以，如果限定条件是$w_3=w_4=\cdots=w_{10}=0$，那么就有$H_2=H_{10}$。也就是说，对于高阶的hypothesis，为了防止过拟合，我们可以将其高阶部分的权重w限制为0，这样，就相当于从高阶的形式转换为低阶，fit波形更加平滑，不容易发生过拟合。





那有一个问题，令H_{10}高阶权重w为0，为什么不直接使用H_2呢？这样做的目的是拓展我们的视野，为即将讨论的问题做准备。刚刚我们讨论的限制是H_{10}高阶部分的权

重w限制为0，这是比较苛刻的一种限制。下面，我们把这个限制条件变得更宽松一点，即令任意8个权重w为0，并不非要限定$w_3 = w_4 = \cdots = w_{10} = 0$，这个Looser Constraint可以写成：

$$\sum_{q=0}^{10} (w_q \neq 0) \leq 3$$

也就只是限定了w不为0的个数，并不限定必须是高阶的w。这种hypothesis记为H_2'，称为sparse hypothesis set，它与H_2和H_{10}的关系为：

$$H_2 \subset H_2' \subset H_{10}$$

- more flexible than $\mathcal{H}_2$: $\mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}_2'$
- less risky than $\mathcal{H}_{10}$: $\mathcal{H}_2' \subset \mathcal{H}_{10}$

Looser Constraint对应的hypothesis应该更好解一些，但事实是sparse hypothesis set H_2'被证明也是NP-hard，求解非常困难。所以，还要转换为另一种易于求解的限定条件。

那么，我们寻找一种更容易求解的宽松的限定条件Softer Constraint，即：

$$\sum_{q=0}^{10} w_q^2 = ||w||^2 \leq C$$

其中，C是常数，也就是说，所有的权重w的平方和的大小不超过C，我们把这种hypothesis sets记为$H(C)$。

H_2'与$H(C)$的关系是，它们之间有重叠，有交集的部分，但是没有完全包含的关系，也不一定相等。对应$H(C)$，C值越大，限定的范围越大，即越宽松：

$$H(0) \subset H(1.126) \subset \cdots \subset H(1126) \subset \cdots \subset H(\infty) = H_{10}$$

当C无限大的时候，即限定条件非常宽松，相当于没有加上任何限制，就与H_{10}没有什么两样。$H(C)$称为regularized hypothesis set，这种形式的限定条件是可以进行求解的，我们把求解的满足限定条件的权重w记为w_{REG}。接下来就要探讨如何求解w_{REG}。

二、Weight Decay Regularization

现在，针对H(c)，即加上限定条件，我们的问题变成：

$$\min_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^{Q+1}} \quad E_{\text{in}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N}\underbrace{\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{w}^T\mathbf{z}_n - y_n)^2}_{(\mathrm{Z}\mathbf{w}-\mathbf{y})^T(\mathrm{Z}\mathbf{w}-\mathbf{y})}$$

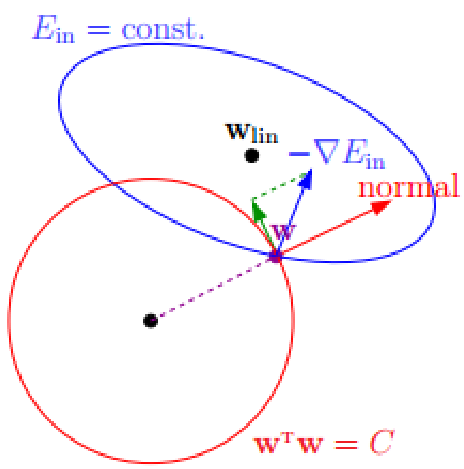
$$\text{s.t.} \quad \underbrace{\sum_{q=0}^{Q} w_q^2}_{\mathbf{w}^T\mathbf{w}} \le C$$

我们的目的是计算$E_{in}(w)$的最小值，限定条件是$||w^2|| \le C$。这个限定条件从几何角度上的意思是，权重w被限定在半径为$\sqrt{C}$的圆内，而球外的w都不符合要求，即便它是靠近$E_{in}(w)$梯度为零的w。

$$\min_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^{Q+1}} \quad E_{\text{in}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N}(\mathrm{Z}\mathbf{w}-\mathbf{y})^T(\mathrm{Z}\mathbf{w}-\mathbf{y}) \text{ s.t. } \mathbf{w}^T\mathbf{w} \le C$$

下面用一张图来解释在限定条件下，最小化$E_{in}(w)$的过程：

- decreasing direction: $-\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w})$, **remember? :-)**
- normal vector of $\mathbf{w}^T\mathbf{w} = C$: $\mathbf{w}$
- if $-\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w})$ and $\mathbf{w}$ not parallel: can **decrease $E_{\text{in}}(\mathbf{w})$ without violating the constraint**
- at optimal solution $\mathbf{w}_{\text{REG}}$, $-\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}_{\text{REG}}) \propto \boxed{\mathbf{w}_{\text{REG}}}$



如上图所示，假设在空间中的一点w，根据梯度下降算法，w会朝着$-\nabla E_{in}$的方向移动（图中蓝色箭头指示的方向），在没有限定条件的情况下，w最终会取得最小值w_{lin}，即“谷底”的位置。现在，加上限定条件，即w被限定在半径为$\sqrt{C}$的圆内，w距离原点的距离不能超过圆的半径，球如图中红色圆圈所示$w^Tw = C$。那么，这种情况下，w不能到达w_{lin}的位置，最大只能位于圆上，沿着圆的切线方向移动（图中绿色箭头指示的方向）。与绿色向量垂直的向量（图中红色箭头指示的方向）是圆切线的法向量，即w的方向，w不能靠近红色箭头方向移动。那么随着迭代优化过程，只要$-\nabla E_{in}$与w点切线方向不垂直，那么根据向量知识，$-\nabla E_{in}$一定在w点切线方向上有不为零的分量，即w点会继续移动。只有当$-\nabla E_{in}$与绿色切线垂直，即与红色法向量平行的时候，$-\nabla E_{in}$在切线方向上没有不为零的分量了，也就表示这时w达到了最优解的位置。

有了这个平行的概念，我们就得到了获得最优解需要满足的性质：

$$\nabla E_{in}(w_{REG}) + \frac{2\lambda}{N} w_{REG} = 0$$

上面公式中的λ称为Lagrange multiplier，是用来解有条件的最佳化问题常用的数学工具，$\frac{2}{N}$是方便后面公式推导。那么我们的目标就变成了求解满足上面公式的w_{REG}。

之前我们推导过，线性回归的E_{in}的表达式为：

$$E_{in} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n^T w - y_n)^2$$

计算E_{in}梯度，并代入到平行条件中，得到：

$$\frac{2}{N}(Z^T Z w_{REG} - Z^T y) + \frac{2\lambda}{N} w_{REG} = 0$$

这是一个线性方程式，直接得到w_{REG}为：

$$w_{REG} = (Z^T Z + \lambda I)^{-1} Z^T y$$

上式中包含了求逆矩阵的过程，因为$Z^T Z$是半正定矩阵，如果λ大于零，那么$Z^T Z + \lambda I$一定是正定矩阵，即一定可逆。另外提一下，统计学上把这叫做ridge regression，可以看成是linear regression的进阶版。

如果对于更一般的情况，例如逻辑回归问题中，∇E_{in}不是线性的，那么将其代入平行条件中得到的就不是一个线性方程式，w_{REG}不易求解。下面我们从另一个角度来看一下平行等式：

$$\nabla E_{in}(w_{REG}) + \frac{2\lambda}{N} w_{REG} = 0$$

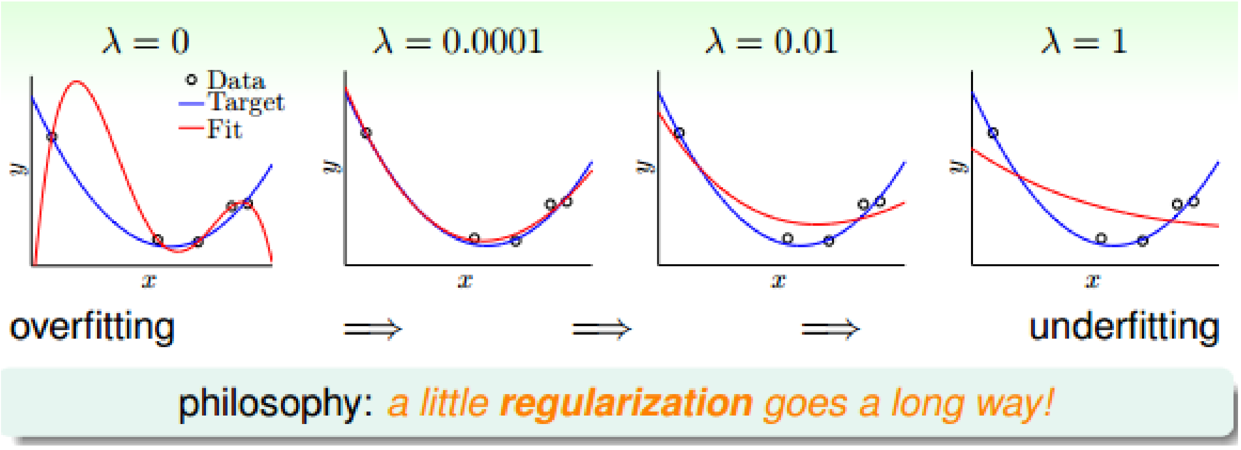
已知∇E_{in}是E_{in}对w_{REG}的导数，而$\frac{2\lambda}{N} w_{REG}$也可以看成是$\frac{\lambda}{N} w_{REG}^2$的导数。那么平行等式左边可以看成一个函数的导数，导数为零，即求该函数的最小值。也就是说，问题转换为最小化该函数：

$$E_{aug}(w) = E_{in}(w) + \frac{\lambda}{N} w^T w$$

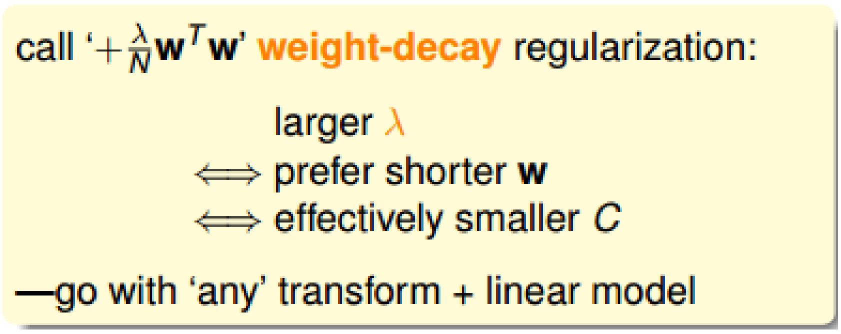
该函数中第二项就是限定条件regularizer，也称为weight-decay regularization。我们把这个函数称为Augmented Error，即$E_{aug}(w)$。

如果λ不为零，对应于加上了限定条件，若λ等于零，则对应于没有任何限定条件，问题转换成之前的最小化$E_{in}(w)$。

下面给出一个曲线拟合的例子，λ取不同的值时，得到的曲线也不相同：



从图中可以看出，当$\lambda = 0$时，发生了过拟合；当$\lambda = 0.0001$时，拟合的效果很好；当$\lambda = 0.01$和$\lambda = 1$时，发生了欠拟合。我们可以把λ看成是一种penality，即对hypothesis复杂度的惩罚，λ越大，w就越小，对应于C值越小，即这种惩罚越大，拟合曲线就会越平滑，高阶项就会削弱，容易发生欠拟合。λ一般取比较小的值就能达到良好的拟合效果，过大过小都有问题，但究竟取什么值，要根据具体训练数据和模型进行分析与调试。



事实上，这种regularization不仅可以用在多项式的hypothesis中，还可以应用在logistic regression等其他hypothesis中，都可以达到防止过拟合的效果。

我们目前讨论的多项式是形如$x, x^2, x^3, \cdots, x^n$的形式，若x的范围限定在[-1,1]之间，那么可能导致x^n相对于低阶的值要小得多，则其对于的w非常大，相当于要给高阶项设置很大的惩罚。为了避免出现这种数据大小差别很大的情况，可以使用Legendre Polynomials代替$x, x^2, x^3, \cdots, x^n$这种形式，Legendre Polynomials各项之间是正交的，用它进行多项式拟合的效果更好。关于Legendre Polynomials的概念这里不详细介绍，有兴趣的童鞋可以看一下维基百科。

三、Regularization and VC Theory

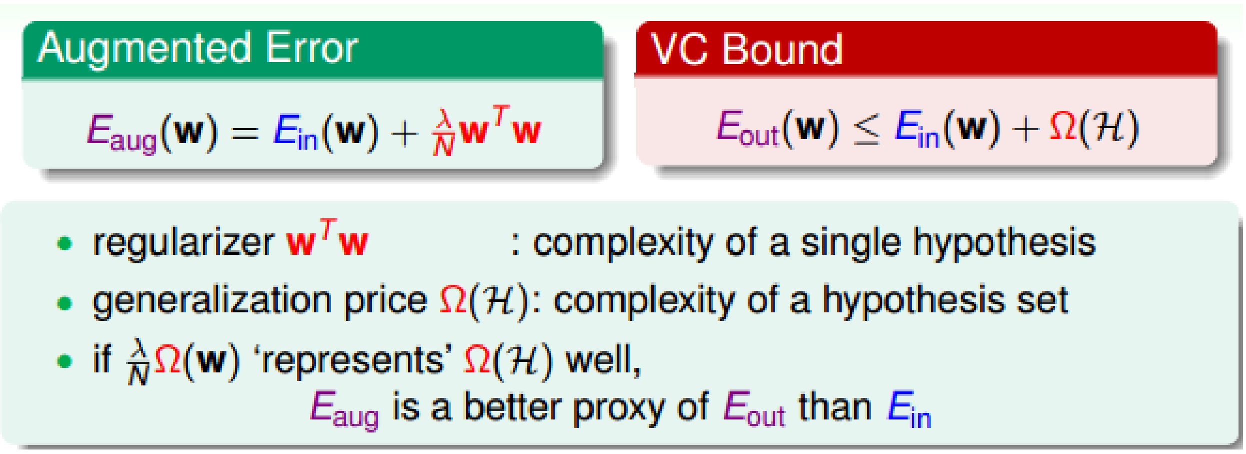
下面我们研究一下Regularization与VC理论之间的关系。Augmented Error表达式如下：

$$E_{aug}(w) = E_{in}(w) + \frac{\lambda}{N} w^T w$$

VC Bound表示为：

$$E_{out}(w) \leq E_{in}(w) + \Omega(H)$$

其中$w^T w$表示的是单个hypothesis的复杂度，记为$\Omega(w)$；而$\Omega(H)$表示整个hypothesis set的复杂度。根据Augmented Error和VC Bound的表达式，$\Omega(w)$包含于$\Omega(H)$之内，所以，$E_{aug}(w)$比E_{in}更接近于E_{out}，即更好地代表E_{out}，$E_{aug}(w)$与E_{out}之间的误差更小。



根据VC Dimension理论，整个hypothesis set的$d_{VC} = \check{d} + 1$，这是因为所有的w都考虑了，没有任何限制条件。而引入限定条件的$d_{VC}(H(C)) = d_{EFF}(H, A)$，即有效的VC dimension。也就是说，$d_{VC}(H)$比较大，因为它代表了整个hypothesis set，但是$d_{EFF}(H, A)$比较小，因为由于regularized的影响，限定了w只取一小部分。其中A表示regularized算法。当$\lambda > 0$时，有：

$$d_{EFF}(H, A) \leq d_{VC}$$

这些与实际情况是相符的，比如对多项式拟合模型，当$\lambda = 0$时，所有的w都给予考虑，相应的d_{VC}很大，容易发生过拟合。当$\lambda > 0$且越来越大时，很多w将被舍弃，$d_{EFF}(H, A)$减小，拟合曲线越来越平滑，容易发生欠拟合。

四、General Regularizers

那么通用的Regularizers，即$\Omega(w)$，应该选择什么样的形式呢？一般地，我们会朝着目标函数的方向进行选取。有三种方式：

- **target-dependent**
- **plausible**
- **friendly**

- target-dependent: some properties of target, if known
  - symmetry regularizer: $\sum [\![q \text{ is odd}]\!]\, w_q^2$
- plausible: direction towards smoother or simpler

  stochastic/deterministic noise both **non-smooth**
  - sparsity (L1) regularizer: $\sum |w_q|$ (next slide)
- friendly: easy to optimize
  - weight-decay (L2) regularizer: $\sum w_q^2$

其实这三种方法跟之前error measure类似，其也有三种方法：

- **user-dependent**
- **plausible**
- **friendly**

regularizer与error measure是机器学习模型设计中的重要步骤。

augmented error = error $\widehat{\text{err}}$ + regularizer Ω
regularizer: target-dependent, plausible, or friendly
ringing a bell? :-)
error measure: user-dependent, plausible, or friendly

接下来，介绍两种Regularizer：L2和L1。L2 Regularizer一般比较通用，其形式如下：

$$\Omega(w)=\sum_{q=0}^{Q} w_q^2=||w||_2^2$$

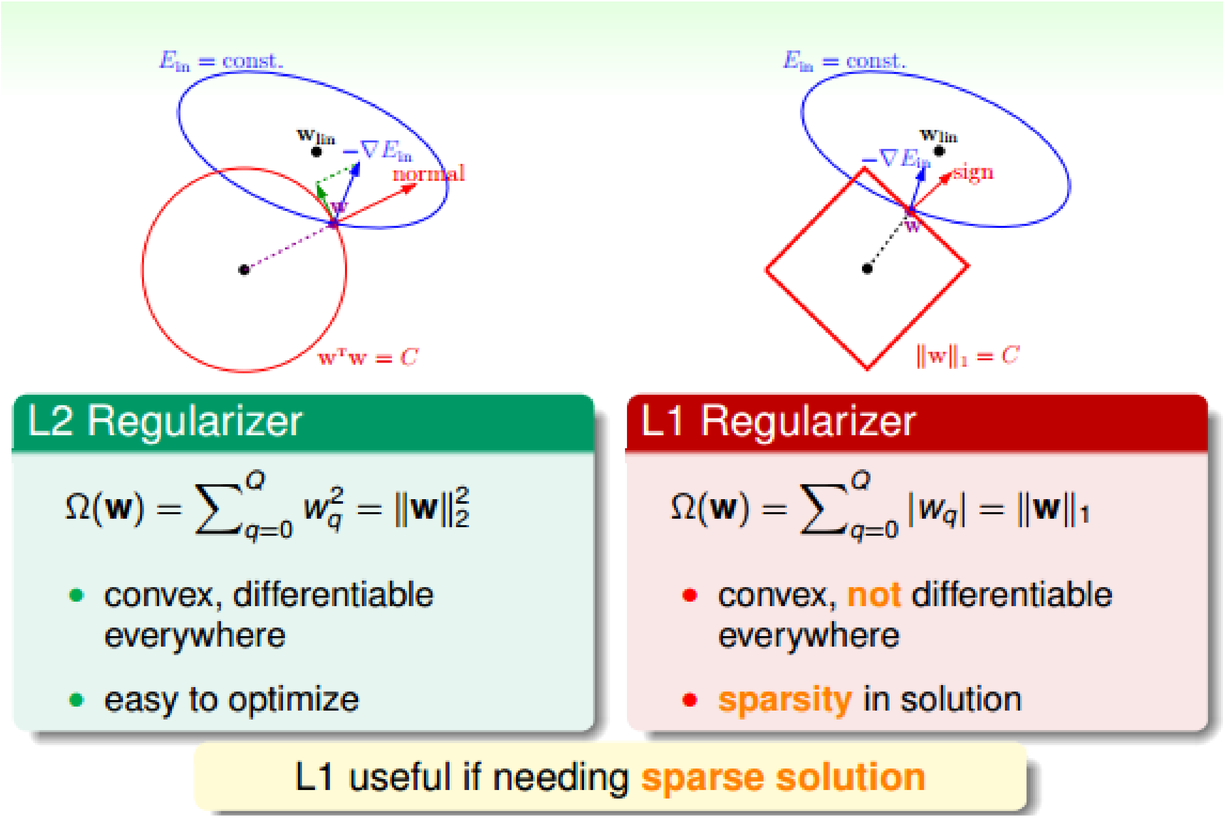
这种形式的regularizer计算的是w的平方和，是凸函数，比较平滑，易于微分，容易进行最优化计算。

L1 Regularizer的表达式如下：

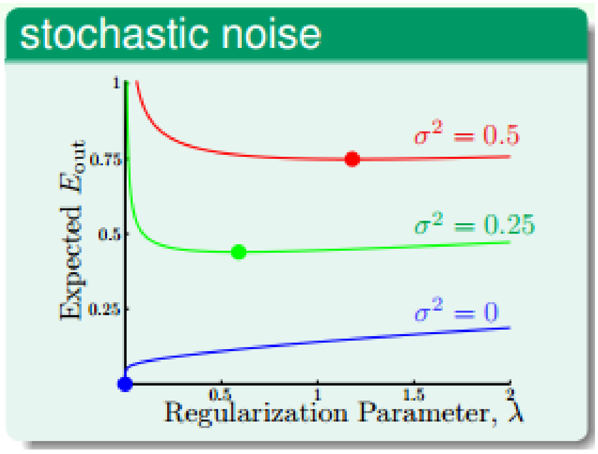
$$\Omega(w)=\sum_{q=0}^{Q} |w_q|=||w||_1$$

L1计算的不是w的平方和，而是绝对值和，即长度和，也是凸函数。已知$w^Tw=C$围成的是圆形，而$||w||_1=C$围成的是正方形，那么在正方形的四个顶点处，是不可微分的（不像圆形，处处可微分）。根据之前介绍的平行等式推导过程，对应这种正方形，它的解大都位于四个顶点处（不太理解，欢迎补充赐教），因为正方形边界处的w绝对值都不为零，若$-\nabla E_{in}$不与其平行，那么w就会向顶点处移动，顶点处的许多w分量为零，所以，L1 Regularizer的解是稀疏的，称为sparsity。优点是计算速度

快。

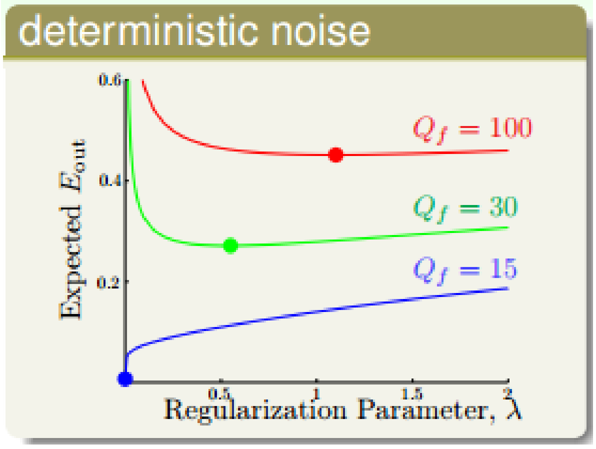


下面来看一下λ如何取值，首先，若stochastic noise不同，那么一般情况下，λ取值有如下特点：



从图中可以看出，stochastic noise越大，λ越大。

另一种情况，不同的deterministic noise，λ取值有如下特点：



从图中可以看出，deterministic noise越大，λ越大。

以上两种noise的情况下，都是noise越大，相应的λ也就越大。这也很好理解，如果在开车的情况下，路况也不好，即noise越多，那么就越会踩刹车，这里踩刹车指的就是regularization。但是大多数情况下，noise是不可知的，这种情况下如何选择λ？这部分内容，我们下节课将会讨论。

五、总结

本节课主要介绍了Regularization。首先，原来的hypothesis set加上一些限制条件，就成了Regularized Hypothesis Set。加上限制条件之后，我们就可以把问题转化为E_{aug}最小化问题，即把w的平方加进去。这种过程，实际上回降低VC Dimension。最后，介绍regularization是通用的机器学习工具，设计方法通常包括target-dependent，plausible，friendly等等。下节课将介绍如何选取合适的λ来建立最佳拟合模型。

注明：

文章中所有的图片均来自台湾大学林轩田《机器学习基石》课程