第十五讲:逼近与回归

凸优化问题的重要应用

杨 林

大 纲

1. 逼近

2. LASSO

大 纲

1. 逼近

2. LASSO

1 逼近

■ 逼近

在凸优化中，逼近是指一系列解决难以处理的优化问题（如：问题非凸，目标函数或约束函数过于复杂）的策略. 其核心思想是： 用一个易于求解的凸优化问题，去近似一个原本难以求解的问题（或者是通过一个容易获得的次优解，代替原问题的最优解）

通常采取改变目标函数或约束集，实现模型简化的效果. 包括四种逼近策略：

- ■ 范数逼近
- ■ 罚函数逼近
- ■ 正则化逼近
- ■ 鲁棒逼近

1.1 范数逼近

$$\text{最小化} \qquad \|Ax - b\|$$

$(A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n)$ Ax可以表示为$Ax = x_1 a_1 + \cdots + x_n a_n$，用$A$的列向量尽可能的逼近或者拟合向量$b$

对最优解 $x = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \|Ax - b\|$ 的解释：

1. **几何**：Ax^* 是 $\mathcal{R}(A)$ 中离 b 最近的点
2. **估计**：线性测量模型

$$y = Ax + v$$

是测量值，x 是未知量，v 是测量误差；给定 $y = b$， x 的最佳猜测是 x^*

3. **最优设计**：x 是设计变量（输入），x^*是能最佳逼近期望结果 b 的设计

1.1 范数逼近

最小二乘逼近 ($\|\cdot\|$): 解满足正规方程

$$A^T A x = A^T b$$

$$\left(x^* = \left(A^T A\right)^{-1} A^T b \text{ ,若 } \operatorname{rank} A = n\right)$$

切比雪夫逼近($\|\quad\|_\infty$): 可以作为线性规划问题求解

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & t \\ \text{约束条件} & -t\mathbf{1} \preceq Ax - b \preceq t\mathbf{1} \end{array}$$

绝对残差和的逼近 ($\|\quad\|_1$): 可以作为线性规划问题求解

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \mathbf{1}^T y \\ \text{约束条件} & -y \preceq Ax - b \preceq y \end{array}$$

1.2 罚函数逼近

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \phi(r_1)+\cdots+\phi(r_m) \\ \text{约束条件} & r=Ax-b \end{array}$$

$A\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $m\geq n$, $\phi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$是一个凸惩罚函数，残差可代表对回归模型的估计误差

- **回归分析:**

线性拟合$f(t)=\alpha+\beta t$

每一组输入数据: $<x_i,y_i>, i=1,\ldots,m$

每一组数据的残差: $r_i=y_i-(\alpha+\beta x_i)$

优化变量: α,β

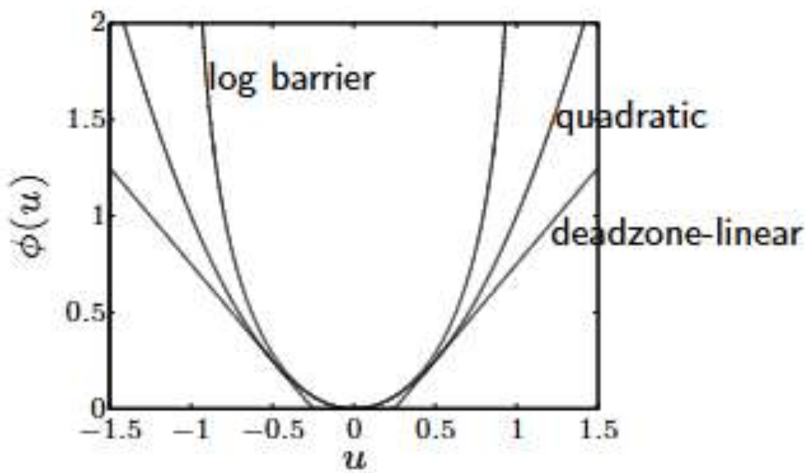
如果线性模型只有α，ϕ是二阶范数的平方，那么优化问题是最小二乘（方差）估计

1.2 罚函数逼近

□ 可以使用不同的罚函数形式：

1. 二次函数： $\phi(u) = u^2$
2. 死区−线性宽度为 a: $\phi(u) = \max\{0, |u| - a\}$
3. 对数障碍限制为 a:

$$\phi(u) = \begin{cases} -a^2 \log(1 - (u/a)^2) & |u| < a \\ \infty & \text{其他情况} \end{cases}$$



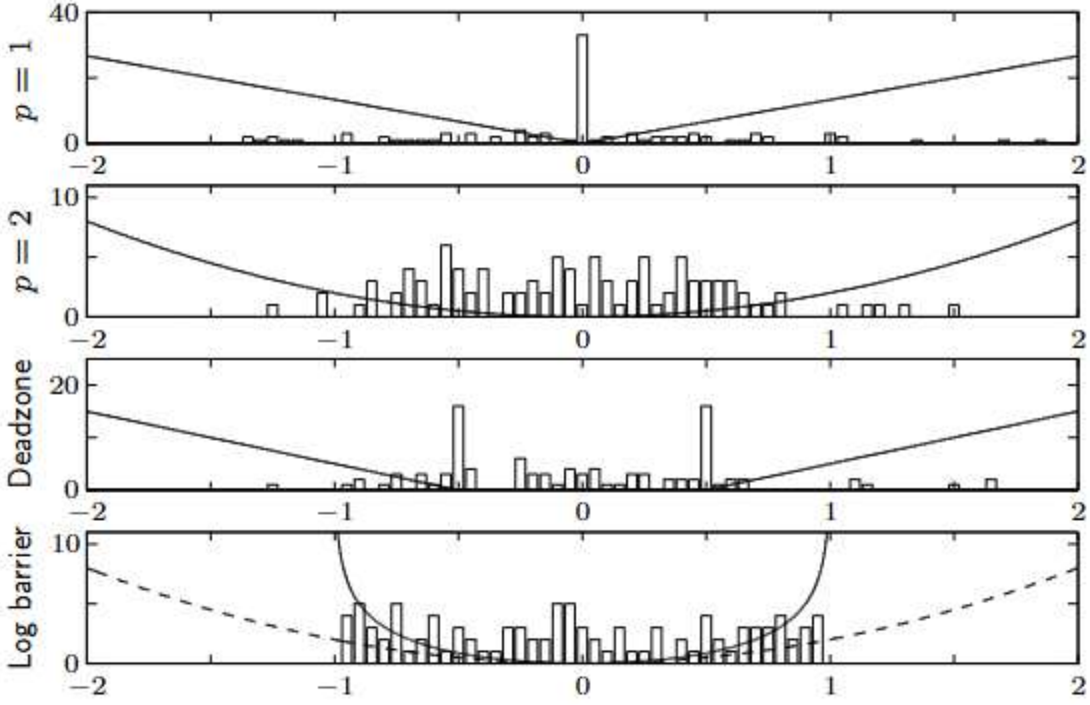
1.2 罚函数逼近

- 例 1: $(m = 100, n = 30)$: 惩罚的残差直方图

$$\phi(u) = |u|, \phi(u) = u^2,$$

$$\phi(u) = \max\{0, |u| - a\}, \phi(u) = -\log\left(1 - u^2\right)$$

罚函数的形状对残差的分布有重大影响

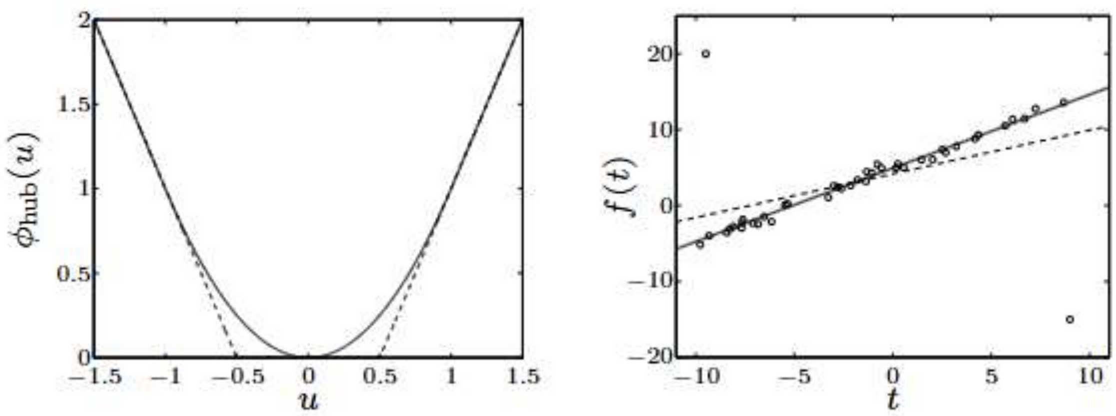


1.2 罚函数逼近

- **Huber 罚函数**(带参数 M)，也叫做鲁棒最小二乘：

$$\phi_{\text{hub}}(u)=\begin{cases}u^2 & |u|\le M\\ M(2|u|-M) & |u|>M\end{cases}$$

线性增长对于较大的 u 使得逼近对离群值不敏感



左侧:$M = 1$ 时的 Huber 惩罚

右侧:通过二次(虚线)和 Huber (实线)惩罚拟合 42 个点 t_i, y_i (圆圈)的仿射函数 $f(t)=\alpha+\beta t$

1.3 正则化逼近

■ 正则化

在凸优化中，正则化是一个修改目标函数的特定技术，其目的是保证问题的良性态或诱导解具有某种期望的性质

通常是在目标函数中添加一个惩罚项$R(x)$，也就是正则化项，是一个凸函数，用来惩罚我们不希望看到的解的性质；$\lambda > 0$ 是正则化参数，用于控制我们对 $R(x)$ 的重视程度

$$\text{最小化}(\mathrm{w.r.t.}\ \mathbb{R}_+^2) \quad (\|Ax-b\|, \|x\|)$$
$$(A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \le n)$$

1.3 正则化逼近

- 解释:找到良好的逼近解 $Ax \approx b$,且 x 的值较小

1. **估计:** 线性测量模型 $y = Ax + v$, 已知 $\| x \|$ 较小
2. **最优设计:** x 较小更经济或更高效,或线性模型 $y = Ax$ 仅在 x 较小的情况下有效
3. **鲁棒逼近:** x 较小的良好逼近解 $Ax \approx b$ 对 A 带来的误差不敏感,而 x 较大的良好逼近解则敏感

1.3 正则化逼近

■ 标量化逼近因子和正则化项

最小化 $\|Ax-b\|+\gamma\|x\|$

对于不同 $\gamma>0$, 求解上述问题可以给出最优权衡曲线

Tikhonov 正则化

最小化 $\|Ax-b\|_2^2+\delta\|x\|_2^2$

可以作为一个最小二乘问题来求解

最小化 $\left\|\begin{bmatrix} A \\ \sqrt{\delta}I \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}\right\|_2^2$

可以得到解析解为 $x^*=\left(A^TA+\delta I\right)^{-1}A^Tb$

1.3 正则化逼近

□ 例 2:最优输入设计

线性时不变系统,其脉冲响应为 h:

$$y(t)=\sum_{\tau=0}^{t} h(\tau)u(t-\tau)\,,t=0,1,\cdots,N$$

输入设计问题:具有 3 个目标的多元目标问题

跟踪误差与期望输出 y_{des} : $J_{\text{track}}=\sum_{t=0}^{N}\big(y(t)-y_{\text{des}}(t)\big)^2$

输入幅度:$J_{\text{mag}}=\sum_{t=0}^{N}u(t)^2$

输入变化:$J_{\text{der}}=\sum_{t=0}^{N-1}\big(u(t+1)-u(t)\big)^2$

使用一个微小且缓慢变化的输入信号来跟踪期望输出

1.3 正则化逼近

□ 例 2:最优输入设计

正则化最小二乘法公式

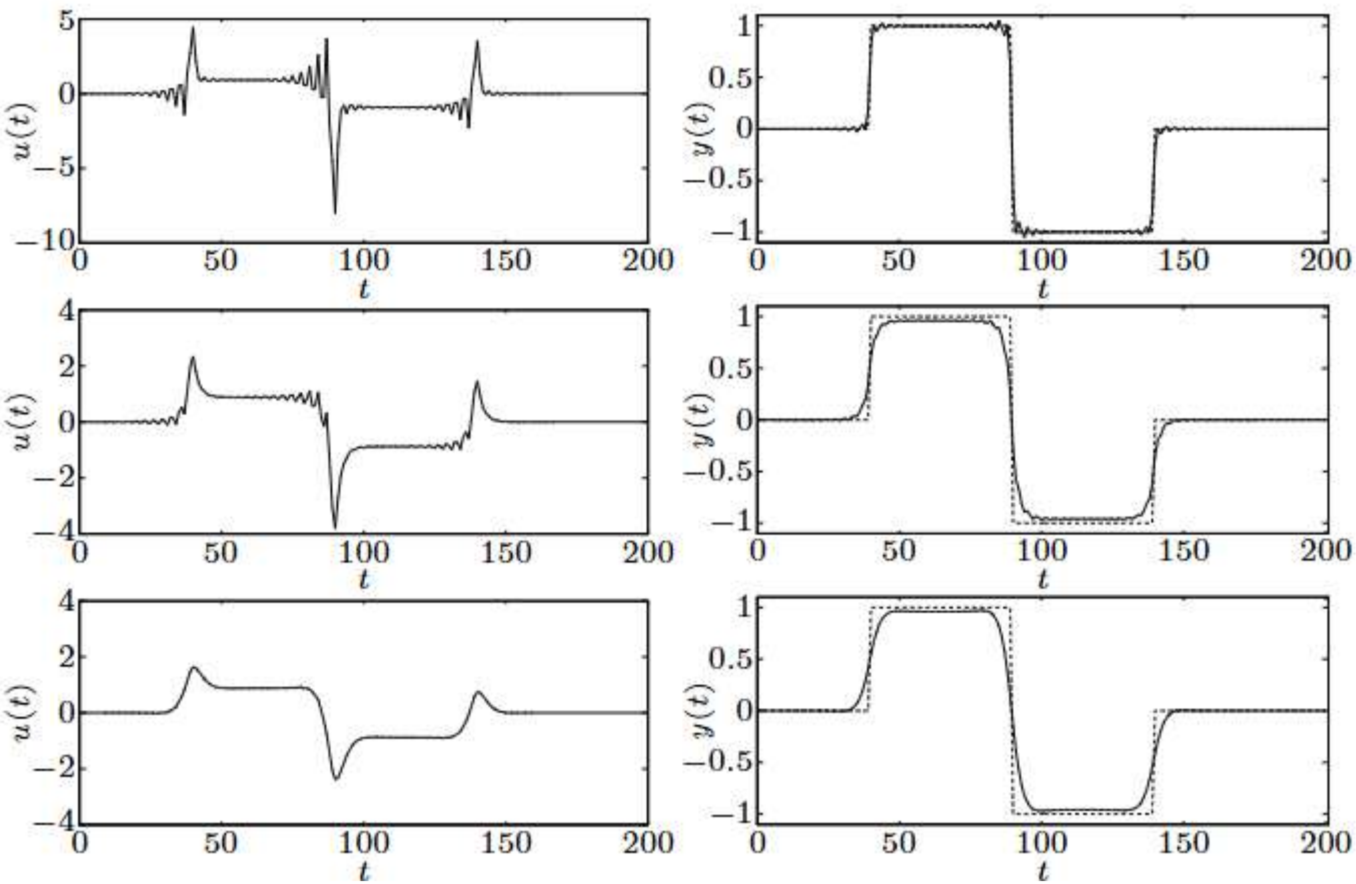
$$\text{最小化} \qquad J_{\text{track}} + \delta J_{\text{der}} + \eta J_{\text{mag}}$$

对于固定的 δ, η, 上述问题也是一个最小二乘问题

1.3 正则化逼近

□ 例 2: 最优输入设计

(顶部) $\delta = 0$, 小 η; (中间) $\delta = 0$, 大 η; (底部) 大 δ, η



1.3 正则化逼近

■ **例 3：信号重建**

$$\text{最小化 (w.r.t.}\ \mathbb{R}_+^2)\quad (\|\hat{x}-x_{\text{cor}}\|, \phi(\hat{x}))$$

$x \in \mathbb{R}^n$ 是未知信号

$x_{\text{cor}} = x + v$ 是(已知)被损坏的 x 版本，带有加性噪声

变量 $\hat{x}$ （重建信号）是 x 的估计

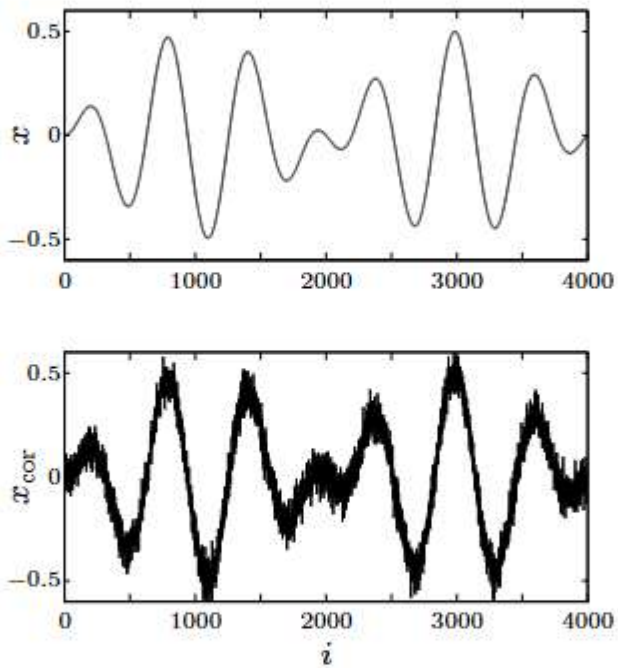
$\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是正则化函数或平滑目标

示例：二次平滑，总变差平滑：

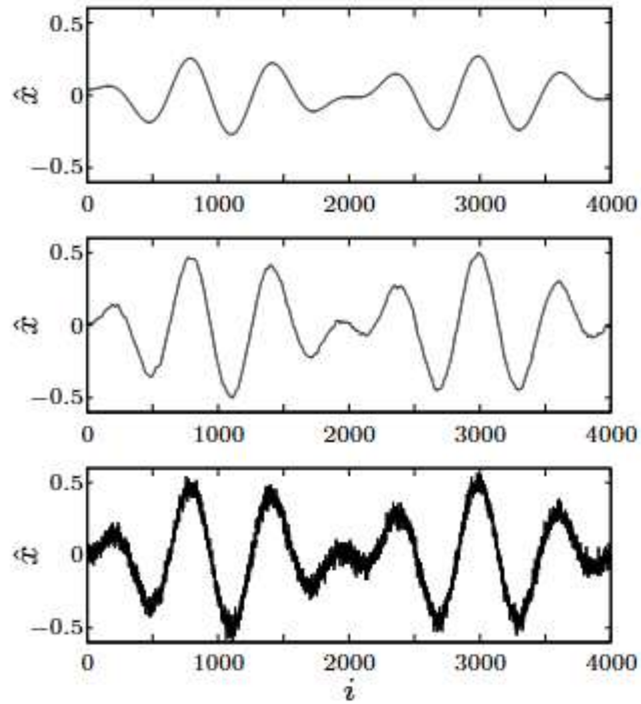
$$\phi_{\text{quad}}(\hat{x}) = \sum_{i=1}^{n}(\hat{x}_{i+1}-\hat{x}_i)^2, \phi_{\text{tv}}(\hat{x}) = \sum_{i=1}^{n}|\hat{x}_{i+1}-\hat{x}_i|$$

1. 3 正则化逼近

☐ 二次平滑示例



original signal x and noisy signal x_{cor}



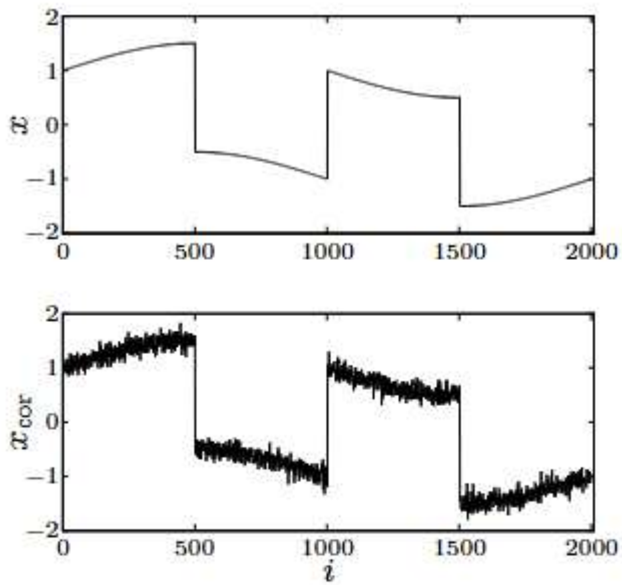
three solutions on trade-off curve $\|\hat{x} - x_{\mathrm{cor}}\|_2$ versus $\phi_{\mathrm{quad}}(\hat{x})$

中间达到最优折衷效果：在保持原信号形状前提下滤除毛刺噪声

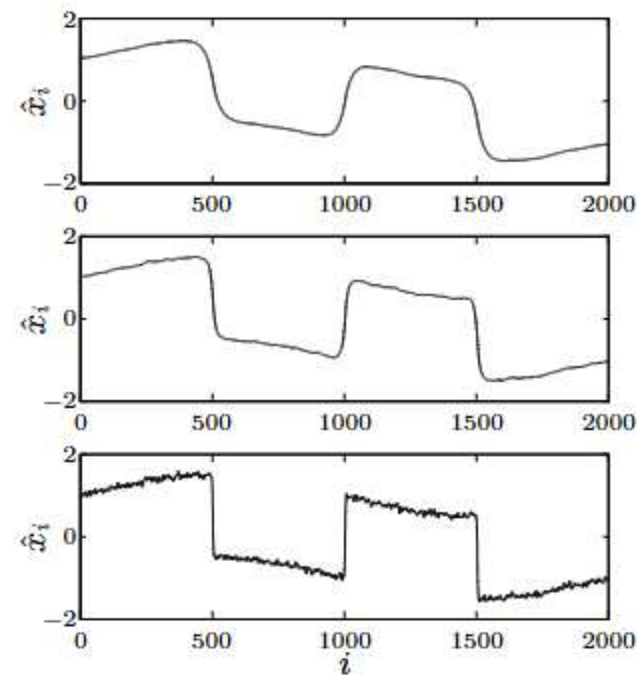
1.3 正则化逼近

□ 总变差重建示例

二次平滑可以消除信号中的噪声和急剧变化



original signal x and noisy signal x_{cor}

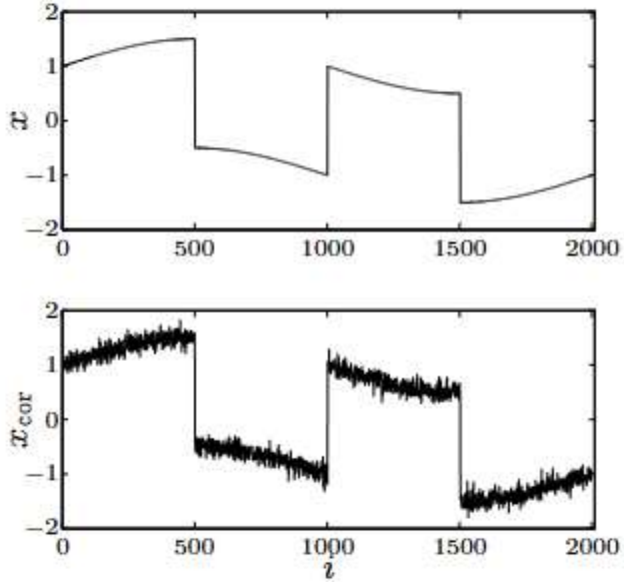


three solutions on trade-off curve $\|\hat{x} - x_{\mathrm{cor}}\|_2$ versus $\phi_{\mathrm{quad}}(\hat{x})$

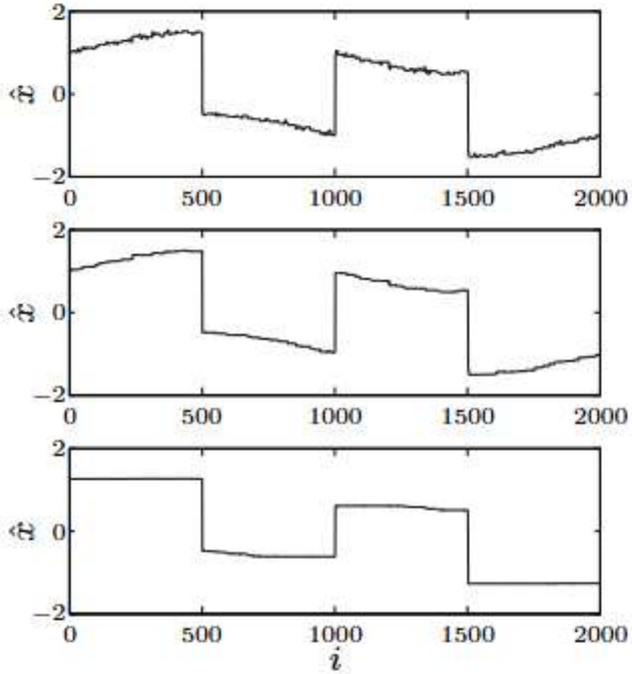
效果均无法达到最优，二次平滑也会消除信号中的急剧变化

1.3 正则化逼近

- □ 总变分平滑保留了信号中的锐利的过渡



original signal x and noisy signal x_{cor}



three solutions on trade-off curve $\|\hat{x} - x_{\mathrm{cor}}\|_2$ versus $\phi_{\mathrm{tv}}(\hat{x})$

1.4 鲁棒逼近

最小化 $\|Ax-b\|$，其中 A 不确定，有两种方法：

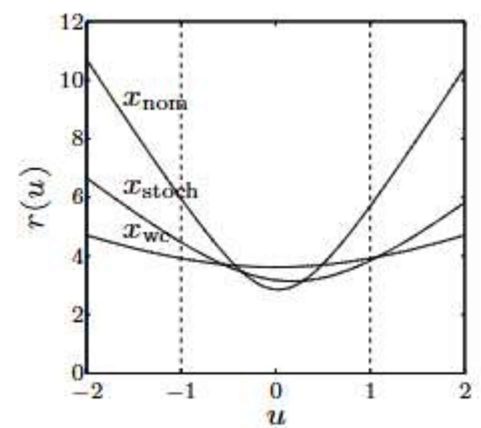
1. 随机：假设 A 是随机的，最小化 $\mathbf{E}\|Ax-b\|$
2. 最坏情况（min-max）：设置 $\mathcal{A}$ 为 A 的可能值，最小化 $\sup_{A\in\mathcal{A}}\|Ax-b\|$，仅在特殊情况（特定的范数 $\|\cdot\|$，分布，集合 $\mathcal{A}$）下可解

□ **例** 4：$A(u)=A_0+uA_1$

a. x_{norm} 最小化 $\|A_0x-b\|$

b. x_{stoch} 最小化 $\mathbf{E}\|A(u)x-b\|_2^2$，其中 u 在 $[-1,1]$ 上均匀分布

c. 最小化 $\sup_{-1\le u\le 1}\|A(u)x-b\|_2^2$ 图示出了 $r(u)=\|A(u)x-b\|_2$



1.4 鲁棒逼近

随机鲁棒 LS, 其中 $A = \bar{A} + U, U$ 随机, $\mathbf{E}U = 0, \mathbf{E}U^T U = P$

$$\text{最小化} \quad \mathbf{E}\left\|\left(\bar{A} + U\right)x - b\right\|_2^2$$

1. 目标函数的显式表达式:

$$\mathbf{E}\|Ax - b\|_2^2 = \mathbf{E}\left\|\bar{A}x - b + Ux\right\|_2^2$$

$$= \left\|\bar{A}x - b\right\|_2^2 + \mathbf{E}x^T U^T U x = \left\|\bar{A}x - b\right\|_2^2 + x^T P x$$

2. 因此, 鲁棒最小二乘问题等价于如下最小二乘问题

$$\text{最小化} \quad \left\|\bar{A}x - b\right\|_2^2 + \left\|P^{1/2}x\right\|_2^2$$

3. 当 $P = \delta I$ 时, 得到 Tikhonov 正则化问题

$$\text{最小化} \quad \left\|\bar{A}x - b\right\|_2^2 + \delta\|x\|_2^2$$

1.4 鲁棒逼近*

■ **最坏情况鲁棒 LS**

满足 $\mathcal{A}=\{\bar{A}+u_1A_1+\cdots+u_pA_p \mid \|u\|_2\le 1\}$

$$\text{最小化}\ \sup_{A\in\mathcal{A}}\left\|\bar{A}x-b\right\|_2^2=\sup_{\|u\|_2\le 1}\|P(x)u+q(x)\|_2^2$$

其中$P(x)=[A_1x,A_2x,\cdots,A_px],q(x)=\bar{A}x-b$

1. 以下问题之间存在强对偶性

$$\begin{array}{ll}\text{最大化} & \|P(x)u+q(x)\|_2^2\\ \text{约束条件} & \|u\|_2^2\le 1\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}\text{最小化} & t+\lambda\\ \text{约束条件} & \begin{bmatrix} I & P & q\\ P^T & \lambda I & 0\\ q(x)^T & 0 & t\end{bmatrix}\succeq 0\end{array}$$

1.4 鲁棒逼近*

2. 因此, 鲁棒 LS 问题是等价于 SDP

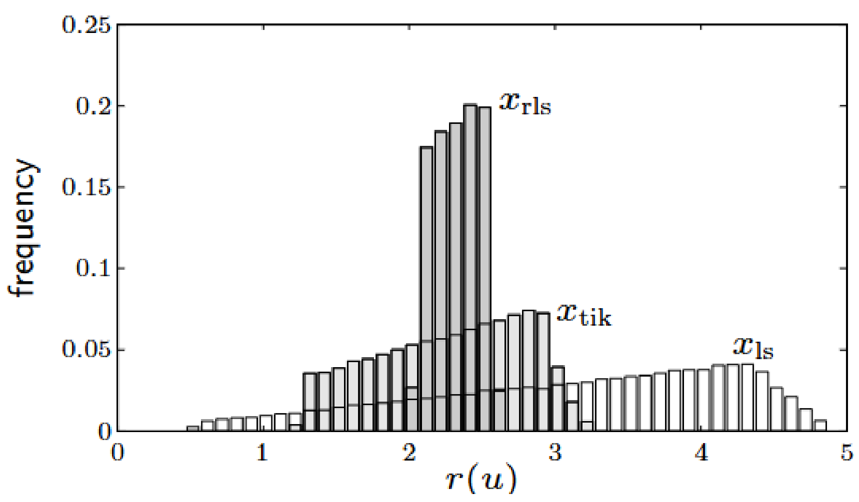
$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & t+\lambda \\
\text{约束条件} & \begin{bmatrix} I & P(x) & q(x) \\ P(x)^T & \lambda I & 0 \\ q(x)^T & 0 & t \end{bmatrix} \succeq 0
\end{array}
$$

1.4 鲁棒逼近*

- **例** 5:

$$r(u) = \|(A_0 + u_1 A_1 + u_2 A_2)x - b\|_2$$

其中 u 在单位圆上均匀分布,对于 x 的三个值（最坏情况鲁棒LS）



大 纲

1. 逼近

2. LASSO

2 LASSO

线性回归问题中，通过最小二乘法拟合，特征数量远大于样本数量时，容易过拟合，需要从众多特征中识别少数关键特征

$$\text{最小化} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \sum_{j} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \|\beta_j\|$$

岭回归（Ridge Regression, 1970s）

$$\text{最小化} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \sum_{j} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \beta_j^2$$

等价于在最小二乘的基础上，加上约束“$\sum \beta_j^2 \leq s$”约束模型复杂度，但不能产生稀疏解

2 LASSO

Robert Tibshirani于1996年发表奠基性论文：
Regression Shrinkage and Selection via the Lasso（Journal of the Royal Statistical Society, Series B）

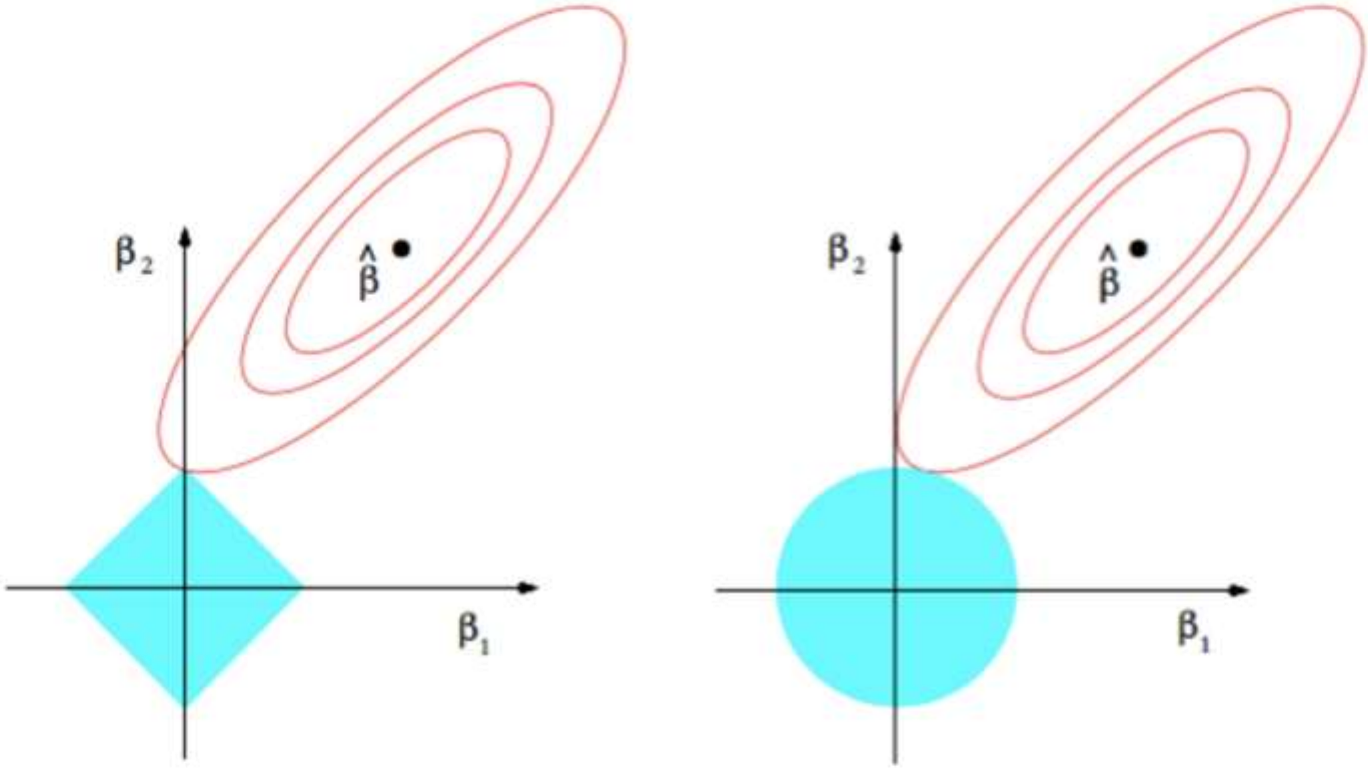
Lasso（Least Absolute Shrinkage and Selection Operator）是一种结合了特征选择和正则化的线性回归方法

$$\text{最小化} \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$

等价于在最小二乘的基础上，加上约束“$\sum|\beta_j| \le s$”，LASSO 在降低模型复杂度的基础上，实现了特征选择

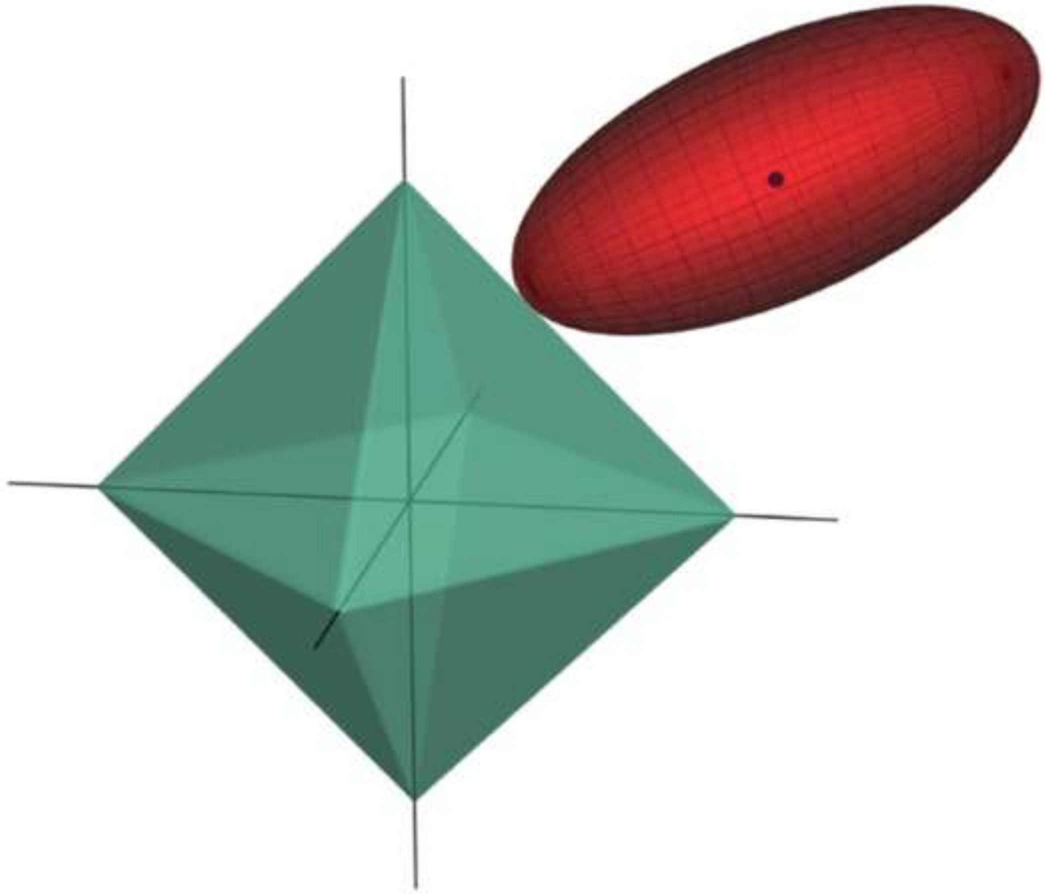
LASSO的提出是统计学和机器学习的重要转折点，它将变量选择从离散的组合优化问题转化为连续的凸优化问题，开辟了稀疏建模的新时代，其影响力超越统计学，延伸到信号处理、计量经济学、生物信息学等多个领域

2 LASSO



Lasso   Ridge Regression

2 LASSO



-- Statistical Learning with Sparsity by Hastie, Tibshirani & Wainwright

谢 谢 ！