03_Regularisierung

Martin Reißel

27. Juni 2022

Inhaltsverzeichnis

1 Regularisierung

1.1 Überblick

Bei Regressionsaufgaben taucht oft das Problem des Overfittings auf. Dabei wird das zugrundeliegende Modell "zu genau" an die vorliegenden Daten angepasst, was einerseits negative Auswirkungen auf die Generalisierung haben kann und andererseits zu extremer Empfindlichkeit gegenüber Messfehlern in den Daten führen kann.

Um diese Probleme zu beseitigen, benutzt man Regularisierungsansätze. Über zusätzliche Nebenbedingungen wird versucht, Overfitting zu vermeiden.

Anhand eines einfachen Tomographieproblems werden verschiedene Regularisierer vorgestellt.

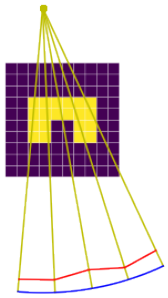
1.2 Tomographie

Fast alle Tomographieverfahren in Medizin und Technik arbeiten nach dem gleichen Grundprinzip:

- das zu untersuchende Objekt wird durchstrahlt und die Abschwächung der Intensität nach Austritt aus dem Objekt gemessen, die aufgrund unterschiedlicher Dichten im Objekt entsteht
- die Messung wird mehrfach wiederholt in dem das Objekt oder die Strahlenquelle gedreht wird
- aus den für viele verschiedene Winkel erhaltenen Intensitätsmessungen (sogenannten **Sinogrammen**) soll nun die Dichteverteilung im Objekt bestimmt werden

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

from IPython.display import HTML
from IPython.display import Math
```

```
%precision 5
np.set_printoptions(precision=4)


from DatenNotebooks.xrtomo12 import *

%matplotlib inline

_,_,t = tomo()
anim = HTML(t().to_jshtml());
```



```
anim
```

```
<IPython.core.display.HTML object>
```

Um die Aufgabenstellung als Regressionsproblem formulieren zu können, machen wir die folgenden (teilweise vereinfachenden) Annahmen:

- das zu untersuchende Objekt befindet sich immer im Einheitsquadrat $[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]\times[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]$
- wir überziehen das Einheitsquadrat mit einem äquidistanten Gitter mit n_g Gitterzellen (Pixel) in jeder Koordinatenrichtung
- innerhalb einer Gitterzelle wird die Dichte unseres Objekts als konstant angenommen
- wir schicken n_s Strahlen durch das Objekt und messen die Abschwächung der Intensität für jeden dieser Strahlen
- die Messung wird für n_w verschiedene Drehwinkel wiederholt
- wir gehen von einem linearen Modell aus, d.h. durchläuft ein Strahl nacheinander zwei Zellen des Gitters, so addieren sich die Abschwächungen

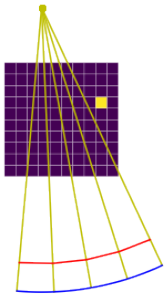
Damit kann die Aufgabe wie folgt beschrieben werden:

- benutze die Information aus den Messdaten (Sinogramm) um die (innerhalb eines Pixels konstante) Dichte in jedem Pixel unseres Gitters im Einheitsquadrat zu bestimmen
- die Dichtewerte der Pixel liefern dann ein Bild des Inneren unseres Objekts

Für die Rückrechnung benötigen wir noch die Information, wie die Sinogramme für jedes einzelne Pixel aussehen. Dazu müssen wir alle Messdaten für jedes einzelne Pixel ermitteln, wenn die Dichte in diesem Pixel 1 und in allen anderen Pixeln 0 ist. Diese Daten müssen für einen Tomographen nur einmal ermittelt werden und können dann für die Bildrekonstruktion über Regression immer wieder verwendet werden

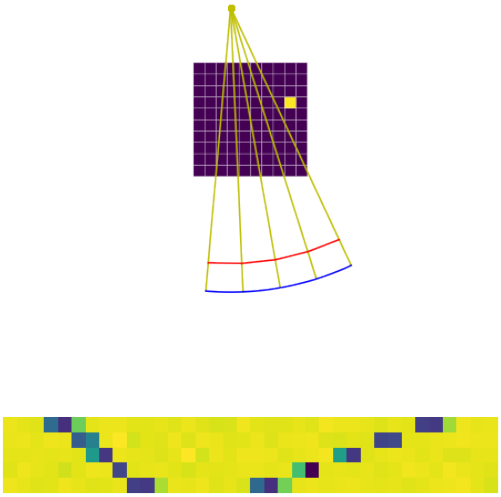
Wir betrachten exemplarisch das (ideale) Sinogramm eines Pixels

```
def pixeldichte(x,y):
    return float((0.3 <= x) * (x < 0.4) * (0.1 <= y) * (y < 0.2))

_, _ , t = tomo(sig0 = vectorize(pixeldichte), delta=0)

anim = HTML(t().to_jshtml())
```



Eine reale Messung würde aufgrund von Messfehlern ein etwas verändertes Sinogramm liefern:

```
_, _, t = tomo(sig0 = vectorize(pixeldichte))

anim = HTML(t().to_jshtml())
```



```
anim
```

```
<IPython.core.display.HTML object>
```

Aufgrund unserer Modellannahme sollte sich nun das für unser Objekt gemessene Sinogramm als Linearkombination der Pixel-Sinogramme darstellen lassen.

Wandeln wir die Sinogramme in Vektoren der Dimension m um und bezeichnen wir mit $x_j \in \mathbb{R}^m$, $j = 1, \ldots, n$, das Pixel-Sinogramme zum j-ten Pixel bzw. mit $y \in \mathbb{R}^m$ das Sinogramm unseres Körpers, so ergibt sich für die Pixelintensität $w \in \mathbb{R}^n$ das folgende lineare Regressionsproblem

$$w^* = \operatorname{argmin} \|Xw - y\|_2^2, \quad X = \left(x_1, \ldots, x_n\right) \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Ordnen wir die einzelnen Komponenten von w^* entsprechend an, so erhalten wir (hoffentlich) ein Dichtebild des Inneren unseres Körpers.

1.3 Lineare Regression ohne Regularisierung

Mit der oben benutzten Funktion `tomo` aus dem Package `xrtomo12` können sehr einfach die erforderlichen Daten erzeugt werden. Wir betrachten zunächst den Doc-String von `tomo`

```
help(tomo)
```

```
Help on function tomo in module DatenNotebooks.xrtomo12:

tomo(sig0=<function sig0 at 0x7f0c1bcdf310>, ngitter=10, nstrahl=5,
winkel=array([  0,  10,  20,  30,  40,  50,  60,  70,  80,  90, 100, 110, 120,
       130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200, 210, 220, 230, 240, 250,
       260, 270, 280, 290, 300, 310, 320, 330, 340, 350]), quelle=<class
'DatenNotebooks.xrtomo12.zentral'>, delta=0.01, fout=None)
    |
    |
    sig0    : Funktion die für (x,y) den Leitfähigkeitswert liefert
    ngitter : Gitterauflösung (in beide Richtungen gleich) auf [-0.5,0.5] x
[-0.5,0.5]
    nstrahl : Anzahl der Strahlen für Quelle
    winkel  : array der Drehwinkel
    quelle  : zentral oder parallel
```

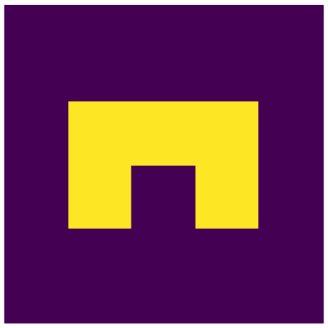
```
        delta   : std des Messrauschens
        fout    : Daten werden als float32 in fout.csv.gz komprimiert geschrieben

        Rückgabewert: X, y, Animationsfunktion

            a(rep = False, interval = 200)

            rep      : Repeat
            interval : Zeitabstand zwischen Frames
```

`tomo` besitzt unter anderem folgende Parameter:

- `sig0(x,y)` ist eine Funktion, die die Dichte im Innern des Körpers an (x,y) definiert (also die Information, die wir später mit Regression möglichst präzise rekonstruieren wollen); `sig0` muss vektorisierbar sein, d.h. auch auf numpy-arrays x,y arbeiten können
- `ngitter` definiert die Anzahl der Pixel pro Koordinatenrichtung
- `nstrahl` ist die Anzahl der Strahlen
- `winkel` eine Liste mit Winkeln, unter denen das Objekt durchleuchtet werden soll
- `quelle` definiert, ob die Strahlenquelle das Objekt `parallel` oder `zentral` durchleuchtet
- `delta` definiert die Standardabweichung des normalverteilten Messfehlers in den gemessenen Intensitäten

Wir generieren nun einen Datensatz *ohne Messfehler* auf y und lösen das Regressionsproblem mit Scikit-Learn

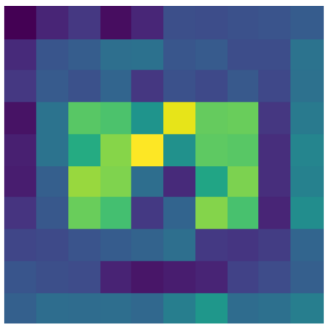
```
X, y, _ = tomo(delta = 0.0)

from sklearn import linear_model

modell = linear_model.LinearRegression(fit_intercept = False)
modell.fit(X, y.ravel())

w = modell.coef_

def plotReko(b):
    n = int(np.sqrt(b.shape[0]))

    plt.pcolor(b.reshape(n,n))
    plt.axis('equal')
    plt.axis('off')

plotReko(w)
```



Die Rekonstruktion ist perfekt (*inverse crime*).

Nun wiederholen wir das Ganze für die selbe Konstellation, dieses mal aber mit 1% (relativem normalverteilten) Messfehler auf y.

```
X, y, _ = tomo(delta = 0.01)

modell = linear_model.LinearRegression(fit_intercept = False)
modell.fit(X, y.ravel())

w = modell.coef_
plotReko(w)
```



Die Rekonstruktion ist eher unbefriedigend, offensichtlich wirken sich die Messfehler in y sehr nachteilig aus.

Die Ursache kann mit Hilfe der Singulärwertzerlegung leicht erklärt werden. Wenn wir $\|Xw - y\|_2^2$ minimieren, dann berechnen wir zu $X = U\Sigma V^T$ eigentlich

$$w^* = X^+ y = V\Sigma^+ U^T y$$

mit

$$\Sigma^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \frac{1}{\sigma_r} & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Existieren Singulärwerte $\sigma_k \ll \sigma_1$ (und ist $u_k^T y \neq 0$, was bei einem messfehlerbehafteten y eigentlich immer der Fall ist), so kann es durch die Kehrwertbildung zu extremen Messfehlerverstärkungen kommen, die die Rekonstruktion komplett verfälschen können (**Overfitting**)

1.4 PCA (TSVD)

Haben wir in unseren Daten X Singulärwerte

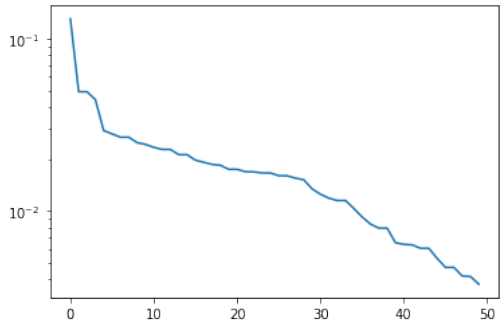
$$\sigma_1 \geq \sigma_k \geq \sigma_{k+1} \geq \ldots \geq \sigma_r > 0, \quad \sigma_1 \gg \sigma_{k+1},$$

so bedeutet das, dass die entsprechenden Parameterkombinationen $v_{k+1}^T w, \ldots, v_r^T w$ nur sehr geringen Einfluss auf y haben. Deshalb kann man versuchen X über TSVD/PCA durch einen entsprechend verkleinerten Datensatz X_k zu ersetzen und mit diesem die Rekonstruktion durchzuführen.

Wir betrachten für unseren Fall zunächst den “Exlpained Variance Ration”, also $\frac{\sigma_i^2}{\mathrm{Var}(X)}$

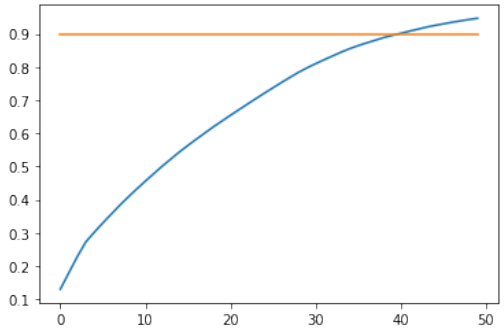
```
Xfro = spa.linalg.norm(X, ord = 'fro')

U, s, VT = spa.linalg.svds(X, 50)
ii = s.argsort()[::-1]

exp_var = s[ii]**2
exp_var_ratio = exp_var / Xfro**2
```

```
plt.semilogy(exp_var_ratio);
```



bzw. die kumulierte Summe davon

```
varcum = exp_var_ratio.cumsum()
#varcum
plt.plot(varcum)
plt.plot(0.9 * np.ones(varcum.shape));
```



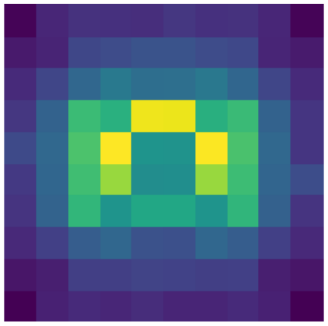
Mehr als 90 Prozent der Varianz von X erreichen wir schon mit wenigen Hauptkomponenten

```
ncut = np.argwhere(varcum > 0.9).min()
ncut
```

```
40
```

Als Rekonstruktion erhalten wir

```
iicut = ii[:ncut]
wk = VT[iicut,:].T.dot(s[iicut] * U.T[iicut].dot(y))
plotReko(wk)
```



Sie ist etwas besser als oben, insbesondere ist sie nicht mehr so “verrauscht”. Allerdings sind die harten Kontraste an der Trennfläche Körper/Umgebung sehr verwaschen.

1.5 Ridge Regression (Tikhonov-Regularisierung)

Ein anderer Ansatz um dem Problem des Overfittings zu begegnen wird bei Ridge Regression verfolgt. Wir bestimmen jetzt die Rekonstruktion w durch Minimieren von

$$\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_2^2$$

wobei $\alpha > 0$ ein vom Benutzer zu wählender “Regularisierungsparameter” ist.

Mit α gewichtet man, ob man mehr Wert auf möglichst kleine Residuen ($\alpha > 0$ nahe bei 0) oder mehr Wert auf “kleine” Parameter w ($\alpha > 0$ groß) legt, um damit dem Overfitting entgegen zu wirken.

Der Vorteil bei diesem Zugang ist, dass man keine Singulärwertzerlegung von X benötigt. Dazu benutzt man

$$\begin{aligned}\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_2^2 &= \left\| \begin{pmatrix} X \\ \sqrt{\alpha} I \end{pmatrix} w - \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \|\tilde{X}w - \tilde{y}\|_2^2\end{aligned}$$

und die zugehörige Normalgleichung ist

$$\tilde{X}^T\tilde{X}w = \tilde{X}^T\tilde{y}$$

bzw.

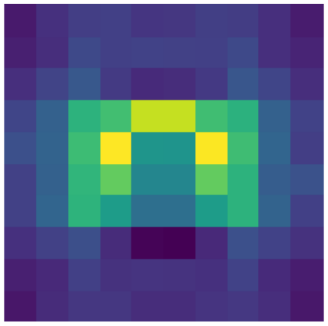
$$\left(X^TX + \alpha I\right)w = X^Ty.$$

Für $\alpha > 0$ ist die Systemmatrix spd und das Gleichungssystem ist eindeutig lösbar.

1.5.1 Fit mit Defaultparametern

Mit `linear_model.Ridge` führen wir eine Ridge Regression mit Default-Parameter $\alpha = 1$ durch.

```
ridge = linear_model.Ridge(fit_intercept = False)

ridge.fit(X, y)

w = ridge.coef_
plotReko(w)
```

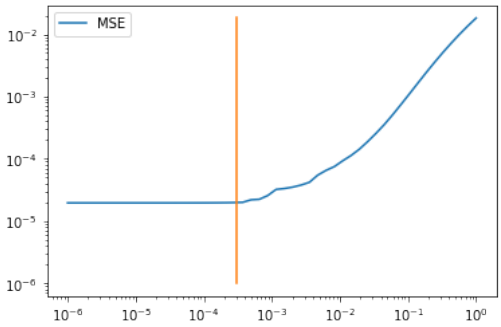


Die Rekonstruktion ist ähnlich zu der bei PCA/TSVD.

1.5.2 Fit mit Parameterwahl

Die Wahl des Parameters α im letzten Abschnitt ist mit Sicherheit nicht sehr geschickt. Deshalb sehen wir uns jetzt an, wie sich die Residuen des gefitteten linearen Modells (MSE) mit α verändern.

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error

al = np.logspace(-6,0)

mse = []

for a in al:
    ridge = linear_model.Ridge(alpha = a, fit_intercept = False)
    ridge.fit(X, y)
    mse.append(mean_squared_error(y, ridge.predict(X)))

mse = np.array(mse)

plt.loglog(al, mse, label = "MSE")
plt.loglog([3e-4, 3e-4], [1e-6, mse.max()])
plt.legend(loc = 0);
```

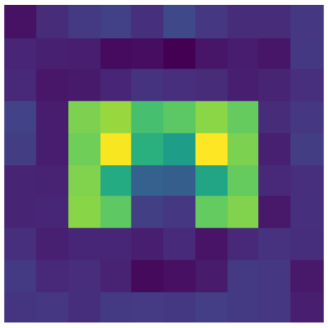


Der MSE-Wert fällt mit kleiner werdendem α zunächst stark ab, um dann fast zu stagnieren. Dieses Stagnieren deutet auf einsetzendes Overfitting hin. Deshalb bietet es sich an, α einerseits möglichst groß zu wählen um Overfitting zu vermeiden, andererseits aber klein genug, damit das Residuum und damit der Fit genau genug ist.

```
alpha = 3e-4
ridge = linear_model.Ridge(alpha, fit_intercept = False)
ridge.fit(X, y)
w = ridge.coef_
plotReko(w)
```

```
Math(r'\alpha = {}'.format(alpha))
```

$\alpha = 0.0003$



Es gibt viele Parameterwahlstrategien, um α automatisch bestimmen zu lassen (Diskrepanz-Prinzip nach Morozov, L-Curve, Cross-Validation etc.). Scikit-learn enthält z.B. `linear_model.RidgeCV`, das Cross-Validation dafür benutzt:

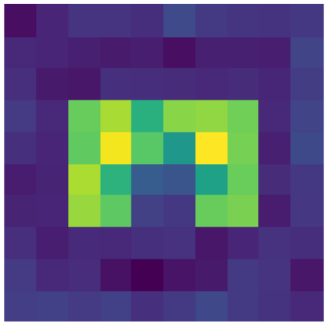
- unterteile die Daten in k möglichst gleich große Teilmengen T_i, $i = 1, \ldots, k$ (unter Umständen **stratifiziert**, also mit annähernd gleicher Verteilung)
- führe k Fits durch, wobei alle Daten außer einem T_i benutzt werden
- würde man nun wie oben das Residuum zu den für die Anpassung benutzten Daten berechnen, dann würde man bei Overfitting relativ kleine Werte erhalten (**in-sample error**)
- deswegen benutzt man nun den nicht verwendeten Datensatz T_i um die Qualität der Anpassung zu prüfen (**out-of-sample error**)
- enthalten alle T_i nur genau ein Element, so spricht man von **Leave-One-Out-Cross-Validation**

Cross-Validation scheint auf den ersten Blick sehr aufwendig zu sein (Leave-One-Out-Cross-Validation erfordert so viele Fits wie Daten vorhanden sind). Allerdings kann für Ridge Regression durch eine geschickte Implementierung der Mehraufwand soweit reduziert werden, dass er nicht mehr ins Gewicht fällt.

Die Methode `linear_model.RidgeCV` benutzt als Default solch eine Implementierung der Leave-One-Out-Cross-Validation.

```
al = np.logspace(-5,-2)
ridgecv = linear_model.RidgeCV(alphas = al, fit_intercept = False)

ridgecv.fit(X, y)

display(Math(r'\alpha = {:f}'.format(ridgecv.alpha_)))

w = ridgecv.coef_
plotReko(w)
```

$\alpha = 0.000391$



1.6 Lasso (Tikhonov mit L^1-Strafterm)

Statt $\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_2^2$ minimiert man nun

$$\frac{1}{2m}\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_1$$

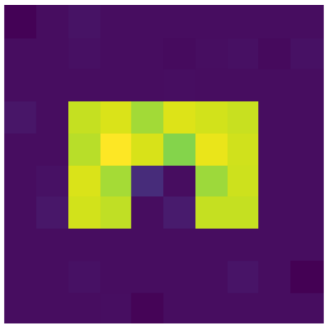
wobei $\alpha > 0$ wieder ein vom Benutzer zu wählender Regularisierungsparameter ist.

Im Gegensatz zum letzten Abschnitt kann man für dieses Problem keine einfache, geschlossene Lösung angeben.

In Scikit-Learn ist dieses Verfahren (mit Parameterwahl über Cross-Validation) in der Methode `linear_model.LassoCV` implementiert. Benutzt man `LassoCV` ohne weitere Parameter, so wird α automatisch ermittelt.

```
lassocv = linear_model.LassoCV(fit_intercept = False, cv = 5)

lassocv.fit(X, y)

display(Math(r'\alpha = {:e}'.format(lassocv.alpha_)))

w = lassocv.coef_
plotReko(w)
```

$$\alpha = 9.867860e-06$$



Wir erhalten deutlich stärkere Kontraste, der Hintergrund ist sehr viel gleichmäßiger als in den vorherigen Rekonstruktionen.

1.6.1 Subgradienten, Sparsity

Betrachten wir die rekonstruierten Parameter genauer, so fällt auf, dass viele der Parameter identisch 0 sind.

```
w
```

```
array([ 0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  4.6363e-03, -2.4641e-02,
        0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        1.6704e-03,  0.0000e+00,  1.4197e-02, -0.0000e+00, -0.0000e+00,
       -0.0000e+00, -0.0000e+00,  2.4671e-02,  0.0000e+00, -3.6158e-02,
        0.0000e+00, -0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00, -0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00,  3.1670e-02,  1.0098e+00,  9.7667e-01,  0.0000e+00,
        4.5634e-02,  9.8698e-01,  9.8596e-01,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
       -0.0000e+00,  1.3011e-02,  1.0227e+00,  9.3558e-01,  1.0309e-01,
        0.0000e+00,  9.2004e-01,  9.9805e-01,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00, -0.0000e+00,  9.6475e-01,  1.0846e+00,  1.0147e+00,
        8.7460e-01,  1.0462e+00,  1.0038e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        2.8481e-02,  0.0000e+00,  9.8580e-01,  1.0207e+00,  9.2846e-01,
        1.0251e+00,  1.0094e+00,  9.8845e-01,  0.0000e+00,  2.9374e-03,
        0.0000e+00, -0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        7.0650e-03, -0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
       -5.3625e-04, -0.0000e+00,  8.7177e-03,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
       -1.5487e-03,  6.6484e-03,  1.0668e-02, -8.1487e-03,  1.2945e-02,
       -2.8224e-02, -0.0000e+00,  2.0360e-02,  3.0506e-03, -0.0000e+00,
        0.0000e+00, -0.0000e+00,  0.0000e+00, -0.0000e+00,  0.0000e+00])
```

Dies ist kein Zufall. Wir untersuchen jetzt die Eigenschaften der Minima unserer Zielfunktion

$$f(w) = \frac{1}{2m}\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_1$$

genauer. f ist für $\alpha \geq 0$ konvex, wegen $\|w\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |w_i|$ ist f aber nicht differenzierbar.

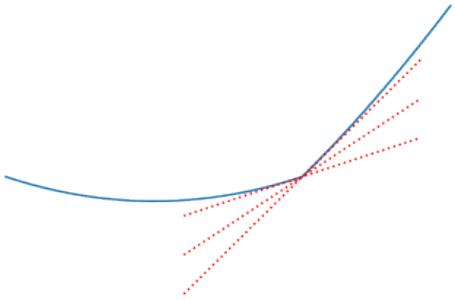
Man kann allerdings den Differenzierbarkeitsbegriff so erweitern, dass man ihn auch in dieser Situation anwenden kann. Für f konvex definiert man den **Subgradienten** $\partial f(w)$ an der Stelle w als die Menge aller Vektoren d mit

$$f(v) \geq f(w) + (d, v - w)_2 \quad \forall v \in U,$$

wobei U eine offene Umgebung von w ist.

Anschaulich beschreibt man damit alle linear affinen Abbildungen auf U, die den Graphen von f an $(w, f(w))$ berühren und in U nicht oberhalb des Graphen von f verlaufen (“alle Tangenten unterhalb”).

```
f  = lambda w : w*w + np.abs(w - 1)
tl = lambda w : w
tr = lambda w : 3*(w - 1) + 1
tm = lambda w : 2*(w - 1) + 1

w  = np.linspace(0, 1.5, 1000)
wt = np.linspace(0.6, 1.4, 2)

plt.plot(w, f(w))
plt.plot(wt, tl(wt), 'r:')
plt.plot(wt, tr(wt), 'r:')
plt.plot(wt, tm(wt), 'r:')
plt.axis('off');
```



Für konvexes f, g hat der Subgradient $\partial f(w)$ folgende Eigenschaften:

- er existiert, d.h. $\partial f(w) \neq \varnothing \ \forall w$
- $\partial(f+g)(w) = \partial f(w) + \partial g(w)$
- besteht er nur aus einem Element, dann ist f differenzierbar in w und der gewöhnliche und der Subgradient sind identisch
- w minimiert die konvexe Funktion f genau dann, wenn $0 \in \partial f(w)$

Als Beispiel betrachten wir die konvexe Funktion $f(w) = |w|$. Für $w \neq 0$ ist f differenzierbar, so dass dort die gewöhnliche Ableitung mit dem Subgradienten übereinstimmt. Alle Geraden durch $(0, f(0))$ die (lokal) nicht oberhalb des Graphen von f verlaufen haben eine Steigung in $[-1, 1]$. Somit ist

$$\partial|w| = \begin{cases} -1 & w < 0 \\ [-1,1] & w = 0 \\ 1 & w > 0 \end{cases}.$$

Betrachten wir nun für $\alpha \geq 0$ die Lasso-Zielfunktion

$$\begin{aligned} f(w) &= \frac{1}{2m}\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_1 \\ &= \frac{1}{2m}(Xw - y, Xw - y)_2 + \alpha\|w\|_1 \end{aligned}$$

für den einfachsten Fall $n = 1$, d.h. $w \in \mathbb{R}$, $X = x \in \mathbb{R}^m$, $y \in \mathbb{R}^m$, also

$$f(w) = \frac{1}{2m}(xw - y, xw - y)_2 + \alpha|w|.$$

Der erste Summand ist (klassisch) differenzierbar, so dass wir als Subgradienten

$$\partial f(w) = \frac{1}{m}\big((x,x)_2 w - (x,y)_2\big) + \alpha \begin{cases} -1 & w < 0 \\ [-1,1] & w = 0 \\ 1 & w > 0 \end{cases}$$

erhalten. Um jetzt das Minimum von f zu bestimmen, überprüfen wir die Bedingung $0 \in \partial f(w)$.

Für $x = 0$ ist $\partial f(w) = \partial|w|$ und $0 \in \partial f(w)$ genau dann, wenn $w = 0$.

Sei jetzt $x \neq 0$. Dann folgt aus $0 \in \partial f(w)$

$$(x,x)_2 w - (x,y)_2 + \alpha d m = 0, \quad d \in \begin{cases} \{-1\} & w < 0 \\ [-1,1] & w = 0 \\ \{1\} & w > 0 \end{cases}$$

bzw. wegen $x \neq 0$

$$w = \frac{(x,y)_2 - \alpha d m}{(x,x)_2}.$$

Für $w < 0$ ist $d = -1$ also

$$w = \frac{(x,y)_2 + \alpha m}{(x,x)_2} < 0$$

und somit

$$w = \frac{(x,y)_2 + \alpha m}{(x,x)_2}, \quad \text{für} \quad (x,y)_2 < -\alpha m.$$

Analog ergibt sich für $w > 0$

$$w = \frac{(x,y)_2 - \alpha m}{(x,x)_2}, \quad \text{für} \quad (x,y)_2 > \alpha m.$$

Für $w = 0$ ist

$$(x,y)_2 = \alpha dm, \quad d \in [-1,1],$$

d.h.

$$-\alpha m \le (x,y)_2 \le \alpha m.$$

Insgesamt erhalten wir damit folgende Lösung

$$w^* = \operatorname{argmin}_{w\in\mathbb{R}} f(w) = \begin{cases} \frac{(x,y)_2+\alpha m}{(x,x)_2} & (x,y)_2 < -\alpha m \\ 0 & -\alpha m \le (x,y)_2 \le \alpha m \\ \frac{(x,y)_2-\alpha m}{(x,x)_2} & (x,y)_2 > \alpha m \end{cases}.$$

Für $\alpha \downarrow 0$ erhält man das Minimum w^* von $\frac{1}{2}(xw-y, xw-y)_2$, nämlich

$$\frac{(x,y)_2}{(x,x)_2}.$$

Mit wachsendem $\alpha > 0$ verändert man diesen Wert bzw. setzt ihn auf 0.

Kommen wir nun zurück zur allgemeinen Lasso-Zielfunktion, d.h. $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $X \in \mathbb{R}^n$,

$$f(w) = \frac{1}{2m}\|Xw-y\|_2^2 + \alpha\|w\|_1.$$

Der Subgradient ist

$$\partial f(w) = \frac{1}{m}X^T(Xw-y) + \alpha\,\partial\|w\|_1.$$

und mit $r = Xw - y$ erhalten wir für die k-te Komponente

$$\partial_{w_k} f(w) = \frac{1}{m}(x_k, r) + \alpha\,\partial|w_k|.$$

Nehmen wir nun an, dass w ein Minimierer von f ist mit $w_k = 0$. Dann ist $0 \in \partial_{w_k} f(w)$, d.h.

$$0 = \frac{1}{m}(x_k, r) + \alpha\, d, \quad d \in [-1,1],$$

also

$$|(x_k, r)| \le m\,\alpha.$$

Im Vergleich dazu liefert die (differenzierbare) Tikhonov-Zielfunktion

$$f(w) = \|Xw-y\|_2^2 + \alpha\|w\|_2^2$$

in der gleichen Situation ($w_k = 0$)

$$0 = \partial_{w_k} f(w) = 2(x_k, r)_2 + 2\alpha\, w_k = 2(x_k, r)_2,$$

also $(x_k, r) = 0$ *unabhängig* von α.

Damit folgt, dass für einen Optimierer w von $f(w)$ die Komponente w_k nur dann 0 sein kann, falls

- bei Tikhonov $(x_k, r) = 0$ ist, also $r = Xw - y$ senkrecht auf x_k steht
- bei Lasso $|(x_k, r)_2| \le m\,\alpha$ ist, d.h. der Winkel φ_k zwischen x_k und r der Bedingung

$$|\cos(\varphi_k)| = \left|\frac{(x_k, r)_2}{\|x_k\|_2\,\|r\|_2}\right| \le \frac{m\,\alpha}{\|x_k\|_2\,\|r\|_2}$$

  genügt.

Bei Tikhonov müssen x_k und r immer senkrecht aufeinander stehen. Bei Lasso werden hingegen in Abhängigkeit von α Abweichungen davon zugelassen. Offensichtlich ist die Bedingung bei Lasso für $\alpha > 0$ weniger restriktiv. Für α groß genug kann sie immer eingehalten werden.

Bei Lasso kann man also über α steuern, wie viele Komponenten von w identisch 0 sind, d.h. man beeinflusst damit, wie "sparse" w ist.

1.6.2 Coordinate Descent

In diesem Abschnitt betrachten wir nun das numerische Verfahren, mit dem Scikit-Learn den Minimierer von

$$f(w) = \frac{1}{2m}\|Xw - y\|_2^2 + \alpha\|w\|_1$$

berechnet.

Der Subgradient von f ist

$$\partial f(w) = \frac{1}{m}X^T(Xw - y) + \alpha\,\partial\|w\|_1.$$

Wegen

$$\partial_{w_k}\|w\|_1 = \partial_{w_k}\sum_{j=1}^{n}|w_j| = \partial_{w_k}|w_k|$$

erhalten wir als k-te Komponente

$$\partial_{w_k} f(w) = \frac{1}{m}x_k^T\Big(\sum_{j=1}^{n}x_j w_j - y\Big) + \alpha\,\partial_{w_k}|w_k|.$$

Benutzen wir

$$y_k = y - \sum_{j\neq k}^{n}x_j w_j$$

so erhalten wir schließlich

$$\partial_{w_k} f(w) = \frac{1}{m}\big((x_k, x_k)_2 w_k - (x_k, y_k)_2\big) + \alpha\,\partial_{w_k}|w_k|.$$

Halten wir w_j, $j \neq k$ fest und betrachten f als Funktion in w_k, dann minimieren wir f in Richtung w_k , falls wir

$$0 \in \partial_{w_k} f(w) = \frac{1}{m}\big((x_k, x_k)_2 w_k - (x_k, y_k)_2\big) + \alpha\,\partial_{w_k}|w_k|$$

auflösen können. Dies ist aber identisch mit dem oben gelösten Problem im Fall $n = 1$. Wir erhalten also

$$w_k^* = \operatorname{argmin}_{w_k\in\mathbb{R}} f(w) = \begin{cases} \frac{(x_k,y_k)_2+m\alpha}{(x_k,x_k)_2} & (x_k, y_k)_2 < -m\alpha \\ 0 & -m\alpha \le (x_k, y_k)_2 \le m\alpha \\ \frac{(x_k,y_k)_2-m\alpha}{(x_k,x_k)_2} & (x_k, y_k)_2 > m\alpha \end{cases}.$$

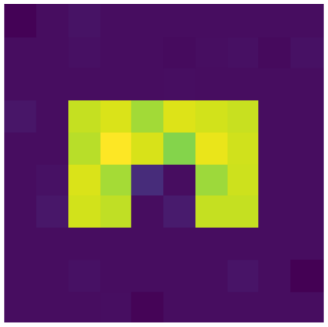
Diese eindimensionalen Optimierungsprobleme entlang der einzelnen Koordinaten-Richtung w_k sind also einfach zu lösen. Beim **Coordinate Descent** Verfahren wiederholt man einfach zyklisch diese Abstiege entlang der Richtungen $w_1, \ldots, w_n$.

Wir wenden das Verfahren wieder auf das Tomographieproblem an und benutzen dabei für α den Wert den wir oben mit Scikit-Learn ermittelt hatten.

```
def CDsimpel(w0, X, y, alpha = 1e-4, nit = 300):
    m, n = X.shape
    w = w0.copy()

    ma = m * alpha
    for it in range(nit):
        for k in range(n):
            xk = X[:,k].toarray().ravel()
            yk = y - X.dot(w) + xk * w[k]

            xkxk = xk.dot(xk)
            xkyk = xk.dot(yk)


            if   xkyk < -ma:
                 w[k] = (xkyk + ma) / xkxk
            elif xkyk > ma:
                 w[k] = (xkyk - ma) / xkxk
```

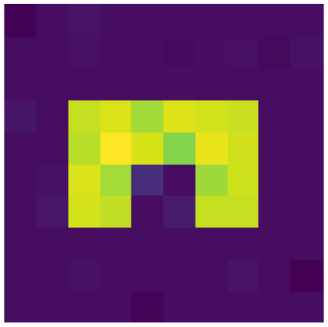
```
            else:
                w[k] = 0.0
    return(w)

w0 = np.ones(X.shape[1])

alpha_cd = lassocv.alpha_

w = CDsimpel(w0, X, y, alpha_cd)

display(Math(r'\alpha = {:e}'.format(alpha_cd)))

plotReko(w)
```

$$\alpha = 9.867860e-06$$



Unser Rekonstruktion sieht der von Scikit-Learn sehr ähnlich:

```
plotReko(lassocv.coef_)
```



Das gilt auch für die Zahlenwerte der rekonstruierten Parameter.

```
w
```

```
array([ 0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  4.6413e-03, -2.4627e-02,
        0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        1.6543e-03,  0.0000e+00,  1.4168e-02,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00,  0.0000e+00,  2.4666e-02,  0.0000e+00, -3.6135e-02,
        0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00,  3.1676e-02,  1.0097e+00,  9.7668e-01,  0.0000e+00,
        4.5570e-02,  9.8703e-01,  9.8596e-01,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
        0.0000e+00,  1.3013e-02,  1.0227e+00,  9.3561e-01,  1.0296e-01,
        0.0000e+00,  9.2015e-01,  9.9805e-01,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
```

```
 0.0000e+00,  0.0000e+00,  9.6476e-01,  1.0846e+00,  1.0147e+00,
 8.7480e-01,  1.0462e+00,  1.0038e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
 2.8494e-02,  0.0000e+00,  9.8581e-01,  1.0207e+00,  9.2857e-01,
 1.0251e+00,  1.0094e+00,  9.8847e-01,  0.0000e+00,  2.9107e-03,
 0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
 7.0484e-03,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
-5.3130e-04,  0.0000e+00,  8.7426e-03,  0.0000e+00,  0.0000e+00,
-1.5607e-03,  6.6373e-03,  1.0682e-02, -8.1462e-03,  1.2943e-02,
-2.8219e-02,  0.0000e+00,  2.0371e-02,  3.0617e-03,  0.0000e+00,
 0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00,  0.0000e+00])
```

1.7 Zusammenfassung

Anhand eines Tomographieproblems haben wir die folgenden Regularisierer betrachtet:

- PCA (TSVD):
  - benutze statt $\mathbb{R}^{m\times n} \ni X = U_r \Sigma_r V_r^T$ die abgeschnittene Variante $X = U_k \Sigma_k V_k^T$, $k \leq r$
  - k ist der Regularisierungsparameter
  - numerischer Aufwand: benötige (partielle) SVD
- Ridge Regression (Tikhonov-Regularisierung):
  - löse statt $X^T X w = X^T y$ das modifizierte Normalgleichungssystem

    $$\left(X^T X + \alpha I\right) w_\alpha = X^T y$$

  - dies ist äquivalent zu

    $$w_\alpha = \operatorname{argmin}_w \left(\|Xw - y\|_2^2 + \alpha \|w\|_2^2 \right)$$

  - $\alpha > 0$ ist der Regularisierungsparameter
- Lasso (Tikhonov mit L^1-Strafterm):
  - $w_\alpha = \operatorname{argmin}_w \left(\frac{1}{2m} \|Xw - y\|_2^2 + \alpha \|w\|_1 \right)$
  - über den Regularisierungsparameter $\alpha > 0$ kann man Sparsity von w_α regulieren
  - im Gegensatz zu Ridge Regression kann das Problem nicht so umformuliert werden, dass es mit endlich vielen Operationen lösbar ist
  - w_α wird iterativ, z.B. mit Coordinate Descent, berechnet