带约束条件曲线拟合的简单尝试

——wcy1122

1 简介

我们需要解决这样的一个问题，给定一个数列的前四项 1991,1992,2004,2009，要求通过相关方法推测出这个数列的第五项。此外，该问题有一个额外的隐藏条件，数列的第五项>=2019。

~~拿到这个问题，我首先去 OEIS 上查询了一下这个数列，很遗憾，没有找到。~~

这是一个经典的预测回归类问题，解决此类问题的方法不外乎如下几种：（1）脑洞大开，找规律瞎猜；（2）插值；（3）曲线拟合。在我看来，插值法并不是一个适合于回归预测的方法，刻意经过数据点会带来严重的过拟合问题。关于曲线拟合的方法前面同学也已经展示了很多方法，比如使用多项式，sigmod，tanh 函数，atan 函数，三角函数等。

但我注意到，大部分的回归，第五项的值都是小于 2019 的，也就是说这些回归其实是错误的。因此，我尝试在这个方向上寻找突破口。

曲线拟合本质上是一个多元非线性最优化问题，我们首先设计一个损失函数，比如 L2 范数，然后通过最小化损失函数，让曲线接近数据点。注意到本题中的隐藏条件，数列的第五项>=2019。这是一个限制条件，转化为不等式也就是 f(5)<=2019。带不等式约束的最优化问题其实是一个经典问题，我们可以使用众所周知的拉格朗日乘子法解决。因此我使用拉格朗日乘子法，配合上一些常见的拟合函数，尝试解决这个回归问题。

2 拉格朗日乘子法

拉格朗日乘子法是一类经典的解决带约束最优化问题的方法。对于每个不等式 gi(x)<=0，我们引入一个非负参数 λi，对于每个等式 fi(x)=0，我们引入一个非负参数 μi。我们可以根据原问题中的最优化函数 f(x)构造拉格朗日函数。

$$\mathrm{L}(\mathrm{x},\lambda,\mu)=\mathrm{f}(\mathrm{x})+\sum_{i}\lambda i*gi(x)+\sum_{i}\mu i*fi(x)$$

我们将拉格朗日函数的最小化问题转换为对偶问题的最大化问题，找一种数值计算方法将其最优化即可。

对于本问题，我们可以使用matlab下自带的带约束最优化函数fmincon，将原函数，初始值，约束条件传入函数，运行即可。

对于本问题，约束不等式和损失函数如下。

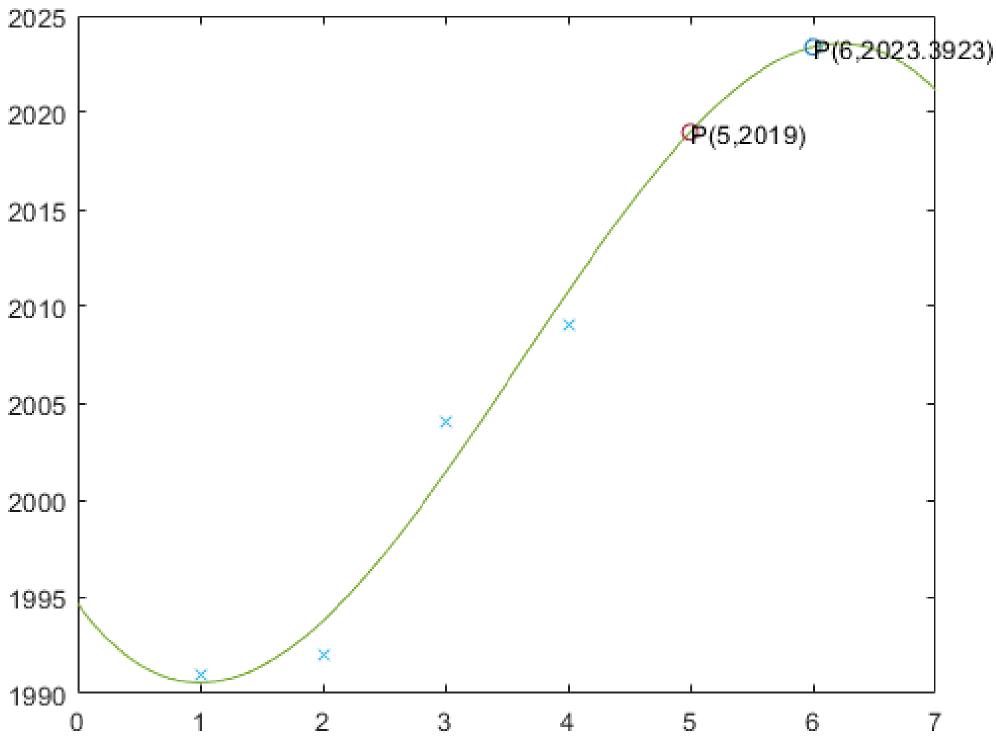
$$\mathrm{L2\_loss}(\mathrm{w})=\sum_{i=1}^{n}(f(x,w)-y)^{\wedge}2$$

$$2019-\mathrm{f}(\mathrm{w},\mathrm{x})<=0$$

3 实验结果

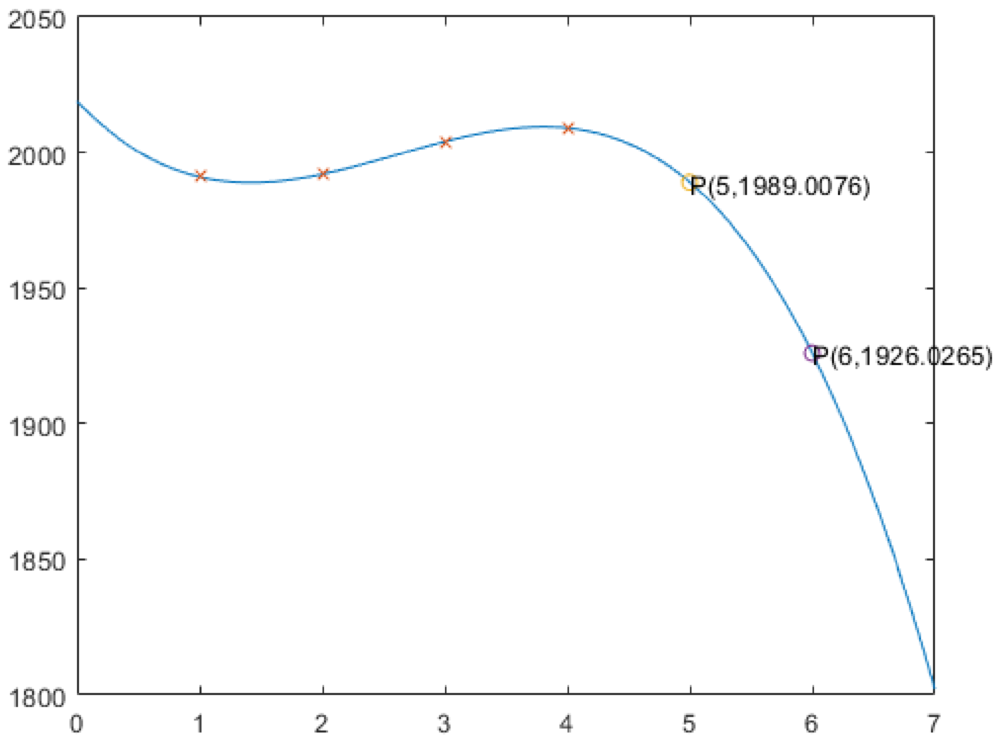
3.1 多项式拟合

将四个点进行插值会得到一个三次多项式，因此我首先使用三次多项式进行测试。定义 f(x)=a*x^3+b*x^2+c*x+d，结果如下。



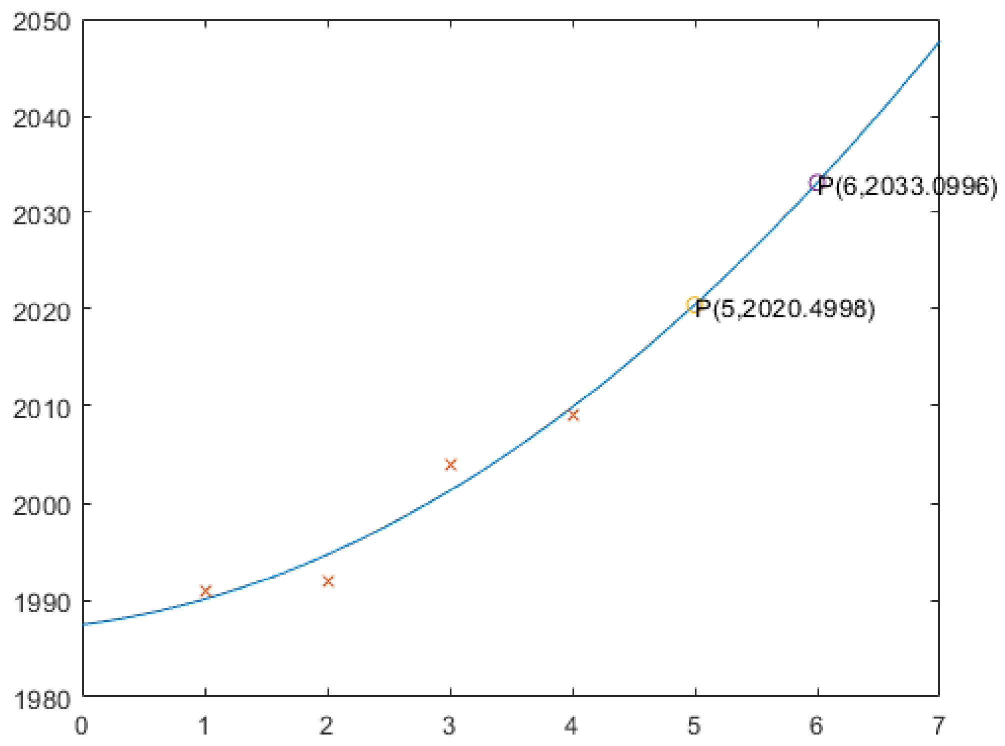

```
L2_loss=13.0435
x=5,y=2019
x=6,y=2023.3922
```

和不带约束拟合，即等价的拉格朗日插值的进行对比。



```
L2_loss=1.118e-06
x=5,y=1989.0076
x=6,y=1926.0265
```

我又尝试拟合了 2 次函数。定义 f(x)=a*x^2+b*x+c，结果如下。




```
L2_loss=16.2
x=5,y=2020.4998
x=6,y=2033.0996
```

3.2 tanh函数。

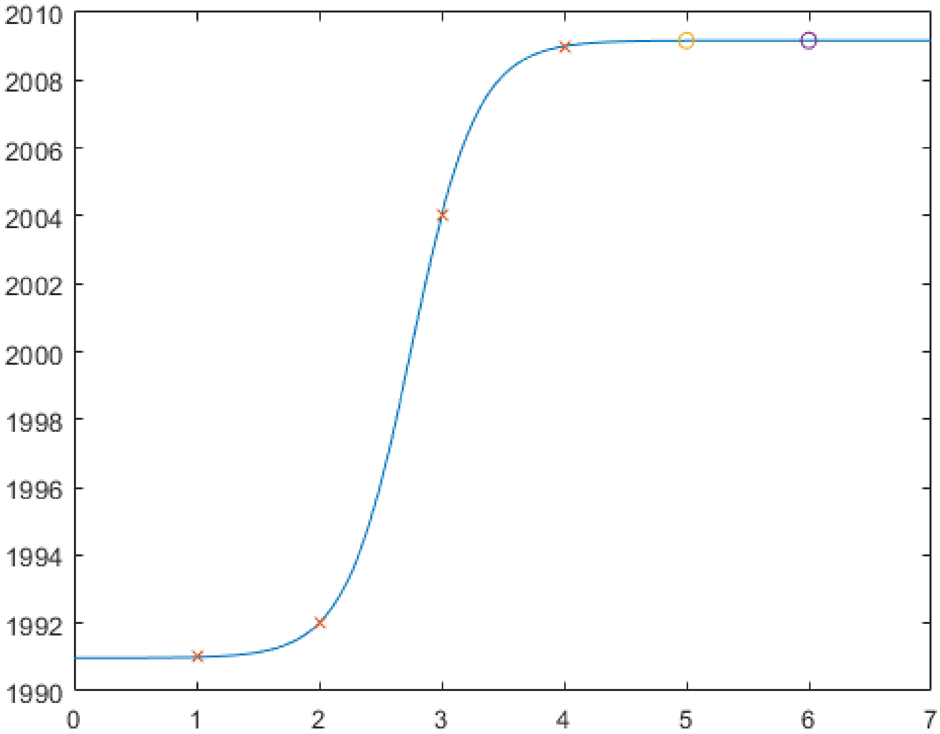
我首先对不带约束的tanh函数进行拟合。Tanh的拟合方式如下。

$$f(x,a,b,c,d)=c*\frac{e^{a*(x-b)}-e^{-a*(x-b)}}{e^{a*(x-b)}+e^{-a*(x-b)}}+d$$

非多项式函数需要调试初始值，否则一般情况下不会收敛。我设置的初始值：

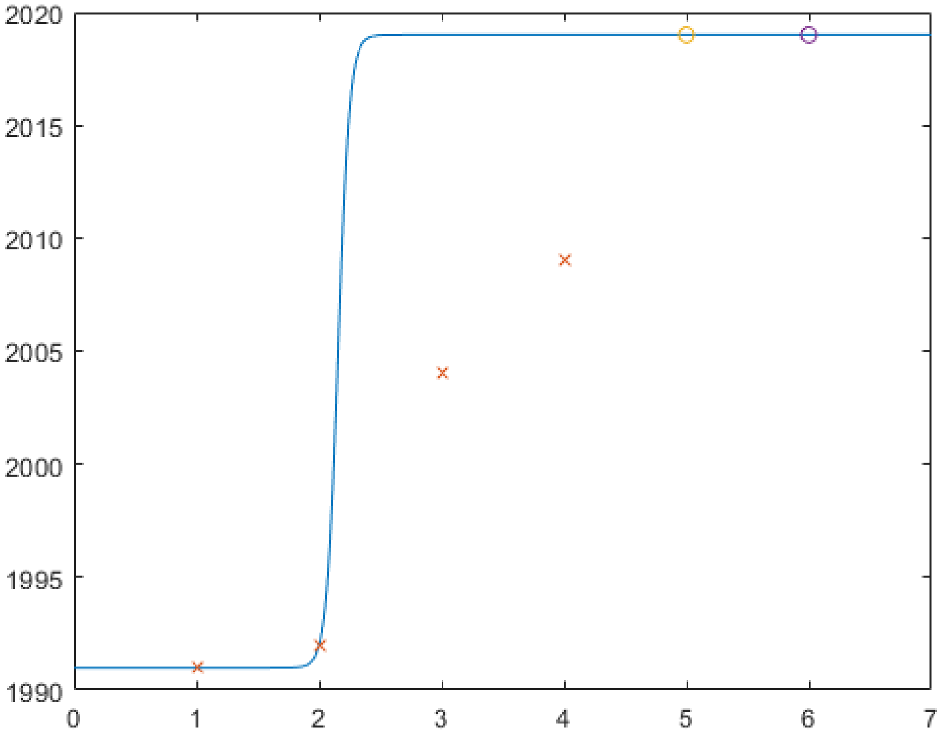
```
a=1,b=2,c=20,d=2000
```

结果如下。




```
L2_loss=2.6552e-10
x=5,y=2009.1656
x=6,y=2009.1695
```

加入约束条件后，其实拟合效果并不是很好。为了满足约束，loss 没有收敛到 0。



```
L2_loss=325
x=5,y=2019
x=6,y=2019
```

3.3 atan函数。

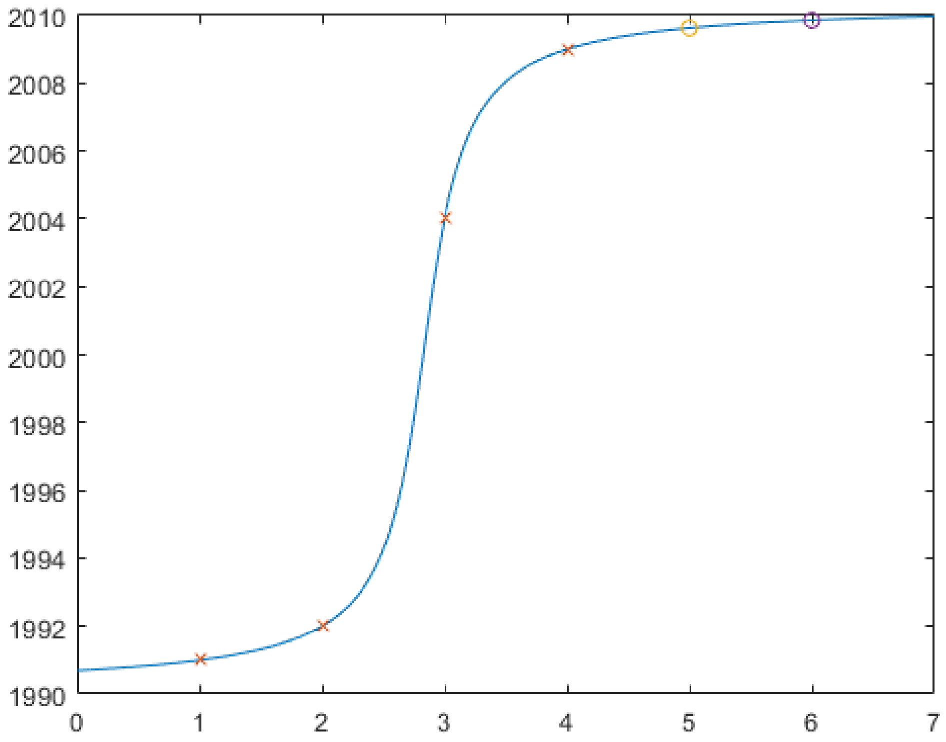
我首先对不带约束的tanh函数进行拟合。Tanh的拟合方式如下。

$$f(x, a, b, c, d) = c * \mathrm{atan}(a * (x - b)) + d$$

初始值:

```
a=0.5,b=1,c=2,d=2000
```

结果如下。



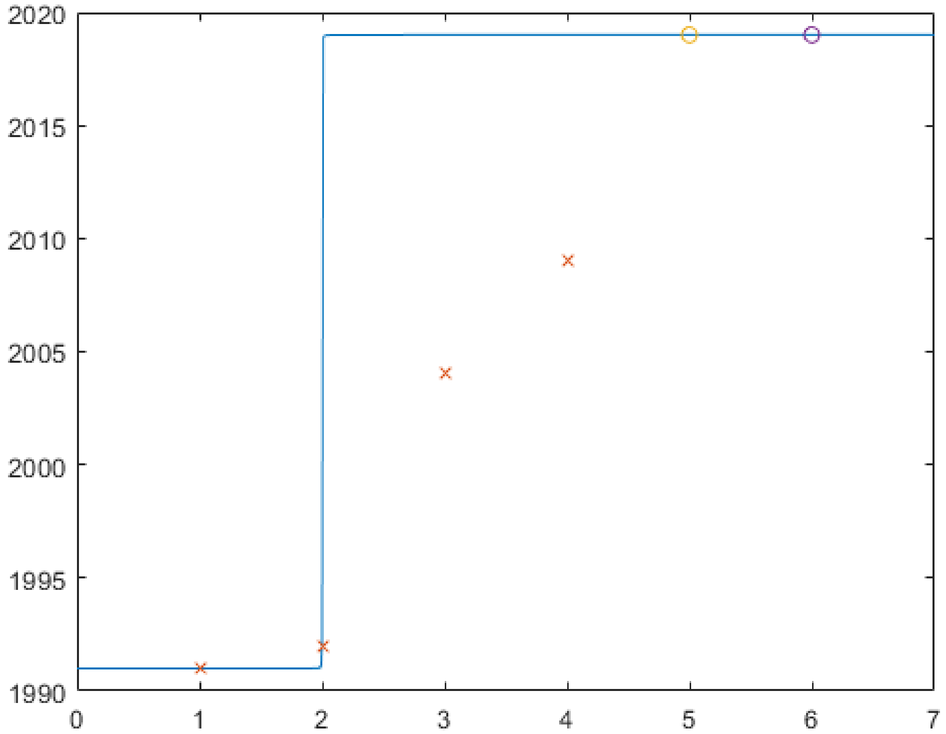

```
L2_loss=1.7142e-09
x=5,y=2009.6205
x=6,y=2009.853
```

加入约束条件后，结果如下。和 tanh 类似，效果也不是很好，没有收敛到 0。不同的初始值得到不同的解。

初始值:

```
a=0.5,b=1,c=2,d=2000
```

图像:

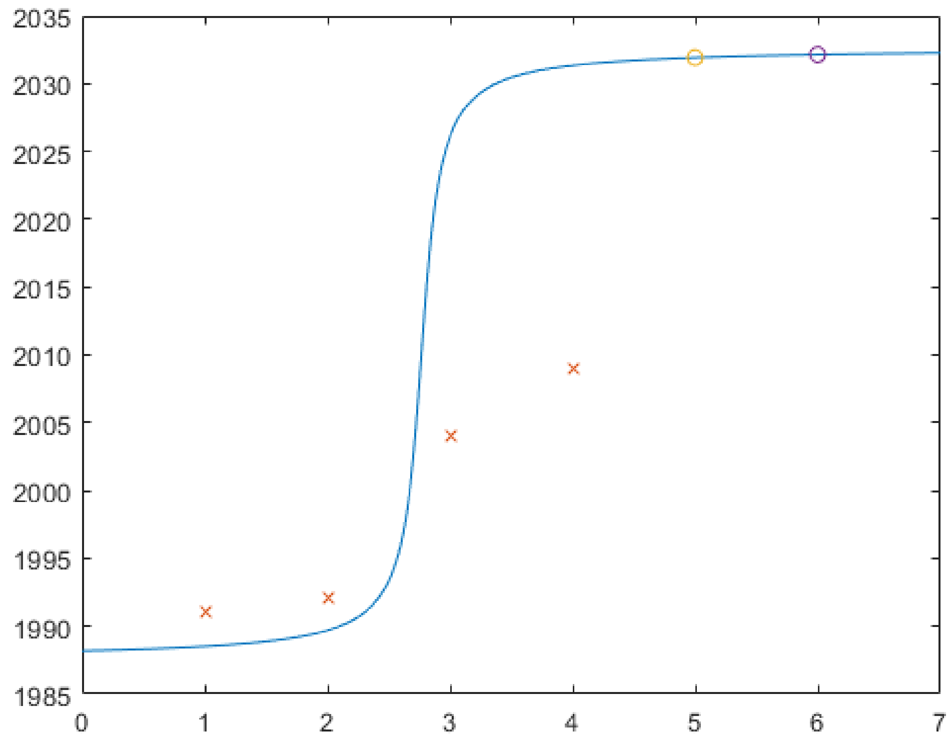



```
L2_loss=325.0079
x=5,y=2019.0005
x=6,y=2019.0006
```

初始值:

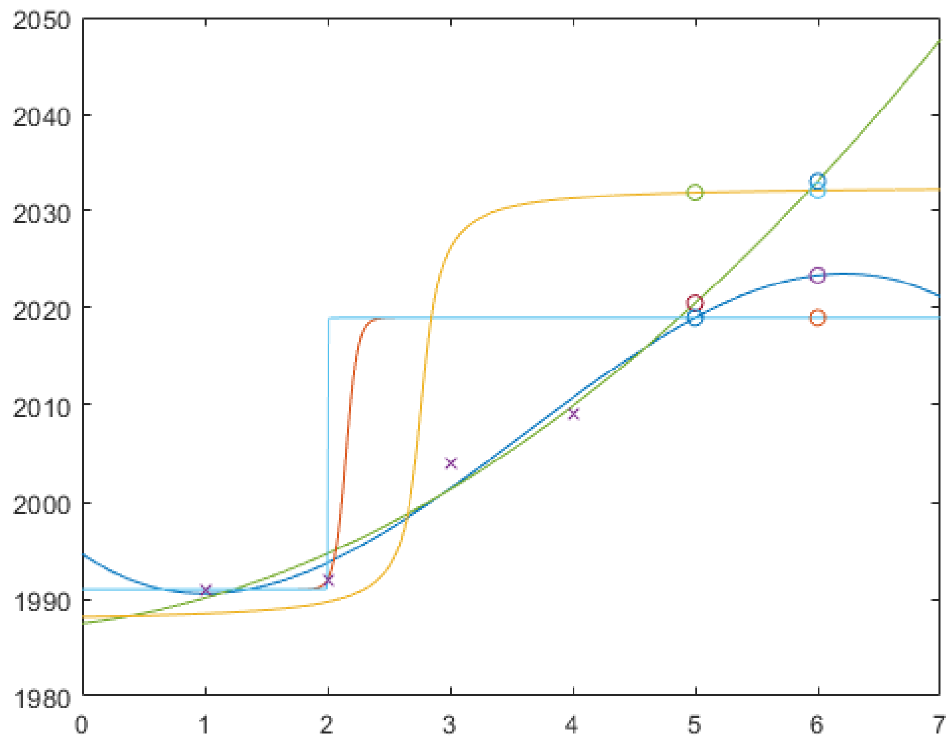
```
a=0.5,b=10,c=2,d=2000
```

图像:




```
L2_loss=998.7521
x=5,y=2031.9241
x=6,y=2032.15
```

总体实验结果:



4 一些新的尝试

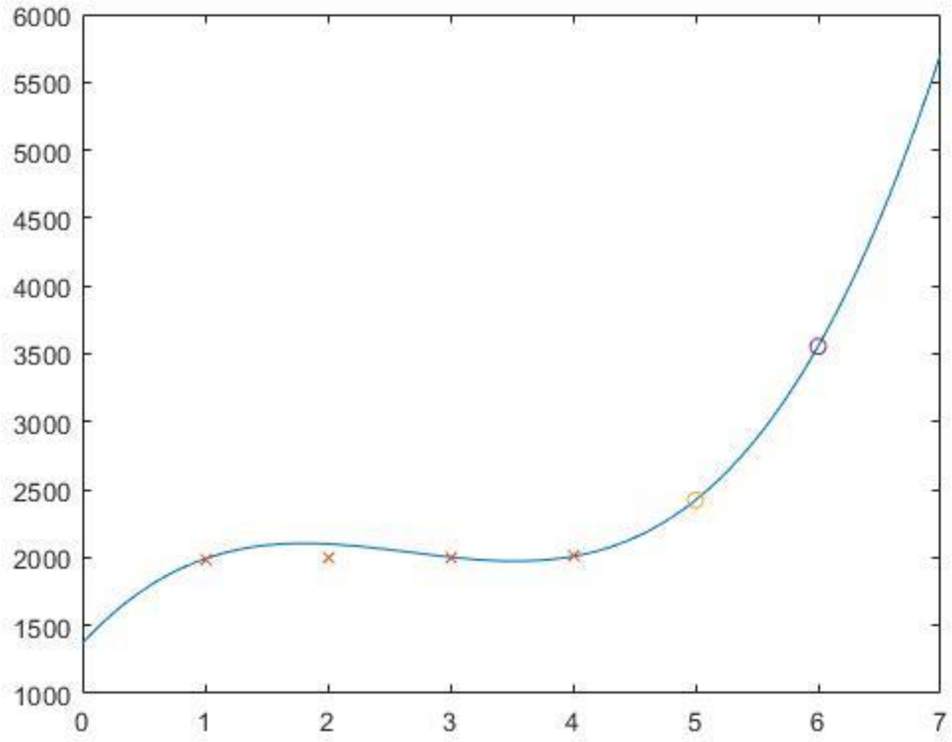
我尝试使用一个新的 loss function 进行测试。

4.1 L1 误差

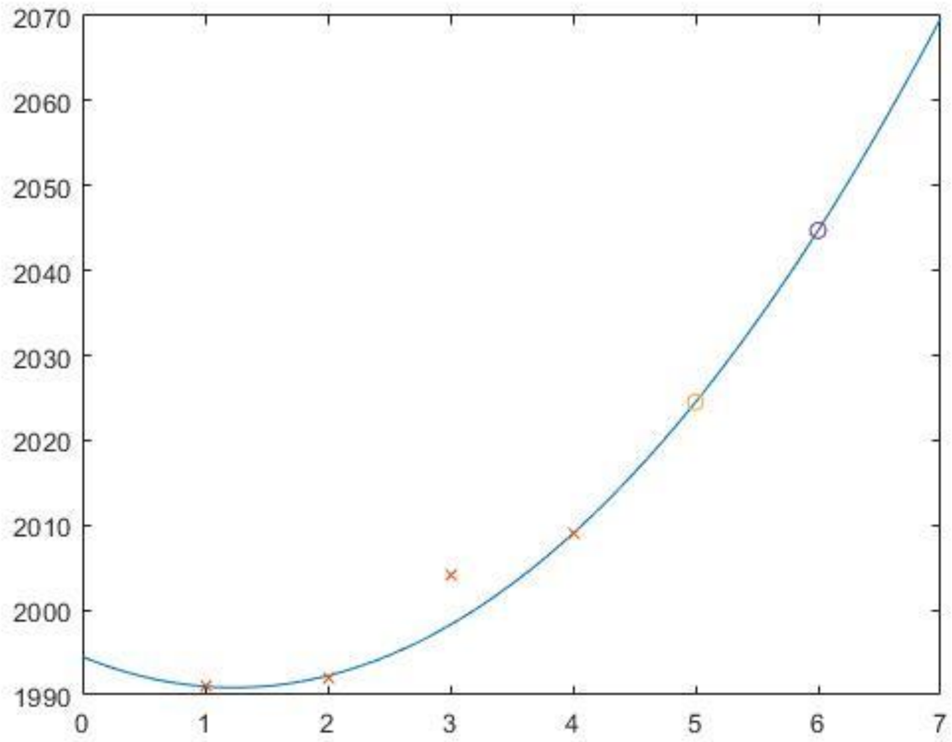
$$\text{L1\_loss(w)} = \sum_{i=1}^{n} |f(x,w) - y|$$

以下是相关测试结果。

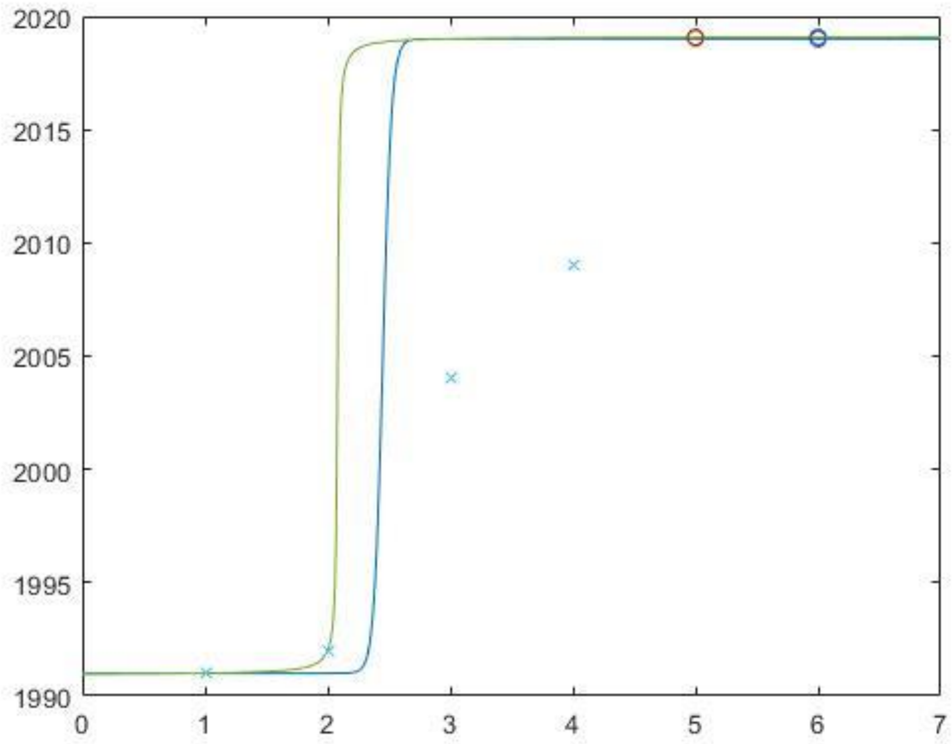
函数	Loss	f(5)	F(6)
三次函数	106.4972	2415.5256	3524.6907
二次函数	6	2024.6301	2045.0752
Tanh 函数	25.9999	2019	2019
Arctan 函数	25.0698	2019.0759	2019.0837



三次


2070
2060
2050
2040
2030
2020
2010
2000
1990
0
1
2
3
4
5
6
7

二次


2020
2015
2010
2005
2000
1995
1990
0
1
2
3
4
5
6
7

tanh 和 atan

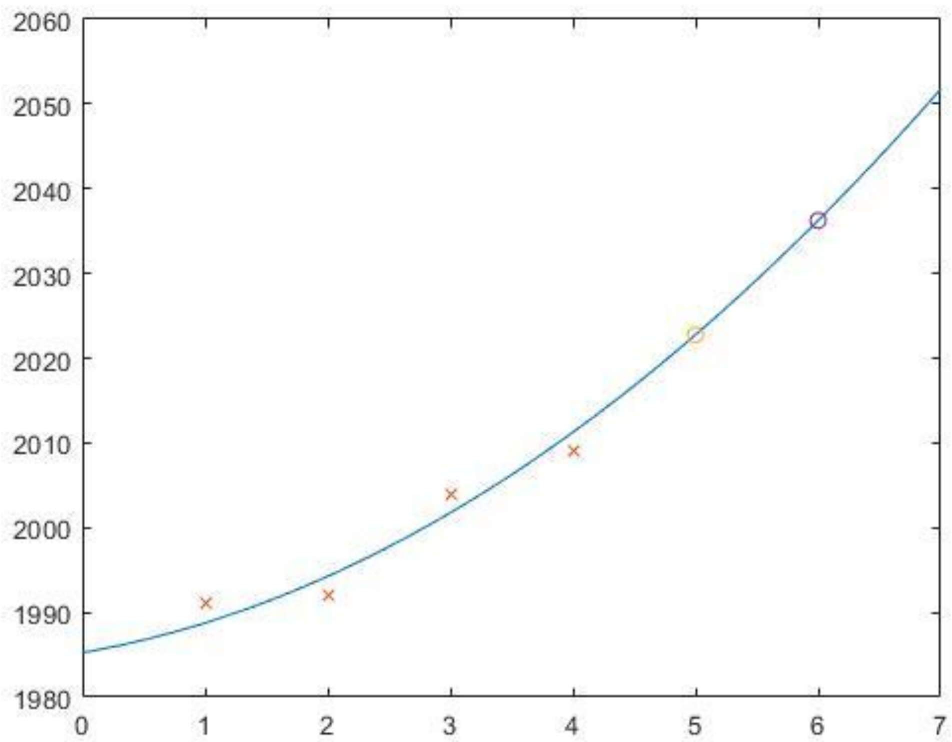
4.2 最大值误差

借鉴了 SVM 的损失函数，我使用以下函数作为损失函数。

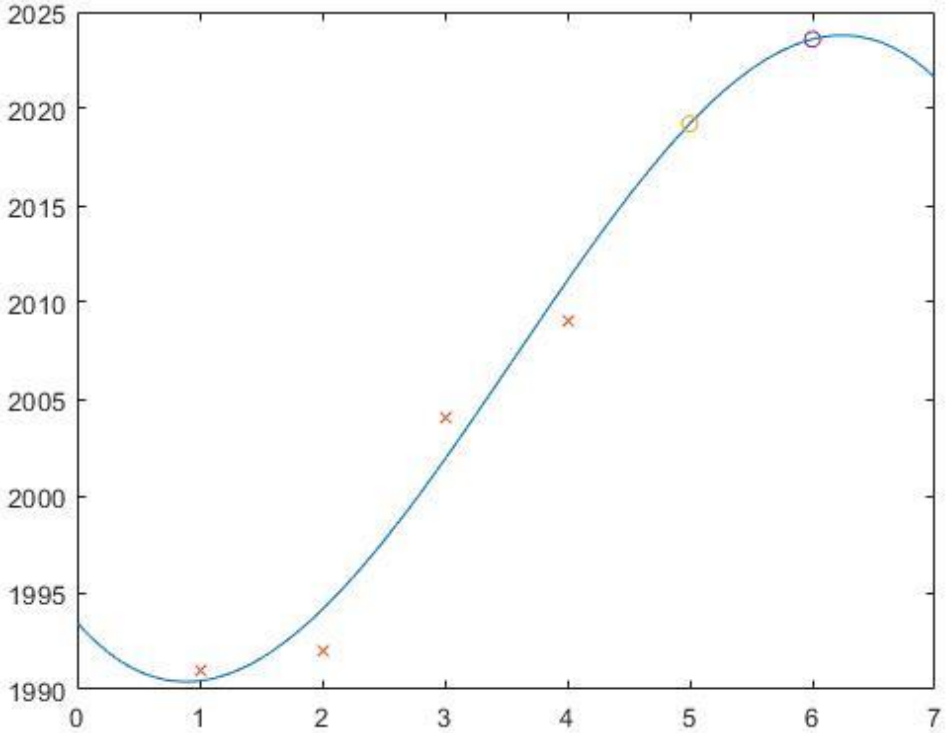
$$\mathrm{Max\_loss(w)} = \max|f(x,w) - y|$$

以下是相关测试结果。

函数	**Loss**	**f(5)**	**F(6)**
三次函数	2.025	2019.3505	2025.1525
二次函数	2.2504	2022.7443	2036.2395
Tanh 函数	15	2019.0019	2019.0019
Arctan 函数	15	2023.8151	2024.4745

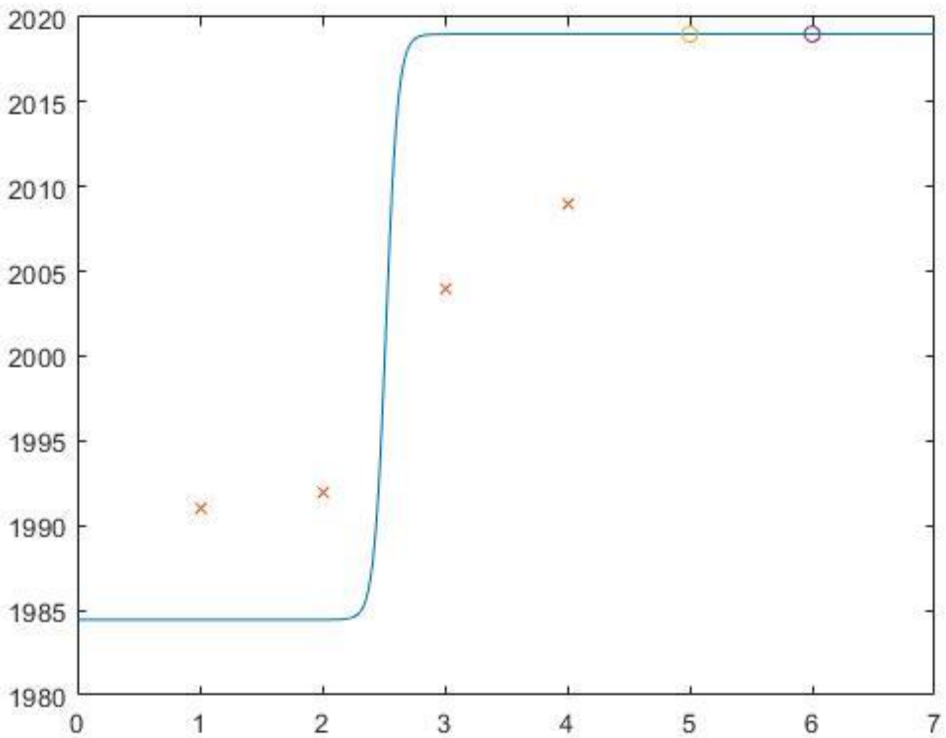


三次



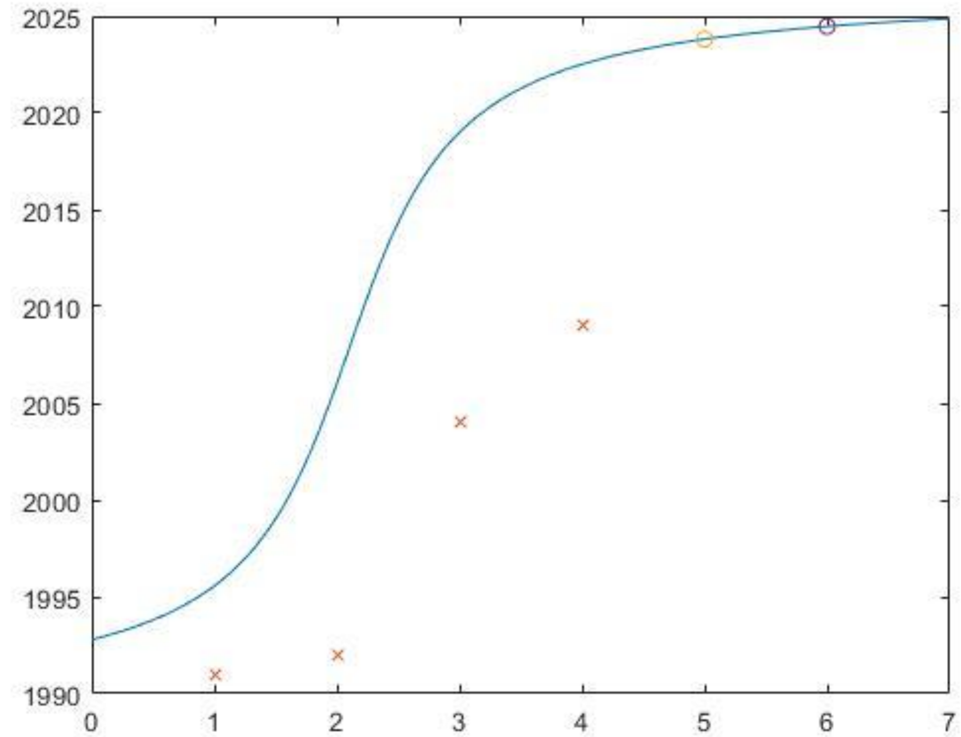
2025
2020
2015
2010
2005
2000
1995
1990
0
1
2
3
4
5
6
7

二次



2020
2015
2010
2005
2000
1995
1990
1985
1980
0
1
2
3
4
5
6
7

tanh



atan

5 结论

根据我们进行的预测，第五个数据点大概集中在 2020 年左右，第六个点出现在 2030 年左右的概率更高一些。以上只是一些带约束曲线拟合的简单尝试，可以看到拟合效果并不算很好，基本都没有收敛，当然我也没有特别仔细地调参。非线性约束条件在拉格朗日乘子法下的总体表现并不是很理想，对初始值的要求很高且很难收敛。或许可以考虑使用一些更优秀的最优化方法，比如牛顿法，或者搭一个深度神经网络。