



逼近与拟合

Norm Approximation, Least-Norm Problems, and Regularization

梁经纬 Jingwei Liang

Institute of Natural Sciences
School of Mathematical Sciences

Lecture 02: 逼近与拟合

2026 年秋季学期

饮水思源 · 爱国荣校

本讲的三类问题

范数逼近 (norm approximation)

§6.1

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|$$

方程通常过定，用残差衡量无法同时满足的程度。



最小范数 (least-norm problem)

§6.2

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|x\| \quad \text{subject to} \quad Ax = b$$

方程通常欠定，在多个精确解中选择结构最简单的一个。



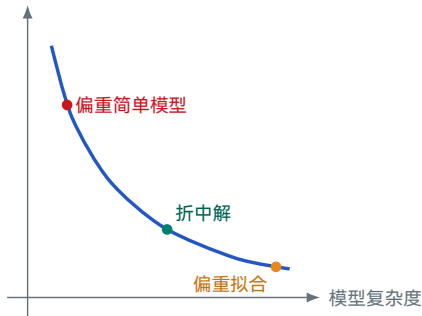
正则化逼近 (regularized approximation)

§6.3

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\| + \gamma \|x\|$$

在拟合误差与解的大小或结构之间折中。

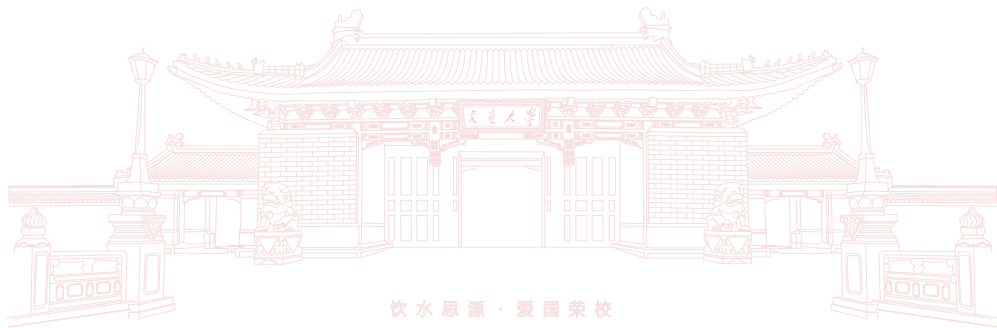
拟合误差



同一矩阵方程，因数据维度与建模目的不同，产生三类基本模型。

01

范数逼近



饮水思源 · 爱国荣校

范数逼近

基本问题 (norm approximation)

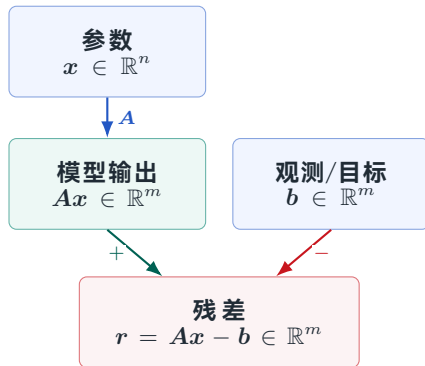
$$\underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m.$$

令

$$r = Ax - b \in \mathbb{R}^m$$

为**残差** (residual)。目标是在给定范数下，使模型输出 Ax 尽可能接近数据 b 。

- ▣ 该问题是凸优化问题，且总有最优解。
- ▣ 最优值为零当且仅当 $b \in \text{range}(A)$ 。



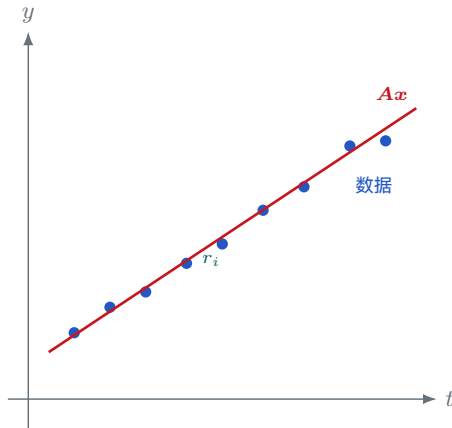
线性组合与回归

将 A 的列写为 $a_1, \dots, a_n$, 则

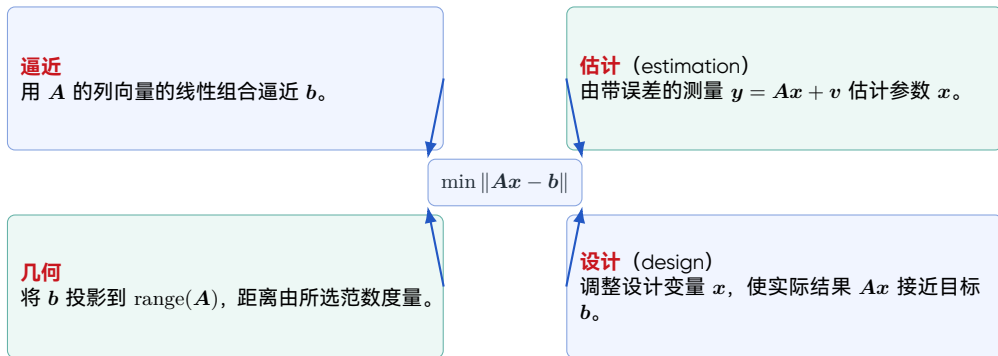
$$Ax = x_1 a_1 + \dots + x_n a_n.$$

范数逼近是在 A 的列向量张成的空间中, 寻找最接近 b 的线性组合。在**回归** (regression) 语言中:

- ▣ a_j 称为**回归变量** (regressor);
- ▣ 最优的 Ax 称为 b 关于这些 regressors 的 regression;
- ▣ r_i 是第 i 个 individual residual。



四种解释

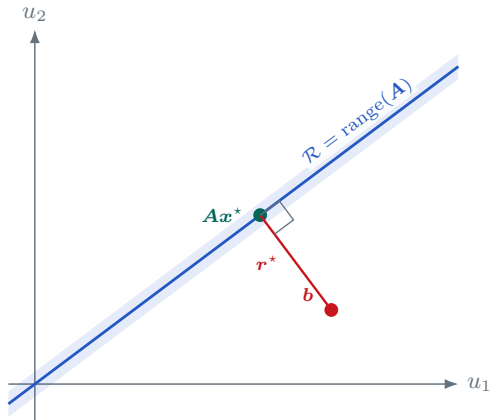


到值域的投影

设 $\mathcal{R} = \text{range}(\mathbf{A}) \subseteq \mathbb{R}^m$ 。令 $\mathbf{u} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ ，原问题等价于

$$\underset{\mathbf{u}}{\text{minimize}} \quad \|\mathbf{u} - \mathbf{b}\| \quad \text{subject to} \quad \mathbf{u} \in \mathcal{R}.$$

因此最优模型输出是 $\mathbf{b}$ 在 $\mathcal{R}$ 上的**范数投影**。若采用 ℓ_2 范数，残差与子空间正交；其他范数下投影的几何性质会改变。



加权残差

加权范数逼近 (weighted norm approximation)

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad \|\mathbf{W}(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})\|, \quad \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{m \times m}.$$

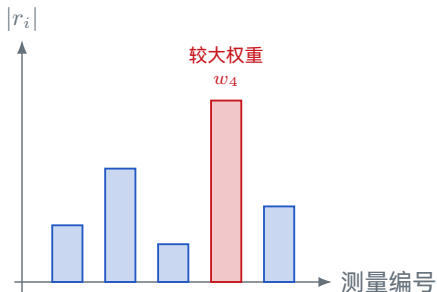
当 $\mathbf{W} = \text{diag}(w_1, \dots, w_m)$ 时, 通常取 $w_i > 0$, 并有

$$\|\mathbf{W}\mathbf{r}\|_2^2 = \sum_{i=1}^m w_i^2 r_i^2.$$

较大的 w_i 表示第 i 个残差更重要, 或该测量更可信。计算上可直接令

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{W}\mathbf{A}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{W}\mathbf{b},$$

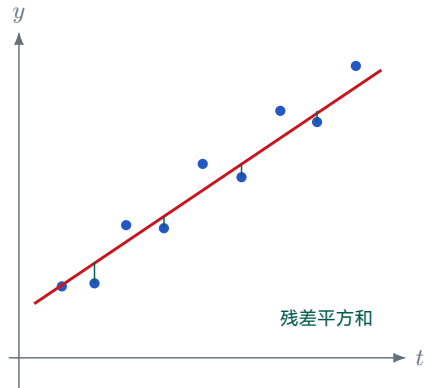
将其转化为普通范数逼近。



最小二乘

当使用欧氏范数时，平方不改变极小点：

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad f(x) = \|Ax - b\|_2^2 = x^\top A^\top Ax - 2b^\top Ax + b^\top b.$$

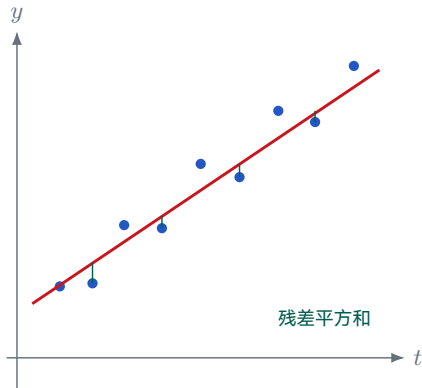


最小二乘

当使用欧氏范数时，平方不改变极小点：

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad f(x) = \|Ax - b\|_2^2 = x^\top A^\top Ax - 2b^\top Ax + b^\top b.$$

$$\nabla f(x) = 2A^\top (Ax - b).$$



最小二乘

当使用欧氏范数时，平方不改变极小点：

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad f(x) = \|Ax - b\|_2^2 = x^\top A^\top Ax - 2b^\top Ax + b^\top b.$$

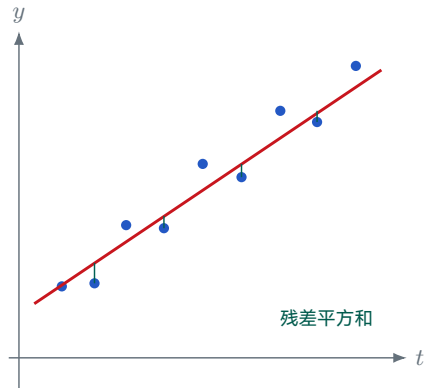
$$\nabla f(x) = 2A^\top (Ax - b).$$

一阶最优性条件给出**正规方程** (normal equations)

$$A^\top Ax = A^\top b.$$

若 A 满列秩，则

$$x^* = (A^\top A)^{-1} A^\top b.$$



最大残差与绝对残差

Chebyshev / minimax approximation

$$\min \|Ax - b\|_{\infty} = \min \max_i |r_i|.$$

等价的线性规划为

$$\begin{aligned} \min_{x, t} \quad & t \\ \text{s.t.} \quad & -t\mathbf{1} \preceq Ax - b \preceq t\mathbf{1}. \end{aligned}$$

Sum of absolute residuals

$$\min \|Ax - b\|_1 = \min \sum_i |r_i|.$$

等价的线性规划为

$$\begin{aligned} \min_{x, t} \quad & \mathbf{1}^{\top} t \\ \text{s.t.} \quad & -t \preceq Ax - b \preceq t. \end{aligned}$$

ℓ_{∞} 控制最坏误差; ℓ_1 对大离群残差的惩罚较温和。

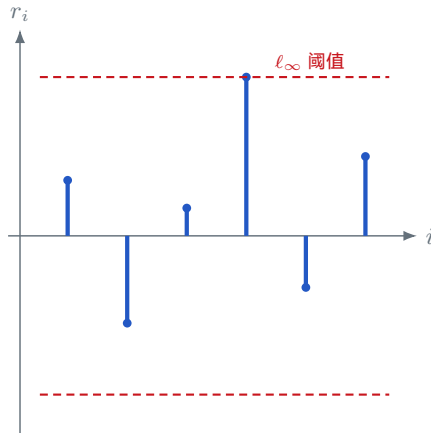
范数如何改变拟合

同一残差向量 $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_m)$ 在不同范数下被不同方式聚合:

$$\|\mathbf{r}\|_1 = \sum_i |r_i|, \quad \|\mathbf{r}\|_2^2 = \sum_i r_i^2,$$

$$\|\mathbf{r}\|_\infty = \max_i |r_i|.$$

- ▣ ℓ_2 : 大残差以平方方式放大;
- ▣ ℓ_1 : 逐项线性累加, 常用于 robust estimation;
- ▣ ℓ_∞ : 直接压低最大绝对残差。



罚函数逼近

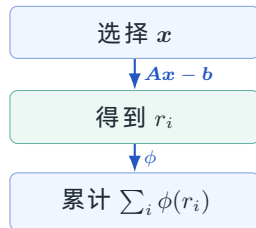
对于 $1 \leq p < \infty$, ℓ_p 目标可等价地写为

$$\sum_{i=1}^m |r_i|^p.$$

更一般地, 给每个残差配置一个凸的**罚函数** (penalty function) ϕ :

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x}, \mathbf{r}}{\text{minimize}} && \sum_{i=1}^m \phi(r_i) \\ & \text{subject to} && \mathbf{r} = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}. \end{aligned} \tag{6.2}$$

ϕ 为凸函数即可保证问题为凸; 常见但非必要的附加性质是对称、非负且 $\phi(0) = 0$ 。



常见罚函数

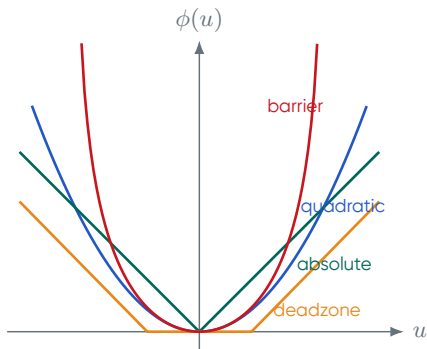
▣ $\phi(u) = |u|^p$: 给出 ℓ_p 范数逼近; $p = 2$ 为最小二乘, $p = 1$ 为绝对残差之和。

▣ deadzone-linear (宽度 $a > 0$):

$$\phi(u) = \begin{cases} 0, & |u| \leq a, \\ |u| - a, & |u| > a. \end{cases}$$

▣ log barrier (上界 $a > 0$):

$$\phi(u) = \begin{cases} -a^2 \log(1 - (u/a)^2), & |u| < a, \\ +\infty, & |u| \geq a. \end{cases}$$



Boyd & Vandenberghe, Section 6.1.2, Example 6.1

同一组数据，四种目标

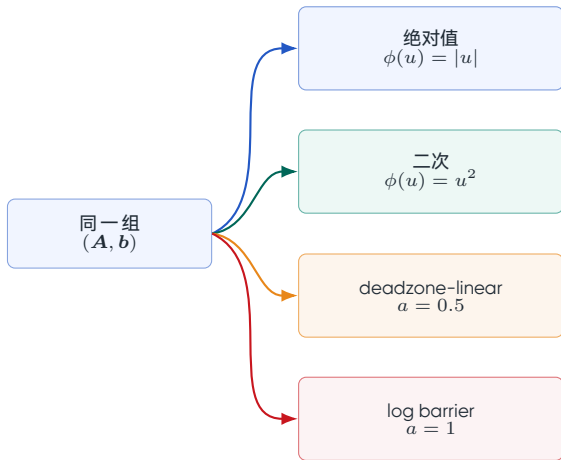
教材固定同一组随机生成的数据

$$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100 \times 30}, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^{100},$$

分别求解

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^{100} \phi((\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})_i).$$

矩阵与观测保持不变，只有 ϕ 改变。因此，最优残差分布的差异可以直接归因于罚函数的形状。



四个最优解 $\Rightarrow$ 四组 residual histograms

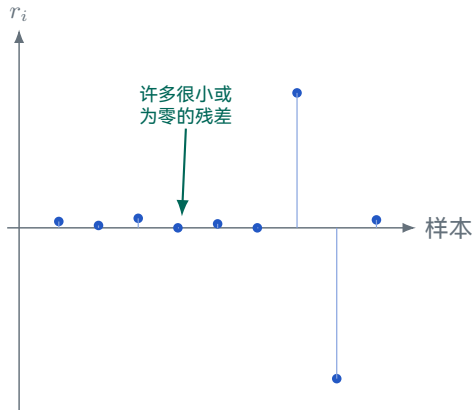
Boyd & Vandenberghe, Section 6.1.2, numerical example preceding Figure 6.2

罚函数的形状

正比例缩放 ϕ 不改变极小点，但**形状**改变不同幅度残差之间的相对权重：

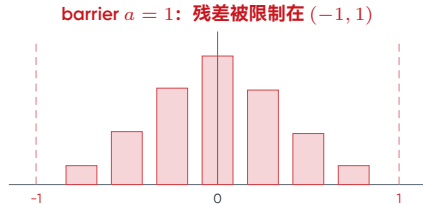
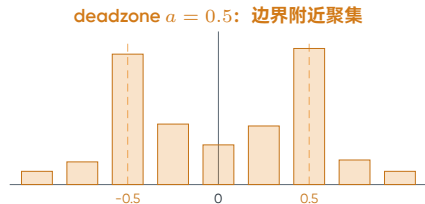
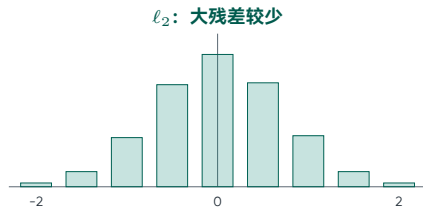
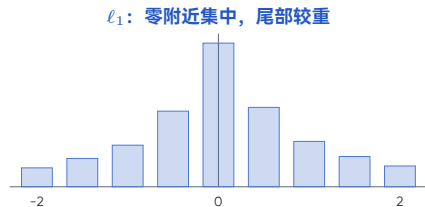
- ▣ 小 $|u|$ 处 ϕ 很小：没有强动力把小残差继续压低；
- ▣ 大 $|u|$ 处增长很快：大残差代价高；
- ▣ ϕ 在某个区间外为 $+\infty$ ：相应残差不可接受。

这解释了为何不同罚函数得到不同的残差分布 (amplitude distribution)。



四种残差分布

同一组 $A \in \mathbb{R}^{100 \times 30}$ 、 $b \in \mathbb{R}^{100}$ 下，罚函数改变了最优残差的 amplitude distribution。



这些图概括 Figure 6.2 的结构特征；柱高为定性重绘，参数与约束区间取自教材数值例。

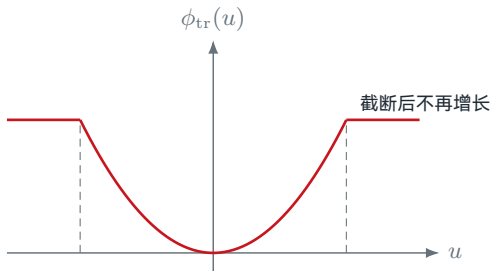
Boyd & Vandenberghe, Section 6.1.2, Figure 6.2 (定性重绘)

离群点

在线性测量 $y_i = \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} + v_i$ 中，**离群点** (outlier) 对应异常大的 $|v_i|$ 。理想上希望降低其影响。考虑截断二次罚函数

$$\phi_{\text{tr}}(u) = \begin{cases} u^2, & |u| \leq M, \\ M^2, & |u| > M. \end{cases} \quad (6.3)$$

它会忽略超过阈值的残差，但不是凸函数，因此相应优化问题一般成为困难的组合优化问题。

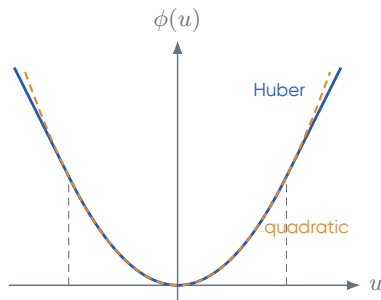


Huber 罚函数

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

Huber penalty 在中心区域与最小二乘一致，在尾部改为线性增长：

- ▣ 小误差保留二次拟合的敏感性；
- ▣ 大误差不再以平方速度主导目标；
- ▣ ϕ_{hub} 凸且可微，得到 robust least-squares approximation。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.1.2, Equation (6.4)

稳健回归

教材的数值例包含 42 个点，其中 40 个点接近同一直线，另有两个明显离群点。拟合 $f(t) = \alpha + \beta t$ 时比较

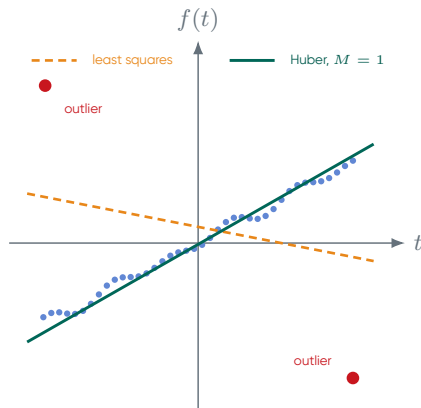
$$\min_{\alpha, \beta} \sum_i (y_i - \alpha - \beta t_i)^2$$

与 Huber 拟合

$$\min_{\alpha, \beta} \sum_i \phi_{\text{hub}}(y_i - \alpha - \beta t_i), \quad M = 1.$$

$ r $	0.5	2	10
r^2	0.25	4	100
$\phi_{\text{hub}}(r)$	0.25	3	19

大残差的代价由二次增长改为线性增长，因此两个离群点不再以平方代价拉偏拟合直线。



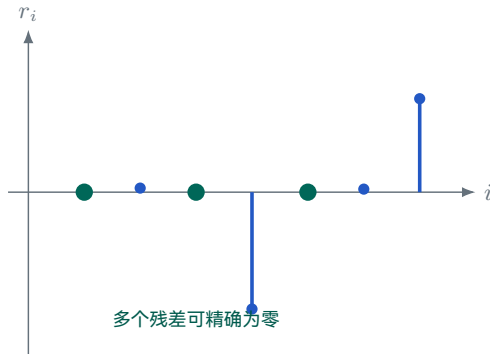
Boyd & Vandenberghe, Section 6.1.2, Example 6.2 and Figure 6.5 (定性重绘)

ℓ_1 与零残差

ℓ_1 罚函数 $\phi(u) = |u|$ 在零点附近的相对权重高于二次罚函数。因此, ℓ_1 范数逼近常使许多残差恰为零或非常小:

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_1 \implies \mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} = b_i \text{ 对许多 } i \text{ 成立.}$$

这也是 ℓ_1 估计常被称为 robust estimation 的一个侧面: 少数大残差可以由疑似异常观测承担。



带约束的范数逼近

一般形式

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\| \quad \text{subject to} \quad x \in \mathcal{C},$$

其中 $\mathcal{C}$ 为凸集时，整个问题仍为凸优化问题。

约束的作用取决于语境：

逼近

排除不可接受的 Ax ，或要求近似结果满足额外结构。

估计

将参数 x 或测量误差的先验知识写成可行域。

几何

将点 b 投影到比线性子空间更一般的集合，例如锥或多面体。

非负约束与区间约束

非负变量 (nonnegative variables)

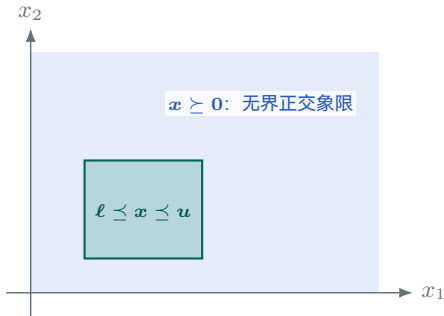
$$\min \|Ax - b\| \quad \text{s.t.} \quad x \succeq 0.$$

适用于功率、强度、速率等本身非负的量。几何上，这是将 b 投影到 A 的列向量生成的**锥**上。

变量界 (variable bounds)

$$\min \|Ax - b\| \quad \text{s.t.} \quad \ell \preceq x \preceq u.$$

在估计中， ℓ, u 表示已知的物理范围；几何上， b 被投影到一个 box 经 A 映射后的集合上。



概率单纯形

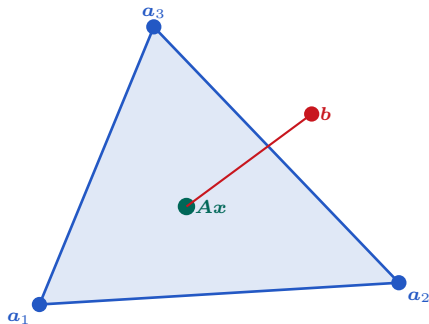
当 x 表示比例或相对频率时，约束为

$$x \succeq 0, \quad \mathbf{1}^\top x = 1.$$

于是

$$Ax = x_1 a_1 + \cdots + x_n a_n$$

是 A 的列向量的**凸组合**。因此，此问题是在 $\text{conv}\{a_1, \dots, a_n\}$ 中逼近 b 。

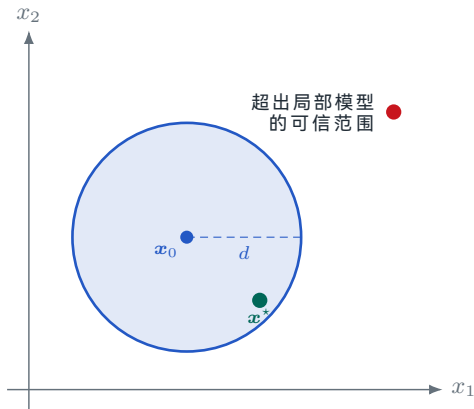


范数球约束

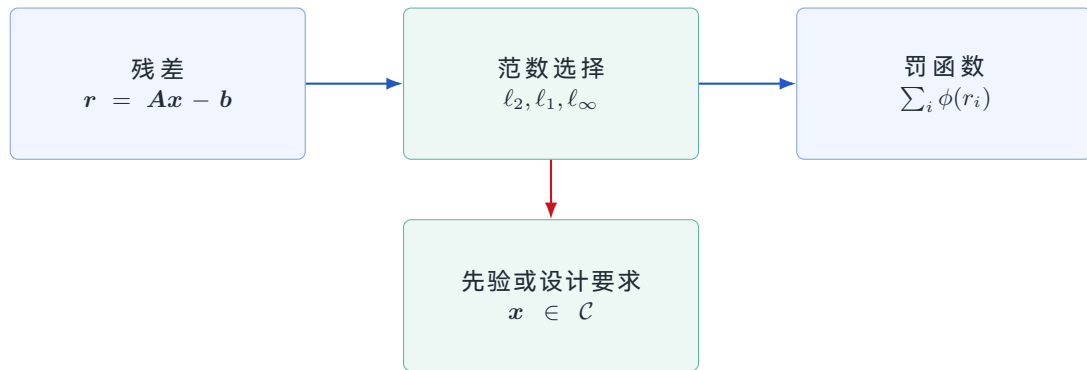
局部可信的参数范围

$$\min \|Ax - b\| \quad \text{s.t.} \quad \|x - x_0\| \leq d.$$

- ▣ x_0 可看作先验估计, d 表示允许偏离的最大幅度;
- ▣ 也可视作**信赖域** (trust region): 若 Ax 只是非线性模型 $f(x)$ 在 x_0 附近的线性近似, 则只在该球内信任它;
- ▣ 这一思路会在正则化中再次出现。



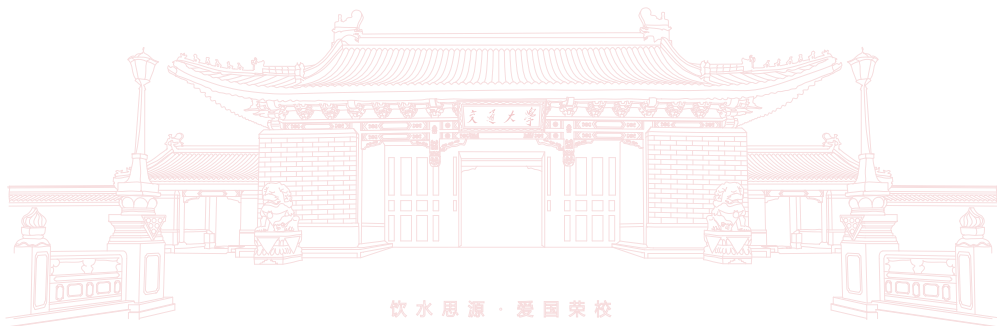
本节结构



范数、罚函数与约束共同决定何谓“好的逼近”。

02

最小范数问题

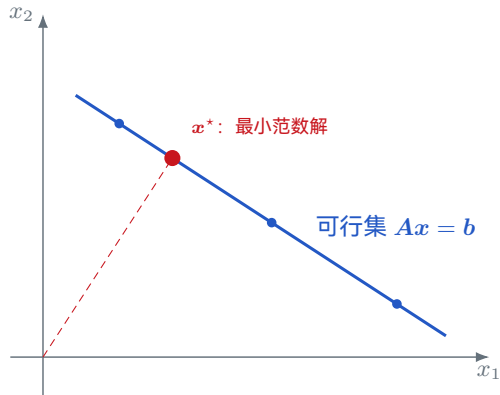


最小范数问题

最小范数问题 (least-norm problem)

$$\begin{array}{ll}\text{minimize}_{x \in \mathbb{R}^n} & \|x\| \\ \text{subject to} & Ax = b.\end{array}$$

- 只有当 $b \in \text{range}(A)$ 时可行。
- 这是凸优化问题；只要方程可行，最优解就存在。
- 不失一般性可假设 A 满行秩；当 $m < n$ 时，方程少于未知量，通常有许多可行解。
- 在全部满足 $Ax = b$ 的解中，选择按给定范数最小的一个。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.2, equation (6.5)

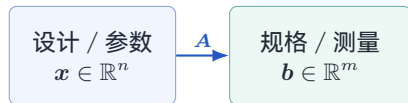
欠定方程的选择原则

控制与设计解释 (control / design)

x 是设计变量或控制输入, $Ax = b$ 是必须满足的规格。
最小范数解以最小的输入幅度实现这些规格。

估计解释 (estimation)

$Ax = b$ 是 $m < n$ 个无噪声测量; 它们不足以唯一确定参数 x 。
若先验认为“小参数比大参数更可信”, 便选择范数最小的可行参数。



欠定: $m < n$
可行 x 不唯一

以 $\|x\|$
选择一个解

几何解释

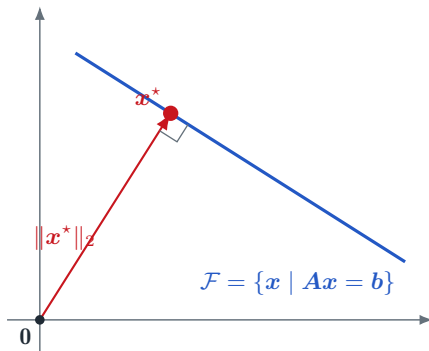
可行集

$$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

是一个仿射集。最小范数问题是在 $\mathcal{F}$ 内寻找离原点最近的点：

$$x^* \in \operatorname{argmin}_{x \in \mathcal{F}} \|x - 0\|.$$

当范数为 ℓ_2 范数时， x^* 是原点到 $\mathcal{F}$ 的正交投影；投影方向与仿射集平行方向正交。



几何解释

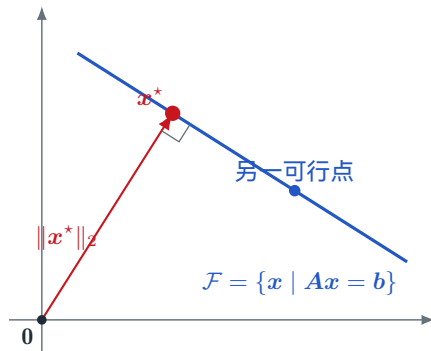
可行集

$$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = b\}$$

是一个仿射集。最小范数问题是在 $\mathcal{F}$ 内寻找离原点最近的点：

$$x^* \in \operatorname{argmin}_{x \in \mathcal{F}} \|x - 0\|.$$

当范数为 ℓ_2 范数时， x^* 是原点到 $\mathcal{F}$ 的正交投影；投影方向与仿射集平行方向正交。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.2, geometric interpretation

消去等式约束

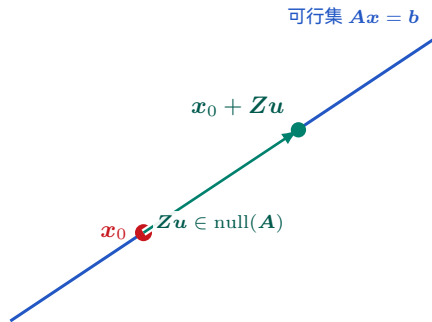
设 x_0 是 $Ax = b$ 的任一特解, Z 的列构成 $\text{null}(A)$ 的一组基。则全部可行解恰好为

$$x = x_0 + Zu, \quad u \in \mathbb{R}^k.$$

因此原问题等价于

$$\text{minimize}_{u \in \mathbb{R}^k} \|x_0 + Zu\|.$$

- ▣ Zu 在零空间内移动, 不改变 Ax : $AZu = 0$ 。
- ▣ “带等式约束的最小范数”化为“无约束的范数逼近”。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.2, reformulation as norm approximation

最小范数与范数逼近

Norm approximation

$$\text{minimize}_x \|Ax - b\|.$$

给定目标 b ，在 $\text{range}(A)$ 中寻找最接近它的输出。
残差在输出空间 $\mathbb{R}^m$ 中度量。

Least-norm problem

$$\text{minimize}_x \|x\| \quad \text{subject to } Ax = b.$$

在精确满足目标的输入中选择最小者。
范数在变量空间 $\mathbb{R}^n$ 中度量。



最小二范数解

假设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 满行秩且 $m < n$ 。对

$$\text{minimize}_x \|x\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad Ax = b$$

引入乘子 $\nu \in \mathbb{R}^m$ 。

$$2x^* + A^\top \nu^* = 0, \quad Ax^* = b.$$

满行秩保证 $AA^\top \succ 0$ ，因而下式可逆。

最小二范数解

假设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 满行秩且 $m < n$ 。对

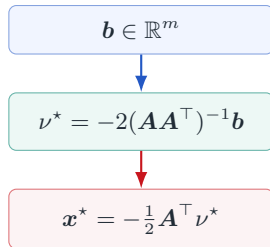
$$\text{minimize}_x \|x\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad Ax = b$$

引入乘子 $\nu \in \mathbb{R}^m$ 。

$$2x^* + A^\top \nu^* = 0, \quad Ax^* = b.$$

满行秩保证 $AA^\top \succ 0$ ，因而下式可逆。

$$x^* = -\frac{1}{2}A^\top \nu^*, \quad -\frac{1}{2}AA^\top \nu^* = b.$$



最小二范数解

假设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 满行秩且 $m < n$ 。对

$$\text{minimize}_x \|x\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad Ax = b$$

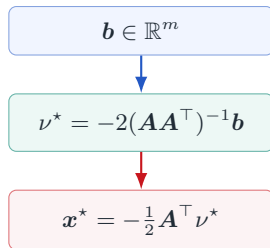
引入乘子 $\nu \in \mathbb{R}^m$ 。

$$2x^* + A^\top \nu^* = 0, \quad Ax^* = b.$$

满行秩保证 $AA^\top \succ 0$ ，因而下式可逆。

$$x^* = -\frac{1}{2}A^\top \nu^*, \quad -\frac{1}{2}AA^\top \nu^* = b.$$

$$x^* = A^\top (AA^\top)^{-1} b.$$

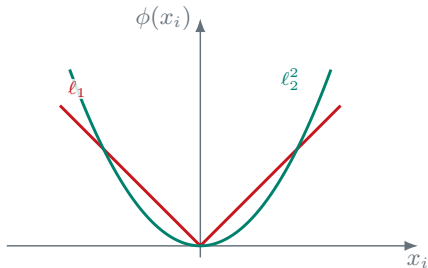


最小罚函数问题

以可分离的 penalty function ϕ 替换范数:

$$\begin{array}{ll}\text{minimize}_{\mathbf{x}} & \phi(x_1) + \cdots + \phi(x_n) \\ \text{subject to} & \mathbf{Ax} = \mathbf{b}.\end{array}$$

- ▣ 假设 ϕ convex、nonnegative, 且 $\phi(0) = 0$ 。
- ▣ $\phi(x_i)$ 表示对第 i 个系数幅度的代价; 目标函数累计所有代价。
- ▣ 与 §6.1 的 penalty approximation 结构相同, 只是被惩罚的对象从 residual r_i 换为 coefficient x_i 。



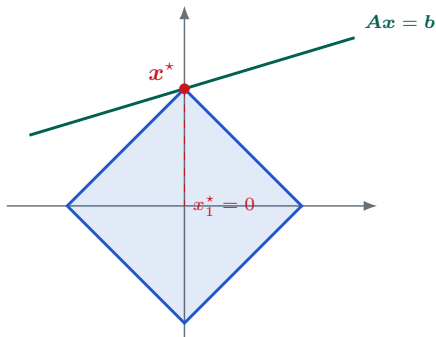
Boyd & Vandenberghe, Section 6.2, equation (6.6)

ℓ_1 范数与稀疏解

$$\text{minimize}_x \|x\|_1 \quad \text{subject to} \quad Ax = b.$$

当 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 满行秩且 $m < n$ 时, least ℓ_1 -norm problem 倾向于给出许多分量为零的解 (sparse solution)。

- ▣ ℓ_1 单位球的角点位于坐标轴上。
- ▣ 仿射可行集首次接触某个缩放后的 ℓ_1 球时, 接触点常落在角点或低维面上。

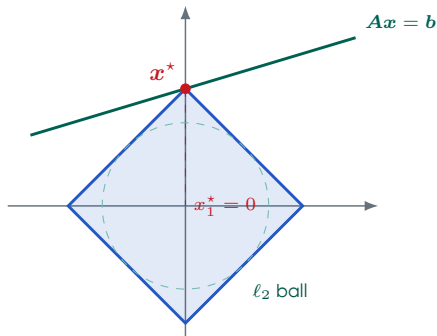


ℓ_1 范数与稀疏解

$$\text{minimize}_x \|x\|_1 \quad \text{subject to} \quad Ax = b.$$

当 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 满行秩且 $m < n$ 时, least ℓ_1 -norm problem 倾向于给出许多分量为零的解 (sparse solution)。

- ▣ ℓ_1 单位球的角点位于坐标轴上。
- ▣ 仿射可行集首次接触某个缩放后的 ℓ_1 球时, 接触点常落在角点或低维面上。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.2, sparse solutions via least ℓ_1 -norm

稀疏支持集的枚举

若预先指定一个支持集 $S \subseteq \{1, \dots, n\}$, $|S| = m$, 并令其余分量为零, 则

$$A_S x_S = b.$$

若 A_S 可逆, 就得到一个至多含 m 个非零分量的可行解。

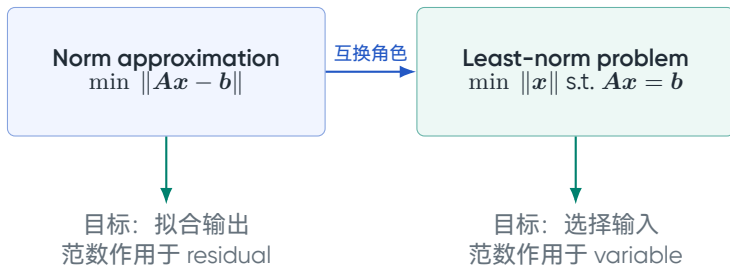
- ▣ 这说明“稀疏可行解”并不罕见。
- ▣ 若要在这类至多含 m 个非零分量的候选中寻找范数最小者, 最坏需比较 $\binom{n}{m}$ 个大小为 m 的支持集。
- ▣ least ℓ_1 -norm 提供一个凸优化 heuristic: 以一次可解的凸问题寻找稀疏且小的解。

columns of A



choose $S = \{2, 5\}$
solve $A_S x_S = b$

两类逼近问题



最小范数问题的两个典型结果

Euclidean norm

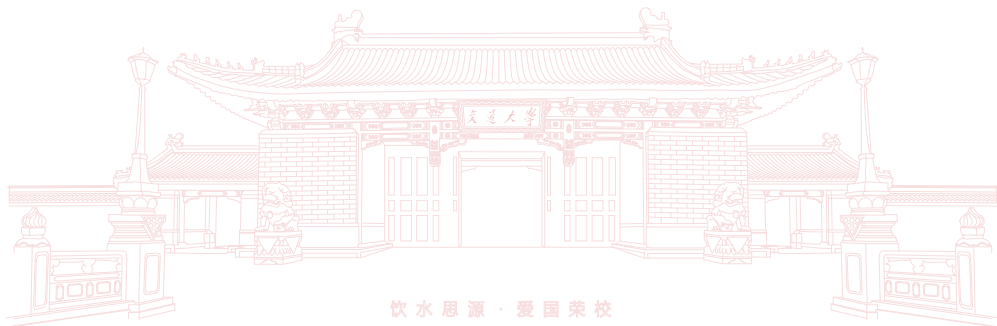
$$x^* = A^\top (AA^\top)^{-1}b \quad (A \text{ 满行秩}).$$

ℓ_1 norm

凸建模可作为寻找 sparse solution 的有效 heuristic。

03

正则化逼近



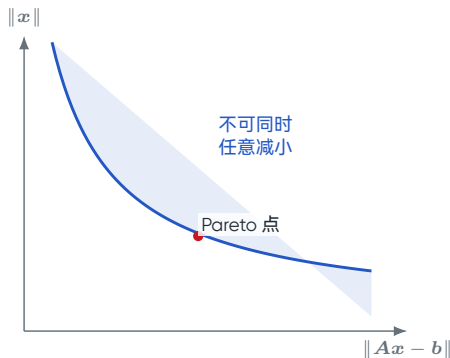
两个目标

minimize $(\|Ax - b\|, \|x\|)$ with respect to $\mathbb{R}_+^2$.

第一个目标衡量拟合误差 (residual norm), 第二个目标衡量解的大小。

两个范数可以不同:

$\|Ax - b\|$ 定义在 $\mathbb{R}^m$, $\|x\|$ 定义在 $\mathbb{R}^n$.



Pareto 曲线的端点

小范数端

$$x = 0 \implies (\|Ax - b\|, \|x\|) = (\|b\|, 0).$$

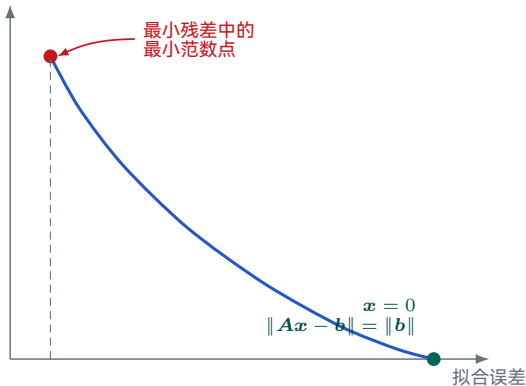
小残差端

令

$$C = \operatorname{argmin}_x \|Ax - b\|.$$

在 C 中选择最小范数点。若两项均为 ℓ_2 范数，该点唯一，为 $A^\dagger b$ 。

解的大小



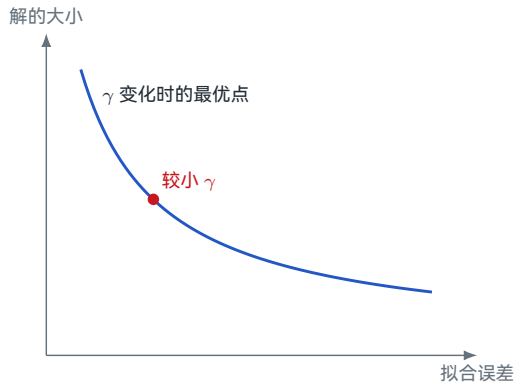
标量化

将两项目标合成一个目标:

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\| + \gamma \|x\|, \quad \gamma > 0. \quad (6.8)$$

常用的平方 ℓ_2 形式为

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|_2^2 + \delta \|x\|_2^2, \quad \delta > 0. \quad (6.9)$$



标量化

将两项目标合成一个目标:

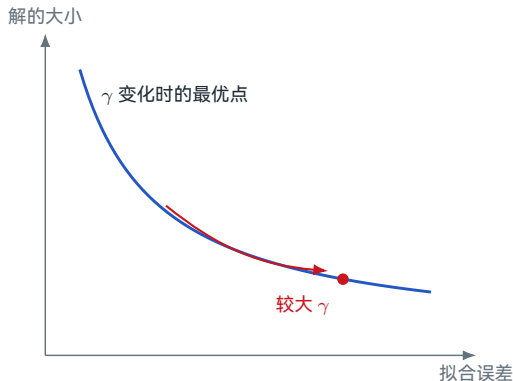
$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\| + \gamma \|x\|, \quad \gamma > 0. \quad (6.8)$$

常用的平方 ℓ_2 形式为

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|_2^2 + \delta \|x\|_2^2, \quad \delta > 0. \quad (6.9)$$

参数的作用

γ 或 δ 增大时, 模型更偏好较小的 x , 允许较大的拟合误差。



正则化的解释

参数估计

$\|x\|$ 小表示先验上更可信;
惩罚项编码了对参数幅度的知识。

工程设计

$\|Ax - b\|$ 是性能偏差;
 $\|x\|$ 是控制或资源成本。

模型可信度

若 Ax 只是 $f(x)$ 的局部
线性近似,
小步长使近似更可信。

同一个数学项 $\gamma\|x\|$ 可以来自统计先验、设计代价或局部模型的适用范围; 选择它之前需要说明其物理含义。

Tikhonov 正则化

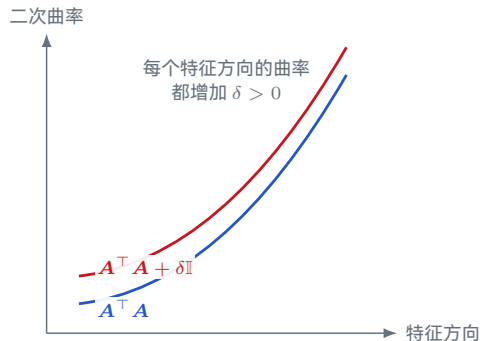
$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad & \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \delta \|\mathbf{x}\|_2^2 \\ & = \mathbf{x}^\top (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \delta \mathbf{I}) \mathbf{x} - 2\mathbf{b}^\top \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^\top \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

一阶条件给出

$$(\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \delta \mathbf{I}) \mathbf{x} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}, \quad \mathbf{x}_\delta = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \delta \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{b}.$$

关键性质

对任意 $\delta > 0$, $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \delta \mathbf{I} \succ 0$ 。因此不要求 $\mathbf{A}$ 满列秩, 也不要求 m 与 n 之间有特定关系。

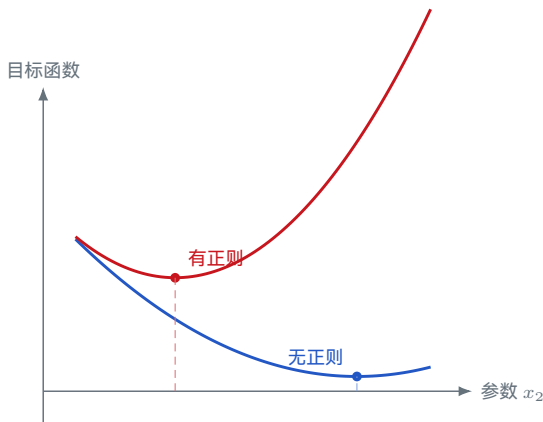


病态系统中的折中

设 A 在某个方向上的增益很小。为了使 Ax 匹配 b ，最小二乘解可能在该方向取很大的系数。

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2 \rightsquigarrow \text{小残差}$$

但相应的 $\|x\|_2$ 可能很大。Tikhonov 正则化不再强迫精确匹配，而是限制该放大效应。



Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.2; 病态情形的定性示意

二阶差分平滑

若 x_i 表示区间 $[0, 1]$ 上的采样值，则

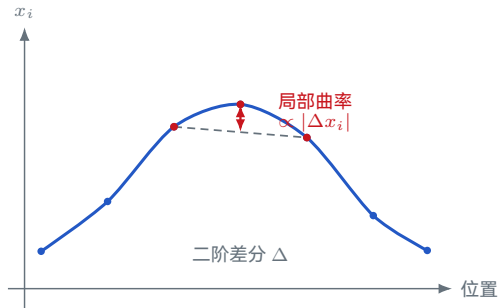
$$(\Delta x)_i = n^2(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}), \quad i = 2, \dots, n-1,$$

近似二阶导数。 Δx 小意味着曲率小。

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|_2^2 + \delta \|\Delta x\|_2^2 + \eta \|x\|_2^2.$$

矩阵 Δ 是带状的；投影时只展示局部结构：

$$\Delta \propto \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}.$$

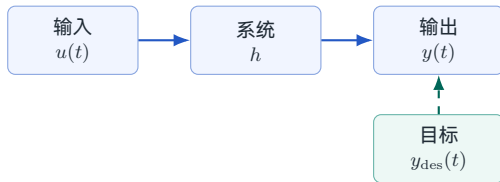


最优输入设计

线性动态系统的输入 $u(0), \dots, u(N)$ 与输出满足卷积关系

$$y(t) = \sum_{\tau=0}^t h(\tau)u(t-\tau), \quad t = 0, \dots, N.$$

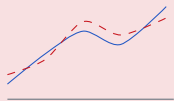
其中 h 是 impulse response (卷积核)。目标是选择输入信号，使输出尽量跟踪 y_{des} 。



三个性能指标

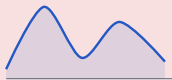
跟踪误差

$$J_{\text{track}} = \frac{1}{N+1} \sum_{t=0}^N (y(t) - y_{\text{des}}(t))^2.$$



输入幅度

$$J_{\text{mag}} = \frac{1}{N+1} \sum_{t=0}^N u(t)^2.$$



输入变化

$$J_{\text{der}} = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} (u(t+1) - u(t))^2.$$



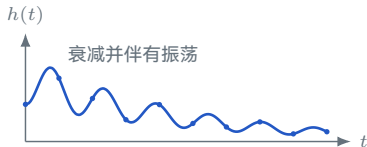
$$\underset{u}{\text{minimize}} \quad J_{\text{track}} + \delta J_{\text{der}} + \eta J_{\text{mag}}, \quad \delta, \eta \geq 0.$$

Boyd & Vandenberghe, Example 6.3

输入设计的数值设置

教材采用 $N = 200$ 。对 $t = 0, \dots, 200$ ，系统的 impulse response 为

$$h(t) = \frac{1}{9}(0.9)^t(1 - 0.4 \cos(2t)).$$



逐步增强正则化

$\delta = 0, \eta = 0.005$ 跟踪误差小；输入幅度大且变化快。

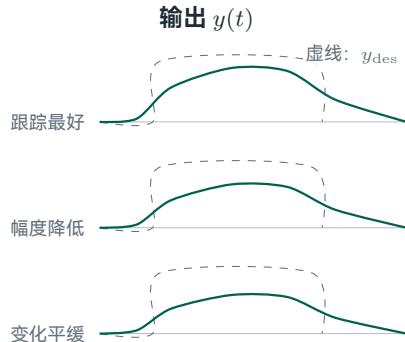
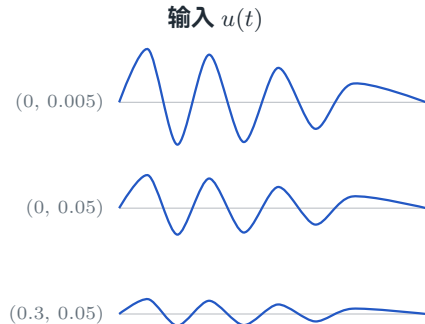
$\delta = 0, \eta = 0.05$ 输入幅度降低；跟踪误差随之增加。

$\delta = 0.3, \eta = 0.05$ 输入明显平滑；跟踪误差仅小幅增加。

三个解使用同一系统和同一目标轨迹，因此可以直接观察 η 与 δ 分别对幅度和变化速度的作用。

Boyd & Vandenberghe, Example 6.3 and Figure 6.6 (定性重绘)

正则化改变输入



左侧行标依次给出 (δ, η) 。增大 η 降低输入幅度；再增大 δ 抑制快速变化，而输出跟踪只进一步损失少量精度。

Boyd & Vandenberghe, Example 6.3 and Figure 6.6 (定性重绘)

ℓ_1 正则化

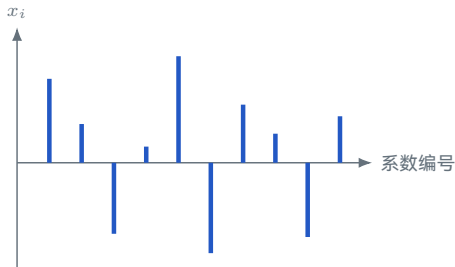
$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|_2 + \gamma \|x\|_1. \quad (6.11)$$

该问题在保持拟合能力的同时，倾向于使许多 x_i 恰为零。

与 6.2 的联系

$$\min \|x\|_1 \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

是在精确拟合条件下选择稀疏解；式 (6.11) 允许带噪的近似拟合。



ℓ_1 正则化

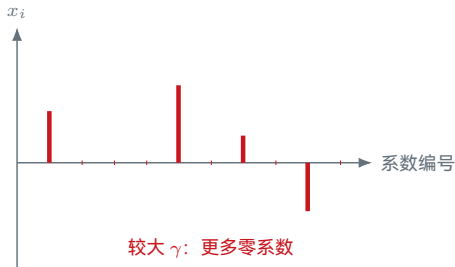
$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|_2 + \gamma \|x\|_1. \quad (6.11)$$

该问题在保持拟合能力的同时，倾向于使许多 x_i 恰为零。

与 6.2 的联系

$$\min \|x\|_1 \quad \text{s.t.} \quad Ax = b$$

是在精确拟合条件下选择稀疏解；式 (6.11) 允许带噪的近似拟合。



回归变量选择

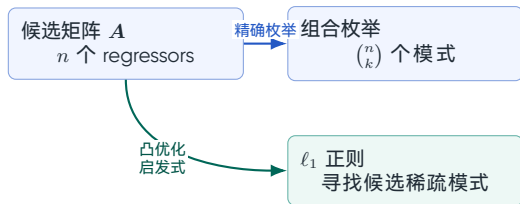
从 n 个候选 regressors 中选择 $k < n$ 个:

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad \text{subject to} \quad \text{card}(\mathbf{x}) \leq k.$$

这是组合问题: 固定一个 sparsity pattern 后可解最小二乘, 若枚举恰好含 k 个变量的模式, 候选数为

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

约束 $\text{card}(\mathbf{x}) \leq k$ 的全部支持集共有 $\sum_{j=0}^k \binom{n}{j}$ 种。



20 个候选变量

教材数值例取

$$A \in \mathbb{R}^{10 \times 20}, \quad x \in \mathbb{R}^{20}, \quad b \in \mathbb{R}^{10}.$$

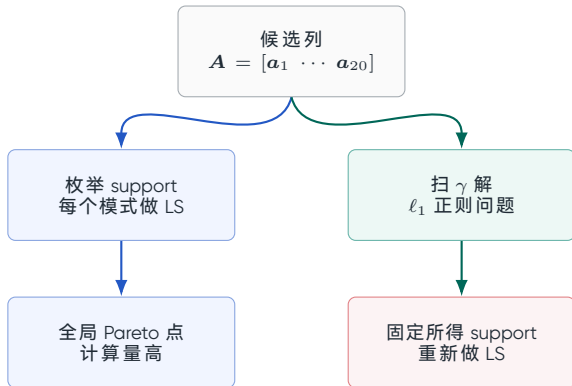
若逐一枚举恰有 k 个非零元素的 support, 最小二乘问题的数量为

$$\binom{20}{k}.$$

k	1	2	3	5	10
$\binom{20}{k}$	20	190	1140	15504	184756

这说明精确 Pareto 曲线只适合小规模实例。

教材实例中, heuristic 在 $\text{card}(x) = 1$ 时恰好命中全局最优点; 对其他稀疏度没有这一保证。

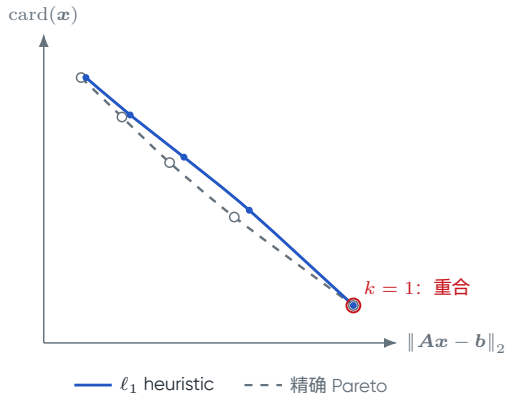


Boyd & Vandenberghe, Example 6.4 and Figure 6.7

稀疏度与残差

对 $A \in \mathbb{R}^{10 \times 20}$ ，精确枚举给出全局 Pareto 曲线；改变 γ 的 ℓ_1 正则则给出可计算的近似曲线。实线不是对组合问题最优值的普遍保证，

而是用于选择候选 sparsity pattern 的 heuristic。图中 $k = 1$ 的两点重合。



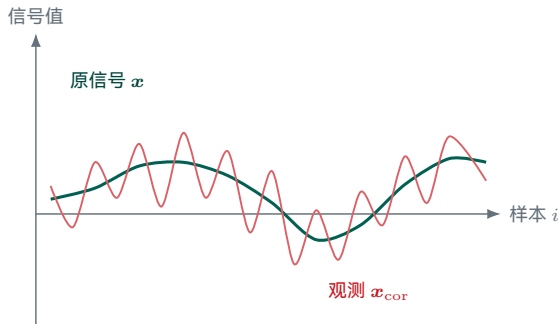
Boyd & Vandenberghe, Example 6.4 and Figure 6.7 (定性重绘)

带噪信号

一维信号的观测模型为

$$x_{\text{cor}} = x + v.$$

x 通常平滑或分段平滑; v 是未知的、快速变化的噪声。目标是从 x_{cor} 恢复 x , 这一过程称为 reconstruction、de-noising 或 smoothing。



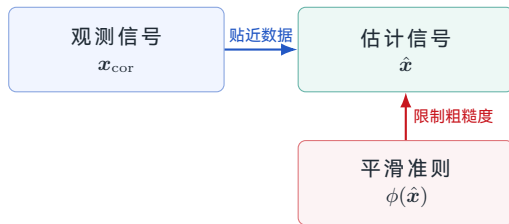
Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.3

重建的双目标模型

$$\underset{\hat{x}}{\text{minimize}} \quad (\|\hat{x} - x_{\text{cor}}\|_2, \phi(\hat{x})), \quad \phi \text{ convex.} \quad (6.12)$$

- ▣ $\|\hat{x} - x_{\text{cor}}\|_2$: 保持与观测一致;
- ▣ $\phi(\hat{x})$: 度量粗糙程度 (roughness)。

二者通常无法同时达到最小, 因此仍是 Pareto trade-off。



二次平滑

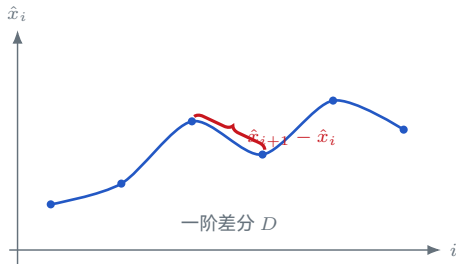
令 $D \in \mathbb{R}^{(n-1) \times n}$ 为一阶差分矩阵:

$$D\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \hat{x}_2 - \hat{x}_1 \\ \hat{x}_3 - \hat{x}_2 \\ \vdots \\ \hat{x}_n - \hat{x}_{n-1} \end{bmatrix}, \quad \phi_{\text{quad}}(\hat{\mathbf{x}}) = \|D\hat{\mathbf{x}}\|_2^2.$$

$$\underset{\hat{\mathbf{x}}}{\text{minimize}} \quad \|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{cor}}\|_2^2 + \delta \|D\hat{\mathbf{x}}\|_2^2.$$

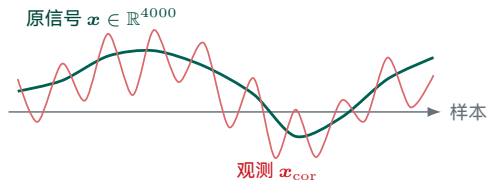
其解为

$$\hat{\mathbf{x}} = (\mathbb{I} + \delta D^\top D)^{-1} \mathbf{x}_{\text{cor}}.$$



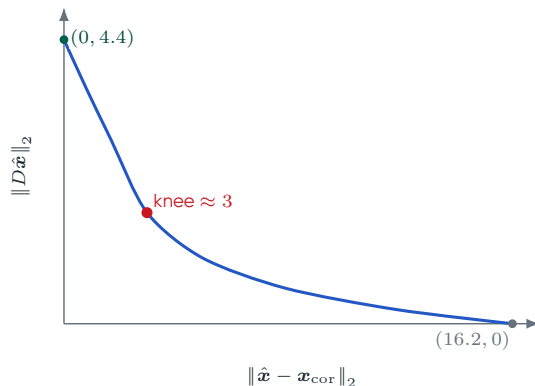
二次平滑：一个数值实例

原信号与受污染观测



绿色：平滑信号；红色：快速变化的噪声。

最优 trade-off 曲线

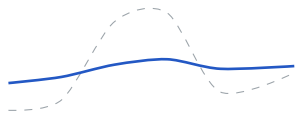


左端为 $\hat{x} = x_{\text{cor}}$ ；右端为 $\hat{x} = 0$ 。

Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.3, Figures 6.8–6.9 (定性重绘)

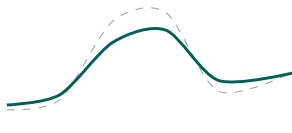
二次平滑：三个折中解

过度平滑



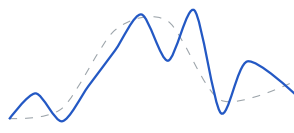
$\|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{cor}}\|_2 = 8$
拟合代价大，细节被抹平

折中



$\|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{cor}}\|_2 = 3$
与原信号最接近

平滑不足



$\|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{cor}}\|_2 = 1$
仍保留较多噪声

灰色虚线为生成该实例时的原信号；其中间解对应 Figure 6.9 的 knee 附近。

Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.3, Figure 6.10 (定性重绘)

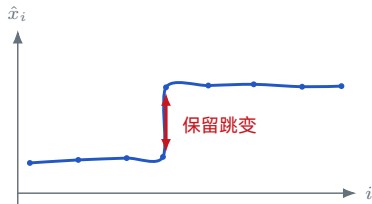
总变差

总变差 (total variation) 使用同一个一阶差分矩阵 D , 但改用 ℓ_1 范数:

$$\phi_{\text{tv}}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^{n-1} |\hat{x}_{i+1} - \hat{x}_i| = \|D\hat{\mathbf{x}}\|_1.$$

$$\underset{\hat{\mathbf{x}}}{\text{minimize}} \quad \|\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_{\text{cor}}\|_2^2 + \delta \|D\hat{\mathbf{x}}\|_1.$$

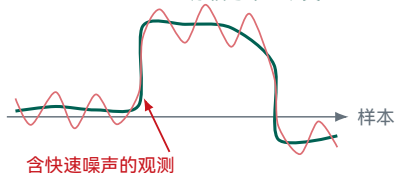
对于偶尔出现的大跳变, 线性而非二次的惩罚通常更合适。



含跳变信号：二次平滑与总变差

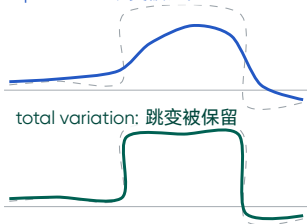
原信号与观测 $n = 2000$

原信号中的跳变



同一观测的两种恢复

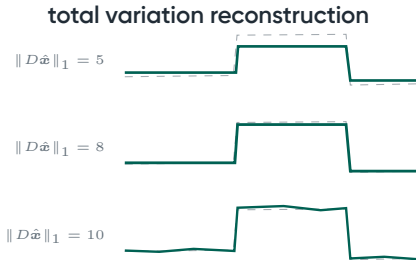
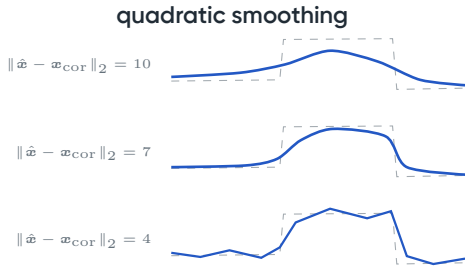
quadratic: 跳变被钝化



灰虚线：原信号；蓝/绿实线：重建结果。二次罚会同时压低噪声与真实的快速变化， ℓ_1 差分罚允许少量大跳变。

Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.3, Figures 6.11–6.14 (定性重绘)

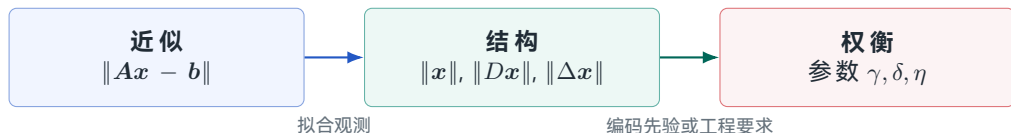
含跳变信号：三档比较



灰虚线为原信号。二次平滑的中间档去噪较好，但仍钝化边缘；TV 的中间档同时保留平台与跳变。两组数字对应教材 Figures 6.12 与 6.14。

Boyd & Vandenberghe, Section 6.3.3, Figures 6.12–6.14 (定性重绘)

正则化的结构



6.1

用残差定义拟合质量。

6.2

在精确约束下选择结构化解。

6.3

在带噪条件下权衡拟合与结构。



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

自然科学研究院
INSTITUTE OF NATURAL SCIENCES

Fin

