从线性代数到 LASSO

公式展开、推导与计算过程完整教材

面向新手与进阶读者

2026 年 5 月 7 日

使用说明

这份教材的目标是把下面三类公式从“看起来像黑盒”拆成可以手算、可以解释、可以推导的对象：

$$x \approx Dh, \qquad h^* = \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2, \qquad h^* = \arg\min_h \left(\frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 \right).$$

教材采用两条线：

- **新手主线**：每个公式先解释符号，再展开成坐标形式，再做数字例子。
- **进阶主线**：给出定义、引理、证明、最优性条件、子梯度、近端算子和算法推导。

阅读建议如下。第一次读时，可以先跳过标为“进阶读者”的框；第二次读时再补上证明与算法细节。所有核心公式都会至少以三种形式出现：矩阵形式、求和形式、具体数字形式。

目录

符号表

符号	含义
a, b, c	标量，一个数字。
x, h, r	向量，通常写成列向量。
D, A, B	矩阵。
$D \in \mathbb{R}^{m\times k}$	D 有 m 行、k 列。
d_j	矩阵 D 的第 j 列。
d_{ij}	矩阵 D 第 i 行第 j 列的元素。
$x \approx Dh$	用 D 的列向量线性组合近似表示 x。
$\|x\|_2$	向量 x 的 L2 范数，也叫欧氏长度。
$\|x\|_1$	向量 x 的 L1 范数，等于绝对值之和。
$\|x\|_0$	非零元素个数；严格说不是范数。
$\arg\min_h f(h)$	使 $f(h)$ 取得最小值的那个 h。
λ	正则化强度，越大越偏向稀疏或小系数。
$S_\lambda(z)$	soft-thresholding，软阈值算子。

第一部分

第一阶段：看懂公式

第一章　读公式的基本方法

1.1　公式不是压缩包，而是结构化句子

很多数学公式本质上是一句话。以

$$x \approx Dh$$

为例，它不是一个孤立符号，而是在说：存在一个系数向量 h，使得矩阵 D 的列向量经过加权相加后，尽量像目标向量 x。

为了真正读懂它，我们先把每个对象完全展开。设

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1k} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{m1} & d_{m2} & \cdots & d_{mk} \end{bmatrix}, \qquad h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_k \end{bmatrix}.$$

矩阵乘向量 Dh 的第 i 个坐标是

$$(Dh)_i = d_{i1}h_1 + d_{i2}h_2 + \cdots + d_{ik}h_k.$$

因此

$$Dh = \begin{bmatrix} d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k \\ d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k \\ \vdots \\ d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k \end{bmatrix}.$$

于是

$$x \approx Dh$$

完整展开就是

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k \\ d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k \\ \vdots \\ d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k \end{bmatrix}.$$

这等价于同时要求下面 m 个近似关系成立：

$$\begin{aligned} x_1 &\approx d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k, \\ x_2 &\approx d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k, \\ &\vdots \\ x_m &\approx d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k. \end{aligned}$$

直觉

读数学公式可以按四步来：第一，看对象类型，是数字、向量还是矩阵；第二，看维度是否匹配；第三，把乘法展开；第四，把目标函数写成“误差怎么加起来”。

1.2　一个贯穿全书的小例子

设

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}, \qquad h = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

先逐行计算 Dh：

$$Dh = \begin{bmatrix} 1\cdot 2 + 0\cdot(-1) \\ 2\cdot 2 + 3\cdot(-1) \\ (-1)\cdot 2 + 4\cdot(-1) \end{bmatrix}.$$

每一行继续算：

$$\begin{aligned} 1\cdot 2 + 0\cdot(-1) &= 2 + 0 = 2, \\ 2\cdot 2 + 3\cdot(-1) &= 4 - 3 = 1, \\ (-1)\cdot 2 + 4\cdot(-1) &= -2 - 4 = -6. \end{aligned}$$

所以

$$Dh = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -6 \end{bmatrix}.$$

如果目标向量是

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -5 \end{bmatrix},$$

那么误差为

$$r = x - Dh = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2-2 \\ 1-1 \\ -5-(-6) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

因此 Dh 与 x 很接近，只在第三个坐标差了 1。

1.3 学习路线图

本书从下面的链条开始：

$$\text{向量} \longrightarrow \text{矩阵} \longrightarrow \text{矩阵乘法} \longrightarrow \text{线性组合} \longrightarrow x \approx Dh.$$

然后进入误差最小化：

$$x - Dh \longrightarrow \|x - Dh\|_2^2 \longrightarrow \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2 .$$

最后加入稀疏性：

$$\|h\|_0 \longrightarrow \|h\|_1 \longrightarrow \arg\min_h \left(\frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 \right).$$

第二章　标量、向量与矩阵

2.1　标量

定义 2.1 (标量). 标量是一个单独的数，通常记作 a, b, c, α, λ 等。例如

$$a = 3, \qquad \lambda = 0.5.$$

标量之间的加减乘除就是普通算术。例如

$$2a + 1 = 2 \cdot 3 + 1 = 6 + 1 = 7.$$

2.2　向量

定义 2.2 (列向量). m 维列向量是 m 个数字按列排成的对象:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m.$$

这里 x_i 表示第 i 个坐标。

例如

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}$$

表示

$$x_1 = 2, \qquad x_2 = -1, \qquad x_3 = 4.$$

定义 2.3 (向量相等). 两个同维向量相等，意思是每个坐标都相等。若

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix},$$

则

$$a = b$$

等价于

$$a_1 = b_1, \quad a_2 = b_2, \quad \ldots, \quad a_m = b_m.$$

2.3 矩阵

定义 2.4 (矩阵)**.** 矩阵是按行和列排列的数字表。一个 $m \times k$ 矩阵写作

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1k} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{m1} & d_{m2} & \cdots & d_{mk} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times k}.$$

d_{ij} 表示第 i 行第 j 列的元素。

例如

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}.$$

逐项写出为

$$d_{11} = 1, \quad d_{12} = 0, \quad d_{21} = 2, \quad d_{22} = 3, \quad d_{31} = -1, \quad d_{32} = 4.$$

2.4 行、列与转置

矩阵 $D \in \mathbb{R}^{m \times k}$ 的第 j 列记为

$$d_j = \begin{bmatrix} d_{1j} \\ d_{2j} \\ \vdots \\ d_{mj} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m.$$

因此整个矩阵可以按列写成

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \cdots & d_k \end{bmatrix}.$$

转置会把行和列互换。若

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \\ d_{31} & d_{32} \end{bmatrix},$$

则

$$D^\top = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \end{bmatrix}.$$

2.5　维度检查

定义 2.5 (维度匹配)**.** 只有维度匹配时，矩阵乘法、向量加法等运算才有意义。若

$$D \in \mathbb{R}^{m\times k}, \qquad h \in \mathbb{R}^{k},$$

则 $Dh \in \mathbb{R}^m$。若还给定 $x \in \mathbb{R}^m$，那么 $x - Dh$ 有意义。

例如

$$D \in \mathbb{R}^{3\times 2}, \qquad h \in \mathbb{R}^{2},$$

则

$$Dh \in \mathbb{R}^3.$$

如果

$$x \in \mathbb{R}^3,$$

那么

$$x - Dh \in \mathbb{R}^3.$$

但如果 $x \in \mathbb{R}^4$，则 $x - Dh$ 没有意义，因为 x 是 4 维，Dh 是 3 维。

练习 2.1. 设 $D \in \mathbb{R}^{5\times 3}$，$h \in \mathbb{R}^3$，$x \in \mathbb{R}^5$。判断 Dh、$x - Dh$、$D^\top x$ 的维度。

答案。

$$Dh \in \mathbb{R}^5, \qquad x - Dh \in \mathbb{R}^5, \qquad D^\top \in \mathbb{R}^{3\times 5}, \qquad D^\top x \in \mathbb{R}^3.$$

第三章　向量运算与线性组合

3.1　向量加法

给定

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix},$$

向量加法定义为逐坐标相加:

$$a + b = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_m + b_m \end{bmatrix}.$$

具体例子:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+4 \\ 2+5 \\ 3+6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}.$$

3.2　标量乘向量

给定标量 c 和向量 a，定义

$$ca = c \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ca_1 \\ ca_2 \\ \vdots \\ ca_m \end{bmatrix}.$$

例如

$$3 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \cdot 1 \\ 3 \cdot 2 \\ 3 \cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 9 \end{bmatrix}.$$

3.3 线性组合

定义 3.1 (线性组合). 给定向量 $d_1, d_2, \ldots, d_k \in \mathbb{R}^m$ 和标量 $h_1, h_2, \ldots, h_k$，表达式

$$h_1 d_1 + h_2 d_2 + \cdots + h_k d_k$$

叫做这些向量的一个线性组合。

例如

$$d_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \qquad d_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}, \qquad h_1 = 2, \qquad h_2 = -1.$$

线性组合为

$$h_1 d_1 + h_2 d_2 = 2d_1 + (-1)d_2.$$

逐步展开:

$$\begin{aligned} 2d_1 + (-1)d_2 &= 2 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} + (-1) \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2 \cdot 1 \\ 2 \cdot 2 \\ 2 \cdot (-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (-1) \cdot 0 \\ (-1) \cdot 3 \\ (-1) \cdot 4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -3 \\ -4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2 + 0 \\ 4 + (-3) \\ -2 + (-4) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -6 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

3.4 张成空间与基

定义 3.2 (张成空间). 向量 $d_1, \ldots, d_k$ 的所有线性组合组成的集合叫做它们的张成空间, 记作

$$\operatorname{span}\{d_1, \ldots, d_k\} = \{h_1 d_1 + \cdots + h_k d_k : h_1, \ldots, h_k \in \mathbb{R}\}.$$

直觉

如果把每个 d_j 看成一个“积木”，那么张成空间就是用这些积木按任意比例加起来能够到达的所有位置。

定义 3.3 (线性无关). 向量 $d_1, \ldots, d_k$ 线性无关，指的是

$$h_1 d_1 + \cdots + h_k d_k = 0$$

只有一个解:

$$h_1 = h_2 = \cdots = h_k = 0.$$

如果存在不全为零的 h_j 也能让线性组合为零，则它们线性相关。

进阶读者

在线性表示问题 $x \approx Dh$ 中，如果 D 的列线性相关，那么同一个 Dh 可能由多个不同的 h 表示。例如 $d_2 = 2d_1$ 时，

$$2d_1 + 0d_2 = 0d_1 + 1d_2.$$

这会导致最小二乘解不唯一，LASSO 的稀疏性也会受到列相关性的影响。

第四章　点积、长度与范数

4.1　点积定义

定义 4.1 (点积). 给定两个同维向量

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix},$$

它们的点积定义为

$$a^\top b = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_m b_m = \sum_{i=1}^{m} a_i b_i.$$

具体例子:

$$a = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

则

$$\begin{aligned} a^\top b &= 1 \cdot 4 + 2 \cdot (-1) + 3 \cdot 2 \\ &= 4 - 2 + 6 \\ &= 8. \end{aligned}$$

4.2　点积的几何意义

欧氏空间中有公式

$$a^\top b = \|a\|_2 \, \|b\|_2 \cos\theta,$$

其中 θ 是 a 和 b 的夹角。因此

$$a^\top b > 0$$

通常表示夹角小于 $90°$;

$$a^\top b = 0$$

表示垂直;

$$a^\top b < 0$$

表示夹角大于 90°。

4.3 L2 范数

定义 4.2 (L2 范数). 对

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix},$$

定义

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_m^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} x_i^2}.$$

平方后的 L2 范数为

$$\|x\|_2^2 = x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_m^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i^2.$$

例如

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

则

$$\begin{aligned} \|x\|_2 &= \sqrt{3^2 + 4^2} \\ &= \sqrt{9 + 16} \\ &= \sqrt{25} \\ &= 5. \end{aligned}$$

同时

$$\|x\|_2^2 = 3^2 + 4^2 = 9 + 16 = 25.$$

4.4 L1 范数

定义 4.3 (L1 范数). 对

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix},$$

定义

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_m| = \sum_{i=1}^{m} |x_i|.$$

例如

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ -4 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

则

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= |3| + |-4| + |0| + |2| \\ &= 3 + 4 + 0 + 2 \\ &= 9. \end{aligned}$$

4.5　L0 计数

定义 4.4 (L0 计数)**.** $\|x\|_0$ 表示 x 中非零元素的个数。严格说，它不是一个真正的范数，但在稀疏学习中常用。

例如

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

非零元素是 3 和 -2，所以

$$\|x\|_0 = 2.$$

4.6　范数公理与常用引理

定义 4.5 (范数)**.** 函数 $\|\cdot\|$ 是范数，如果对所有向量 x, y 和标量 c 满足：

(1) 非负性：$\|x\| \geq 0$，且 $\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$；

(2) 齐次性：$\|cx\| = |c| \, \|x\|$；

(3) 三角不等式：$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$。

引理 4.1 (L1 与 L2 的非负性)**.** $\|x\|_1 \geq 0$ 且 $\|x\|_2 \geq 0$。并且它们等于 0 当且仅当 $x = 0$。

证明. 因为每个绝对值 $|x_i| \geq 0$，所以

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{m} |x_i| \geq 0.$$

若 $\|x\|_1 = 0$，则一堆非负数相加为 0，只能每一项都为 0：

$$|x_1| = |x_2| = \cdots = |x_m| = 0.$$

于是

$$x_1 = x_2 = \cdots = x_m = 0.$$

同理，因为 $x_i^2 \geq 0$，所以

$$\|x\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \geq 0.$$

若 $\|x\|_2 = 0$，则 $\|x\|_2^2 = 0$，于是每个 $x_i^2 = 0$，从而每个 $x_i = 0$。 □

易错点

$\|x\|_2$ 和 $\|x\|_2^2$ 不一样。前者有平方根，后者没有平方根：

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_m^2}, \qquad \|x\|_2^2 = x_1^2 + \cdots + x_m^2.$$

最小二乘常用 $\|x - Dh\|_2^2$，不是 $\|x - Dh\|_2$。

第五章　矩阵乘法与 $x \approx Dh$

5.1　矩阵乘向量的逐项定义

设

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1k} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{m1} & d_{m2} & \cdots & d_{mk} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times k}, \qquad h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_k \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^k.$$

则

$$Dh = \begin{bmatrix} d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k \\ d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k \\ \vdots \\ d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k \end{bmatrix}.$$

也就是说，Dh 的第 i 个坐标为

$$(Dh)_i = \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j.$$

5.2　矩阵乘向量等于列向量线性组合

若

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \cdots & d_k \end{bmatrix},$$

其中每个 $d_j \in \mathbb{R}^m$，则

$$Dh = h_1d_1 + h_2d_2 + \cdots + h_kd_k.$$

下面完整证明这个等式。因为

$$d_j = \begin{bmatrix} d_{1j} \\ d_{2j} \\ \vdots \\ d_{mj} \end{bmatrix},$$

所以

$$
\begin{aligned}
h_1d_1 + h_2d_2 + \cdots + h_kd_k &= h_1 \begin{bmatrix} d_{11} \\ d_{21} \\ \vdots \\ d_{m1} \end{bmatrix} + h_2 \begin{bmatrix} d_{12} \\ d_{22} \\ \vdots \\ d_{m2} \end{bmatrix} + \cdots + h_k \begin{bmatrix} d_{1k} \\ d_{2k} \\ \vdots \\ d_{mk} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} d_{11}h_1 \\ d_{21}h_1 \\ \vdots \\ d_{m1}h_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_{12}h_2 \\ d_{22}h_2 \\ \vdots \\ d_{m2}h_2 \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} d_{1k}h_k \\ d_{2k}h_k \\ \vdots \\ d_{mk}h_k \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k \\ d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k \\ \vdots \\ d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k \end{bmatrix} \\
&= Dh.
\end{aligned}
$$

直觉

D 是字典，列向量 d_j 是字典里的“原子”或“基元素”；h_j 是每个原子的使用量。Dh 就是“按 h 给出的剂量，把所有原子混合起来”。

5.3 矩阵乘矩阵

若

$$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, \qquad B \in \mathbb{R}^{n\times p},$$

则

$$C = AB \in \mathbb{R}^{m\times p}.$$

C 第 i 行第 j 列的元素是

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \cdots + a_{in}b_{nj} = \sum_{\ell=1}^{n} a_{i\ell}b_{\ell j}.$$

具体例子：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 3 & 4 \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix}.$$

则 $A \in \mathbb{R}^{2\times 3}$，$B \in \mathbb{R}^{3\times 2}$，所以 $AB \in \mathbb{R}^{2\times 2}$。逐项计算：

$$c_{11} = 1\cdot 2 + 2\cdot 0 + 0\cdot 3 = 2 + 0 + 0 = 2,$$

$$
\begin{aligned}
c_{12} &= 1\cdot 1 + 2\cdot(-1) + 0\cdot 2 = 1 - 2 + 0 = -1,\\
c_{21} &= (-1)\cdot 2 + 3\cdot 0 + 4\cdot 3 = -2 + 0 + 12 = 10,\\
c_{22} &= (-1)\cdot 1 + 3\cdot(-1) + 4\cdot 2 = -1 - 3 + 8 = 4.
\end{aligned}
$$

因此

$$
AB = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 10 & 4 \end{bmatrix}.
$$

5.4　$x \approx Dh$ 的完整含义

设 $x \in \mathbb{R}^m$，$D \in \mathbb{R}^{m\times k}$，$h \in \mathbb{R}^k$。当我们写

$$
x \approx Dh
$$

时，实际含义是

$$
x_i \approx \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j, \qquad i = 1, 2, \ldots, m.
$$

把所有坐标列出来，就是

$$
\begin{aligned}
x_1 &\approx d_{11}h_1 + d_{12}h_2 + \cdots + d_{1k}h_k,\\
x_2 &\approx d_{21}h_1 + d_{22}h_2 + \cdots + d_{2k}h_k,\\
&\vdots\\
x_m &\approx d_{m1}h_1 + d_{m2}h_2 + \cdots + d_{mk}h_k.
\end{aligned}
$$

练习 5.1. 令

$$
D = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 3 & -1 \end{bmatrix}, \qquad h = \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \end{bmatrix}.
$$

逐行计算 Dh。

答案。

$$
\begin{aligned}
Dh &= \begin{bmatrix} 1\cdot 4 + 2\cdot(-2) \\ 0\cdot 4 + 1\cdot(-2) \\ 3\cdot 4 + (-1)\cdot(-2) \end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix} 4-4 \\ 0-2 \\ 12+2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 14 \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

第六章 误差、平方误差与最小二乘

6.1 误差向量

如果 Dh 是对 x 的近似，则误差向量定义为

$$r = x - Dh.$$

完全展开为

$$r = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 - (Dh)_1 \\ x_2 - (Dh)_2 \\ \vdots \\ x_m - (Dh)_m \end{bmatrix}.$$

因为

$$(Dh)_i = \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j,$$

所以

$$r_i = x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j.$$

于是

$$r = \begin{bmatrix} x_1 - \sum_{j=1}^{k} d_{1j} h_j \\ x_2 - \sum_{j=1}^{k} d_{2j} h_j \\ \vdots \\ x_m - \sum_{j=1}^{k} d_{mj} h_j \end{bmatrix}.$$

6.2 平方误差

用 L2 范数平方度量误差：

$$\|x - Dh\|_2^2 = \|r\|_2^2.$$

先按范数定义展开：

$$\|r\|_2^2 = r_1^2 + r_2^2 + \cdots + r_m^2.$$

再把 r_i 代入:

$$\|x - Dh\|_2^2 = \left(x_1 - \sum_{j=1}^{k} d_{1j}h_j\right)^2 + \left(x_2 - \sum_{j=1}^{k} d_{2j}h_j\right)^2 + \cdots + \left(x_m - \sum_{j=1}^{k} d_{mj}h_j\right)^2.$$

用求和符号写为

$$\|x - Dh\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right)^2.$$

6.3　最小二乘问题

定义 6.1 (最小二乘). 给定 $x \in \mathbb{R}^m$ 和 $D \in \mathbb{R}^{m\times k}$，最小二乘问题是

$$h^* = \arg\min_{h\in\mathbb{R}^k} \|x - Dh\|_2^2.$$

如果使用带 $\frac{1}{2}$ 的形式，则写作

$$h^* = \arg\min_{h\in\mathbb{R}^k} \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2.$$

这两个问题的最优解相同，因为乘以正数 $\frac{1}{2}$ 不改变最小点。

完全展开为

$$h^* = \arg\min_{h_1,\ldots,h_k} \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right)^2.$$

若使用 $\frac{1}{2}$ 形式，则为

$$h^* = \arg\min_{h_1,\ldots,h_k} \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right)^2.$$

6.4　一维最小二乘：从最简单问题推导

先看最简单的一个变量问题:

$$f(h) = (x - dh)^2.$$

目标是

$$h^* = \arg\min_{h}(x - dh)^2.$$

若 $d \neq 0$，平方项最小等价于让括号内部为零:

$$x - dh = 0.$$

逐步解出 h:

$$\begin{aligned} x - dh &= 0, \\ -dh &= -x, \\ dh &= x, \\ h &= \frac{x}{d}. \end{aligned}$$

所以

$$h^* = \frac{x}{d}.$$

如果 $d = 0$，则

$$f(h) = x^2$$

与 h 无关，所有 h 都同样好。

6.5　一个过定方程的手算例子

令

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad h \in \mathbb{R}.$$

则

$$Dh = \begin{bmatrix} h \\ h \\ h \end{bmatrix}.$$

误差为

$$x - Dh = \begin{bmatrix} 1-h \\ 2-h \\ 2-h \end{bmatrix}.$$

平方误差为

$$\begin{aligned} f(h) &= \|x - Dh\|_2^2 \\ &= (1-h)^2 + (2-h)^2 + (2-h)^2. \end{aligned}$$

逐项展开:

$$\begin{aligned} (1-h)^2 &= h^2 - 2h + 1, \\ (2-h)^2 &= h^2 - 4h + 4. \end{aligned}$$

因此

$$f(h) = (h^2 - 2h + 1) + (h^2 - 4h + 4) + (h^2 - 4h + 4)$$

$$= 3h^2 - 10h + 9.$$

求导:

$$f'(h) = 6h - 10.$$

令导数为零:

$$\begin{aligned} 6h - 10 &= 0, \\ 6h &= 10, \\ h &= \frac{10}{6} = \frac{5}{3}. \end{aligned}$$

因此

$$h^* = \frac{5}{3}.$$

此时

$$Dh^* = \begin{bmatrix} 5/3 \\ 5/3 \\ 5/3 \end{bmatrix},$$

误差为

$$x - Dh^* = \begin{bmatrix} 1 - 5/3 \\ 2 - 5/3 \\ 2 - 5/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{bmatrix}.$$

平方误差为

$$\left(-\frac{2}{3}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{4}{9} + \frac{1}{9} + \frac{1}{9} = \frac{6}{9} = \frac{2}{3}.$$

进阶读者

这个例子其实是在找 $1, 2, 2$ 的平均数。最优 h 是

$$h^* = \frac{1 + 2 + 2}{3} = \frac{5}{3}.$$

最小二乘的一个核心直觉是：当模型只能输出一个常数时，最佳常数就是平均数。

第七章　$\arg\min$、函数最小化与梯度

7.1　$\min$ 与 $\arg\min$ 的区别

定义 7.1 ($\min$)**.** $\min_h f(h)$ 表示函数 f 能取得的最小函数值。

定义 7.2 ($\arg\min$)**.** $\arg\min_h f(h)$ 表示让 $f(h)$ 取得最小值的变量 h。

例如

$$f(h) = (h-3)^2.$$

当 $h=3$ 时

$$f(3) = (3-3)^2 = 0.$$

由于平方总是非负，0 是最小值。因此

$$\min_h f(h) = 0, \qquad \arg\min_h f(h) = 3.$$

7.2　多维 $\arg\min$

若

$$h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_k \end{bmatrix},$$

则

$$\arg\min_h f(h)$$

的意思是寻找一整个向量

$$h^* = \begin{bmatrix} h_1^* \\ h_2^* \\ \vdots \\ h_k^* \end{bmatrix}$$

使得 $f(h^*)$ 最小。

7.3 导数与梯度

一维函数 $f(h)$ 的导数 $f'(h)$ 表示斜率。多维函数 $f(h_1,\ldots,h_k)$ 的梯度是所有偏导数组成的向量:

$$\nabla f(h)=\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial h_1}\\ \frac{\partial f}{\partial h_2}\\ \vdots\\ \frac{\partial f}{\partial h_k}\end{bmatrix}.$$

引理 7.1 (可微无约束最优的一阶必要条件)**.** 如果 f 可微，且 h^* 是内点处的局部最小点，则

$$\nabla f(h^*)=0.$$

证明. 对任意方向 v，考虑一维函数

$$\phi(t)=f(h^*+tv).$$

因为 h^* 是局部最小点，所以 $t=0$ 是 ϕ 的局部最小点。因此一维导数满足

$$\phi'(0)=0.$$

链式法则给出

$$\phi'(0)=\nabla f(h^*)^\top v.$$

所以对所有 v 都有

$$\nabla f(h^*)^\top v=0.$$

取 $v=\nabla f(h^*)$，得到

$$\nabla f(h^*)^\top \nabla f(h^*)=\|\nabla f(h^*)\|_2^2=0.$$

因此

$$\nabla f(h^*)=0.$$

□

7.4 二次函数的基本求导

一维二次函数

$$f(h)=ah^2+bh+c$$

导数为

$$f'(h)=2ah+b.$$

若 $a>0$，函数开口向上。令导数为零:

$$2ah+b=0,$$

$$\begin{aligned} 2ah &= -b, \\ h &= -\frac{b}{2a}. \end{aligned}$$

这就是最小点。

例 7.1. 求

$$f(h) = 3h^2 - 10h + 9$$

的最小点。导数为

$$f'(h) = 6h - 10.$$

令

$$6h - 10 = 0$$

得

$$h = \frac{10}{6} = \frac{5}{3}.$$

因为二次项系数 $3 > 0$，所以这是最小点。

第八章　最小二乘的完整推导

8.1　目标函数的矩阵形式

令

$$J(h) = \frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 .$$

因为

$$\|r\|_2^2 = r^\top r,$$

且 $r = x - Dh$，所以

$$J(h) = \frac{1}{2}(x - Dh)^\top (x - Dh).$$

下面一步一步展开。先把转置分配进去:

$$(x - Dh)^\top = x^\top - (Dh)^\top = x^\top - h^\top D^\top.$$

因此

$$\begin{aligned} J(h) &= \frac{1}{2}(x^\top - h^\top D^\top)(x - Dh) \\ &= \frac{1}{2}\left[x^\top x - x^\top Dh - h^\top D^\top x + h^\top D^\top Dh\right]. \end{aligned}$$

注意 $x^\top Dh$ 是一个 1×1 标量，标量等于自己的转置:

$$x^\top Dh = (x^\top Dh)^\top = h^\top D^\top x.$$

所以中间两项相同:

$$-x^\top Dh - h^\top D^\top x = -2h^\top D^\top x.$$

于是

$$J(h) = \frac{1}{2}x^\top x - h^\top D^\top x + \frac{1}{2}h^\top D^\top Dh.$$

8.2　坐标形式的梯度推导

先把目标函数写成求和:

$$J(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right)^2 .$$

令

$$r_i = x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j.$$

则

$$J(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} r_i^2.$$

我们要求第 ℓ 个变量 h_ℓ 的偏导。先算 r_i 对 h_ℓ 的偏导:

$$r_i = x_i - d_{i1}h_1 - d_{i2}h_2 - \cdots - d_{i\ell}h_\ell - \cdots - d_{ik}h_k.$$

其中只有 $-d_{i\ell}h_\ell$ 与 h_ℓ 有关，所以

$$\frac{\partial r_i}{\partial h_\ell} = -d_{i\ell}.$$

链式法则给出

$$\begin{aligned}\frac{\partial J}{\partial h_\ell} &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial h_\ell} \\ &= \sum_{i=1}^{m} r_i(-d_{i\ell}) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell} r_i.\end{aligned}$$

把 r_i 代回去:

$$\begin{aligned}\frac{\partial J}{\partial h_\ell} &= -\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}\left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right) \\ &= -\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}x_i + \sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}\sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j \\ &= -\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}x_i + \sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}d_{ij}\right) h_j.\end{aligned}$$

另一方面，$D^\top x$ 的第 ℓ 个元素是

$$(D^\top x)_\ell = \sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}x_i.$$

而 $D^\top D$ 的第 ℓ, j 个元素是

$$(D^\top D)_{\ell j} = \sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}d_{ij}.$$

因此

$$((D^\top D)h)_\ell = \sum_{j=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{m} d_{i\ell}d_{ij}\right) h_j.$$

所以

$$\frac{\partial J}{\partial h_\ell} = ((D^\top D)h)_\ell - (D^\top x)_\ell.$$

把 $\ell = 1, 2, \ldots, k$ 全部放在一起，得到梯度

$$\nabla J(h) = D^\top Dh - D^\top x.$$

也常写成

$$\nabla J(h) = D^\top (Dh - x).$$

这是因为

$$D^\top (Dh - x) = D^\top Dh - D^\top x = D^\top Dh - D^\top x.$$

8.3　正规方程与解析解

最优点满足

$$\nabla J(h^*) = 0.$$

代入梯度:

$$D^\top Dh^* - D^\top x = 0.$$

逐步移项:

$$\begin{aligned} D^\top Dh^* - D^\top x &= 0, \\ D^\top Dh^* &= D^\top x. \end{aligned}$$

这个方程叫做正规方程。若 $D^\top D$ 可逆，则两边左乘 $(D^\top D)^{-1}$:

$$\begin{aligned} (D^\top D)^{-1}(D^\top D)h^* &= (D^\top D)^{-1} D^\top x, \\ Ih^* &= (D^\top D)^{-1} D^\top x, \\ h^* &= (D^\top D)^{-1} D^\top x. \end{aligned}$$

定理 8.1 (满列秩最小二乘解). 若 $D \in \mathbb{R}^{m\times k}$ 满列秩，即 $\operatorname{rank}(D) = k$，则 $D^\top D$ 可逆，最小二乘问题

$$\min_h \frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2$$

有唯一解

$$h^* = (D^\top D)^{-1} D^\top x.$$

证明. 对任意非零向量 $u \in \mathbb{R}^k$，有

$$u^\top D^\top Du = (Du)^\top (Du) = \|Du\|_2^2.$$

因为 D 满列秩，所以 $Du = 0$ 只有零解 $u = 0$。当 $u \neq 0$ 时，$Du \neq 0$，于是

$$\|Du\|_2^2 > 0.$$

因此 $D^\top D$ 正定，从而可逆。目标函数是二次凸函数，梯度为零的点就是唯一全局最小点。将梯度置零得到正规方程，解出上式。 □

8.4　完整数字例子：二维参数

令

$$D=\begin{bmatrix}1&0\\1&1\\1&2\end{bmatrix},\qquad x=\begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix}.$$

我们要求

$$h^*=\arg\min_{h\in\mathbb{R}^2}\|x-Dh\|_2^2.$$

设

$$h=\begin{bmatrix}h_1\\h_2\end{bmatrix}.$$

先算

$$Dh=\begin{bmatrix}1\cdot h_1+0\cdot h_2\\1\cdot h_1+1\cdot h_2\\1\cdot h_1+2\cdot h_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h_1\\h_1+h_2\\h_1+2h_2\end{bmatrix}.$$

误差为

$$x-Dh=\begin{bmatrix}1-h_1\\2-h_1-h_2\\2-h_1-2h_2\end{bmatrix}.$$

平方误差为

$$f(h_1,h_2)=(1-h_1)^2+(2-h_1-h_2)^2+(2-h_1-2h_2)^2.$$

可以直接求偏导，也可以用矩阵公式。这里两种都做。

先用矩阵公式。计算 $D^\top D$：

$$D^\top=\begin{bmatrix}1&1&1\\0&1&2\end{bmatrix}.$$

于是

$$\begin{aligned}D^\top D&=\begin{bmatrix}1&1&1\\0&1&2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\1&1\\1&2\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}1\cdot1+1\cdot1+1\cdot1&1\cdot0+1\cdot1+1\cdot2\\0\cdot1+1\cdot1+2\cdot1&0\cdot0+1\cdot1+2\cdot2\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}3&3\\3&5\end{bmatrix}.\end{aligned}$$

再计算 $D^\top x$:

$$
\begin{aligned}
D^\top x &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1\cdot 1 + 1\cdot 2 + 1\cdot 2 \\ 0\cdot 1 + 1\cdot 2 + 2\cdot 2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

正规方程为

$$
\begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}.
$$

展开成方程组:

$$
\begin{aligned}
3h_1 + 3h_2 &= 5, \\
3h_1 + 5h_2 &= 6.
\end{aligned}
$$

第二式减第一式:

$$
\begin{aligned}
(3h_1 + 5h_2) - (3h_1 + 3h_2) &= 6 - 5, \\
2h_2 &= 1, \\
h_2 &= \frac{1}{2}.
\end{aligned}
$$

代回第一式:

$$
\begin{aligned}
3h_1 + 3\cdot\frac{1}{2} &= 5, \\
3h_1 + \frac{3}{2} &= 5, \\
3h_1 &= 5 - \frac{3}{2} = \frac{10}{2} - \frac{3}{2} = \frac{7}{2}, \\
h_1 &= \frac{7}{6}.
\end{aligned}
$$

因此

$$
h^* = \begin{bmatrix} 7/6 \\ 1/2 \end{bmatrix}.
$$

验证近似结果:

$$
Dh^* = \begin{bmatrix} 7/6 \\ 7/6 + 1/2 \\ 7/6 + 2\cdot 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7/6 \\ 7/6 + 3/6 \\ 7/6 + 6/6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7/6 \\ 10/6 \\ 13/6 \end{bmatrix}.
$$

误差为

$$x - Dh^* = \begin{bmatrix} 1 - 7/6 \\ 2 - 10/6 \\ 2 - 13/6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/6 \\ 2/6 \\ -1/6 \end{bmatrix}.$$

平方误差为

$$\left(-\frac{1}{6}\right)^2 + \left(\frac{2}{6}\right)^2 + \left(-\frac{1}{6}\right)^2 = \frac{1}{36} + \frac{4}{36} + \frac{1}{36} = \frac{6}{36} = \frac{1}{6}.$$

第九章　投影观点与不可逆情形

9.1　最小二乘是在做投影

最小二乘选择 h^*，使得

$$Dh^* \in \mathrm{span}\{d_1, \ldots, d_k\}$$

尽量接近 x。因此 Dh^* 是 x 在 D 的列空间上的投影。

命题 9.1 (残差正交). 若 h^* 是最小二乘解，则残差

$$r^* = x - Dh^*$$

与 D 的每一列正交，即

$$d_j^\top r^* = 0, \qquad j = 1, 2, \ldots, k.$$

矩阵形式为

$$D^\top r^* = 0.$$

证明. 正规方程为

$$D^\top D h^* = D^\top x.$$

移项得到

$$D^\top x - D^\top D h^* = 0.$$

提取 $D^\top$:

$$D^\top (x - Dh^*) = 0.$$

因为 $r^* = x - Dh^*$，所以

$$D^\top r^* = 0.$$

其第 j 个坐标为

$$(D^\top r^*)_j = d_j^\top r^* = 0.$$

□

9.2　当 $D^\top D$ 不可逆时

如果 D 的列线性相关，则 $D^\top D$ 不可逆。此时最小二乘解可能不唯一。例子：

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

令

$$h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix}.$$

则

$$Dh = \begin{bmatrix} h_1 + 2h_2 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

若要求 $Dh = x$，需要

$$h_1 + 2h_2 = 1.$$

这个方程有无穷多解。例如

$$h_2 = 0 \Rightarrow h_1 = 1, \qquad h_2 = \frac{1}{2} \Rightarrow h_1 = 0, \qquad h_2 = 1 \Rightarrow h_1 = -1.$$

因此所有

$$h = \begin{bmatrix} 1 - 2t \\ t \end{bmatrix}, \qquad t \in \mathbb{R}$$

都能让误差为零。

9.3　Moore-Penrose 伪逆

定义 9.1 (伪逆解). 当最小二乘解不唯一时，常选 L2 范数最小的那个解：

$$h^+ = \arg\min\{\|h\|_2 : h \in \arg\min_z \|x - Dz\|_2^2\}.$$

它可以写作

$$h^+ = D^+ x,$$

其中 D^+ 是 Moore-Penrose 伪逆。

进阶读者

伪逆和奇异值分解密切相关。如果 $D = U\Sigma V^\top$，则

$$D^+ = V\Sigma^+ U^\top,$$

其中 Σ^+ 把非零奇异值取倒数，再转置矩阵形状。这个话题不是理解 LASSO 的必要前提，但对数值稳定性非常重要。

第二部分

第二阶段：从最小二乘到稀疏表示

第十章 稀疏性与 L0 问题

10.1 什么是稀疏

定义 10.1 (稀疏向量). 如果向量中大多数元素为零，则称它是稀疏的。例如

$$h = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

只有两个非零元素，因此是稀疏的。

在 $x \approx Dh$ 中，如果 h 稀疏，表示 x 只需要少数列向量就能近似。例如

$$h = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

时

$$\begin{aligned} Dh &= 0 \cdot d_1 + 2d_2 + 0 \cdot d_3 + (-1)d_4 + 0 \cdot d_5 \\ &= 2d_2 - d_4. \end{aligned}$$

真正用到的只有 d_2 和 d_4。

10.2 L0 稀疏优化

理想的稀疏问题可以写作

$$h^* = \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \|h\|_0 \le s.$$

这句话展开为：在所有满足

$$\|h\|_0 \le s$$

的向量中，寻找使

$$\|x - Dh\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j \right)^2$$

最小的 h。

10.3 为什么 L0 难

如果 $h \in \mathbb{R}^k$，且最多允许 s 个非零元素，那么要先选择哪些位置可以非零。选择恰好 r 个位置的方式数为

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

最多 s 个非零位置时，总候选支持集数为

$$\sum_{r=0}^{s} \binom{k}{r}.$$

例如 $k = 100$，$s = 3$，则

$$\begin{aligned}
\sum_{r=0}^{3} \binom{100}{r} &= \binom{100}{0} + \binom{100}{1} + \binom{100}{2} + \binom{100}{3} \\
&= 1 + 100 + \frac{100 \cdot 99}{2} + \frac{100 \cdot 99 \cdot 98}{3 \cdot 2 \cdot 1} \\
&= 1 + 100 + 4950 + 161700 \\
&= 166751.
\end{aligned}$$

这还只是选择位置，不包括每个位置上的系数求解。

10.4 固定支持集后的最小二乘

假设已经选定支持集

$$S \subseteq \{1, 2, \ldots, k\},$$

并要求

$$h_j = 0 \quad (j \notin S).$$

记 D_S 为取出 D 中支持集 S 对应列得到的子矩阵，h_S 为对应系数。则问题变成

$$\min_{h_S} \|x - D_S h_S\|_2^2.$$

若 $D_S^\top D_S$ 可逆，则

$$h_S^* = (D_S^\top D_S)^{-1} D_S^\top x.$$

完整 L0 搜索就是对许多 S 重复这件事，再比较误差。

进阶读者

L0 优化本质上是连续优化和组合优化的混合：固定支持集后是最小二乘；选择支持集是组合搜索。这也是为什么会出现 OMP、IHT、基追踪、LASSO 等替代方法。

第十一章　正则化：从过拟合到约束偏好

11.1　普通最小二乘只关心拟合

普通最小二乘是

$$h^* = \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2 .$$

它只关心 Dh 和 x 是否接近，而不关心 h 是否大、是否稀疏、是否稳定。

11.2　正则化的通用形式

定义 11.1 (正则化)**.** 正则化是在拟合误差外加入对参数的惩罚：

$$h^* = \arg\min_h \left(\text{拟合误差} + \lambda \cdot \text{复杂度惩罚}\right) .$$

典型写法为

$$h^* = \arg\min_h \left(\|x - Dh\|_2^2 + \lambda R(h)\right) ,$$

其中 $R(h)$ 是正则项，$\lambda \geq 0$ 控制惩罚强度。

11.3　Ridge：L2 正则化

Ridge regression 使用

$$R(h) = \|h\|_2^2 .$$

所以目标函数是

$$J_{\text{ridge}}(h) = \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 + \frac{\lambda}{2}\|h\|_2^2 .$$

完全展开为

$$J_{\text{ridge}}(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij}h_j\right)^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{k} h_j^2.$$

求梯度。第一项梯度已经推导过：

$$\nabla_h \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 = D^\top Dh - D^\top x.$$

第二项是

$$\frac{\lambda}{2}\|h\|_2^2 = \frac{\lambda}{2}(h_1^2 + \cdots + h_k^2).$$

对 h_j 求偏导：

$$\frac{\partial}{\partial h_j}\frac{\lambda}{2}h_j^2 = \lambda h_j.$$

所以整体梯度为

$$\nabla J_{\text{ridge}}(h) = D^\top Dh - D^\top x + \lambda h.$$

令其为零：

$$\begin{aligned} D^\top Dh - D^\top x + \lambda h &= 0, \\ D^\top Dh + \lambda h &= D^\top x, \\ (D^\top D + \lambda I)h &= D^\top x. \end{aligned}$$

若 $D^\top D + \lambda I$ 可逆，则

$$h^* = (D^\top D + \lambda I)^{-1}D^\top x.$$

11.4　LASSO：L1 正则化

LASSO 使用

$$R(h) = \|h\|_1.$$

典型目标为

$$J_{\text{lasso}}(h) = \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 + \lambda\|h\|_1.$$

完全展开为

$$J_{\text{lasso}}(h) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left(x_i - \sum_{j=1}^{k}d_{ij}h_j\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{k}|h_j|.$$

这里第一项希望拟合好，第二项希望 h 的绝对值总和小。由于绝对值在 0 处有尖角，这个目标会把一些系数推到精确的零。

11.5　λ 的作用

当 $\lambda = 0$ 时，LASSO 退化为普通最小二乘：

$$J(h) = \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2.$$

当 λ 很大时，目标强烈惩罚 $\|h\|_1$，会倾向于让 h 更接近零，甚至全部为零。

易错点

λ 不是“越大越好”。λ 小时拟合好但可能不稀疏；λ 大时稀疏但可能欠拟合。实际应用中常用交叉验证或验证集选择 λ。

第十二章　凸性、子梯度与最优性条件

12.1　凸集合

定义 12.1 (凸集合)**.** 集合 C 是凸的，如果对任意 $u, v \in C$ 和任意 $t \in [0,1]$，都有

$$tu + (1-t)v \in C.$$

直观上，凸集合中任意两点连线都仍在集合内。

12.2　凸函数

定义 12.2 (凸函数)**.** 函数 $f : C \to \mathbb{R}$ 是凸函数，如果对任意 $u, v \in C$ 和 $t \in [0,1]$，有

$$f(tu + (1-t)v) \leq tf(u) + (1-t)f(v).$$

例 12.1. $f(h) = h^2$ 是凸函数。我们验证一维情况。取 $u, v \in \mathbb{R}$，$t \in [0,1]$:

$$tu + (1-t)v = v + t(u-v).$$

凸性需要

$$(tu + (1-t)v)^2 \leq tu^2 + (1-t)v^2.$$

计算右边减左边:

$$\begin{aligned}
&tu^2 + (1-t)v^2 - (tu + (1-t)v)^2 \\
&= tu^2 + (1-t)v^2 - \left[t^2u^2 + 2t(1-t)uv + (1-t)^2v^2\right] \\
&= t(1-t)u^2 - 2t(1-t)uv + t(1-t)v^2 \\
&= t(1-t)(u^2 - 2uv + v^2) \\
&= t(1-t)(u-v)^2 \\
&\geq 0.
\end{aligned}$$

所以 h^2 是凸函数。

引理 12.1 (凸函数之和仍凸)**.** 如果 f 和 g 都是凸函数，且 $\alpha, \beta \geq 0$，那么

$$F(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$$

也是凸函数。

证明. 对任意 u, v 和 $t \in [0,1]$，由 f, g 的凸性得

$$f(tu+(1-t)v) \le tf(u)+(1-t)f(v),$$

$$g(tu+(1-t)v) \le tg(u)+(1-t)g(v).$$

两式分别乘以非负数 α, β 后相加:

$$\begin{aligned}
&\alpha f(tu+(1-t)v)+\beta g(tu+(1-t)v)\\
&\le \alpha[tf(u)+(1-t)f(v)]+\beta[tg(u)+(1-t)g(v)]\\
&= t[\alpha f(u)+\beta g(u)]+(1-t)[\alpha f(v)+\beta g(v)]\\
&= tF(u)+(1-t)F(v).
\end{aligned}$$

所以 F 凸。 □

12.3 最小二乘和 L1 都是凸的

最小二乘项
$$f(h)=\frac{1}{2}\|x-Dh\|_2^2$$
是凸的，因为它是二次函数，Hessian 为

$$\nabla^2 f(h)=D^\top D.$$

对任意 u,
$$u^\top D^\top Du=\|Du\|_2^2 \ge 0,$$
所以 $D^\top D$ 半正定。

L1 项
$$g(h)=\lambda\|h\|_1=\lambda\sum_{j=1}^{k}|h_j|$$
也是凸的，因为绝对值函数凸，非负加权求和仍凸。因此 LASSO 目标

$$F(h)=\frac{1}{2}\|x-Dh\|_2^2+\lambda\|h\|_1$$

是凸函数。

12.4 绝对值不可导与子梯度

绝对值函数

$$\phi(h)=|h|$$

在 $h \neq 0$ 时可导:

$$\phi'(h) = \begin{cases} 1, & h > 0, \\ -1, & h < 0. \end{cases}$$

但在 $h = 0$ 处，左导数为 -1，右导数为 1，普通导数不存在。

定义 12.3 (子梯度). 对凸函数 f，向量 g 是 f 在 x 处的一个子梯度，如果对所有 y 有

$$f(y) \geq f(x) + g^\top (y - x).$$

所有子梯度组成的集合记为 $\partial f(x)$。

引理 12.2 (绝对值函数的子梯度).

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

证明. 当 $h > 0$ 时，$|h| = h$，斜率为 1，所以子梯度是 $\{1\}$。当 $h < 0$ 时，$|h| = -h$，斜率为 -1，所以子梯度是 $\{-1\}$。

当 $h = 0$ 时，要求 g 满足对所有 y，

$$|y| \geq |0| + g(y - 0) = gy.$$

即

$$|y| \geq gy.$$

若 $y > 0$，两边除以正数 y，得到

$$1 \geq g.$$

若 $y < 0$，两边除以负数 y 时不等号反向:

$$-1 \leq g.$$

所以

$$-1 \leq g \leq 1,$$

即 $g \in [-1, 1]$。 □

12.5　LASSO 的最优性条件

LASSO 目标是

$$F(h) = \frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 .$$

第一项可微，梯度为

$$D^\top(Dh-x).$$

第二项的子梯度为

$$\partial\|h\|_1=\partial\left(\sum_{j=1}^{k}|h_j|\right).$$

逐坐标写为

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

因此最优性条件是

$$0\in D^\top(Dh^*-x)+\lambda\partial\|h^*\|_1.$$

逐坐标写为

$$0\in d_j^\top(Dh^*-x)+\lambda\partial\left|h_j^*\right|,\qquad j=1,\ldots,k.$$

也就是说：

$$\begin{cases}d_j^\top(Dh^*-x)+\lambda=0, & h_j^*>0,\\ d_j^\top(Dh^*-x)-\lambda=0, & h_j^*<0,\\ d_j^\top(Dh^*-x)\in[-\lambda,\lambda], & h_j^*=0.\end{cases}$$

第三行可以写成

$$\left|d_j^\top(Dh^*-x)\right|\le\lambda\quad\text{当}h_j^*=0.$$

直觉

LASSO 把一个系数设为零的条件是：这个变量对误差的“推动力”不够大。准确说，当相关性 $\left|d_j^\top(Dh^*-x)\right|$ 没超过阈值 λ 时，$h_j^*=0$ 可以满足最优性条件。

第十三章　LASSO 的形式与等价观点

13.1　惩罚形式

最常见形式是

$$h^* = \arg\min_h \left(\frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 \right).$$

完全展开为

$$h^* = \arg\min_{h_1,\ldots,h_k} \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{k} |h_j| \right].$$

13.2　约束形式

另一种形式是

$$h^* = \arg\min_h \frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \|h\|_1 \le t.$$

展开约束为

$$|h_1| + |h_2| + \cdots + |h_k| \le t.$$

展开目标为

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j \right)^2.$$

进阶读者

在合适条件下，惩罚形式和约束形式之间存在对应关系：某个 λ 对应某个 t。但这个对应关系通常不是显式给定的，需要通过求解路径或交叉验证来寻找。

13.3　基追踪去噪形式

在信号处理中，还常见

$$\min_h \|h\|_1 \quad \text{subject to} \quad \|x - Dh\|_2 \le \varepsilon.$$

它的含义是：在重构误差不超过 ε 的前提下，寻找 L1 范数最小的表示。

13.4　为什么 L1 可以替代 L0

L0 直接数非零元素:

$$\|h\|_0 = \#\{j : h_j \neq 0\}.$$

L1 求绝对值和:

$$\|h\|_1 = \sum_{j=1}^{k} |h_j|.$$

二者不相等。但 L1 的等高线在坐标轴上有尖角,这些尖角使得优化解容易落在某些坐标为零的位置。

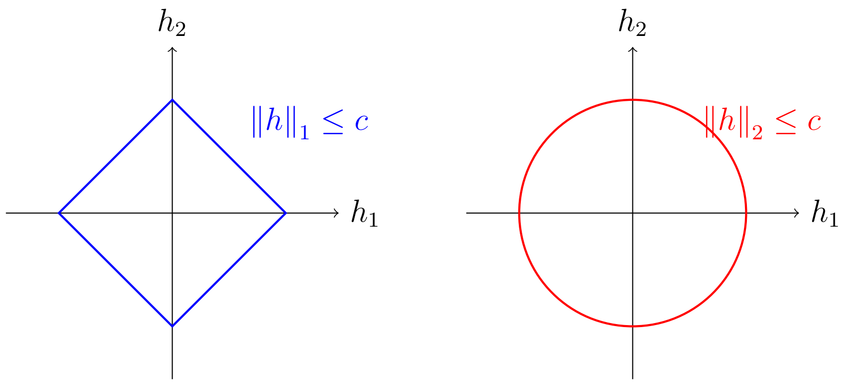

图 13.1: 二维中 L1 球是菱形,L2 球是圆。L1 的尖角位于坐标轴上,因此更容易产生坐标为零的解。

第十四章　Soft-thresholding：一维 LASSO 的完整推导

14.1　问题形式

考虑一维问题

$$\min_h q(h) = \frac{1}{2}(h-z)^2 + \lambda\,|h|\,, \qquad \lambda \geq 0.$$

这个问题是 LASSO 的核心积木。它的解记为

$$h^* = S_\lambda(z).$$

我们不直接给结果，而是分三种情况推导。

14.2　情况一：假设 $h > 0$

如果 $h > 0$，则

$$|h| = h.$$

目标函数变成

$$q(h) = \frac{1}{2}(h-z)^2 + \lambda h.$$

求导:

$$\begin{aligned} q'(h) &= \frac{1}{2}\cdot 2(h-z)\cdot 1 + \lambda \\ &= h - z + \lambda. \end{aligned}$$

令导数为零:

$$\begin{aligned} h - z + \lambda &= 0, \\ h &= z - \lambda. \end{aligned}$$

但这一段推导基于假设 $h > 0$，所以还需要

$$z - \lambda > 0.$$

也就是

$$z > \lambda.$$

因此当 $z > \lambda$ 时，候选解为

$$h^* = z - \lambda.$$

14.3　情况二：假设 $h < 0$

如果 $h < 0$，则

$$|h| = -h.$$

目标函数变成

$$q(h) = \frac{1}{2}(h - z)^2 - \lambda h.$$

求导:

$$\begin{aligned} q'(h) &= \frac{1}{2} \cdot 2(h - z) - \lambda \\ &= h - z - \lambda. \end{aligned}$$

令导数为零:

$$\begin{aligned} h - z - \lambda &= 0, \\ h &= z + \lambda. \end{aligned}$$

因为本情况假设 $h < 0$，所以需要

$$z + \lambda < 0,$$

即

$$z < -\lambda.$$

因此当 $z < -\lambda$ 时，候选解为

$$h^* = z + \lambda.$$

14.4　情况三：$h = 0$

在 $h = 0$ 处不能用普通导数，但可以用子梯度。目标函数子梯度为

$$\partial q(h) = h - z + \lambda \partial |h|.$$

在 $h = 0$ 时

$$\partial q(0) = 0 - z + \lambda[-1, 1] = -z + \lambda[-1, 1].$$

最优条件是

$$0 \in \partial q(0).$$

于是

$$0 \in -z + \lambda[-1,1].$$

这表示存在某个 $u \in [-1,1]$，使得

$$0 = -z + \lambda u.$$

逐步解出:

$$\begin{aligned} 0 &= -z + \lambda u, \\ z &= \lambda u, \\ u &= \frac{z}{\lambda} \quad (\lambda > 0). \end{aligned}$$

要让 $u \in [-1,1]$，必须

$$-1 \leq \frac{z}{\lambda} \leq 1.$$

两边乘以正数 λ:

$$-\lambda \leq z \leq \lambda.$$

因此当

$$|z| \leq \lambda$$

时，$h^* = 0$。

14.5　合并三种情况

综上，软阈值算子为

$$S_\lambda(z) = \begin{cases} z - \lambda, & z > \lambda, \\ 0, & -\lambda \leq z \leq \lambda, \\ z + \lambda, & z < -\lambda. \end{cases}$$

也可以写成紧凑形式

$$S_\lambda(z) = \operatorname{sign}(z) \max(|z| - \lambda, 0).$$

这里

$$\operatorname{sign}(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z = 0, \\ -1, & z < 0. \end{cases}$$

14.6　数字例子

取 $\lambda = 2$。计算 $S_2(z)$。

$$
\begin{aligned}
z = 5: &\quad S_2(5) = 5 - 2 = 3, \\
z = 1: &\quad -2 \le 1 \le 2, \quad S_2(1) = 0, \\
z = -1.5: &\quad -2 \le -1.5 \le 2, \quad S_2(-1.5) = 0, \\
z = -7: &\quad S_2(-7) = -7 + 2 = -5.
\end{aligned}
$$

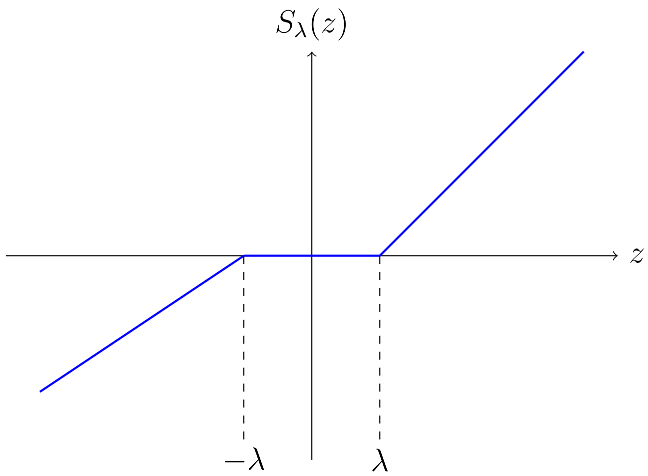

图 14.1: 软阈值：小信号归零，大信号向零收缩。

第十五章　特殊情形：正交设计下的 LASSO

15.1　$D = I$ 的情形

如果

$$D = I,$$

那么 LASSO 变成

$$\min_h \frac{1}{2}\|x-h\|_2^2 + \lambda\|h\|_1 .$$

展开:

$$\frac{1}{2}\|x-h\|_2^2 + \lambda\|h\|_1 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k}(x_j-h_j)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{k}|h_j| .$$

因为每个 h_j 只出现在自己的那一项里，问题可以拆成 k 个一维问题:

$$\min_{h_j} \frac{1}{2}(h_j-x_j)^2 + \lambda|h_j|, \qquad j = 1, 2, \ldots, k.$$

根据上一章，解为

$$h_j^* = S_\lambda(x_j).$$

因此

$$h^* = S_\lambda(x)$$

表示对 x 的每个坐标分别做 soft-thresholding。

15.2　数字例子

设

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ 0.5 \\ -4 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad \lambda = 1.$$

逐坐标计算:

$$
\begin{aligned}
h_1^* &= S_1(3) = 3 - 1 = 2, \\
h_2^* &= S_1(0.5) = 0, \\
h_3^* &= S_1(-4) = -4 + 1 = -3, \\
h_4^* &= S_1(1) = 0.
\end{aligned}
$$

所以

$$
h^* = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \\ 0 \end{bmatrix}.
$$

这个解是稀疏的，因为第二和第四个系数变成了零。

15.3 正交列情形

若 $D^\top D = I$，则

$$
\frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 = \frac{1}{2}x^\top x - h^\top D^\top x + \frac{1}{2}h^\top h.
$$

令

$$
z = D^\top x.
$$

则与 h 有关的部分是

$$
\frac{1}{2}h^\top h - z^\top h + \lambda \|h\|_1.
$$

逐坐标展开:

$$
\sum_{j=1}^{k} \left(\frac{1}{2}h_j^2 - z_j h_j + \lambda |h_j| \right).
$$

配方:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}h_j^2 - z_j h_j &= \frac{1}{2}(h_j^2 - 2z_j h_j) \\
&= \frac{1}{2}\left[(h_j - z_j)^2 - z_j^2\right] \\
&= \frac{1}{2}(h_j - z_j)^2 - \frac{1}{2}z_j^2.
\end{aligned}
$$

因为 $-\frac{1}{2}z_j^2$ 与 h_j 无关，所以每个坐标求解

$$
\min_{h_j} \frac{1}{2}(h_j - z_j)^2 + \lambda |h_j|.
$$

因此

$$
h_j^* = S_\lambda(z_j) = S_\lambda((D^\top x)_j).
$$

矩阵形式为

$$h^* = S_\lambda(D^\top x).$$

进阶读者

正交设计是 LASSO 中少数能写出显式解的情形。一般 $D^\top D \neq I$ 时，各个坐标耦合在一起，不能直接对 $D^\top x$ 做一次 soft-thresholding 得到精确解。

第十六章 坐标下降法：逐坐标求解 LASSO

16.1 思想

坐标下降法每次只更新一个变量 h_j，把其他变量暂时固定。LASSO 虽然整体没有简单闭式解，但单个坐标的子问题可以用 soft-thresholding 解。

16.2 分离第 j 个变量

LASSO 目标为

$$F(h) = \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 + \lambda \sum_{\ell=1}^{k} |h_\ell|.$$

按列写

$$Dh = \sum_{\ell=1}^{k} d_\ell h_\ell.$$

固定除 h_j 以外的变量，定义部分残差

$$r^{(-j)} = x - \sum_{\ell \neq j} d_\ell h_\ell.$$

则

$$x - Dh = x - \sum_{\ell \neq j} d_\ell h_\ell - d_j h_j = r^{(-j)} - d_j h_j.$$

所以关于 h_j 的子问题是

$$\min_{h_j} \frac{1}{2}\left\|r^{(-j)} - d_j h_j\right\|_2^2 + \lambda |h_j|.$$

其他 $\ell \neq j$ 的 $\lambda |h_\ell|$ 都是常数，更新 h_j 时可以忽略。

16.3 把子问题展开到一维二次式

展开平方项:

$$\frac{1}{2}\left\|r^{(-j)} - d_j h_j\right\|_2^2 = \frac{1}{2}(r^{(-j)} - d_j h_j)^\top (r^{(-j)} - d_j h_j)$$

$$= \frac{1}{2}\left[(r^{(-j)})^\top r^{(-j)} - 2h_j d_j^\top r^{(-j)} + h_j^2 d_j^\top d_j\right].$$

令

$$a_j = d_j^\top d_j = \|d_j\|_2^2, \qquad b_j = d_j^\top r^{(-j)}.$$

那么与 h_j 有关的部分是

$$\frac{1}{2}a_j h_j^2 - b_j h_j + \lambda |h_j|.$$

配方：

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}a_j h_j^2 - b_j h_j &= \frac{1}{2}a_j\left(h_j^2 - 2\frac{b_j}{a_j}h_j\right)\\ &= \frac{1}{2}a_j\left[(h_j - \frac{b_j}{a_j})^2 - \left(\frac{b_j}{a_j}\right)^2\right]\\ &= \frac{1}{2}a_j\left(h_j - \frac{b_j}{a_j}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{b_j^2}{a_j}.\end{aligned}$$

最后一项与 h_j 无关，可忽略。因此子问题等价于

$$\min_{h_j} \frac{1}{2}a_j\left(h_j - \frac{b_j}{a_j}\right)^2 + \lambda |h_j|.$$

如果 $a_j > 0$，除以正数 a_j 不改变最小点：

$$\min_{h_j} \frac{1}{2}\left(h_j - \frac{b_j}{a_j}\right)^2 + \frac{\lambda}{a_j}|h_j|.$$

根据 soft-thresholding,

$$h_j^* = S_{\lambda/a_j}\left(\frac{b_j}{a_j}\right).$$

等价写法为

$$h_j^* = \frac{1}{a_j}S_\lambda(b_j).$$

16.4 坐标下降算法

给定初始值 $h^{(0)}$，重复以下步骤：

1. 对 $j = 1, 2, \ldots, k$ 逐个更新；
2. 计算
$$r^{(-j)} = x - \sum_{\ell \neq j} d_\ell h_\ell;$$
3. 计算
$$a_j = \|d_j\|_2^2, \qquad b_j = d_j^\top r^{(-j)};$$
4. 更新
$$h_j \leftarrow S_{\lambda/a_j}\left(\frac{b_j}{a_j}\right).$$

16.5 完整手算一轮

令

$$D=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix},\qquad x=\begin{bmatrix}3\\0.5\end{bmatrix},\qquad \lambda=1,\qquad h^{(0)}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}.$$

更新 h_1。因为 $d_1=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，$d_2=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$，且 $h_2=0$，所以

$$r^{(-1)}=x-d_2h_2=\begin{bmatrix}3\\0.5\end{bmatrix}.$$

计算

$$a_1=d_1^\top d_1=1^2+0^2=1,$$

$$b_1=d_1^\top r^{(-1)}=1\cdot 3+0\cdot 0.5=3.$$

更新

$$h_1\leftarrow S_{1/1}(3/1)=S_1(3)=3-1=2.$$

更新 h_2。此时 $h_1=2$，所以

$$r^{(-2)}=x-d_1h_1=\begin{bmatrix}3\\0.5\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}2=\begin{bmatrix}3\\0.5\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}2\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0.5\end{bmatrix}.$$

计算

$$a_2=d_2^\top d_2=0^2+1^2=1,$$

$$b_2=d_2^\top r^{(-2)}=0\cdot 1+1\cdot 0.5=0.5.$$

更新

$$h_2\leftarrow S_1(0.5)=0.$$

一轮后

$$h^{(1)}=\begin{bmatrix}2\\0\end{bmatrix}.$$

第十七章　近端算子与 ISTA

17.1　把 LASSO 拆成两部分

定义

$$f(h)=\frac{1}{2}\|x-Dh\|_2^2,\qquad g(h)=\lambda\|h\|_1.$$

则 LASSO 是

$$\min_h F(h)=f(h)+g(h).$$

f 光滑可导，g 不光滑但有简单近端算子。

17.2　梯度下降回顾

如果只最小化 $f(h)$，梯度下降为

$$h^{(t+1)}=h^{(t)}-\eta\nabla f(h^{(t)}).$$

这里

$$\nabla f(h)=D^\top(Dh-x).$$

所以

$$h^{(t+1)}=h^{(t)}-\eta D^\top(Dh^{(t)}-x).$$

17.3　近端算子定义

定义 17.1 (近端算子). 给定函数 g 和步长 $\eta>0$，其近端算子定义为

$$\operatorname{prox}_{\eta g}(u)=\arg\min_z\left(\frac{1}{2}\|z-u\|_2^2+\eta g(z)\right).$$

当

$$g(z)=\lambda\|z\|_1,$$

有

$$\operatorname{prox}_{\eta\lambda\|\cdot\|_1}(u)=S_{\eta\lambda}(u),$$

其中 soft-thresholding 对每个坐标分别作用。

17.4 推导 L1 近端算子

根据定义

$$\mathrm{prox}_{\eta\lambda\|\cdot\|_1}(u) = \arg\min_z \left(\frac{1}{2}\|z-u\|_2^2 + \eta\lambda\|z\|_1\right).$$

展开:

$$\frac{1}{2}\|z-u\|_2^2 + \eta\lambda\|z\|_1 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{k}(z_j-u_j)^2 + \eta\lambda\sum_{j=1}^{k}|z_j|.$$

按坐标分解:

$$\sum_{j=1}^{k}\left[\frac{1}{2}(z_j-u_j)^2 + \eta\lambda|z_j|\right].$$

每个坐标的最小化都是

$$\min_{z_j}\frac{1}{2}(z_j-u_j)^2 + \eta\lambda|z_j|.$$

根据一维推导,

$$z_j^* = S_{\eta\lambda}(u_j).$$

因此

$$\mathrm{prox}_{\eta\lambda\|\cdot\|_1}(u) = \begin{bmatrix} S_{\eta\lambda}(u_1) \\ S_{\eta\lambda}(u_2) \\ \vdots \\ S_{\eta\lambda}(u_k) \end{bmatrix}.$$

17.5 ISTA 公式

ISTA 先对光滑项做一步梯度下降:

$$u^{(t)} = h^{(t)} - \eta\nabla f(h^{(t)}).$$

代入梯度:

$$u^{(t)} = h^{(t)} - \eta D^\top(Dh^{(t)} - x).$$

然后对 L1 项做近端映射:

$$h^{(t+1)} = S_{\eta\lambda}(u^{(t)}).$$

合并得到

$$h^{(t+1)} = S_{\eta\lambda}\left(h^{(t)} - \eta D^\top(Dh^{(t)} - x)\right).$$

17.6 步长条件

梯度

$$\nabla f(h) = D^\top (Dh - x)$$

的 Lipschitz 常数为

$$L = \lambda_{\max}(D^\top D) = \|D\|_2^2 .$$

通常选择

$$0 < \eta \le \frac{1}{L}.$$

进阶读者

FISTA 是 ISTA 的加速版本，典型收敛率从 ISTA 的 $O(1/t)$ 改善到 $O(1/t^2)$。但理解 FISTA 前必须先理解：光滑项梯度步加非光滑项近端步。

第十八章　L1 与 L2 正则化的几何差异

18.1　二维 L2 约束

二维 L2 约束为

$$\|h\|_2 \le c.$$

展开:

$$\sqrt{h_1^2 + h_2^2} \le c.$$

两边非负，平方得到

$$h_1^2 + h_2^2 \le c^2.$$

这是圆盘。

18.2　二维 L1 约束

二维 L1 约束为

$$\|h\|_1 \le c.$$

展开:

$$|h_1| + |h_2| \le c.$$

分四个象限看。

第一象限 $h_1 \ge 0, h_2 \ge 0$:

$$h_1 + h_2 \le c.$$

第二象限 $h_1 \le 0, h_2 \ge 0$:

$$-h_1 + h_2 \le c.$$

第三象限 $h_1 \le 0, h_2 \le 0$:

$$-h_1 - h_2 \le c.$$

第四象限 $h_1 \ge 0, h_2 \le 0$:

$$h_1 - h_2 \le c.$$

这四条边围成菱形。

18.3　为什么尖角导致稀疏

约束形式的 LASSO 可以写成

$$\min_h \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \|h\|_1 \le t.$$

平方误差的等高线通常是椭圆。优化时，最小椭圆会刚好碰到 L1 菱形。由于菱形尖角在坐标轴上，碰到尖角的概率较高。若碰到 $h_1 = 0$ 的轴，则最优解中 $h_1 = 0$；若碰到 $h_2 = 0$ 的轴，则 $h_2 = 0$。

18.4　L2 为什么通常不产生精确零

Ridge 的约束形式是

$$\min_h \frac{1}{2}\|x - Dh\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \|h\|_2 \le t.$$

L2 球是圆，没有坐标轴尖角。最优点通常落在光滑边界上，系数被缩小，但不容易精确等于零。

本节小结

L2 正则化更像“整体收缩”，L1 正则化更像“收缩加截断”。这就是 Ridge 常产生小而密的系数，LASSO 常产生稀疏系数的根本差异。

第三部分

第三阶段：综合例题、扩展与实践

第十九章　完整综合例题一：从 $x \approx Dh$ 到最小二乘

19.1　题目

给定

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

求

$$h^* = \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2.$$

19.2　第一步：写出 Dh

设

$$h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix}.$$

则

$$Dh = \begin{bmatrix} 1 \cdot h_1 + 0 \cdot h_2 \\ 0 \cdot h_1 + 1 \cdot h_2 \\ 1 \cdot h_1 + 1 \cdot h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_1 + h_2 \end{bmatrix}.$$

19.3　第二步：写出误差

$$x - Dh = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_1 + h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - h_1 \\ 2 - h_2 \\ 2 - h_1 - h_2 \end{bmatrix}.$$

19.4　第三步：写出平方误差

$$f(h_1, h_2) = (1 - h_1)^2 + (2 - h_2)^2 + (2 - h_1 - h_2)^2.$$

19.5　第四步：展开并求偏导

先展开三项:

$$(1 - h_1)^2 = h_1^2 - 2h_1 + 1,$$
$$(2 - h_2)^2 = h_2^2 - 4h_2 + 4,$$

$$\begin{aligned}(2 - h_1 - h_2)^2 &= (h_1 + h_2 - 2)^2 \\ &= h_1^2 + h_2^2 + 4 + 2h_1h_2 - 4h_1 - 4h_2.\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}f(h_1, h_2) &= h_1^2 - 2h_1 + 1 + h_2^2 - 4h_2 + 4 \\ &\quad + h_1^2 + h_2^2 + 4 + 2h_1h_2 - 4h_1 - 4h_2 \\ &= 2h_1^2 + 2h_2^2 + 2h_1h_2 - 6h_1 - 8h_2 + 9.\end{aligned}$$

偏导为

$$\frac{\partial f}{\partial h_1} = 4h_1 + 2h_2 - 6,$$
$$\frac{\partial f}{\partial h_2} = 4h_2 + 2h_1 - 8.$$

令偏导为零:

$$4h_1 + 2h_2 - 6 = 0,$$
$$2h_1 + 4h_2 - 8 = 0.$$

化简:

$$2h_1 + h_2 = 3,$$
$$h_1 + 2h_2 = 4.$$

从第一式得

$$h_2 = 3 - 2h_1.$$

代入第二式:

$$h_1 + 2(3 - 2h_1) = 4,$$

$$
\begin{aligned}
h_1 + 6 - 4h_1 &= 4, \\
-3h_1 &= -2, \\
h_1 &= \frac{2}{3}.
\end{aligned}
$$

再代回

$$
h_2 = 3 - 2 \cdot \frac{2}{3} = 3 - \frac{4}{3} = \frac{5}{3}.
$$

所以

$$
h^* = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 5/3 \end{bmatrix}.
$$

19.6　第五步：验证误差

$$
Dh^* = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 5/3 \\ 2/3 + 5/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 5/3 \\ 7/3 \end{bmatrix}.
$$

误差:

$$
x - Dh^* = \begin{bmatrix} 1 - 2/3 \\ 2 - 5/3 \\ 2 - 7/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ -1/3 \end{bmatrix}.
$$

平方误差:

$$
\left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(-\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{1}{9} + \frac{1}{9} + \frac{1}{9} = \frac{1}{3}.
$$

第二十章　完整综合例题二：LASSO 手算

20.1　题目

给定

$$D = I_3, \qquad x = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 0.8 \\ -3 \end{bmatrix}, \qquad \lambda = 1.$$

求

$$h^* = \arg\min_h \left(\frac{1}{2} \|x - h\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 \right).$$

20.2　展开目标函数

因为 $D = I_3$，所以 $Dh = h$。设

$$h = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{bmatrix}.$$

目标函数为

$$F(h) = \frac{1}{2} \left[(2.5 - h_1)^2 + (0.8 - h_2)^2 + (-3 - h_3)^2 \right] + |h_1| + |h_2| + |h_3|.$$

它可分解为三部分:

$$F(h) = F_1(h_1) + F_2(h_2) + F_3(h_3),$$

其中

$$F_1(h_1) = \frac{1}{2}(h_1 - 2.5)^2 + |h_1|,$$

$$F_2(h_2) = \frac{1}{2}(h_2 - 0.8)^2 + |h_2|,$$

$$F_3(h_3) = \frac{1}{2}(h_3 - (-3))^2 + |h_3|.$$

20.3　逐坐标 soft-thresholding

根据 $S_\lambda(z)$，有

$$h_j^* = S_1(x_j).$$

逐项计算:

$$\begin{aligned} h_1^* &= S_1(2.5) = 2.5 - 1 = 1.5, \\ h_2^* &= S_1(0.8) = 0 \quad (\text{因为} -1 \le 0.8 \le 1), \\ h_3^* &= S_1(-3) = -3 + 1 = -2. \end{aligned}$$

所以

$$h^* = \begin{bmatrix} 1.5 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}.$$

20.4　检查最优性条件

当 $D = I$ 时，LASSO 最优性条件是

$$0 \in h^* - x + \lambda \partial \left\| h^* \right\|_1.$$

逐坐标检查。

第一个坐标:

$$h_1^* = 1.5 > 0, \qquad \partial \left| h_1^* \right| = \{1\}.$$

所以

$$h_1^* - x_1 + 1 = 1.5 - 2.5 + 1 = 0.$$

第二个坐标:

$$h_2^* = 0, \qquad \partial \left| 0 \right| = [-1, 1].$$

需要

$$0 \in 0 - 0.8 + [-1, 1].$$

即存在 $u \in [-1, 1]$，使

$$-0.8 + u = 0.$$

取

$$u = 0.8 \in [-1, 1]$$

即可。

第三个坐标:

$$h_3^* = -2 < 0, \qquad \partial \left| h_3^* \right| = \{-1\}.$$

所以

$$h_3^* - x_3 - 1 = -2 - (-3) - 1 = 0.$$

三个坐标均满足最优性条件，因此解正确。

第二十一章　从单样本到多样本：$X \approx DH$

21.1　单样本形式

单个样本的表示是

$$x \approx Dh,$$

其中

$$x \in \mathbb{R}^m, \qquad D \in \mathbb{R}^{m\times k}, \qquad h \in \mathbb{R}^k.$$

21.2　多个样本

若有 n 个样本

$$x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}^m,$$

把它们并成矩阵

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

每个样本有自己的系数

$$h_1, h_2, \dots, h_n \in \mathbb{R}^k,$$

组成

$$H = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & \cdots & h_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{k\times n}.$$

于是

$$X \approx DH.$$

第 i 个样本对应

$$x_i \approx Dh_i.$$

21.3　Frobenius 范数

定义 21.1 (Frobenius 范数). 对矩阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix},$$

定义

$$\|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2.$$

多样本最小二乘可写为

$$\min_H \|X - DH\|_F^2.$$

展开为

$$\|X - DH\|_F^2 = \sum_{p=1}^{m}\sum_{q=1}^{n}\left(x_{pq} - \sum_{j=1}^{k} d_{pj}h_{jq}\right)^2.$$

也可按列写成

$$\|X - DH\|_F^2 = \sum_{q=1}^{n} \|x_q - Dh_q\|_2^2.$$

21.4 多样本 LASSO / 稀疏编码

若希望每个样本的系数都稀疏，可以写成

$$\min_H \frac{1}{2}\|X - DH\|_F^2 + \lambda\|H\|_1,$$

其中

$$\|H\|_1 = \sum_{j=1}^{k}\sum_{q=1}^{n} |h_{jq}|.$$

完全展开为

$$\min_{h_{jq}} \left[\frac{1}{2}\sum_{p=1}^{m}\sum_{q=1}^{n}\left(x_{pq} - \sum_{j=1}^{k} d_{pj}h_{jq}\right)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{k}\sum_{q=1}^{n}|h_{jq}|\right].$$

21.5 字典学习

如果 D 也未知，就进入字典学习:

$$\min_{D,H} \frac{1}{2}\|X - DH\|_F^2 + \lambda\|H\|_1 \quad \text{subject to} \quad \|d_j\|_2 \le 1,\ j = 1, \ldots, k.$$

约束 $\|d_j\|_2 \le 1$ 是为了避免尺度不唯一。因为

$$d_j h_{jq} = (cd_j)\left(\frac{h_{jq}}{c}\right)$$

对任意 $c \neq 0$ 都相同，如果不控制 D 的列长度，就可能把 D 放大、把 H 缩小，从而人为减小 $\|H\|_1$。

进阶读者

字典学习对 D 和 H 联合起来通常不是凸问题。但若固定 D，对 H 是 LASSO；若固定 H，对 D 是带约束的最小二乘。因此常用交替最小化。

第二十二章　常见误区与检查清单

22.1　误区一：把 $\|x\|_2$ 和 $\|x\|_2^2$ 混淆

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_m^2},$$

而

$$\|x\|_2^2 = x_1^2 + \cdots + x_m^2.$$

如果

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix},$$

则

$$\|x\|_2 = 5, \qquad \|x\|_2^2 = 25.$$

22.2　误区二：认为 L1 等于 L0

L0 是非零个数:

$$\|h\|_0 = \#\{j : h_j \neq 0\}.$$

L1 是绝对值和:

$$\|h\|_1 = \sum_{j=1}^{k} |h_j|.$$

例如

$$h = \begin{bmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

有

$$\|h\|_0 = 1, \qquad \|h\|_1 = 100.$$

所以二者不是一回事。L1 只是常用来鼓励稀疏。

22.3 误区三：以为 $\arg\min$ 是最小值

若

$$f(h) = (h-3)^2,$$

则

$$\min_h f(h) = 0, \qquad \arg\min_h f(h) = 3.$$

前者是函数值，后者是变量。

22.4 误区四：忽略维度

写

$$x - Dh$$

之前必须检查

$$x \in \mathbb{R}^m, \qquad Dh \in \mathbb{R}^m.$$

若 $D \in \mathbb{R}^{m\times k}$ 且 $h \in \mathbb{R}^k$，则 $Dh \in \mathbb{R}^m$，这时才可以与 $x \in \mathbb{R}^m$ 相减。

22.5 实用检查清单

遇到一个新公式时，按下面顺序检查：

1. 每个符号是什么类型：标量、向量、矩阵还是函数？
2. 每个对象的维度是多少？
3. 每次加法两边维度是否相同？
4. 每次乘法内侧维度是否匹配？
5. 目标函数最后是否是一个标量？
6. 若有 $\arg\min$，被优化变量是谁？
7. 若有正则化，惩罚的是误差、参数大小还是非零个数？

第四部分

附录

第二十三章　矩阵求导速查与证明

23.1　标量对向量的梯度

如果

$$f(h) = a^\top h,$$

其中 $a, h \in \mathbb{R}^k$，则

$$f(h) = a_1 h_1 + a_2 h_2 + \cdots + a_k h_k.$$

对 h_j 求偏导:

$$\frac{\partial f}{\partial h_j} = a_j.$$

所以

$$\nabla f(h) = a.$$

23.2　二次型求导

令

$$f(h) = \frac{1}{2} h^\top A h,$$

其中 $A = A^\top$。展开:

$$h^\top A h = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{k} a_{ij} h_i h_j.$$

对 h_ℓ 求偏导。包含 h_ℓ 的项分两类：$i = \ell$ 和 $j = \ell$。因此

$$\frac{\partial}{\partial h_\ell}(h^\top A h) = \sum_{j=1}^{k} a_{\ell j} h_j + \sum_{i=1}^{k} a_{i\ell} h_i.$$

因为 A 对称，$a_{i\ell} = a_{\ell i}$，所以上式为

$$2 \sum_{j=1}^{k} a_{\ell j} h_j = 2(Ah)_\ell.$$

因此

$$\frac{\partial}{\partial h_\ell} \frac{1}{2} h^\top A h = (Ah)_\ell.$$

把所有坐标放在一起，得到

$$\nabla_h \frac{1}{2} h^\top A h = Ah.$$

23.3　最小二乘梯度的另一种推导

$$J(h) = \frac{1}{2}(x - Dh)^\top (x - Dh).$$

展开：

$$J(h) = \frac{1}{2} x^\top x - h^\top D^\top x + \frac{1}{2} h^\top D^\top D h.$$

第一项 $\frac{1}{2}x^\top x$ 与 h 无关，梯度为 0。第二项为

$$-h^\top D^\top x = -(D^\top x)^\top h,$$

梯度为

$$-D^\top x.$$

第三项中 $D^\top D$ 对称，所以梯度为

$$D^\top D h.$$

合并：

$$\nabla J(h) = D^\top D h - D^\top x = D^\top (Dh - x).$$

第二十四章　练习题与答案

24.1　基础练习

练习 24.1. 设

$$a = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

计算 $a+b$、$2a-b$、$a^\top b$、$\|a\|_1$、$\|a\|_2^2$。

答案。

$$a+b = \begin{bmatrix} 2+0 \\ -1+4 \\ 3+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

$$2a-b = \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \\ 6 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ -6 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

$$a^\top b = 2\cdot 0 + (-1)\cdot 4 + 3\cdot 1 = 0 - 4 + 3 = -1.$$

$$\|a\|_1 = |2| + |-1| + |3| = 2 + 1 + 3 = 6.$$

$$\|a\|_2^2 = 2^2 + (-1)^2 + 3^2 = 4 + 1 + 9 = 14.$$

练习 24.2. 设

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad h = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

计算 Dh。

答案。

$$Dh = \begin{bmatrix} 1\cdot 2 + 2\cdot(-1) \\ 3\cdot 2 + 0\cdot(-1) \\ (-1)\cdot 2 + 1\cdot(-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2-2 \\ 6+0 \\ -2-1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 6 \\ -3 \end{bmatrix}.$$

24.2 最小二乘练习

练习 24.3. 设

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

求

$$\arg\min_h \|x - Dh\|_2^2.$$

答案。

$$Dh = \begin{bmatrix} h \\ h \end{bmatrix}, \qquad x - Dh = \begin{bmatrix} 1-h \\ 3-h \end{bmatrix}.$$

目标函数:

$$\begin{aligned} f(h) &= (1-h)^2 + (3-h)^2 \\ &= h^2 - 2h + 1 + h^2 - 6h + 9 \\ &= 2h^2 - 8h + 10. \end{aligned}$$

导数:

$$f'(h) = 4h - 8.$$

令导数为零:

$$4h - 8 = 0 \Rightarrow h = 2.$$

所以 $h^* = 2$。

练习 24.4. 设

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad x = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

用正规方程求最小二乘解。

答案。

$$D^\top = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned} D^\top D &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1\cdot 1 + 0\cdot 0 + 1\cdot 1 & 1\cdot 0 + 0\cdot 1 + 1\cdot 1 \\ 0\cdot 1 + 1\cdot 0 + 1\cdot 1 & 0\cdot 0 + 1\cdot 1 + 1\cdot 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$= \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned} D^\top x &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1\cdot 0 + 0\cdot 1 + 1\cdot 1 \\ 0\cdot 0 + 1\cdot 1 + 1\cdot 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

正规方程:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

展开:

$$2h_1 + h_2 = 1,$$
$$h_1 + 2h_2 = 2.$$

第一式得 $h_2 = 1 - 2h_1$。代入第二式:

$$\begin{aligned} h_1 + 2(1 - 2h_1) &= 2, \\ h_1 + 2 - 4h_1 &= 2, \\ -3h_1 &= 0, \\ h_1 &= 0. \end{aligned}$$

所以

$$h_2 = 1.$$

故

$$h^* = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

24.3 LASSO 练习

练习 24.5. 计算 $S_2(5)$、$S_2(1)$、$S_2(-3)$、$S_2(-0.5)$。

答案。

$$S_2(5) = 5 - 2 = 3.$$

$$S_2(1) = 0 \quad (|1| \le 2).$$

$$S_2(-3) = -3 + 2 = -1.$$

$$S_2(-0.5) = 0 \quad (|-0.5| \le 2).$$

练习 24.6. 设 $D = I_4$，

$$x = \begin{bmatrix} 4 \\ -1 \\ 0.2 \\ -5 \end{bmatrix}, \qquad \lambda = 1.5.$$

求 LASSO 解。

答案。当 $D = I$ 时

$$h_j^* = S_{1.5}(x_j).$$

逐项计算：

$$\begin{aligned} h_1^* &= S_{1.5}(4) = 4 - 1.5 = 2.5, \\ h_2^* &= S_{1.5}(-1) = 0, \\ h_3^* &= S_{1.5}(0.2) = 0, \\ h_4^* &= S_{1.5}(-5) = -5 + 1.5 = -3.5. \end{aligned}$$

因此

$$h^* = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 0 \\ 0 \\ -3.5 \end{bmatrix}.$$

第二十五章　总结

从本书的推导可以看到，三个核心公式的含义分别是：

$$x \approx Dh$$

表示用 D 的列向量线性组合近似 x；

$$h^* = \arg\min_h \|x - Dh\|_2^2$$

表示寻找让平方误差最小的系数；

$$h^* = \arg\min_h \left(\frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 + \lambda \|h\|_1 \right)$$

表示在拟合误差和稀疏性之间做权衡。

最重要的计算链条是：

$$Dh = \sum_{j=1}^{k} d_j h_j,$$

$$x - Dh = \begin{bmatrix} x_1 - \sum_j d_{1j} h_j \\ \vdots \\ x_m - \sum_j d_{mj} h_j \end{bmatrix},$$

$$\|x - Dh\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(x_i - \sum_{j=1}^{k} d_{ij} h_j \right)^2,$$

$$\nabla_h \frac{1}{2} \|x - Dh\|_2^2 = D^\top (Dh - x),$$

$$0 \in D^\top (Dh^* - x) + \lambda \partial \|h^*\|_1,$$

$$S_\lambda(z) = \begin{cases} z - \lambda, & z > \lambda, \\ 0, & |z| \le \lambda, \\ z + \lambda, & z < -\lambda. \end{cases}$$

本节小结

真正理解 LASSO 不需要先掌握所有高级优化理论，但必须掌握四件事：矩阵乘法是线性组合；最小二乘是平方误差最小；L1 是绝对值和；soft-thresholding 是 L1 产生稀疏的最小单元。