Ratio Math.
(1991), 167 - 177

UN PROBLEMA DI OTTIMIZZAZIONE NON-SMOOTH IN STATISTICA ROBUSTA

Luciano Stefanini (*)

Sommario - In questa nota viene preso in esame un problema di stima parametrica robusta noto come *Least Median of Squares Regression* (*LMS Regression*). Esso consiste nel determinare i parametri da stimare mediante la minimizzazione della mediana dei quadrati dei residui, in analogia con il metodo classico dei minimi quadrati in cui se ne minimizza la media.
In due recenti lavori di D.L. Souvaine - J.M. Steele [11] e di J.M. Steele - W.L. Steiger [12], sono stati proposti due algoritmi per il caso lineare, basati sulle proprietà degli iperpiani di regressione. Tali algoritmi non sono però applicabili al caso non-lineare e perdono di efficienza, nel caso lineare, col crescere del numero dei parametri del modello.
L'approccio qui adottato consente di studiare alcune caratteristiche della regressione LMS come problema di ottimizzazione vincolata a due livelli, in cui si deve minimizzare una funzione obiettivo soggetta a vincoli che contengono, a loro volta, un (sotto)problema di ottimizzazione. Ciò fa intervenire funzioni non-differenziali (*nonsmooth*) della classe poliedrico-convessa, le quali rendono conto della natura intrinsecamente combinatoria della stima LMS. La struttura del problema consente di ricavare un algoritmo di tipo Branch & Bound, applicabile indifferentemente sia al caso lineare che al caso non-lineare.

INTRODUZIONE

Nella letteratura recente sulla stima parametrica, a partire dai primi lavori di P. Huber (1964) e di F.R. Hampel (1971), è stato introdotto in modo sistematico il concetto di robustezza delle stime, precisato tramite diverse classi di stimatori robusti. Recentemente, P.J. Rousseeuw (in [9] e poi in [8]), in analogia con il

(*) Facoltà di Economia e Commercio - Urbino
Lavoro svolto con il contributo del Ministero della Pubblica Istruzione

modo di procedere nel caso dei minimi quadrati (in cui si minimizza la Media dei quadrati dei residui), ha proposto un criterio di stima che consiste nel minimizzare la Mediana dei quadrati dei residui (Least Median of Squares Regression), il cui *breakdown point* è 1/2.
Se con $r_1, r_2, ..., r_m$ si indicano i quadrati dei residui, la loro mediana è definita come un valore M che minimizza la somma degli scarti assoluti:

$$M \in \arg\min_{\mu} \sum_{j=1}^{m} | r_j - \mu |$$

ovvero

$$\sum_{j=1}^{m} | r_j - M | \quad = \quad \min_{\mu} \sum_{j=1}^{m} | r_j - \mu |$$

In due recenti lavori, D.L. Souvaine - J.M. Steele [11] e J.M. Steele - W.L. Steiger [12] hanno proposto due algoritmi efficienti per il caso lineare, basati sulle proprietà degli interpiani di regressione. Tali algoritmi non sono però applicabili nel caso di modelli di regressione non-lineare. Inoltre, essi perdono rapidamente di efficienza col crescere del numero p dei parametri da stimare (la loro complessità computazionale è dell'ordine o (m^p), ciò che li rende vantaggiosamente applicabili per bassi valori di p).

In questo lavoro si prende in esame la stima LMS nel caso di un modello di regressione generale, in cui i residui possono essere definiti a partire da una qualsiasi funzione (di classe $C^{(1)}$) dei parametri e dei dati.

Il problema viene dapprima formulato in termini di ottimizzazione a due livelli (*bilevel programming*) e, utilizzando la teoria classica della dualità, viene impostato come problema non -lineare che, descritto in forma compatta, contiene una funzione poliedrica convessa che ne caratterizza la natura *nonsmooth* e combinatoria.

Infine, utilizzando la particolare struttura del problema di ottimizzazione, viene proposto un metodo di tipo branch & bound per ottenere una procedura di minimizzazione globale applicabile sia al caso di un modello lineare che non-lineare.

FORMULAZIONE DEL PROBLEMA DI STIMA:

Si consideri il problema di determinare p parametri $\theta = (\theta_1, \theta_2, ..., \theta_p)^T$ che definiscono un modello del tipo

$$y = f(x, \theta),$$

dove:

$$x \in \mathbf{R}^q,\ \theta \in \mathbf{R}^p,\ f : \mathbf{R}^q \times \mathbf{R}^p \longrightarrow R,$$

sulla base di un numero m di osservazioni date dai vettori:

$$y = (y_1, y_2, ..., y_m)^T,$$

$$x_i = (x_{1i}, x_{2i}, ..., x_{qi})^T, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Indichiamo i quadrati dei residui con

$$r_i(\theta) = [y_i - f(x_i, \theta)]^2, \quad i = 1, 2, ..., m.$$

Fissato $\theta \in \mathbf{R}^p$, la mediana $M(\theta)$ dei quadrati dei residui, funzione di θ, è una soluzione del problema di minimo seguente:

$$M(\theta) \in \arg\min_{\mu} \sum_{j=i}^{m} | r_j(\theta) - \mu | \tag{1}$$

ed essendo $r_j(\theta) \geq 0\ \forall j$, si ha $M(\theta) \geq 0$. Se il minimo di tale problema, per θ fissato, non è unico, si può scegliere il più piccolo degli argomenti μ.

La stima LMS consiste nel determinare il vettore che minimizza $M(\theta)$:

$$\mathrm{Min}_{\theta}\, M(\theta). \tag{2}$$

Definendo le variabili

$$d_j^+ = \max\{0, r_j(\theta) - \mu\} \quad \text{e} \quad d_j^- = \max\{0, \mu - r_j(\theta)\} \tag{3}$$

ed avendosi $r_j(\theta) - \mu = d_j^+ - d_j^-$ e $| r_j(\theta) - \mu | = d_j^+ + d_j^-$,

il problema (2) può essere posto nella forma seguente:

$$\mathrm{Min}_{\theta,\mu}\ \mu \quad \text{s.t.} \quad \mu \geq 0 \tag{4}$$

$$\sum_{j=i}^{m} (d_j^+ + d_j^-) = \text{Minimo} \tag{5}$$

s.t.

$$\mu = r_j(\theta) - d_j^+ + d_j^- \quad \text{per} \quad j = 1, 2, ..., m \tag{6}$$

$$d_j^+ \geq 0, \quad d_j^- \geq 0. \tag{7}$$

Il problema (4)-(7) contiene due livelli di ottimizzazione, il secondo comparendo fra i vincoli del primo (*Bilevel Programming Problem*, cfr. J. Bard, [1]).

Consideriamo il sottoproblema (5)-(7) per θ fissato. Se $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m$ sono le variabili duali associate ai vincoli (6), il problema duale di (5)-(7), corrispondente al calcolo della mediana, è il seguente (θ fissato):

$$\text{Max} \sum_{j=1}^{m} \lambda_j r_j(\theta) \tag{8}$$

s.t.

$$\sum_{j=1}^{m} \lambda_j = 0 \tag{9}$$

$$-1 \leq \lambda_i \leq 1, \qquad i = 1, 2, ..., m. \tag{10}$$

Poiché, per θ fissato, le funzioni che intervengono sono lineari, le seguenti condizioni di Kuhn-Tucker sono necessarie e sufficienti affinché il vettore $(\mu, d^+_1, ..., d^+_m, d^-_1, ..., d^-_m, \lambda_1, ..., \lambda_m)^T$ sia soluzione della coppia di problemi (5)-(7) e (8)-(10).

$$\mu + d^+_i - d^-_i - r_i(\theta) = 0 \qquad \text{per} \quad i = 1, 2, ..., m \tag{11}$$

$$\sum_{j=1}^{m} (d^+_j + d^-_j) - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j r_j(\theta) = 0 \tag{12}$$

$$d^+_j \geq 0, \; d^-_j \geq 0, \; \mu \geq 0 \tag{13}$$

$$\sum_{j=1}^{m} \lambda_j = 0 \tag{14}$$

$$-1 \leq \lambda_j \leq 1 \tag{15}$$

Il problema di stima LMS può allora essere formulato nel modo seguente, nelle 3m+p+1 variabili $\mu \in \mathbf{R}$, $\theta \in \mathbf{R}^p$, $d^+ \in \mathbf{R}$, $d^- \in \mathbf{R}^m$, $\lambda \in \mathbf{R}^m$:

(P) Min μ
s.t. (11) - (15).

OSSERVAZIONI SUL PROBLEMA DI OTTIMIZZAZIONE

Esaminiamo ora il problema (8)-(10), che può essere riscritto, per valori fissati di θ, nella forma:

$$\text{Max} \quad 2\sum_{j=1}^{m} [v_j r_j(\theta) - r_j(\theta)]$$
$$\text{s.t.}$$
$$2\sum_{j=1}^{m} v_j = m$$
$$0 \leq v_j \leq 1$$

dove si è posto $v_j = (\lambda_j+1) / 2$ per ogni $j = 1, 2, ..., m$

Come noto, il problema (5) è un caso particolare di *knapsack problem* con vincoli sulle variabili, la cui soluzione (B.G. Dantzig [3]) richiede semplicemente di ordinare i termini $r_i(\theta)$ in senso non-decrescente:

$$r_1(\theta) \geq r_2(\theta) \geq ... \geq r_m(\theta), \tag{16}$$

di scegliere $t = m/2$ se m è pari, ovvero $t = (m+1)/2$ se m è dispari e di porre

$$v_j = \begin{cases} 1 & \text{se } j < t \\ m/2 - t + 1 & \text{se } j = t \\ 0 & \text{se } j > t \end{cases}$$

e quindi

$$\lambda_j = \begin{cases} +1 & \text{se } j < t \\ m - 2t + 1 & \text{se } j = t \\ -1 & \text{se } j > t \end{cases}$$

Ne segue che i valori di λ_j sono tutti interi dell'insieme $\{-1, 0, 1\}$ e, indicato con $\mathbf{L}$ l'insieme dei vettori λ che, al variare di θ, sono candidati a risolvere il problema (8)-(10), si ha che

$$\mathbf{L} \subset \{-1, 0, 1\}^m \text{ è un insieme finito.}$$

Il problema (8)-(10) può allora essere scritto nella forma seguente:

$$\Phi(\theta) = \text{Max} \left\{ \sum_{j=1}^{m} r_j(\theta)\lambda_j;\ \lambda \in \mathbf{L} \right\} \tag{17}$$

Poiché una funzione del tipo

$$h(x) = \text{Max}\ \{x^T \lambda;\ \lambda \in \mathbf{L}\},\ \text{al variare di } x,$$

è poliedrica convessa (*polyhedral convex*), caratterizzata da un numero finito di iperpiani di supporto, e $\Phi(\theta) = h(r(\theta))$, la funzione (17) è composta da $r(\theta)$ che, nelle nostre ipotesi, è differenziabile e da $h(r)$ che è invece convessa, continua ma non ovunque differenziabile.

Il problema

$$\text{Min}_\theta \quad \Phi(\theta)$$

è stato studiato da R. Fletcher ([5] e [6]), il quale ha proposto un algoritmo globalmente convergente.

Si osservi che, essendo

$$\Phi(\theta) = \sum_{j=1}^{m} \left| r_j(\theta) - M(\theta) \right|, \tag{18}$$

$\Phi(\theta)$ rappresenta una misura di dispersione dei quadrati dei residui attorno alla loro mediana e la minimizzazione della (18) ha di per sé interesse. La specializzazione dell'algoritmo di Fleohter a (18) è descritta in un lavoro precedente [13].

Inoltre, la funzione $\Phi(\theta)$ esprime la natura non differenziabile del problema (P). Infatti, tramite la definizione (17), possiamo esprimere (P) nella forma seguente:

$$\begin{gathered}
\text{Min} \quad \mu \\
\text{s.t.} \\
\mu = r_i(\theta) - d_i^+ + d_i^- \qquad \text{per} \quad i = 1, 2, \ldots, m \\
\sum_{j=1}^{m} [d_j^+ + d_j^-] = \Phi(\theta) \\
d_j^+ \geq 0,\ d_j^- \geq 0,\ \mu \geq 0
\end{gathered}$$

In questa ultima formulazione, in cui la funzione obiettivo è lineare e le funzioni dei vincoli sono convesse, il vettore λ non compare esplicitamente bensì è contenuto nella funzione $\Phi(\theta)$ che compare in un vincolo.

UN ALGORITMO DI TIPO BRANCH AND BOUND

Come si è visto nella sezione precedente, i vettori λ che entrano come variabili nel problema (P) appartengono ad un insieme finito

$$\mathbf{L} \subseteq \{\lambda \mid \lambda_i \in \{-1, 0, 1\}, \sum_{j=1}^{m} \lambda_j = 0\}$$

Supponiamo di conoscere il vettore λ soluzione di (P) e definiamo i tre insiemi disgiunti di indici:

$$\Lambda^+ = \{j \mid \lambda_j = +1\}, \quad \Lambda^- = \{j \mid \lambda_j = -1\} \text{ e}$$
$$\Lambda^0 = \{j \mid \lambda_j = 0\} \text{ (eventualmente } \Lambda^0 \text{ è vuoto).}$$

Dal problema (8)-(10) si ha che i primi due insiemi hanno cardinalità uguale a t = [m/2], il troncamento intero di m/2, e che l'unione dei tre insiemi è tutto {1, 2, ..., m}.

Si osservi, per inciso, che, se $\lambda_t = 0$ allora $d_t^- + d_t^+ = 0$, da cui anche $d_t^- = d_t^+ = 0$ e quindi $\mu = r_t(\theta)$. In ogni caso, inoltre,

$$\lambda_j = -1 \quad \Rightarrow \quad d_j^- = 0, \quad d_j^+ = r_j(\theta) - \mu \geq 0$$
$$\lambda_j = +1 \quad \Rightarrow \quad d_j^+ = 0, \quad d_j^- = \mu - r_j(\theta) \geq 0$$

Allora, fissato il vettore λ che soddisfi (9) e (10), il calcolo di θ è riconducibile al problema seguente:

$$\text{(Q)} \quad \operatorname{Min}_{\theta, \mu} \quad \mu$$
$$\text{s.t.}$$

$$\begin{array}{ll} r_j(\theta) - \mu \geq 0 & \text{per } j \in \Lambda^- \\ \mu - r_j(\theta) \geq 0 & \text{per } j \in \Lambda^+ \\ \mu = r_j(\theta) & \text{per } j \in \Lambda^0 \end{array}$$

Il problema precedente, contenente le variabili μ e θ, equivale a (P) nell'ipotesi che siano noti a priori gli insiemi Λ corrispondenti al vettore ottimo λ. Se invece tali insiemi di indici non si riferiscono all'ottimo λ, è immediato verificare che la soluzione (μ_Q, θ_Q) di (Q) è legata alla soluzione (μ_P, θ_P) di (P) della disuguaglianza

$$\mu_P \leq \mu_Q,$$

ossia (Q) fornisce un *upper bound* per (P).

Inoltre, se gli insiemi Λ in (Q) sono sostituiti da tre loro sottoinsiemi

$$V^+ \subseteq \Lambda^+, V^- \subseteq \Lambda^- \text{ e } V^0 \subseteq \Lambda^0$$

si ottiene un problema

$$\text{(BQ)}\ \mathrm{Min}_{\theta,\mu}\ \mu$$
$$\text{s.t.}$$
$$\begin{array}{ll} r_j(\theta) - \mu \geq 0 & \text{per } j \in V^- \\ \mu - r_j(\theta) \geq 0 & \text{per } j \in V^+ \\ \mu = r_j(\theta) & \text{per } j \in V^0 \\ \mu \geq 0 & \end{array}$$

la cui soluzione (μ_{BQ}, θ_{BQ}) è tale che $\mu_{BQ} \leq \mu_Q$, per cui (BQ) fornisce un *lower bound* a (Q).

Queste proprietà suggeriscono una procedura di ricerca di tipo *branch and bound* in cui ogni percorso (nodo finale) dell'albero di ricerca corrisponde ad una scelta degli insiemi V. Una strategia di branching è la seguente: si considerano m possibili livelli, corrispondenti alle m componenti del vettore λ; ad ogni livello sono creati tre *branch*, corrispondenti alle tre possibili scelte seguenti:

	0		livello j-1
0	0	0	livello j
$j \in V^+$	$j \in V^0$	$j \in V^-$	

Ad ogni nodo del livello m si ha una terna di insiemi Λ per il problema (Q) mentre ad ogni livello intermedio si ha un problema (BQ).

L'algoritmo può allora essere schematizzato nel modo seguente:

STEP 0 (INIZIALIZZAZIONE)

Dato $\theta = \theta_0$ iniziale (qualsiasi), calcola $r_i(\theta)$ per $i = 1, 2, ..., m$ e risolvi il problema (8)-(10) (richiede solo un ordinamento).

Definisci i tre insiemi Λ e risolvi il corrispondente problema (Q) ottenendo (μ_Q, θ_Q). Definisci $t^+ = |\Lambda^+|$, $t^0 = |\Lambda^0|$ e $t^- = |\Lambda^-|$ uguali alle cardinalità dei tre insiemi Λ.

Per quanto visto, μ_Q è una soluzione iniziale di (P).

Poni $j = 0$ (indice iniziale di livello), $V^+ = V^- = V^0 =$ Insieme vuoto.

STEP 1. (BRANCHING AL LIVELLO SUCCESSIVO)

Incrementa l'indice di livello: $j \leftarrow j + 1$.

Se $|V^+| < t^+$ allora: $s_j \leftarrow +1$

$V^+ \leftarrow V^+ \cup \{j\}$.

altrimenti, se $|V^0| = 0$ allora: $s_j \leftarrow 0$

$V^0 \leftarrow \{j\}$

altrimenti: $s_j \leftarrow -1$

$V^- \leftarrow V^- \cup \{j\}$.

(Il vettore di stato s_j indica il tipo di branching effettuato al livello j).

STEP 2. (CALCOLO DEL BOUND)

Risolvi il problema (BQ). Se non esistono soluzioni ammissibili, allora vai allo step 4.
Se la soluzione esiste, e j=m, allora vai allo step 5; se invece j<m e $\mu_{BQ} \geq \mu_Q$ vai allo step 3.
Altrimenti vai allo step 1.

STEP 3. (BRANCHING AL MEDESIMO LIVELLO)

Se $s_j = -1$ allora vai allo step 1.
Se $s_j = 0$ e $|V^-| < t^-$ allora: $s_j \leftarrow -1$
$V^- \leftarrow V^- \cup \{j\}$
$V^0 \leftarrow$ Insieme Vuoto
vai allo step 2.
Se $s_j = 0$ e $|V^-| = t^-$ allora: vai allo step 4.
Se $s_j = +1$ e $|V^0| = 0$ allora: $s_j \leftarrow 0$
$V^0 \leftarrow \{j\}$
$V^+ \leftarrow V^+ - \{j\}$
vai allo step 2.
Se $s_j = +1$ e $|V^0| = 1$ e $|V^-| = t^-$ allora: vai allo step 4.
Se $s_j = +1$ e $|V^0| = 1$ e $|V^-| < t^-$ allora: $s_j \leftarrow -1$
$V^- \leftarrow V^- \cup \{j\}$
$V^+ \leftarrow V^+ - \{j\}$
vai allo step 2.

STEP 4. (BACKTRACK AL LIVELLO PRECEDENTE)

Se $s_j = 0$ allora:	$V^0 \leftarrow$ Insieme Vuoto
Se $s_j = +1$ allora:	$V^+ \leftarrow V^+ - \{j\}$
Se $s_j = -1$ allora:	$V^- \leftarrow V^- - \{j\}$
Decrementa	$j \leftarrow j - 1$.
Se j = 0 allora:	STOP.

altrimenti: vai allo step 3.

STEP. 5. (TROVATA UNA SOLUZIONE)

Se $\mu_{BQ} < \mu_Q$ allora: $\mu_Q \leftarrow \mu_{BQ}$
$\theta_Q \leftarrow \theta_{BQ}$

Vai allo step 4.

L'algoritmo appena illustrato, che, come si è visto, enumera tutti i nodi dell'albero di ricerca relativo ai possibili insiemi di indici che definiscono il problema (P), determina la soluzione ottima globale di (P). Esso è stato codificato in linguaggio FORTRAN 77 per un Personal Computer che utilizza il sistema operativo MS-DOS. L'esperienza computazionale svolta ha mostrato che scegliendo il vettore iniziale θ della stima ai minimi quadrati del modello ed ordinando le osservazioni sulla base del calcolo della mediana con tale valore iniziale di θ, il numero dei nodi esaminati effettivamente è ragionevolmente contenuto.

BIBLIOGRAFIA

1. Bard, J. F., *Convex two-level Optimization*, Math. Progr., 40, 1988.
2. Clarke, F.H., *Nonsmooth Analysis and Optimization*, J. Wiley & Sons, 1983.
3. Dantzig, G.B., *Discrete Variable Extremun Problems*, Oper. Res., 5, 1957.
4. Demyanov, V.F. - Pallaschke, D. (eds), *Nondifferentiable Optimization: Motivations and Applications*, IIASA - Springer Verlag, 1985.
5. Fletcher, R., *Practical Methods of Optimization*, Vol. 2., J. Wiley & Sons, 1981.
6. Fletcher, R., *"A Model Algorithm for Composite Nondifferentiable Optimization Problems"*, Math. Progr. Study 17, 1982.
7. Huber, P., *Robust Statistics*, J. Wiley & Sons, 1981.
8. Hampel, F.R. - Ronchetti, E.M. - Rousseeuw, P.J. - Stahel, W.A., *Robust Statistics*, J. Wiley & Sons, 1986.
9. Rousseeuw, P.J., *Least Median of Squares Regression*, J.A.S.A., 79, 388, 1984.
10. Shor, N.Z., *Minimization Methods for Nondifferentiable Functions*, Springer Verlag, 1985.
11. Souvaine, D.L. - Steele, J.M., *Time - and Space - Efficient Algorithms for Least Median of Squares Regression*, J.A.S.A., 82, 399, 1987.
12. Steele, J.M. - Steiger, W.L., *Algorithms and Complexity for Least Median of Squares Regression*, Discr. Appl. Math., 13, 1986.

13. Stefanini, L., *Su un problema di stima parametrica robusta*, XII Congresso Annuale A.M.A.S.E.S., Palermo, 1988.