# Optimalizace

## 6. Aplikace metody nejmenších čtverců

Tomáš Kroupa Tomáš Werner

2022 LS

Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

# Regrese

- Regresní model vyjadřuje závislost proměnné $y$ na $x$ funkcí

$$y = f(x, \boldsymbol{\theta}),$$

  kde $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n$ je vektor parametrů, které hledáme
- Proměnná $y$ je reálná, proměnná $x$ může mít hodnoty v $\mathbb{R}^k$
- Pro data $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ hledáme $\boldsymbol{\theta}$ minimalizující

$$\sum_{i=1}^{m} (y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta}))^2$$

Pro jaké funkce $f$ umíme efektivně spočítat $\boldsymbol{\theta}$?

# Lineární regrese

Funkce $f(x, \boldsymbol{\theta})$ je lineární *v parametrech*:

$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 \varphi_1(x) + \cdots + \theta_n \varphi_n(x) = \boldsymbol{\varphi}(x)^\mathsf{T} \boldsymbol{\theta},$$

kde $\varphi_1, \ldots, \varphi_n$ jsou zadané funkce.

**Metoda nejmenších čtverců**

$$\min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{m} \left( y_i - \boldsymbol{\varphi}(x_i)^\mathsf{T} \boldsymbol{\theta} \right)^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}\|^2,$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \ \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \ldots & \varphi_n(x_1) \\ & & \vdots & \\ \varphi_1(x_m) & \varphi_2(x_m) & \ldots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_n \end{bmatrix}$$

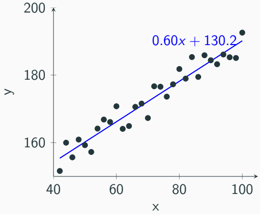
# Příklad – prokládáme body přímkou

- Máme $m$ měření $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$ váhy a výšky
- Vztah mezi proměnnými vyjadřuje funkce $f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 + \theta_2 x$
- Metoda nejmenších čtverců:

$$\min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^2} \|\mathbf{y} - \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}\|^2, \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}$$

Protože existují alespoň dvě různá měření váhy $(x_i \neq x_j)$, tak má matice $\mathbf{A}$ LN sloupce a existuje jediné řešení $\boldsymbol{\theta}^* = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{y}$.

$$\theta_1^* = 130.2, \quad \theta_2^* = 0.6$$



# Příklad – doprava (1)

- Úsek délky 130$m$ mezi semafory projede automobil za čas $[s]$

$$y = \theta_1 + \frac{\theta_2 x}{1 - \frac{x}{N}},$$

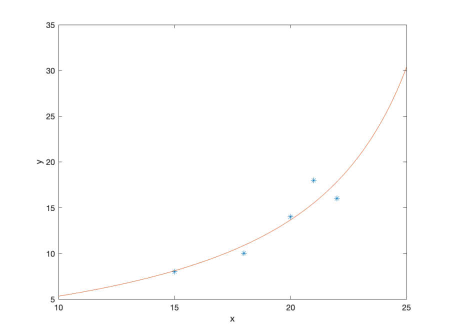
  kde $x$ je počet všech aut v úseku, $N = 30$ je kapacita úseku a $\theta_1, \theta_2$ jsou neznámé parametry
- Na základě $m = 5$ měření odhadujeme průměrnou rychlost auta $[km/h]$ v úseku, pokud je v něm 12 aut

| $x_i$ | 20 | 18 | 22 | 21 | 15 |
|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | 14 | 10 | 16 | 18 | 8 |

# Příklad – doprava (2)

- Lineární regrese $y = \theta_1 + \frac{\theta_2 x}{1-\frac{x}{N}}$, kde $\varphi_1 = 1$, $\varphi_2(x) = \frac{x}{1-\frac{x}{N}}$,

  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^5$ a $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \varphi_2(x_1) \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \varphi_2(x_5) \end{bmatrix}$
- Jelikož $\mathbf{A}$ má LN sloupce, jediné řešení je $\boldsymbol{\theta}^* = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{y}$ a dostaneme $\theta_1^* = 2.546$, $\theta_2^* = 0.185$




Pro $x = 12$ dostaneme průjezd za $y = 6.252\ s$, tedy rychlost

$$\frac{130}{6.252} \cdot 3.6 = 74.861\ km/h$$

# Příklad – doprava (3)

```
% Data
x = [20;18;22;21;15];
y = [14;10;16;18;8];
plot(x,y,'*')
xlabel('x')
ylabel('y')
hold on

% MNČ
N =30;
f = x./(1-x/N); % hodnoty druhé bázové funkce
A = [ones(5,1) f];
theta = A\y; % výpočetně lepší než inv(A'*A)*A'*y

% Graf výsledného modelu
X = 10:0.01:25;
Y = theta(1) + theta(2)*X./(1-X/N);
plot(X,Y)
hold off
```

# Proložení bodů polynomem (1)

- Regresní funkce je zde polynom stupně $n-1$ proměnné $x$,

$$f(x, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1 + \theta_2 x + \theta_3 x^2 + \cdots + \theta_n x^{n-1}$$

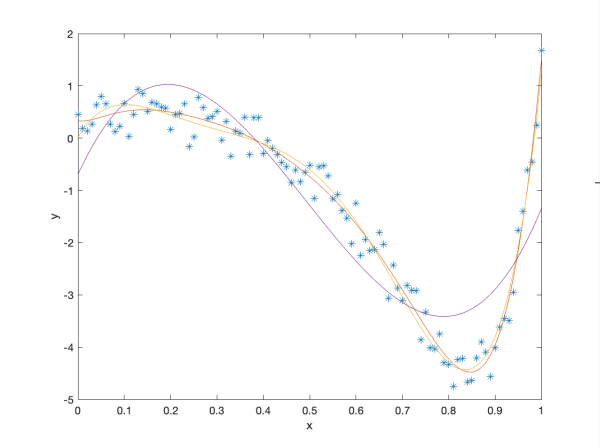
- Vandermondova matice $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^{n-1} \\ & & & \vdots & \\ 1 & x_m & x_m^2 & \ldots & x_m^{n-1} \end{bmatrix}$

**Interpolace polynomem**

Nechť jsou všechny hodnoty $x_1, \ldots, x_m$ různé. Potom má Vandermondova matice LN sloupce a existuje jediný polynom $f(x, \boldsymbol{\theta})$ stupně $\leq m-1$ splňující $y_i = f(x_i, \boldsymbol{\theta}),\ \ i = 1, \ldots, m$.

# Proložení bodů polynomem (2)

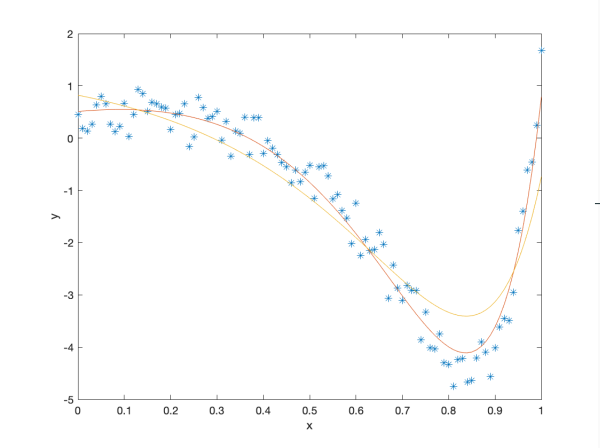
- Přesná interpolace vede na polynomy velmi vysokého stupně
- Preferujeme jednoduché modely vystihující podstatné rysy dat
- Pro $m = 101$ měření $(x_i, y_i)$ porovnáme 3 různé polynomy




| $n-1$ | RSS | $\|\boldsymbol{\theta}\|$ |
|---|---|---|
| 3 | 57 | 77 |
| 5 | 8.93 | 713 |
| 10 | 7.76 | $4 \cdot 10^4$ |

# Proložení bodů polynomem (3)

- Regularizací zjednodušíme model s polynomem 10. stupně
- Minimalizujeme kritérium $\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}\|^2 + \mu\|\boldsymbol{\theta}\|^2$ pro nějaké $\mu > 0$
- Jediné řešení je $\boldsymbol{\theta}^* = (\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A} + \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{y}$




| $\mu$ | RSS | $\|\boldsymbol{\theta}\|$ |
|---|---|---|
| 0.1 | 11.29 | 10.84 |
| 1 | 39.7 | 5.91 |

# Další využití regularizace

- Většinou předpokládáme lineární nezávislost sloupců matice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_n(x_1) \\ & & \vdots & \\ \varphi_1(x_m) & \varphi_2(x_m) & \dots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix}$$

- V případě $m < n$ tento předpoklad není splněn

**Postřehy**

- Jedna z funkcí $\varphi_i$ je na zadaných datech redundantní
- Soustava normálních rovnic $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} \boldsymbol{\theta} = \mathbf{A}^\top \mathbf{y}$ má více řešení
- Protože je matice $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \mu \mathbf{I}$ invertibilní pro libovolné $\mu > 0$, můžeme použít regularizované řešení $\boldsymbol{\theta}^* = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{y}$

# Statistický pohled na lineární model

Do modelu lineární regrese začleníme náhodnost spočívající v chybách měření nebo šumu:

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

- $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pozorovatelné hodnoty vysvětlujících proměnných
- $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n$ neznámé odhadované parametry
- $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$ *náhodné* chyby
- $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$ *náhodné* hodnoty vysvětlované proměnné

# Předpoklady lineárního modelu $\mathbf{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}$

- Každá chyba $\varepsilon_i$ má nulovou střední hodnotu, tedy $\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0$
- Všechny chyby $\varepsilon_i$ mají stejný rozptyl $\sigma^2$, tedy $\mathbb{E}[\varepsilon_i^2] = \sigma^2$
- Různé chyby $\varepsilon_i$ a $\varepsilon_j$ jsou nekorelované, tedy $\mathbb{E}[\varepsilon_i \varepsilon_j] = 0$

**Zkrácený zápis**

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0} \qquad \mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^\mathsf{T}] = \sigma^2 \mathbf{I}$$

## Lineární estimátor $\hat{\theta}$ pro model $\mathbf{y} = \mathbf{A}\theta + \varepsilon$

Lineární estimátor je náhodný vektor $\hat{\boldsymbol{\theta}} := \mathbf{B}\mathbf{y}$, kde $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$.
Říkáme, že $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ je nevychýlený, pokud

$$\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\theta}}] = \boldsymbol{\theta}.$$

### Vlastnosti

- Střední hodnota $\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\theta}}] = \mathbf{B}\mathbf{A}\theta$
- Estimátor $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ je nevychýlený $\Leftrightarrow$ $\mathbf{B}$ je levá inverze matice $\mathbf{A}$
- Kovarianční matice nevychýleného estimátoru je $\sigma^2\mathbf{B}\mathbf{B}^\mathsf{T}$

# LS estimátor pro model $\mathbf{y} = \mathbf{A}\theta + \varepsilon$

Pokud má $\mathbf{A}$ LN sloupce, definujeme LS estimátor pomocí matice

$$\mathbf{A}^{+} = (\mathbf{A}^{\mathsf{T}}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}$$

a pozorujeme, že

- je nevychýlený, protože $\mathbf{A}^{+}\mathbf{A} = \mathbf{I}$
- má kovarianční matici $\sigma^2(\mathbf{A}^{\mathsf{T}}\mathbf{A})^{-1}$

**Věta (Gauss-Markov)**

LS estimátor má ze všech nevychýlených lineárních estimátorů nejmenší čtvercovou chybu.

# Příklad

**Jak dlouho padá kulička do studny?**

Máme $m$ kuliček a měříme dobu dopadu $y_i$ kuličky $i$ do studny.

- Lineární model $\mathbf{y} = \mathbf{A}\theta + \varepsilon$, kde $\mathbf{A} = [1 \dots 1]^\mathsf{T}$
- LS estimátor je aritmetický průměr

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{A}^{+}\mathbf{y} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$$

- Rozptyl LS estimátoru je

$$\sigma^2(\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A})^{-1} = \frac{\sigma^2}{m}$$

# Odhad metodou nejmenších čtverců je maximálně věrohodný

Předpoklady modelu $\mathbf{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ jsou nyní:

- nezávislost chyb $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m$
- $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m \sim N(0, \sigma)$

Hodnotíme $\mathbf{r}(\boldsymbol{\theta}) \coloneqq \tilde{\mathbf{y}} - \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}$, kde $\tilde{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^m$ jsou naměřené hodnoty.

**Tyto optimalizační úlohy jsou ekvivalentní**

1. $\min\limits_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{r}(\boldsymbol{\theta})\|^2$
2. $\max\limits_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n} f_\varepsilon(\mathbf{r}(\boldsymbol{\theta}))$, kde $f_\varepsilon(\mathbf{r}(\boldsymbol{\theta}))$ je věrohodnost naměřených chyb pro parametry $\boldsymbol{\theta}$ a rozdělení $N(0, \sigma)$