Cvičení z optimalizace
Metoda nejmenších čtverců

Vojtěch Franc, 2010

Úvod

Mějme soustavu lineárních rovnic

$$\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}\,, \tag{1}$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ je zadaná matice, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ je zadaný vector a $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$ je vektor proměnných. Metoda nejmenších čtverců (least squares method) se používá k nalezení vektoru $\boldsymbol{x}$, který nejlépe vyhovuje soustavě (1) v případě, kdy (přesné) řešení této soustavy neexistuje. Kvalita řešení $\boldsymbol{x}$ je definována jako kvadrát euklidovské vzdálenosti mezi vektory $\mathbf{A}\boldsymbol{x}$ a $\boldsymbol{b}$, tj. kriteriální funkce je

$$F(\boldsymbol{x}) = \|\mathbf{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2 = \sum_{i=1}^{n} (\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{x} - b_i)^2 = \boldsymbol{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{b}^T\mathbf{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{b}\,,$$

kde $\boldsymbol{a}_i$ značí i-tý řádek matice $\mathbf{A}$ a b_i je i-tá souřadnice vektoru $\boldsymbol{b}$. Vektor $\hat{\boldsymbol{x}}$ je řešením soustavy (1) ve smyslu nejmenších čtverců (least square solution), pokud je řešením optimalizačního problému

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^m} F(\boldsymbol{x})\,. \tag{2}$$

Problém 2 vyžaduje minimalizaci konvexní kvadratické funkce bez omezení. Konvexita kvadratické funkce $F(\boldsymbol{x})$ plyne z toho, že matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ je pozitivní definitní (důkaz viz. úlohy). Díky tomu můžeme převést řešení (2) na hledání stacionárního bodu funkce $F(\boldsymbol{x})$. Tento problém vede na řešení soustavy lineárních rovnic

$$\left.\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right|_{\hat{\boldsymbol{x}}} = 2\mathbf{A}^T\mathbf{A}\hat{\boldsymbol{x}} - 2\mathbf{A}^T\boldsymbol{b} = \mathbf{0}\,. \tag{3}$$

Pokud je matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ invertovatelná, pak řešení soustavy (3), a tím i řešení problému (2), spočteme podle vztahu

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \left(\mathbf{A}^T\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^T\boldsymbol{b}\,. \tag{4}$$

Řešení v Matlabu Pokud existuje, lze inverzi matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ spočítat pomocí příkazu `inv(A'*A)`, a po dosazení do vzorce (4) pak získáme hledané řešení problému nejmenších čtverců

```
x = inv(A'*A)*A'*b
```

Druhou možností je použít operaci maticového dělení (`mldivide` nebo jen \), která je v Matlabu implementovaná. V tomto případě získáme řešení problému nejmenších čtverců použitím příkazu

Mzda $M(t)$ [Kč]	11,941	13,227	12,963	14717	...	22,282	24,448
Období t [rok]	2000.00	2000.25	2000.50	2000.75	...	2008.50	2008.75

Tabulka 1: Vybrané hodnoty z časové řady popisující vývoj PHM v čase. Časový údaj je ve formátu $t = \text{rok} + (\text{kvartál} - 1)/4$, kde rok $\in \{2000, \ldots, 2008\}$ a kvartál $\in \{1, 2, 3, 4\}$.

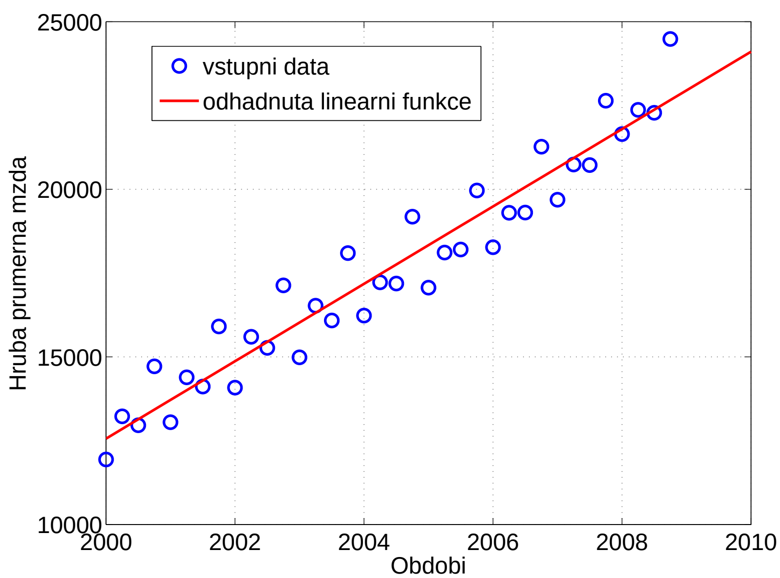
```
x = A\b
```

Druhý způsob řešení je numericky stabilnější než první, který vyžaduje výpočet inverzní matice. Navíc algoritmus pro maticové dělení funguje i v případě, že matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ je singulární.

Řešení soustavy lineárních rovnic metodou nejmenších čtverců je jádrem velkého množství aplikací. My si tuto metodu procvičíme na dvou jednoduchých příkladech.

Predikce průměrné hrubé mzdy

Graf 1 ukazuje vývoj průměrné hrubé mzdy (PHM) v České republice v období od roku 2000 do roku 2008 [1]. Pro ilustraci jsou některé hodnoty z grafu 1 uvedeny v tabulce 1.



Obrázek 1: Modré body odpovídají průměrné hrubé mzdě měřené ve všech kvartálech let 2000 až 2008. Červená přímka je odhadnuta z dat metodou nejmenších čtverců.

Naším cílem bude predikovat hodnotu PHM ve druhém kvartálu roku 2009, tj. v období pro něž nemáte údaje o PHM k dispozici. Úlohu vyřešíme tak, že nejprve nalezneme funkci, která co nejlépe odpovídá zadaným údajům o PHD. Nalezenou funkci následně použijeme pro odhad PHD v požadované době. Z obrázku 1 je vidět, že trend PHM v zavislosti na čase je téměř lineární. Tudíž budeme hledat lineární

[1] Data byla stažena ze stránek Českého statistického úřadu `www.czso.cz/`

funkci

$$\hat{M}(t) = x_0 + x_1 t \,, \tag{5}$$

kde $\hat{M}(t)$ je odhad HPM v čase t a $x_0, x_1 \in \mathbb{R}$ jsou neznámé parametry. Parametry (x_0, x_1) určíme z dat metodou nejmenších čtverců. Naše data (viz. graf 1 a tabulka 1) je množina $\{(M(t_1), t_1), \ldots, (M(t_n), t_n)\}$ obsahují n dvojic (HPM, čas). Parametry (x_0, x_1) nalezneme tak, aby součet kvadrátů odchylek skutečné a odhadnuté mzdy byl v zadaných bodech minimální. To znamená, že budeme minimalizovat funkci

$$F(x_0, x_1) = \sum_{i=1}^{n} \left(\hat{M}(t_i) - M(t_i) \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(x_0 + x_1 t_i - M(t_i) \right)^2 \,.$$

Tato úloha odpovídá řešení soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ metodou nejmenších čtverců, kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ & \vdots \\ 1 & t_n \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} M(t_1) \\ M(t_2) \\ \vdots \\ M(t_n) \end{pmatrix}.$$

Úkoly k vypracování

1. Stáhněte si textový soubor `http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/OPT/cviceni/06/mzdy.txt`. Najhrajte data do Matlabu pomocí příkazů:

```
Data = load('mzdy.txt','-ascii');
Rok = Data(:,1);
Mzdy = Data(:,2);
```

2. Použijte metodu nejmenších čtverců k odhadu parametrů lineární funkce (5) z dat nahraných v bodě 1. Do jednoho grafu zobrazte vstupní data a odhadnutou funkci.

3. Použijte odhadnutou funkci k předpovědi HPM ve druhém kvartálu roku 2009. Pro porovnání, skutečná hodnota HPM v tomto kvartálu byla 23,664 Kč.

4. Pro odhadnuté parametry spočtěte hodnotu kriteriální funkce $F(x_0, x_1)$. Jaká je grafická interpretace této hodnoty?

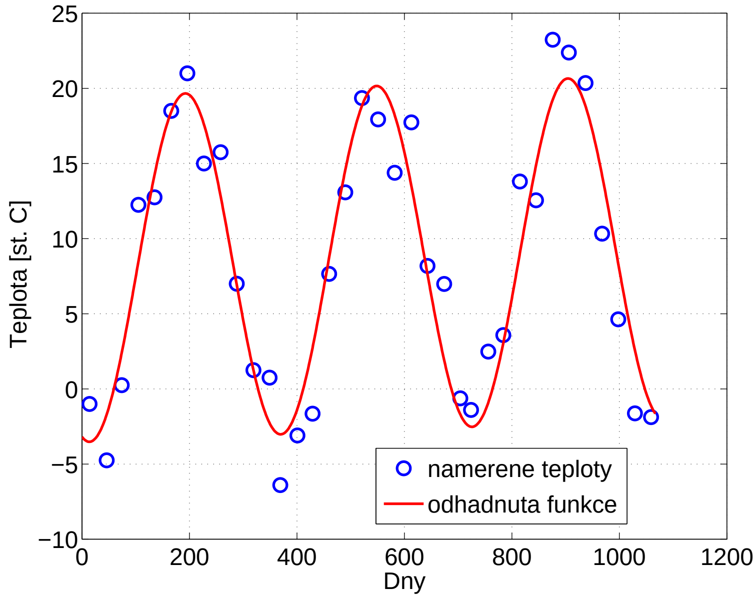
5. Dokažte, že matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ je pozitivně semi-definitní pro libovolnou $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$.

Interpolace denní teploty ve Svatoňovicích[2]

Představte si, že pracujete na meteorologické stanice ve Svatoňovicích (`http://www.meteosvatonovice.unas.cz`). Od Vášeho kolegy meteorologa jste získali měření průměrné denní teploty od roku 2005 do roku 2007. Váš kolega neprováděl meření každý den, ale jen jednou za měsíc. Konkrétně měřil teplotu pokaždé 15. dne v měsíci. Naměřené teploty jsou vyneseny v grafu 2 a vybrané hodnoty jsou pro ilustraci uvedeny v tabulce 2.

Vaším úkolem je odhadnout, jaká byla teplota i v ostaních dnech, pro něž není měření k dispozici. Tuto úlohu vyřešíme tak, že opět proložíme (interpolujeme)

[2] Myšlenka příkladu převzata z Steve Schaffer: Case-study Least-Square solutions `http://infohost.nmt.edu/~schaffer/www_prevclasses/M254/14_LeastSqs/`



Obrázek 2: Modré body značí průměrné denní teploty meřené na meteorologické stanici ve Svatoňovocích mezi roky 2005 až 2007. Měření prováděno vždy 15. dne v měsíci. Den 0 odpovídá datu 1.1.2005. Červená křivka je odhadnuta z naměřených hodnot metodou nejmenších čtverců.

Teplota $T(t)$ [st. Celsia]	-1.00	-4.75	0.25	12.25	...	-1.63	-1.88
Období t [den]	14	46	74	105	...	1029	1059

Tabulka 2: Vybrané hodnoty z časové řady popisující vývoj průměrné denní teploty měřené na meteorologické stanici ve Svatoňovocích mezi roky 2005 až 2007. Měření prováděno vždy 15. dne v měsíci. Den 0 odpovídá datu 1.1.2005.

množinu naměřených teplot funkcí, kterou pak lze použít k dopočítaní hodnot v bodech, kde měření nemáme k dispozici.

Z grafu 2 je jasně vidět, že závislost teploty na čase není v žádném případě lineární jako tomu bylo v předešlé úloze. Naopak, tato závislost je silně nelineární a je vidět, že se teplota mění cyklicky s periodou jednoho roku (tj. každých 365 dní). Jako mnohem rozumnější se tedy například jeví funkce

$$\hat{T}(t) = x_0 + x_1 t + x_2 \sin\left(\frac{2\pi t}{365}\right) + x_3 \cos\left(\frac{2\pi t}{365}\right) , \tag{6}$$

kde $\hat{T}(t)$ je odhadovaná teplota v čase t a $x_0, \ldots, x_3 \in \mathbb{R}$ jsou neznámé parametry. Proč je vhodné použít zrovna funkci tohoto tvaru ukážeme, respektive Vy si dokážete, v úloze popsané dále. Pro teď berme tvar funkce jako daný a zabývejme se pouze nalezením neznámých parametrů $(x_0, \ldots, x_3)$. Budeme opět hledat takové parametry, při nichž bude funkce $\hat{T}(t)$ co nejvíce odpovídat naměřeným hodnotám $\{(T(t_1), t_1), \ldots, (T(t_n), t_n)\}$ (viz. graf 2 a tabulka 2). A opět použijeme metodu nejmenších čtverců, tj. chce nalézt parametry $(x_0, \dots, x_3)$, které minimalizují funkci

$$\begin{aligned} F(x_0, \dots, x_3) &= \sum_{i=1}^{n} \left(\hat{T}(t_i) - T(t_i)\right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} \left(x_0 + x_1 t_i + x_2 \sin\left(\frac{2\pi t_i}{365}\right) + x_3 \cos\left(\frac{2\pi t_i}{365}\right) - T(t_i)\right)^2 . \end{aligned}$$

Jak je vidět, i tento problém je ekvivalentní s úlohou řešení soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ metodou nejmenších čtverců, kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & \sin\left(\frac{2\pi t_1}{365}\right) & \cos\left(\frac{2\pi t_1}{365}\right) \\ 1 & t_2 & \sin\left(\frac{2\pi t_2}{365}\right) & \cos\left(\frac{2\pi t_2}{365}\right) \\ & & \vdots & \\ 1 & t_n & \sin\left(\frac{2\pi t_n}{365}\right) & \cos\left(\frac{2\pi t_n}{365}\right) \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} T(t_1) \\ T(t_2) \\ \vdots \\ T(t_n) \end{pmatrix}.$$

Úkoly k vypracování

1. Stáhněte si textový soubor `http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/OPT/cviceni/06/teplota.txt`. Najhrajte data do Matlabu pomocí příkazů:

```
Data = load('teplota.txt','-ascii');
Den = Data(:,1);
Teplota = Data(:,2);
```

2. Použijte metodu nejmenších čtverců k odhadu parametrů funkce (6) z dat nahraných v bodě 1. Do jednoho grafu zobrazte vstupní data a odhadnutou funkci.

3. Pro odhadnuté parametry spočtěte hodnotu kriteriální funkce $F(x_0, \dots, x_3)$. Jaká je grafická interpretace této hodnoty?

4. Z grafu 2 je vidět, že závislost naměřených teplot zhruba odpovídá sinusoidě superponované na lineární funkci

$$\hat{G}(t) = y_0 + y_1 t + A \sin\left(\frac{2\pi t}{365} + \phi\right).$$

   Lineární funkce $y_0 + y_1 t$ modeluje sklon sinusoidy daný např. globálním oteplováním. Perioda sinusosidy je očividně 365 dní, zatímco její amplituda A a fáze ϕ jsou neznámé. Neznámé parametery jsou tedy čísla $y_0, y_1, A \in \mathbb{R}$ a $\phi \in (0, 2\pi]$. Metodu (lineárních) nejmenších čtverců popsanou výše nelze pro takto definovanou funkci použít, protože hodnota odhadované funkce závisí na parametru ϕ nelineárně. My jsme namísto funkce $\hat{G}(t)$, použili funkci $\hat{T}(t)$, definovanou rovnicí (6), která zavisí na všech svých parametrech lineárně. Fitování funkce $\hat{T}(t)$ lze ospravedlnit tím, že pro každou čtveřici (y_0, y_1, A, ϕ) existuje čtveřice $(x_0, \dots, x_3)$ taková, že obě funkce jsou shodné, tj. že platí $\hat{T}(t) = \hat{G}(t)$, $\forall t \in \mathbb{R}$. Vaším úkolem je toto tvrzení dokázat. Nápověda: vzpomeňte si, jak lze zapsat $\sin(\alpha + \beta)$.

5. Uvažujme kvadratickou funkci

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T \mathbf{H} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{c},$$

   kde $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ je vektor nezávislých proměnných a $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^n$ jsou parametry funkce. Lze použít metodu nejmenších čtverců k odhadu parametrů $(\mathbf{H}, \boldsymbol{c})$? Pokud ano, jak?