

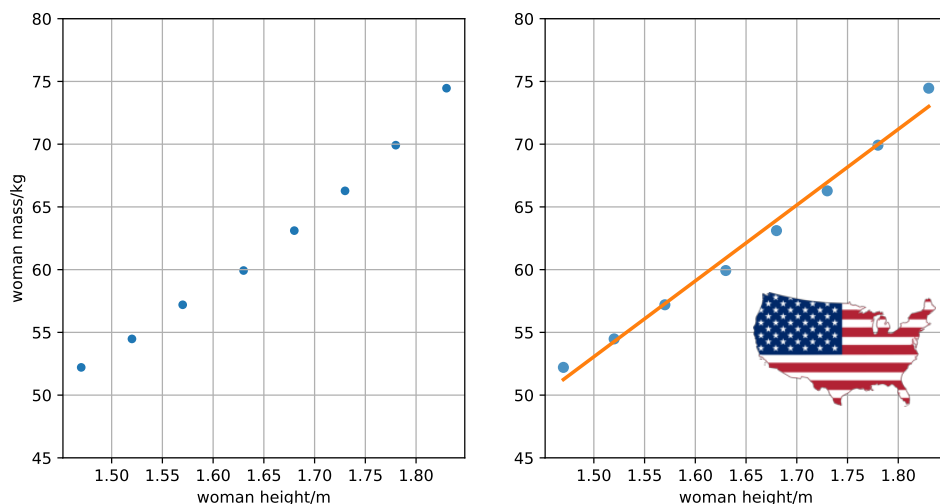
Lineární regrese

Keywords: kombinatorika, pravděpodobnost a statistika, vektory, skalární součin, lineární regrese, strojové učení, zpracování dat

V praxi se často setkáváme s tím, že hodnotami jedné veličiny jsou dány hodnoty druhé veličiny a ze sady naměřených nebo statisticky získaných dat určujeme matematický model udávající funkční závislost mezi oběma veličinami. Jako příklad můžeme uvažovat data udávající výšku a hmotnost amerických žen ve věku mezi 30 a 39 lety (zdroj https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression, 12.4.2024, pro stručnost je použita jenom polovina dat).

výška/m	1,47	1,52	1,57	1,63	1,68	1,73	1,78	1,83
hmotnost/kg	52,21	54,48	57,20	59,93	63,11	66,28	69,92	74,46

Data jsou vykreslena na obrázku vlevo. Z obrázku je patrné, že s rostoucí výškou roste i hmotnost. V takovém případě je možné najít matematický model, který udává hmotnost jako funkci výšky. Takový matematický model je znázorněn barevně na obrázku vpravo. Jedná se o model, který umožní pro zadanou výšku ženy předpovědět její hmotnost.



Obrázek 1: Vlevo jsou vykreslena data jak závisí hmotnost amerických žen (woman mass) na jejich výšce (woman height). Vpravo jsou data doplněna regresní přímkou reprezentující matematický model funkční závislosti mezi výškou a hmotností.

Popsaná úloha se nazývá *lineární regrese*.

Lineární regrese je jednou ze základních metod *strojového učení*, kdy v datech odhalíme jistou funkční závislost. Tuto poté můžeme použít k tomu, abychom dávali predikce funkčních hodnot pro data, která se v zadaném souboru nevyskytují.

V následujícím si ukážeme, jak lineární regrese souvisí s lineární kombinací vektorů, a jak je možné regresní přímku najít pomocí operací s vektory. Budeme postupovat po malých krocích:

- Nejprve si připomeneme, jak se řeší úlohy na zápis vektoru jako lineární kombinace zadaných vektorů.
- Poté se podíváme, jak je možné předchozí úlohu usnadnit, pokud je některý z vektorů kolmý k ostatním.
- Ukážeme, jak je možné najít přibližné řešení úlohy v případě, že přesné řešení neexistuje.
- Na závěr využijeme předchozích poznatků k vyřešení úlohy lineární regrese, tj. ze zadaných dat sestavíme matematický model odhalující trend v těchto datech a umožňující predikovat funkční hodnoty i pro hodnoty, které se v datovém souboru nevyskytují.

Lineární kombinace vektorů

Úloha 1. Zapište vektor $\vec{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ jako lineární kombinaci vektorů $\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ a $\vec{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Řešení. Zapsat vektor $\vec{c}$ jako kombinaci vektorů $\vec{a}$ a $\vec{b}$ znamená najít čísla t_1 a t_2 taková, že

$$t_1 \vec{a} + t_2 \vec{b} = \vec{c}.$$

Po rozepsání do souřadnic vidíme, že tato úloha vede na soustavu rovnic

$$\begin{aligned} 2t_1 + 3t_2 &= 1, \\ 2t_1 + t_2 &= 2. \end{aligned}$$

Tato soustava má jediné řešení $t_1 = \frac{5}{4}$ a $t_2 = -\frac{1}{2}$.

Úloha 2. Napište vektor $\vec{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ jako lineární kombinaci vektorů

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -4 \end{pmatrix}.$$

Řešení. Podobně jako v předchozí úloze hledáme čísla t_1 , t_2 a t_3 taková, že

$$t_1 \vec{u}_1 + t_2 \vec{u}_2 + t_3 \vec{u}_3 = \vec{w}. \quad (1)$$

Po dosazení a rozepsání do souřadnic dostáváme soustavu tří rovnic o třech neznámých

$$\begin{aligned} 2t_1 + 3t_2 + 3t_3 &= 1, \\ 2t_1 + t_2 - t_3 &= 2, \\ t_1 + 2t_2 - 4t_3 &= 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Řešení takové soustavy je již poměrně nepříjemné. Pomocí sčítací nebo dosazovací metody bychom mohli ale zjistit, že

$$t_1 = \frac{14}{13}, \quad t_2 = -\frac{7}{26}, \quad t_3 = -\frac{3}{26}.$$

Lineární kombinace s využitím skalárního součinu

Pokud je alespoň jeden ze zadaných vektorů kolmý ke zbylým vektorům, můžeme šikovným trikem získat jednodušší soustavu rovnic.

Vraťme se k předchozí úloze. Můžeme si všimnout, že vektor $\vec{u}_3$ je kolmý k vektorům $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Tím pádem je i kolmý k rovině definované těmito vektory. Tuto skutečnost snadno ukážeme výpočtem skalárních součinů

$$\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_3 = 2 \cdot 3 + 2 \cdot (-1) + 1 \cdot (-4) = 0$$

a

$$\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3 = 3 \cdot 3 + 1 \cdot (-1) + 2 \cdot (-4) = 0.$$

Díky této vlastnosti se vyplatí rovnici (1) vynásobit skalárně po řadě vektory $\vec{u}_1$ až $\vec{u}_3$. Tím dostáváme následující tři rovnice.

$$t_1(\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_1) + t_2(\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_1) + t_3(\vec{u}_3 \cdot \vec{u}_1) = \vec{w} \cdot \vec{u}_1$$

$$t_1(\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2) + t_2(\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_2) + t_3(\vec{u}_3 \cdot \vec{u}_2) = \vec{w} \cdot \vec{u}_2$$

$$t_1(\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_3) + t_2(\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3) + t_3(\vec{u}_3 \cdot \vec{u}_3) = \vec{w} \cdot \vec{u}_3$$

Výpočtem skalárních součinů dostáváme soustavu, která je nepoměrně jednodušší než soustava (2).

$$9t_1 + 10t_2 = 7$$

$$10t_1 + 14t_2 = 7$$

$$26t_3 = -3$$

Z poslední rovnice vidíme přímo jednu z neznámých a dvě první rovnice tvoří soustavu dvou rovnic o dvou neznámých t_1 a t_2 .

Lineární kombinace a nekonzistentní soustavy rovnic

Připomeňme, že za nekonzistentní označujeme takové soustavy lineárních rovnic, které nemají řešení.

Naši úlohu o nalezení vyjádření vektoru jako lineární kombinace daných vektorů modifikujeme. Jeden z vektorů, se kterými pracujeme, vynecháme. Tím se stane úloha v klasickém smyslu neřešitelnou.

Úloha 3. Napište vektor $\vec{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ jako lineární kombinaci vektorů

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Řešení. Musíme najít čísla t_1, t_2 taková, že platí

$$t_1\vec{u}_1 + t_2\vec{u}_2 = \vec{w}.$$

Rozepsáním v souřadnicích dostaneme soustavu

$$2t_1 + 3t_2 = 1,$$

$$2t_1 + t_2 = 2,$$

$$t_1 + 2t_2 = 1.$$

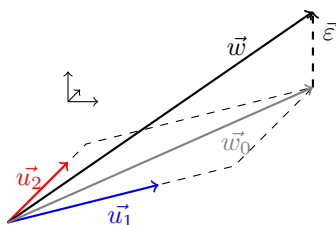
Je snadné se přesvědčit, že tato soustava je nekonzistentní a nemá řešení. Opravdu, soustavu složenou z prvních dvou rovnic jsme vyřešili v úvodu ($t_1 = \frac{5}{4}$ a $t_2 = -\frac{1}{2}$) a poslední rovnice je s touto volbou ve sporu ($\frac{5}{4} + 2 \cdot (-\frac{1}{2}) \neq 1$).

Řešení nekonzistentní soustavy rovnic

Pojďme nyní rozumným způsobem zobecnit pojem řešení. Nebudeme hledat hodnoty neznámých, pro které jsou si levé a pravé strany rovny. Namísto toho budeme hledat alespoň takové hodnoty neznámých, pro které se levé a pravé strany co nejméně liší.

Řešením nekonzistentní soustavy rovnic budeme rozumět takovou volbu hodnot neznámých, pro kterou je délka vektoru vyjadřujícího rozdíl levých a pravých stran soustavy minimální.

Na obrázku si vysvětlíme, co daná soustava vyjadřuje a jak je možné si představit její řešení ve výše uvedeném oslabeném smyslu.



Obrázek 2: Vektory $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ definují rovinu, v níž neleží vektor $\vec{w}$. Proto vektor $\vec{w}$ není možné zapsat jako lineární kombinaci vektorů $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Je však možné jako lineární kombinaci zadaných vektorů zapsat kolmý průmět $\vec{w}_0$ vektoru $\vec{w}$ do uvažované roviny. Vektor $\vec{w}_0$ je ze všech vektorů, které je možno zapsat jako lineární kombinaci vektorů $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$, nejbližší vektoru $\vec{w}$. Kvantitativní kritérium pro tuto vlastnost je délka vektoru $\vec{\epsilon}$. Skutečnost, že ze všech vektorů roviny je k vektoru $\vec{w}$ nejbližší vektor $\vec{w}_0$ plyne z kolmosti vektoru $\vec{\epsilon}$ k rovině určené vektory $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$.

Snažíme se pomocí lineární kombinace vektorů $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ vyjádřit vektor $\vec{w}$, který ale neleží v rovině definované těmito vektory. Taková úloha nemá řešení. Budeme se proto snažit najít alespoň takovou lineární kombinaci, která se od vektoru $\vec{w}$ liší co nejméně.

Tato kombinace je dána vektorem $\vec{w}_0$, přičemž rozdíl mezi $\vec{w}$ a $\vec{w}_0$ je znázorněn vektorem $\vec{\epsilon}$. Snažíme se o to, aby délka vektoru $\vec{\epsilon}$ byla co nejmenší.

Z názorného pohledu a geometrických vlastností je snadné nahlédnout, že toto nastane v případě, kdy je vektor $\vec{\epsilon}$ kolmý k rovině určené vektory $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Tím se dostáváme do stejné situace, jako při alternativním řešení třetí úlohy. Tam jsme také viděli trik, jak najít koeficienty u vektorů $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ bez řešení plné soustavy rovnic: vynásobili jsme soustavu skalárně vektory $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Dokonce k tomuto výpočtu ani nemusíme znát vektor $\vec{\epsilon}$.

Protože délka vektoru $\vec{\epsilon}$ se vyjadřuje pomocí druhých mocnin souřadnic tohoto vektoru, má metoda název *metoda nejmenších čtverců*.

Celý postup si ukážeme na následujícím příkladě.

Lineární regrese

Uvažujme data z následující tabulky.

x	2	3	4
y	1	5	7

Hledáme přímku $y = ax + b$, která co nejlépe vystihuje trend v tomto souboru a byla by vhodným matematickým modelem pro tato data. Dosazením každého ze tří bodů do rovnice přímky dostáváme soustavu tří rovnic o dvou neznámých.

$$2a + b = 1$$

$$3a + b = 5$$

$$4a + b = 7$$

To je úloha s nekonzistentní soustavou rovnic (tzv. přeuročenou soustavou), která nemá řešení v klasickém slova smyslu. Vektorový tvar této soustavy je následující.

$$a \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

Po vynásobení po řadě vektory $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ dostáváme soustavu dvou rovnic.

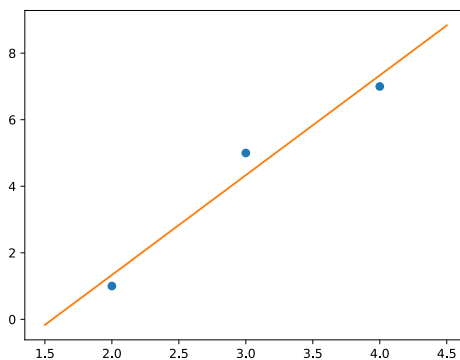
$$29a + 9b = 45$$

$$9a + 3b = 13$$

Řešení této soustavy je $a = 3$ a $b = -\frac{14}{3}$. Regresním modelem pro zadaná data je tedy přímka

$$y = 3x - \frac{14}{3}.$$

Graf obsahující uvedená data a regresní přímku je na obrázku.



Obrázek 3: Tři body neležící je jedné přímce a přímka, která je regresním modelem pro zadanou trojici bodů.

Regrese pro větší datové soubory

Postup uvedený v předchozím textu pro tři body je možné zobecnit na libovolný počet bodů. Není neobvyklé pracovat s datovým souborem obsahujícím stovky bodů.

Je-li vektor $\vec{X}$ vektorem obsahujícím hodnoty nezávislé proměnné¹ a $\vec{Y}$ vektor obsahující hodnoty závislé proměnné, budeme uvažovat model²

$$\vec{Y} = a\vec{X} + b.$$

Koeficienty a a b určíme tak, že tuto rovnici přepíšeme na vektorovou rovnici

$$\vec{Y} = a\vec{X} + b\vec{1},$$

kde $\vec{1}$ je vektor sestavený z jedniček. Tuto rovnici vynásobíme skalárně vektorem $\vec{X}$ a vektorem $\vec{1}$. Dostáváme tak soustavu

$$\begin{aligned} a(\vec{X} \cdot \vec{X}) + b(\vec{X} \cdot \vec{1}) &= \vec{X} \cdot \vec{Y} \\ a(\vec{1} \cdot \vec{X}) + b(\vec{1} \cdot \vec{1}) &= \vec{1} \cdot \vec{Y} \end{aligned} \quad (3)$$

Pro více než tři body takto pracujeme s vektory větší dimenze než tři. V důsledku toho přicházíme o názornou geometrickou představu. Až na tuto skutečnost se však na práci nic nemění. Skalární součin dvou vektorů se stále počítá tak, že se vynásobí odpovídající komponenty a tyto součiny se poté sečtou.

Úloha 4. Nalezněte vhodný lineární model pro tabulku dat z úvodního textu.

Řešení. Připomeňme si uvedená data:

výška/m	1,47	1,52	1,57	1,63	1,68	1,73	1,78	1,83
hmotnost/kg	52,21	54,48	57,20	59,93	63,11	66,28	69,92	74,46

Po dosazení dat do potřebných skalárních součinů dostaneme:

$$\begin{aligned} \vec{X} \cdot \vec{X} &= 1,47^2 + 1,52^2 + 1,57^2 + \dots + 1,83^2 = 21,9257 \\ \vec{X} \cdot \vec{Y} &= 1,47 \cdot 52,21 + 1,52 \cdot 54,48 + 1,57 \cdot 57,20 + \dots + 1,83 \cdot 74,46 = 828,4568 \\ \vec{1} \cdot \vec{X} &= 1,47 + 1,52 + 1,57 + \dots + 1,83 = 13,21 \\ \vec{1} \cdot \vec{Y} &= 52,21 + 54,48 + 57,20 + \dots + 74,46 = 497,59 \\ \vec{1} \cdot \vec{1} &= 1 + 1 + 1 + \dots + 1 = 8 \end{aligned}$$

Po dosazení hodnot do (3) dostáváme soustavu dvou rovnic o dvou neznámých

$$\begin{aligned} 21,9257a + 13,21b &= 828,4568, \\ 13,21a + 8b &= 497,59, \end{aligned}$$

¹Použijeme zápis běžně užívaný při zpracování dat, kdy datové soubory (vektory) označujeme velkými písmeny a vektor, který má všechny komponenty rovny stejnému číslu zapisujeme jako dané číslo se šípkou pro označení vektoru.

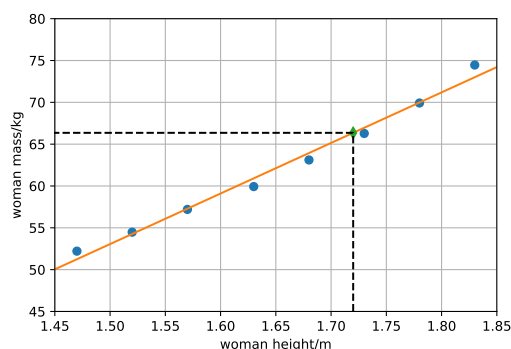
²Přísně vzato tato operace nemá matematicky smysl, protože sčítáme vektor s reálným číslem. Tuto operaci je nutno interpretovat po složkách, kdy toto sčítání znamená, že se reálné číslo změní na vektor příslušné dimenze tak, aby operace byla definována. Toto přizpůsobení se nazývá *broadcasting*. Ve výsledku ke každé komponentě vektoru $a\vec{X}$ přičítáme hodnotu b .

Results matter!

která má jediné řešení. Tímto řešením³ je $a = 60,44$ a $b = -37,61$. Modelem, který udává závislost hmotnosti žen y na jejich výšce x , je vztah

$$y = 60,44x - 37,61.$$

Obrázek 4 ukazuje použitá data, regresní závislost a predikci pro hmotnost ženy o výšce 1,72 metru.



Obrázek 4: Data použitá v úloze, lineární regrese a predikce pro výšku 1,72 metru.

Úloha 5. Najděte regresní přímku pro zadaná data.

x	1,0	2,0	3,0	4,0
y	2,3	2,5	3,1	3,3

Závěrečné poznámky

- Ve statistice je uvedená metoda jednou ze základních metod při predikci, zda jedna veličina má vliv na hodnoty druhé veličiny. Proto jsou k dispozici metody, které hodnotí kvalitu aproximace a také to, zda je pro daný soubor bodů uvažovaná aproximace vhodná či nikoliv.
- Existují také vícerozměrné verze metody nejmenších čtverců, kdy predikovanou hodnotu určíme ne z jedné, ale z několika nezávislých veličin.
- Úloha najít řešení nekonzistentní soustavy lineárních rovnic se vyskytuje i při rekonstrukci obrazu v *akustické tomografii*. To umožňuje studovat složení geologických vrstev nebo zdravotní stav dřeva či stromu na základě informace o rychlosti, s jakou materiálem prochází vlny elastické deformace. Jako úvod do problematiky může posloužit série článků na blogu <https://tomroelandts.com/>.
- Je možné sestavit přímo vztahy pro výpočet koeficientů lineární regrese ze zadaných dat a vynechat tak výpočet skalárních součinů a řešení soustavy rovnic. Viz například https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression\#Expanded_formulas.

Literatura a odkazy

³Pozor, úloha je poměrně citlivá na zaokrouhlování.

Literatura

- Wikipedie, Simple linear regression, https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression, 12.4.2024
- Tom Roelandts, <https://tomroelandts.com/articles/tomography-part-1-projections>, <https://tomroelandts.com/articles/sirt-algorithm>, 13.4.2024

Zdroje obrázků

- https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Flag-map_of_the_United_States.pdf