

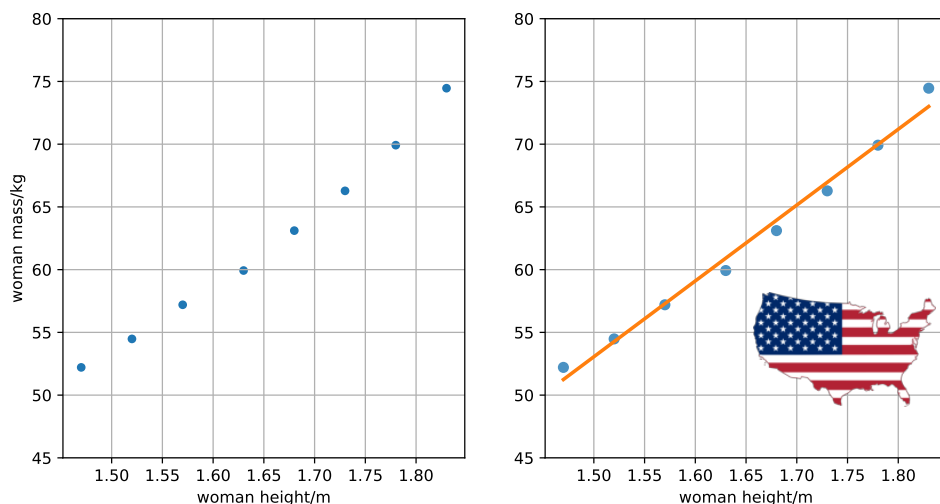
Lineárna regresia

Keywords: kombinatorika, pravdepodobnosť a štatistika, vektory, skalárny súčin, lineárna regresia, strojové učenie, spracovanie dát

V praxi sa často stretávame s tým, že hodnotami jednej veličiny sú dané hodnoty druhej veličiny a zo sady nameraných alebo štatisticky získaných dát určujeme matematický model udávajúci funkčnú závislosť medzi oboma veličinami. Ako príklad môžeme uvažovať dáta udávajúce výšku a hmotnosť amerických žien vo veku medzi 30 a 39 rokov (zdroj https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression, 12.4.2024, pre stručnosť je použitá len polovica dát).

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

Dáta sú vykreslené na obrázku vľavo. Z obrázka je zjavné, že s rastúcou výškou rastie aj hmotnosť. V takom prípade je možné nájsť matematický model, ktorý udáva hmotnosť ako funkciu výšky. Taký matematický model je znázornený farebne na obrázku vpravo. Jedná sa o model, ktorý umožní pre zadanú výšku ženy predpovedať jej hmotnosť.



Obr. 1: Vľavo sú vykreslené dáta ako závisí hmotnosť amerických žien (woman mass) na ich výške (woman height). Vpravo sú dáta doplnené regresnou priamkou reprezentujúcou matematický model funkčnej závislosti medzi výškou a hmotnosťou.

Popísaná úloha sa nazýva *lineárna regresia*.

Lineárna regresia je jednou zo základných metód *strojového učenia*, keď v dátach odhalíme istú funkčnú závislosť. Túto potom môžeme použiť k tomu, aby sme dávali predikcie funkčných hodnôt pre dáta, ktoré sa v zadanom súbore nevyskytujú.

V nasledujúcom si ukážeme, ako lineárna regresia súvisí s lineárnou kombináciou vektorov, a ako je možné regresnú priamku nájsť pomocou operácií s vektormi. Budeme postupovať po malých krokoch:

- Najprv si pripomenieme, ako sa riešia úlohy na zápis vektora ako lineárna kombinácia zadaných vektorov.
- Potom sa pozrieme, ako je možné predchádzajúcu úlohu uľahčiť, ak je niektorý z vektorov kolmý k ostatným.
- Ukážeme, ako je možné nájsť približné riešenie úlohy v prípade, že presné riešenie neexistuje.
- Na záver využijeme predchádzajúcich poznatkov na vyriešenie úlohy lineárnej regresie, t. j. zo zadaných dát zostavíme matematický model odhaľujúci trend v týchto dátach a umožňujúci predikovať funkčné hodnoty aj pre hodnoty, ktoré sa v dátovom súbore nevyskytujú.

Lineárna kombinácia vektorov

Úloha 1. Zapište vektor $\vec{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ ako lineárnu kombináciu vektorov $\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ a $\vec{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Riešenie. Zapísať vektor $\vec{c}$ ako kombináciu vektorov $\vec{a}$ a $\vec{b}$ znamená nájsť čísla t_1 a t_2 také, že

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

Po rozpísaní do súradníc vidíme, že táto úloha vedie na sústavu rovníc

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

Táto sústava má jediné riešenie $t_1 = \frac{5}{4}$ a $t_2 = -\frac{1}{2}$.

Úloha 2. Napíšte vektor $\vec{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ ako lineárnu kombináciu vektorov

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

Riešenie. Podobne ako v predchádzajúcej úlohe hľadáme čísla t_1 , t_2 a t_3 také, že

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

Po dosadení a rozpísaní do súradníc dostávame sústavu troch rovníc o troch neznámych

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

Riešenie takej sústavy je už pomerne nepríjemné. Pomocou sčítacej alebo dosadzovacej metódy by sme mohli ale zistiť, že

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

Lineárna kombinácia s využitím skalárneho súčinu

Ak je aspoň jeden zo zadaných vektorov kolmý k zvyšným vektorom, môžeme šikovným trikom získať jednoduchšiu sústavu rovníc.

Vráťme sa k predchádzajúcej úlohe. Môžeme si všimnúť, že vektor $\vec{u}_3$ je kolmý k vektorom $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Tým pádom je aj kolmý k rovine definovanej týmito vektormi. Túto skutočnosť ľahko ukážeme výpočtom skalárnych súčinov

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

a

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

Vďaka tejto vlastnosti sa oplatí rovnicu (1) vynásobiť skalárne po rade vektormi $\vec{u}_1$ až $\vec{u}_3$. Tým dostávame nasledujúce tri rovnice.

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

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

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

Výpočtom skalárnych súčinov dostávame sústavu, ktorá je neporovnateľne jednoduchšia než sústava (2).

$$9t_1 + 10t_2 = 7$$

$$10t_1 + 14t_2 = 7$$

$$26t_3 = -3$$

Z poslednej rovnice vidíme priamo jednu z neznámych a dve prvé rovnice tvoria sústavu dvoch rovníc o dvoch neznámych t_1 a t_2 .

Lineárna kombinácia a nekonzistentné sústavy rovníc

Pripomeňme, že za nekonzistentnú označujeme také sústavy lineárnych rovníc, ktoré nemajú riešenie.

Našu úlohu o nájdení vyjadrenia vektora ako lineárna kombinácia daných vektorov modifikujeme. Jeden z vektorov, s ktorými pracujeme, vynecháme. Tým sa stane úloha v klasickom zmysle neriešiteľnou.

Úloha 3. Napíšte vektor $\vec{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ ako lineárnu kombináciu vektorov

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

Riešenie. Musíme nájsť čísla t_1 , t_2 také, že platí

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

Rozpísaním v súradniciach dostaneme sústavu

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

$$2t_1 + t_2 = 2,$$

$$t_1 + 2t_2 = 1.$$

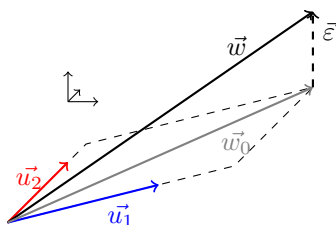
Je jednoduché sa presvedčiť, že táto sústava je nekonzistentná a nemá riešenie. Naozaj, sústavu zloženú z prvých dvoch rovníc sme vyriešili v úvode ($t_1 = \frac{5}{4}$ a $t_2 = -\frac{1}{2}$) a posledná rovnica je s touto voľbou v rozpore ($\frac{5}{4} + 2 \cdot (-\frac{1}{2}) \neq 1$).

Riešenie nekonzistentnej sústavy rovníc

Podme teraz rozumným spôsobom zovšeobecniť pojem riešenia. Nebudeme hľadať hodnoty neznámych, pre ktoré sú si ľavé a pravé strany rovné. Namiesto toho budeme hľadať aspoň také hodnoty neznámych, pre ktoré sa ľavé a pravé strany čo najmenej líšia.

Riešením nekonzistentnej sústavy rovníc budeme rozumieť takú voľbu hodnôt neznámych, pre ktorú je dĺžka vektora vyjadrujúceho rozdiel ľavých a pravých strán sústavy minimálna.

Na obrázku si vysvetlíme, čo daná sústava vyjadruje a ako je možné si predstaviť jej riešenie vo vyššie uvedenom oslabenom zmysle.



Obr. 2: Vektory $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ definujú rovinu, v ktorej neleží vektor $\vec{w}$. Preto vektor $\vec{w}$ nie je možné zapísať ako lineárnu kombináciu vektorov u_1 a u_2 . Je však možné ako lineárnu kombináciu zadaných vektorov zapísať kolmý priemet $\vec{w}_0$ vektora $\vec{w}$ do uvažovanej roviny. Vektor $\vec{w}_0$ je zo všetkých vektorov, ktoré je možné zapísať ako lineárnu kombináciu vektorov $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$, najbližšie vektoru $\vec{w}$. Kvantitatívne kritérium pre túto vlastnosť je dĺžka vektora $\vec{e}$. Skutočnosť, že zo všetkých vektorov roviny je k vektoru $\vec{w}$ najbližšie vektor $\vec{w}_0$ plynie z kolmosti vektora $\vec{e}$ k rovine určenej vektormi $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$.

Snažíme sa pomocou lineárnej kombinácie vektorov $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ vyjadriť vektor $\vec{w}$, ktorý ale neleží v rovine definovanej týmito vektormi. Taká úloha nemá riešenie. Budeme sa preto snažiť nájsť aspoň takú lineárnu kombináciu, ktorá sa od vektora $\vec{w}$ líši čo najmenej.

Táto kombinácia je daná vektorom $\vec{w}_0$, pričom rozdiel medzi $\vec{w}$ a $\vec{w}_0$ je znázornený vektorom $\vec{e}$. Snažíme sa o to, aby dĺžka vektora $\vec{e}$ bola čo najmenšia.

Z názorného pohľadu a geometrických vlastností je jednoduché nahliadnuť, že toto nastane v prípade, keď je vektor $\vec{e}$ kolmý k rovine určenej vektormi $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Tým sa dostávame do rovnakej situácie, ako pri alternatívnom riešení tretej úlohy. Tam sme tiež videli trik, ako nájsť koeficienty pri vektorech $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$ bez riešenia plnej sústavy rovníc: vynásobili sme sústavu skalárne vektormi $\vec{u}_1$ a $\vec{u}_2$. Dokonca k tomuto výpočtu ani nemusíme poznať vektor $\vec{e}$.

Pretože dĺžka vektora $\vec{e}$ sa vyjadruje pomocou druhých mocnín súradníc tohto vektora, má metóda názov *metóda najmenších štvorcov*.

Celý postup si ukážeme na nasledujúcom príklade.

Lineárna regresia

Uvažujme dáta z nasledujúcej tabuľky.

x	2	3	4
y	1	5	7

Hľadáme priamku $y = ax + b$, ktorá čo najlepšie vystihuje trend v tomto súbore a bola by vhodným matematickým modelom pre tieto dáta. Dosadením každého z troch bodov do rovnice priamky dostávame sústavu troch rovníc o dvoch neznámych.

$$2a + b = 1$$

$$3a + b = 5$$

$$4a + b = 7$$

To je úloha s nekonzistentnou sústavou rovníc (tzv. preurčenou sústavou), ktorá nemá riešenie v klasickom zmysle slova. Vektorový tvar tejto sústavy je nasledujúci.

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

Po vynásobení po rade vektormi $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ dostávame sústavu dvoch rovníc.

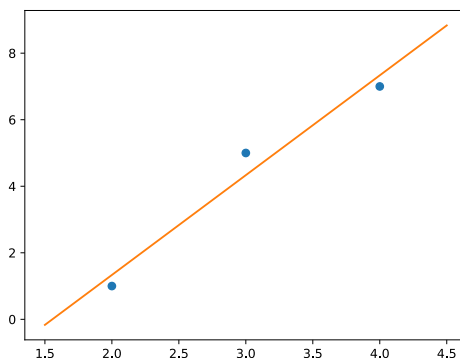
$$29a + 9b = 45$$

$$9a + 3b = 13$$

Riešenie tejto sústavy je $a = 3$ a $b = -\frac{14}{3}$. Regresným modelom pre zadané dáta je teda priamka

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

Graf obsahujúci uvedené dáta a regresnú priamku je na obrázku.



Obr. 3: Tri body neležiace na jednej priamke a priamka, ktorá je regresným modelom pre zadanú trojicu bodov.

Regresia pre väčšie dátové súbory

Postup uvedený v predchádzajúcom texte pre tri body je možné zovšeobecniť na ľubovoľný počet bodov. Nie je neobvyklé pracovať s dátovým súborom obsahujúcim stovky bodov.

Je-li vektor $\vec{X}$ vektorom obsahujúcim hodnoty nezávislej premennej¹ a $\vec{Y}$ vektor obsahujúci hodnoty závislej premennej, budeme uvažovať model²

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

Koeficienty a a b určíme tak, že túto rovnicu prepíšeme na vektorovú rovnicu

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

kde $\vec{1}$ je vektor zostavený z jednotiek. Túto rovnicu vynásobíme skalárne vektorom $\vec{X}$ a vektorom $\vec{1}$. Dostávame tak sústavu

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

Pre viac než tri body takto pracujeme s vektormi väčšej dimenzie než tri. V dôsledku toho prichádzame o názornú geometrickú predstavu. Až na túto skutočnosť sa však na práci nič nemení. Skalárny súčin dvoch vektorov sa stále počíta tak, že sa vynásobia zodpovedajúce komponenty a tieto súčiny sa potom sčítajú.

Úloha 4. Nájdite vhodný lineárny model pre tabuľku dát z úvodného textu.

Riešenie. Pripomeňme si uvedené dáta:

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

Po dosadení dát do potrebných skalárnych súčinov 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 dosadení hodnôt do (3) dostávame sústavu dvoch rovníc o dvoch neznámých

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

¹Použijeme zápis bežne používaný pri spracovaní dát, keď dátové súbory (vektory) označujeme veľkými písmenami a vektor, ktorý má všetky komponenty rovné rovnakému číslu zapisujeme ako dané číslo so šípku pre označenie vektora.

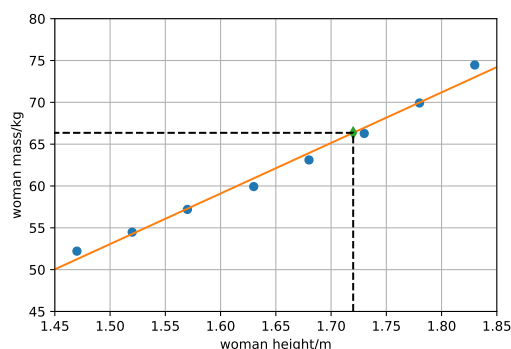
²Prísne vzaté táto operácia nemá matematicky zmysel, pretože sčítavame vektor s reálnym číslom. Túto operáciu je nutné interpretovať po zložkách, keď toto sčítanie znamená, že sa reálne číslo zmení na vektor príslušnej dimenzie tak, aby operácia bola definovaná. Toto prispôbenie sa nazýva *broadcasting*. Vo výsledku ku každej komponente vektora $a\vec{X}$ pripočítavame hodnotu b .

Results matter!

ktorá má jediné riešenie. Týmto riešením³ je $a = 60,44$ a $b = -37,61$. Modelom, ktorý udáva závislosť hmotnosti žien y na ich výške x , je vzťah

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

Obrázok 4 ukazuje použité dáta, regresnú závislosť a predikciu pre hmotnosť ženy o výške 1,72 metra.



Obr. 4: Dáta použité v úlohe, lineárna regresia a predikcia pre výšku 1,72 metra.

Úloha 5. Nájdite regresnú priamku pre zadané dáta.

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

Závěrečné poznámky

- V štatistike je uvedená metóda jednou zo základných metód pri predikcii, či jedna veličina má vplyv na hodnoty druhej veličiny. Preto sú k dispozícii metódy, ktoré hodnotia kvalitu aproximácie a tiež to, či je pre daný súbor bodov uvažovaná aproximácia vhodná či nie.
- Existujú aj viacrozmerné verzie metódy najmenších štvorcov, keď predikovanú hodnotu určujeme nie z jednej, ale z niekoľkých nezávislých veličín.
- Úloha nájsť riešenie nekonzistentnej sústavy lineárnych rovníc sa vyskytuje aj pri rekonštrukcii obrazu v *akustickej tomografii*. To umožňuje študovať zloženie geologických vrstiev alebo zdravotný stav dreva či stromu na základe informácie o rýchlosti, s akou materiálom prechádzajú vlny elastickej deformácie. Ako úvod do problematiky môže poslúžiť séria článkov na blogu <https://tomroelandts.com/>.
- Je možné zostaviť priamo vzťahy pre výpočet koeficientov lineárnej regresie zo zadaných dát a vynechať tak výpočet skalárnych súčinov a riešenie sústavy rovníc. Pozri napríklad https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression\#Expanded_formulas.

³Pozor, úloha je pomerne citlivá na zaokrúhľovanie.

Literatúra a odkazy

Literatúra

- 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