IDAG: Minstakvadrat-metoden och (linjär) regression

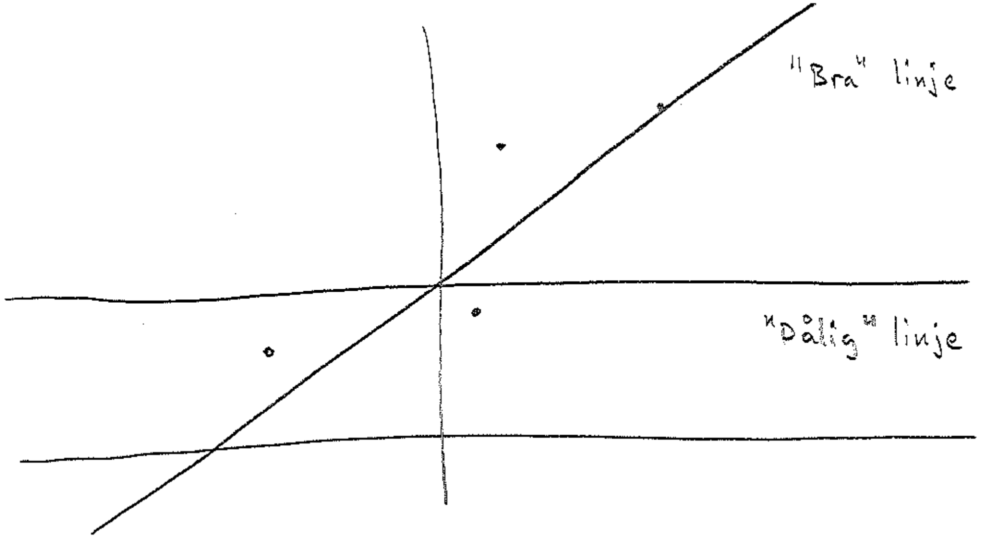
Mål:
- "Lösa" L.E.S. som saknar lösning
- Approximera experimentell data med t.ex. polynom

<u>Linjär regression</u> har ni förmodligen stött på redan i gymnasiet (utan riktig förklaring).

Det handlar om att givet några par av datapunkter $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_m, y_m)$

anpassa en rät linje $y = kx + m$ inte samma m

som ligger närmast punkterna.



Vad betyder "närmast"?

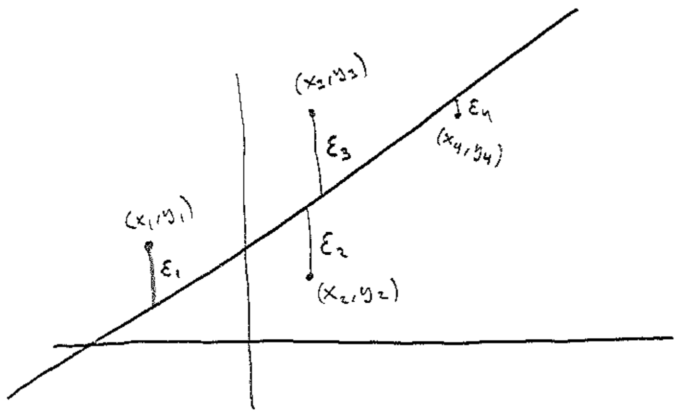
Låt $\varepsilon = (\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m)$ vara vektorn av skillnader,

$$\varepsilon_j = y_j - (kx_j + m) \quad , j = 1, \ldots, m.$$

Den bästa approximativa linjen är den som minimerar $\|\varepsilon\|$. Man kan använda olika normer $\| \ \|$, men vi tar den vi definierat, dvs. minimera $\sqrt{\sum_{j=1}^{m} \varepsilon_j^2}$

OBS: $\Leftrightarrow$ minimera $\sum_{j=1}^{m} \varepsilon_j^2$ (utan kvadratrot)

Visuellt:



Vi kallar y_j <u>observationen</u>,

$kx_j + m$ <u>prediktionen</u> och

ε <u>residualen</u>.

Själva linjen motsvarar en <u>minstakvadrat-lösning</u> (p.g.a. vad vi minimerar).

För att använda samma notation som de flesta ingenjörer och statistiker kommer vi

hädanefter istället för $kx+m$ skriva

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

β_0 och β_1 är de sökta <u>parametrarna</u>, och vi får m ekvationer:

$$\begin{aligned} \beta_0 + \beta_1 x_1 &= y_1 \\ \beta_0 + \beta_1 x_2 &= y_2 \\ &\vdots \\ \beta_0 + \beta_1 x_m &= y_m \end{aligned}$$

Detta är uppfyllt om punkterna (x_j, y_j) ligger på linjen, och då är $\varepsilon = 0$.

Vi skriver systemet som $X\beta = y$

där $X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}$, $\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}$ och $y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$.

Om systemet <u>inte</u> har en lösning (dvs. punkterna ligger ej på linjen) så har vi fortfarande

$$\varepsilon = X\beta - y \ ,$$

så vår uppgift är att minimera $\|X\beta - y\|$.

<u>Def.</u> Låt $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $y \in \mathbb{R}^n$. Då är $\hat{\beta}$ en <u>minstakvadrat-lösning</u> till $X\beta = y$ om

$$\|X\hat{\beta} - y\| \leq \|X\beta - y\| \quad \text{för alla } \beta \in \mathbb{R}^n.$$

OBS: Mer generellt X än tidigare!

Eftersom $\{X\beta \mid \beta \in \mathbb{R}^n\} = \mathrm{Col}(X)$ så är $X\hat{\beta}$ den ortogonala projektionen av y på $\mathrm{Col}(X)$.

(Sats 6.3.9)

Vi skriver $\hat{y} = X\hat{\beta} = \mathrm{proj}_{\mathrm{Col}\,X}\, y$.

Vi vet att $\hat{y} - y \in (\mathrm{Col}\,X)^\perp$.

Men enligt Sats 6.1.3 är $(\mathrm{Col}\,X)^\perp = \mathrm{Nul}(X^T)$, så

$$X^T(\hat{y} - y) = 0 \quad \text{dvs.} \quad X^T(X\hat{\beta} - y) = 0$$

Alltså har vi $\boxed{X^T X \hat{\beta} = X^T y}$

Detta kallas <u>normalekvationerna</u> för $X\beta = y$.

Notera att om $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$ så är $X^T X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ och $X^T y \in \mathbb{R}^n$ så om vi har $m > n$ (fler ekv. än variabler) så har ändå normalekv. n ekv. och n variabler.

Ex. Låt $X = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ och $y = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$.

Då har $X\beta = y$ inga lösningar ($\beta_1 = 0$ och $\beta_1 = 1$!).

Bilda $X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix}$

$$X^T y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Då ger $X^T X \hat{\beta} = X^T y$ att $\hat{\beta} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2/3 \end{bmatrix}$.

Notera att $X\hat{\beta} = \begin{bmatrix} 1/3 \\ 5/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}$ vilket är rätt

olikt y.

Residualen är $\varepsilon = y - \hat{y} = y - X\hat{\beta} = \begin{bmatrix} 2/3 \\ -2/3 \\ 2/3 \end{bmatrix}$

Så minstakvadratfelet är $\|\varepsilon\| = \sqrt{\frac{4}{9} + \frac{4}{9} + \frac{4}{9}} = \sqrt{\frac{4}{3}} = \frac{2\sqrt{3}}{3}$

Jämför med $\|y\| = \sqrt{6}$:

Det relativa felet är $\dfrac{\frac{2\sqrt{3}}{3}}{\sqrt{6}} = \dfrac{2}{3\sqrt{2}} = \dfrac{\sqrt{2}}{3} \approx \dfrac{1.41}{3}$

$= 0.47$

dvs. 47%!

Inte särskilt bra anpassning (men <u>bästa</u>);

kan antyda att punkterna inte följer ett

linjärt samband eller att mätfelen är väldigt stora.

I MATLAB fås $\hat{\beta}$ genom $\hat{\beta} = X \backslash y$,

dvs. samma syntax som när $X\beta = y$ har

en lösning! $\longrightarrow$

Därför viktigt att kontrollera om det verkligen är en lösning eller en minstakvadrat-lösning.

MATLAB använder också $A = QR$ istället för normalekvationerna: Läs kort om detta i hag.

Mer generell regression

Istället för linjer kan vi även anpassa polynom av högre grad (vi antog ju bara $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$)

Om t.ex. $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$ får vi

$X\beta = y$ där

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \quad \text{och} \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}.$$

Ännu mer generellt kan vi ta

$$y = \beta_0 f_0(x) + \beta_1 f_1(x) + \dots + \beta_k f_k(x).$$

Då blir

$$X = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) & \cdots & f_k(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) & \cdots & f_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_0(x_m) & f_1(x_m) & \cdots & f_k(x_m) \end{bmatrix}.$$

Minstakvadrat-lösningen minimerar då

$$\|\varepsilon\|^2 = \sum_{j=1}^{m} \left(y_j - \beta_0 f_0(x_j) - \dots - \beta_k f_k(x_j)\right)^2.$$

MATLAB-DEMO

(Där vi anpassar en linje och ett polynom av grad 3 till data från verkligheten, och ser farorna med extrapolation.)