Metoda nejmenších čtverců

doc. Ing. Petr Blaha, PhD.

16. prosince 2017

Komplexní inovace studijních programů a zvyšování kvality výuky na FEKT VUT v Brně
OP VK CZ.1.07/2.2.00/28.0193

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém

Metoda nejmenších čtverců

Příklad

Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

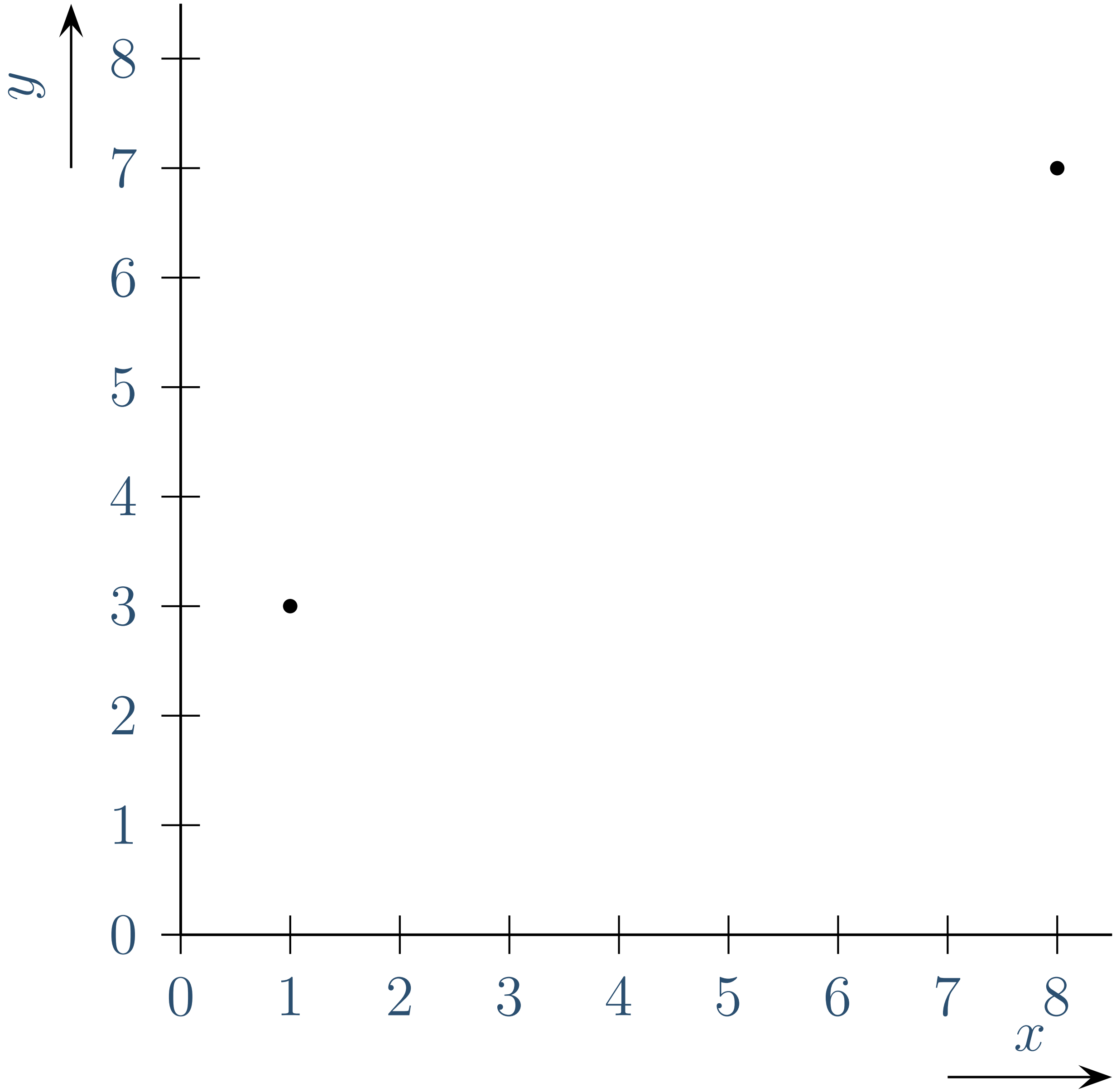
Poznámky k výpočtu

Lineární regrese

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

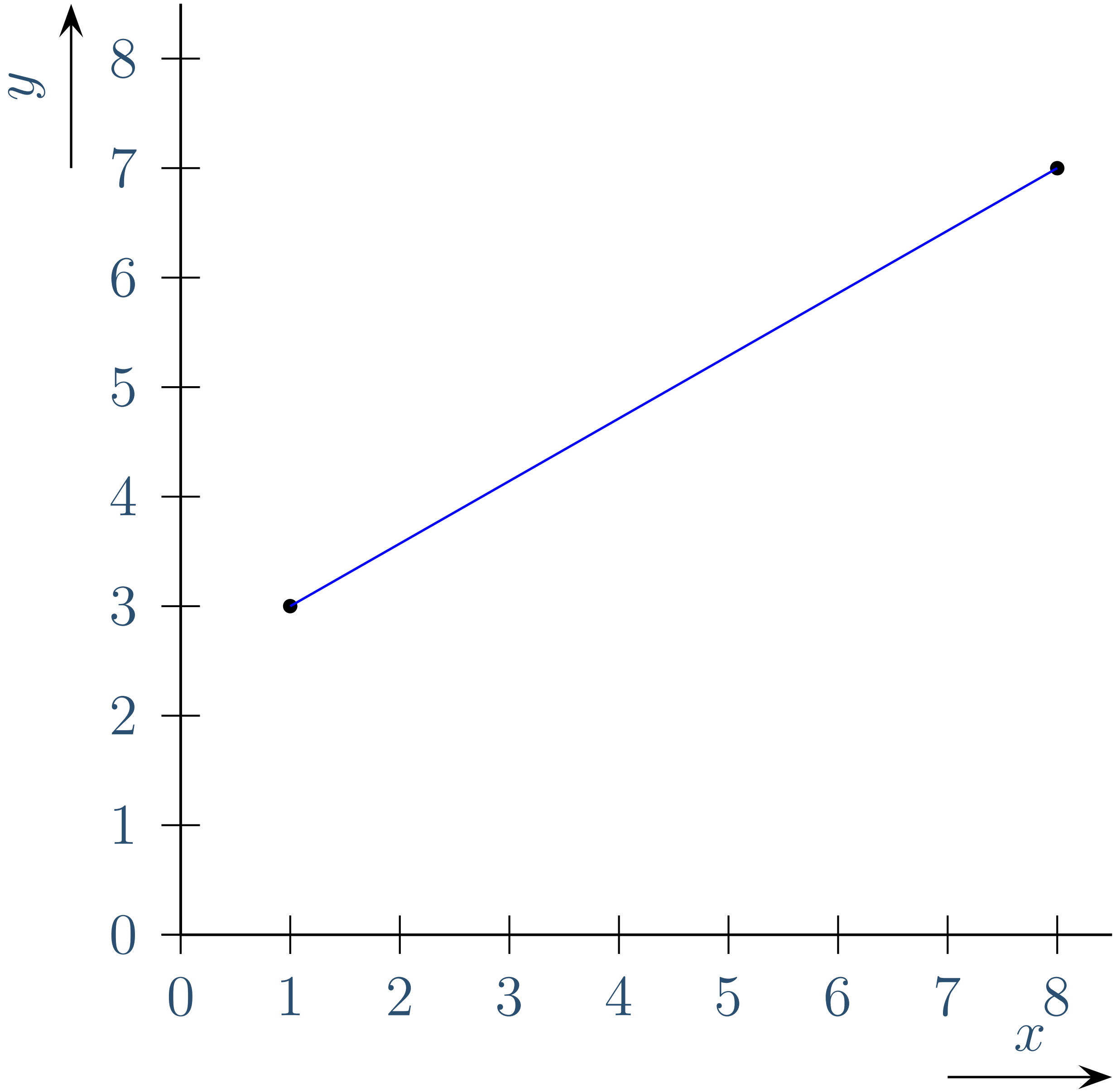
Motivace

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



Motivace

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



Motivace

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém

Metoda nejmenších čtverců

Příklad

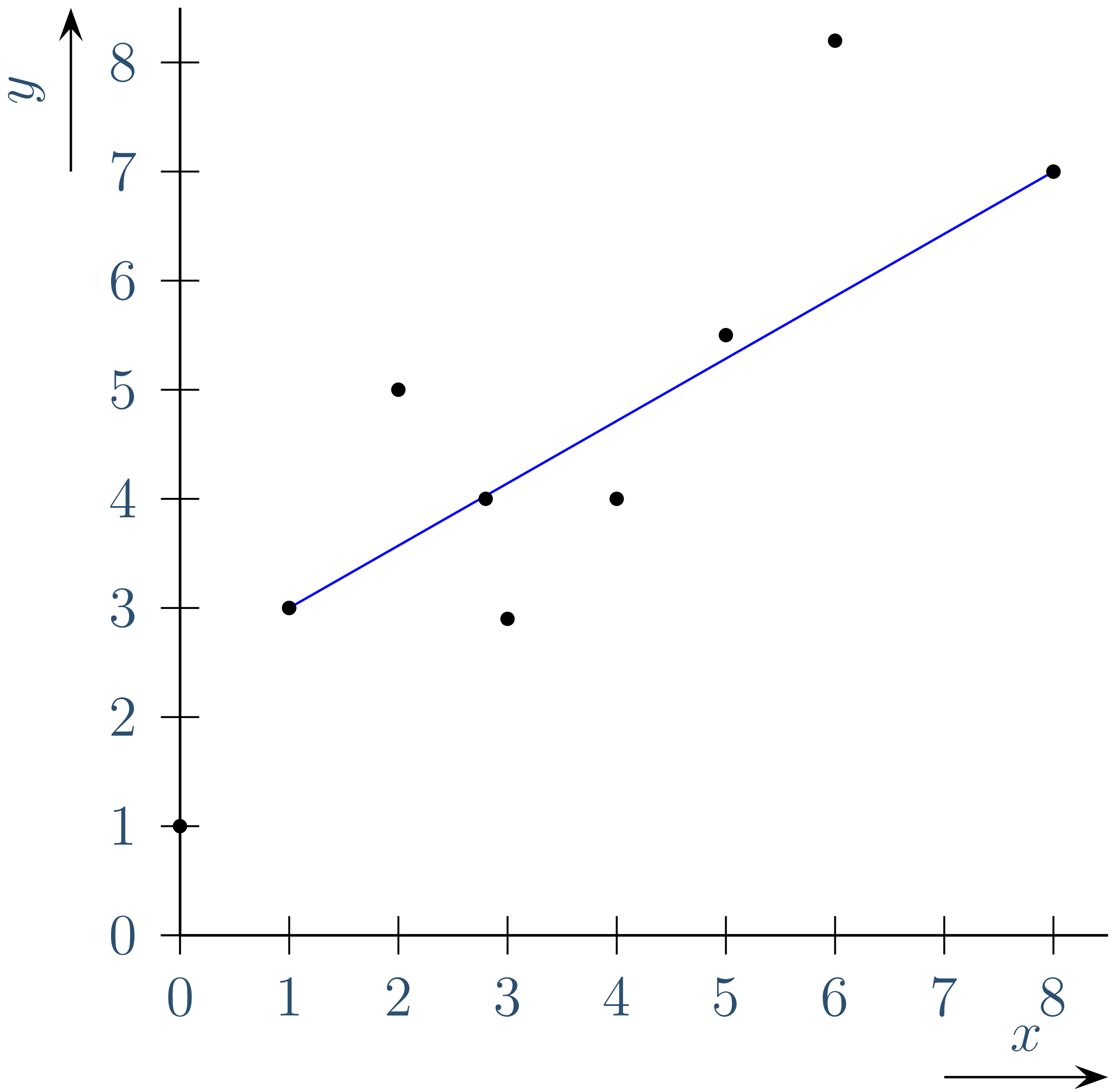
Geometrický význam

Rozbor MNČ

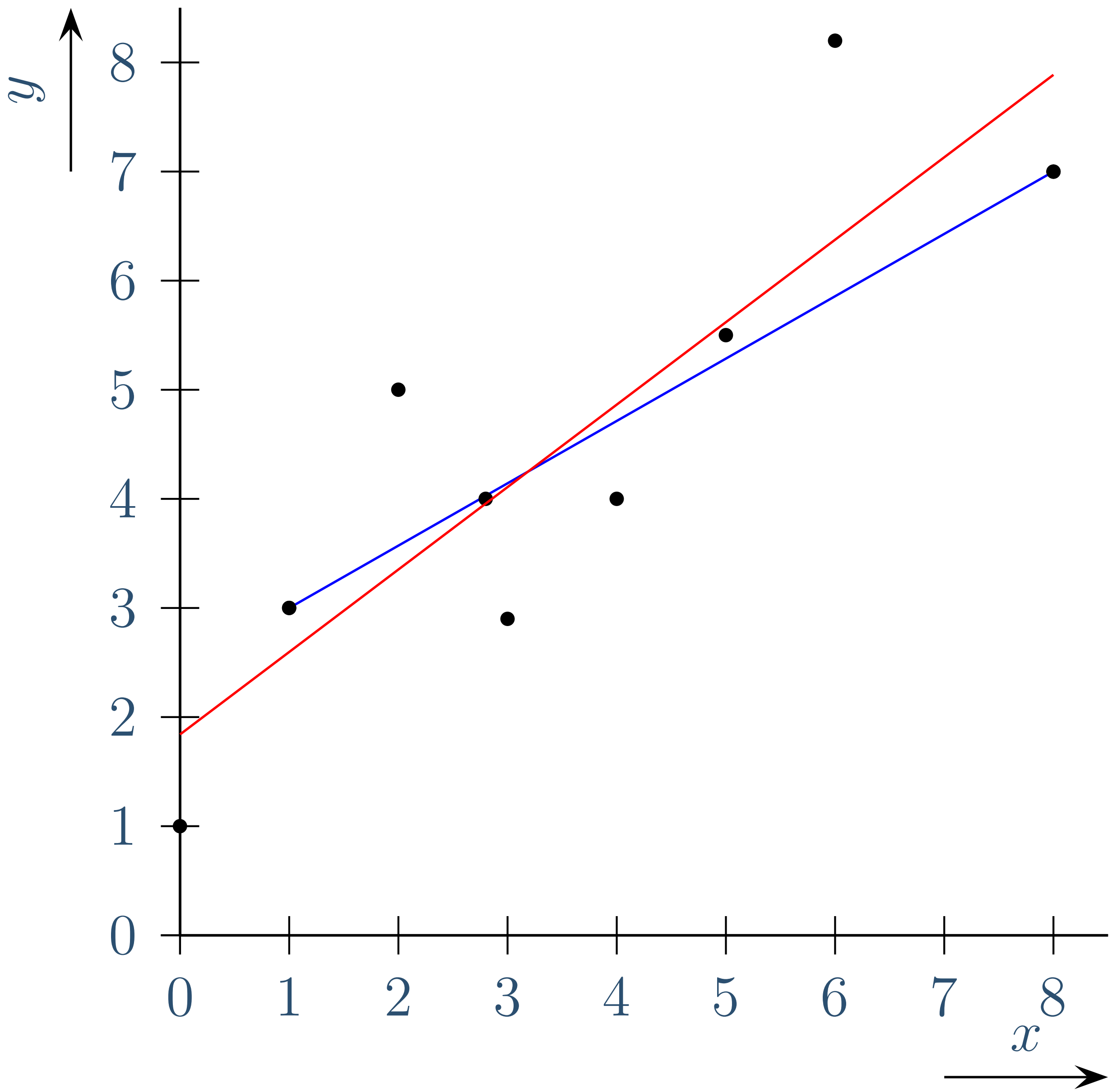
BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu



Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



Motivace

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém

Metoda nejmenších čtverců

Příklad

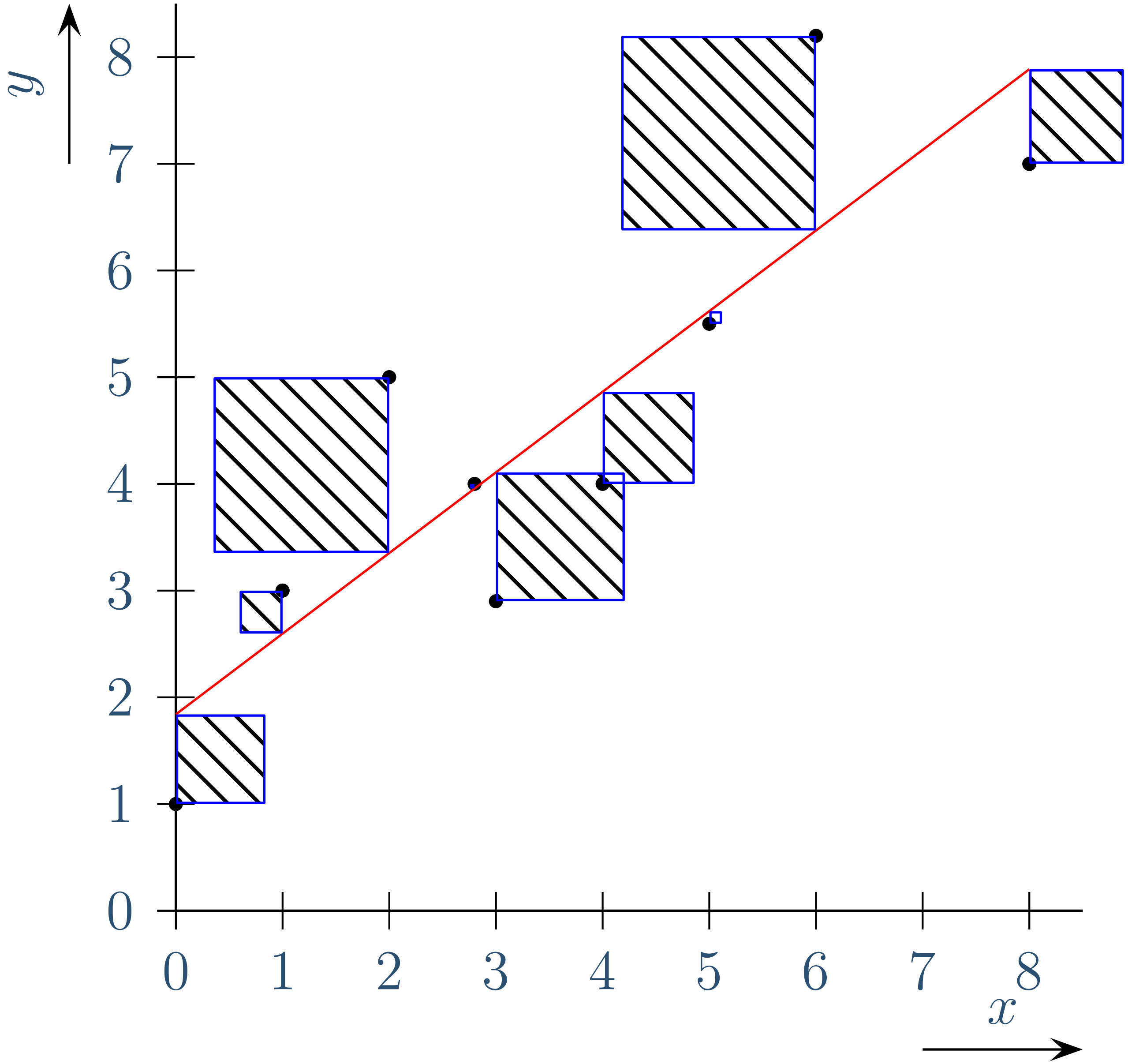
Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu



Formulace problému

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Jedná se o aproximaci daných hodnot polynomem prvního řádu (přímkou) Speciální případ je funkční závislost

$$y(x) = ax + b$$

Obecný případ je funkce

$$y(x) = f(x, a_1, a_2, \cdots, a_n) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \cdots + a_n f_n(x)$$

Cílem lineární regrese je získat odhad koeficientů a, b (případně a_1 až a_n).
Místo proměnné x se často používá

t - vyjadřuje čas

k - celé číslo (například pořadí vzorků)

Vektorový zápis

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Lineární regrese se dá zapsat ve tvaru násobení dvou vektorů

$$y(k) = \varphi^T(k)\theta$$

kde

$y(k)$ - je měřitelná veličina

$\varphi(k)$ - je sloupcový n-řádkový vektor známých veličin (regresní proměnné)

θ - je sloupcový n-řádkový vektor neznámých parametrů.

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém

Metoda nejmenších čtverců

Příklad

Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu

Maticový zápis

Uvažujme N měření a n neznámých parametrů.

$$Y = \Phi\theta$$

kde

$Y = (y(1) \cdots y(N))^T$ - je sloupcový vektor měřitelných veličin

$\Phi = (\varphi(1) \cdots \varphi(N))^T$ - je matice o N-řádcích a n sloupcích (regresní proměnné)

θ - je sloupcový n-řádkový vektor neznámých parametrů.

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Polynomická regrese

$$y(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_1 x^1 + a_0$$

kde

$$\varphi(x)^T = \begin{pmatrix} x^n & x^{n-1} & \cdots & x & 1 \end{pmatrix}$$

$$\theta^T = \begin{pmatrix} a_n & a_{n-1} & \cdots & a_1 & a_0 \end{pmatrix}$$

Exponenciální funkce

$$y(x) = be^{ax}$$

lze logaritmováním převést na

$$\ln y(x) = \ln b + ax$$

Lineární regrese
Motivace
Formulace problému
Vektorový zápis
Maticový zápis
Příklady
FIR systém
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Odezva systému FIR

$$y(k) = g_0 u(k) + g_1 u(k-1) + \cdots g_n u(k-n)$$

kde

$$\varphi(x)^T = \begin{pmatrix} u(k) & u(k-1) & \cdots & u(k-n) \end{pmatrix}$$

$$\theta^T = \begin{pmatrix} g_0 & g_1 & \cdots & g_n \end{pmatrix}$$

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Metoda nejmenších čtverců

Popis

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Chyba odhadu $\varepsilon(k) = y(k) - \varphi^T(k)\theta$.
Metoda nejmenších čtverců vychází z minimalizace ztrátové funkce

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} \varepsilon^2(k) = \frac{1}{2}\varepsilon^T\varepsilon \quad \text{kde } \varepsilon^T = (\varepsilon(1), \varepsilon(2), \cdots, \varepsilon(N))$$

Jiný zápis ztrátové funkce

$$J(\theta) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N} [y(k) - \varphi^T(k)\theta]^2 = \frac{1}{2}(Y - \Phi\theta)^T(Y - \Phi\theta)$$

člen $\varphi^T(k)\theta$ odpovídá odhadu výstupu.

Lineární regrese

Metoda nejmenších čtverců

Popis

Zajímavé matematické vzorečky

Odvození

Kritérium

Jiné vyjádření

Příklad

Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu

Pro vektor $\boldsymbol{x}$ a matici $\boldsymbol{A}$ platí následující vzorečky

$$\frac{d}{dx}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^T$$

$$\frac{d}{dx}(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}$$

$$\frac{d}{dx}(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{x}$$

$$\frac{d}{dx}(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{x}$$

$$\frac{d}{dx}(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \qquad \text{pro symetrickou matici} \, \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$$

Třeba se budou hodit pro odvození metody nejmenších čtverců.

Odvození

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Minimum získáme položením první derivace ztrátové funkce podle vektoru parametrů rovnou nule.

$$0 = \frac{dJ(\theta)}{d\theta} = \frac{1}{2}\frac{d}{d\theta}[(Y - \Phi\theta)^T(Y - \Phi\theta)] =$$

$$= \frac{1}{2}\frac{d}{d\theta}(Y^TY - \theta^T\Phi^TY - Y^T\Phi\theta + \theta^T\Phi^T\Phi\theta) =$$

$$= \frac{1}{2}(-\Phi^TY - \Phi^TY + \Phi^T\Phi\theta + \Phi^T\Phi\theta) = -\Phi^TY + \Phi^T\Phi\theta$$

odkud získáváme

$$\theta = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^TY \tag{1}$$

matice $\Phi^T\Phi$ nesmí být singulární (vetšinou je pozitivně definitní)

Kritérium

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Kritérium lze přepsat ve tvaru

$$J(\theta) = \frac{1}{2}[\theta - (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y]^T(\Phi^T\Phi)[\theta - (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y] + \\ + \frac{1}{2}[Y^T Y - Y^T\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y]$$

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Kritérium

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Kritérium lze přepsat ve tvaru

$$J(\theta) = \overbrace{\frac{1}{2}[\theta-(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y]^T(\Phi^T\Phi)[\theta-(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y]}^{\text{závisí na } \theta}+$$

$$+\frac{1}{2}[Y^T Y - Y^T\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T Y]$$

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Kritérium lze přepsat ve tvaru

$$J(\theta) = \overbrace{\frac{1}{2}[\theta-(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^TY]^T(\Phi^T\Phi)[\theta-(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^TY]}^{\text{závisí na } \theta}+$$

$$+\underbrace{\frac{1}{2}[Y^TY - Y^T\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^TY]}_{\text{nezávisí na } \theta}$$

Jiné vyjádření

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Vzorec (1) lze zapsat v ekvivalentním tvaru

$$\theta = \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)\varphi^T(i)\right]^{-1} \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)y(i)\right]$$

- odvození je podobné jako v předchozím případě
- v některých případech je tento tvar výhodnější (matice Φ velkých rozměrů)
- používá se pro odvození rekurzivního algoritmu
- ani jeden ze vzorců není vhodný pro přímý výpočet

Jiné vyjádření

Lineární regrese

Metoda nejmenších čtverců

Popis

Zajímavé matematické vzorečky

Odvození

Kritérium

Jiné vyjádření

Příklad

Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu

Vzorec (1) lze zapsat v ekvivalentním tvaru

$$\theta = \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)\varphi^T(i)\right]^{-1} \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)y(i)\right]$$

- odvození je podobné jako v předchozím případě
- v některých případech je tento tvar výhodnější (matice Φ velkých rozměrů)
- používá se pro odvození rekurzivního algoritmu
- ani jeden ze vzorců není vhodný pro přímý výpočet

Jiné vyjádření

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Vzorec (1) lze zapsat v ekvivalentním tvaru

$$\theta = \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)\varphi^T(i)\right]^{-1} \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)y(i)\right]$$

- odvození je podobné jako v předchozím případě
- v některých případech je tento tvar výhodnější (matice Φ velkých rozměrů)
- používá se pro odvození rekurzivního algoritmu
- ani jeden ze vzorců není vhodný pro přímý výpočet

Jiné vyjádření

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Popis
Zajímavé matematické vzorečky
Odvození
Kritérium
Jiné vyjádření
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Vzorec (1) lze zapsat v ekvivalentním tvaru

$$\theta = \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)\varphi^T(i)\right]^{-1} \left[\sum_{i=1}^{N} \varphi(i)y(i)\right]$$

- odvození je podobné jako v předchozím případě
- v některých případech je tento tvar výhodnější (matice Φ velkých rozměrů)
- používá se pro odvození rekurzivního algoritmu
- ani jeden ze vzorců není vhodný pro přímý výpočet

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Zadání
Parciální derivace
Výsledné rovnice
Maticový zápis
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Příklad

Zadání

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Zadání
Parciální derivace
Výsledné rovnice
Maticový zápis
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Odvoďte vzorec pro aproximaci naměřených dat polynomem druhého řádu metodou nejmenších čtverců

$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

Ztrátová funkce je

$$J(a_0, a_1, a_2) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

Budeme hledat místo, kde je gradient ztrátové funkce roven nule.

$$\text{grad} J(a_0, a_1, a_2) = 0 \qquad \rightarrow \qquad \frac{\partial J}{\partial a_0} = \frac{\partial J}{\partial a_1} = \frac{\partial J}{\partial a_2} = 0$$

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Zadání
Parciální derivace
Výsledné rovnice
Maticový zápis
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Vyčíslíme parciální derivace

$$\frac{\partial J}{\partial a_0} = -\sum_{i=1}^{N}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) = 0$$

$$\frac{\partial J}{\partial a_1} = -\sum_{i=1}^{N}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)x_i = 0$$

$$\frac{\partial J}{\partial a_2} = -\sum_{i=1}^{N}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)x_i^2 = 0$$

Výsledné rovnice

Rozepsáním předchozích rovnic dostaneme

$$\sum_{i=1}^{N} y_i = a_0 N + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^2$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i y_i = a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^3$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i^2 y_i = a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^4$$

Maticový zápis

Lineární regrese

Metoda nejmenších čtverců

Příklad
Zadání
Parciální derivace
Výsledné rovnice
Maticový zápis

Geometrický význam

Rozbor MNČ

BLUE

Řád odhadu

Poznámky k výpočtu

Maticový zápis předchozích rovnic je

$$\begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^{N} x_i & \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{N} x_i & \sum_{i=1}^{N} x_i^2 & \sum_{i=1}^{N} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{N} x_i^2 & \sum_{i=1}^{N} x_i^3 & \sum_{i=1}^{N} x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N} y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i^2 y_i \end{pmatrix}$$

Získáváme soustavu tří rovnic pro tři neznámé, kterou řešíme standardním způsobem.

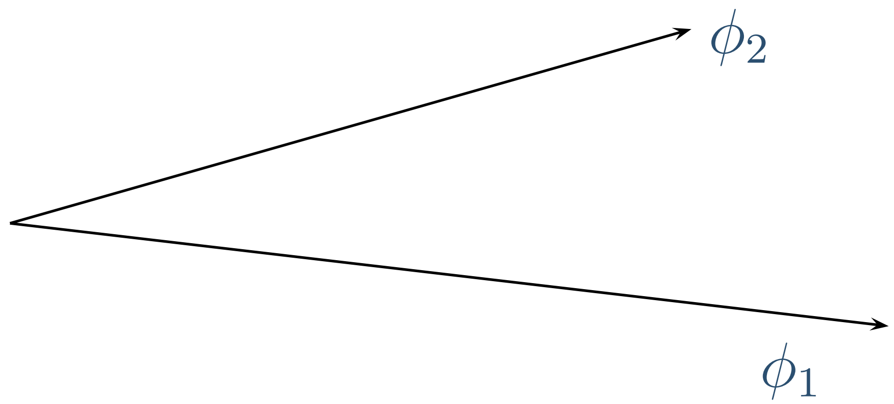
Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Geometrický význam

Motivace

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

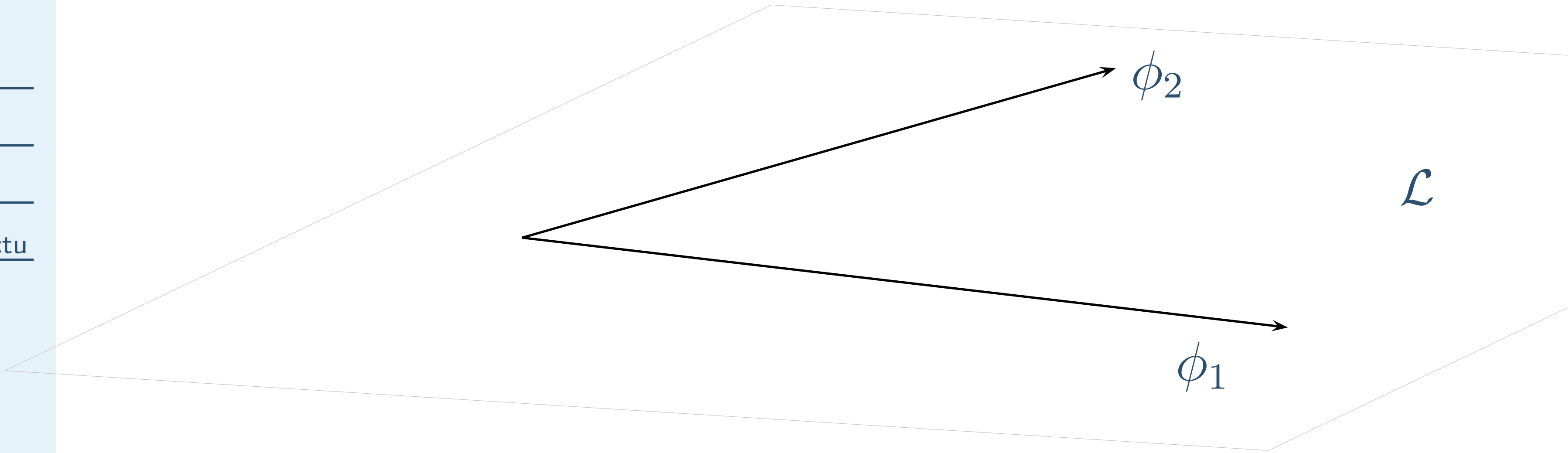
$$\Phi = (\phi_1 \cdots \phi_n)$$



Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

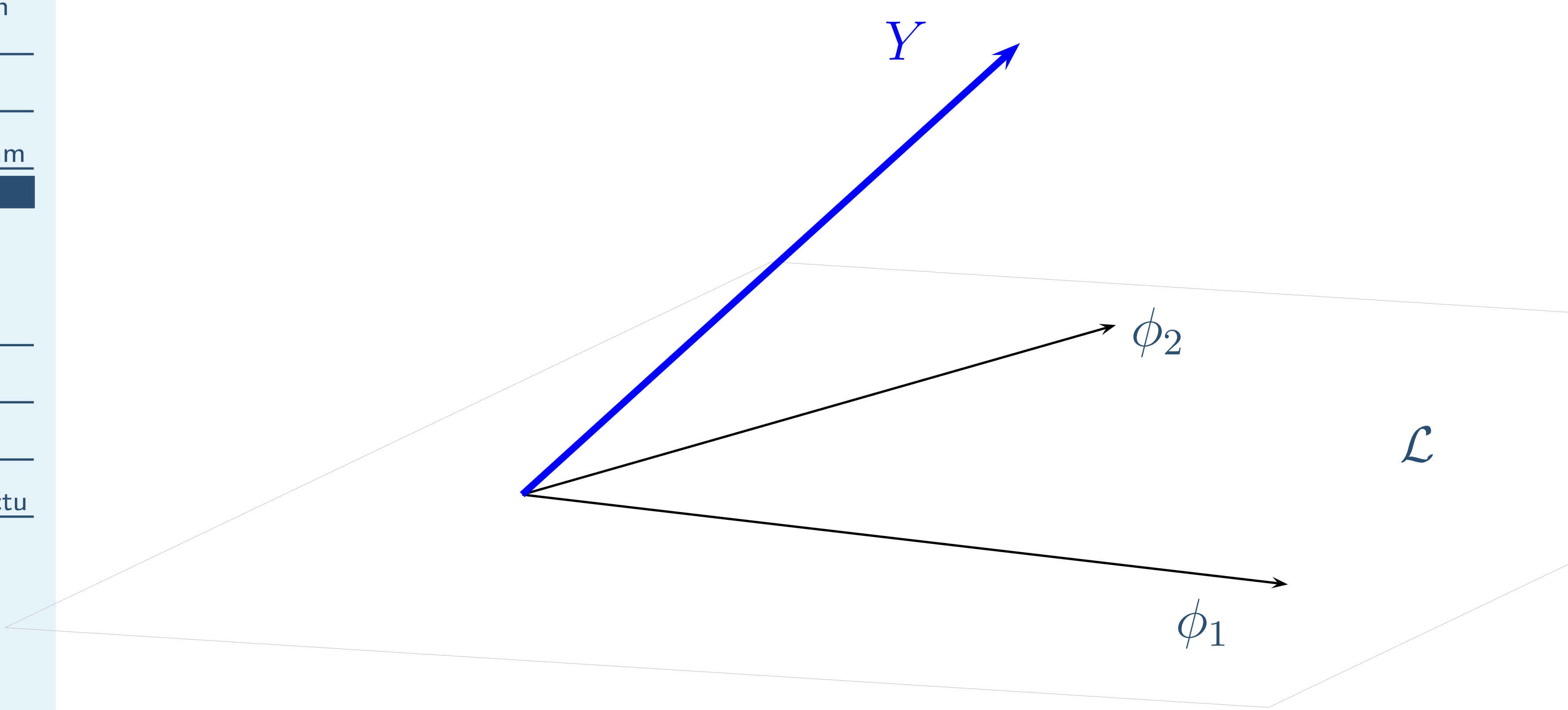
Motivace

$$\Phi = (\phi_1 \cdots \phi_n)$$



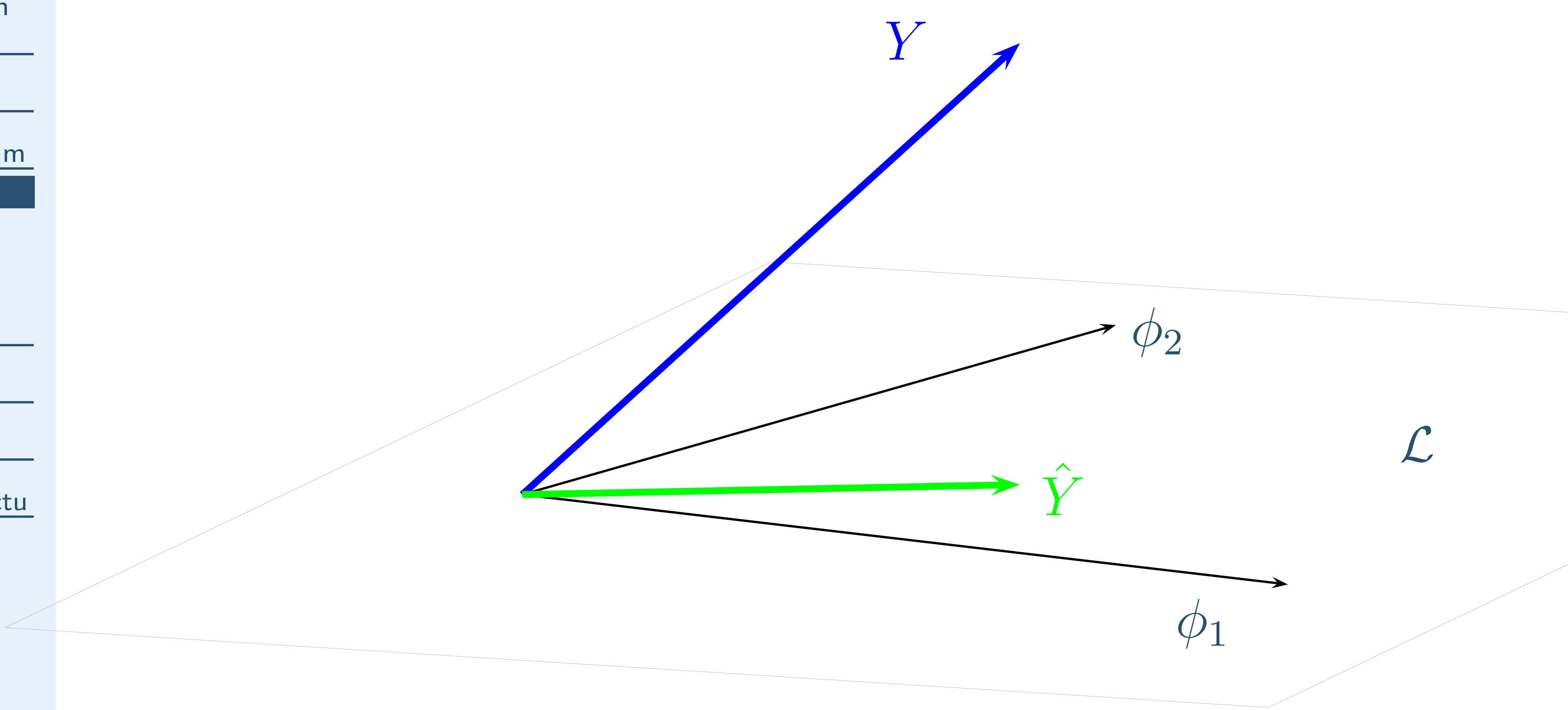
Motivace

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



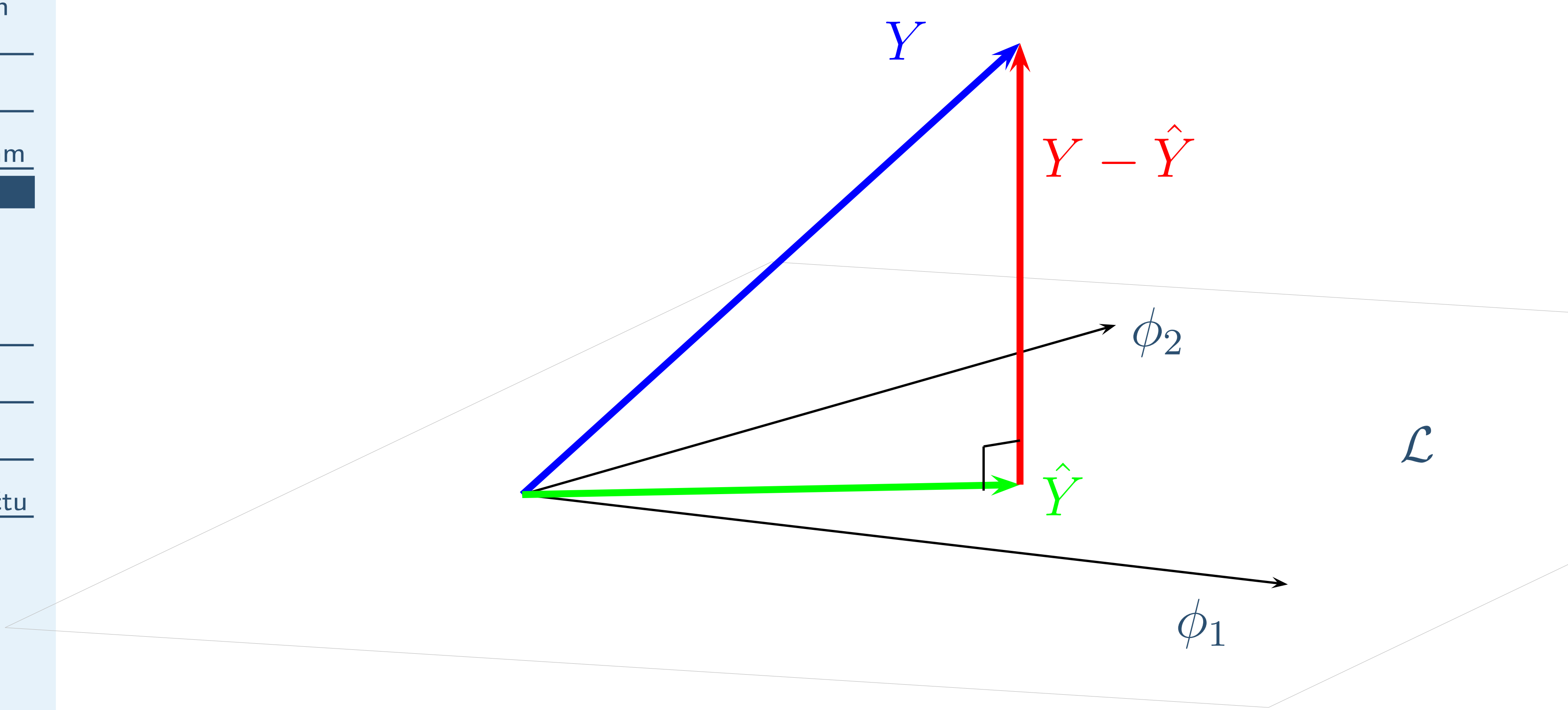
Motivace

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



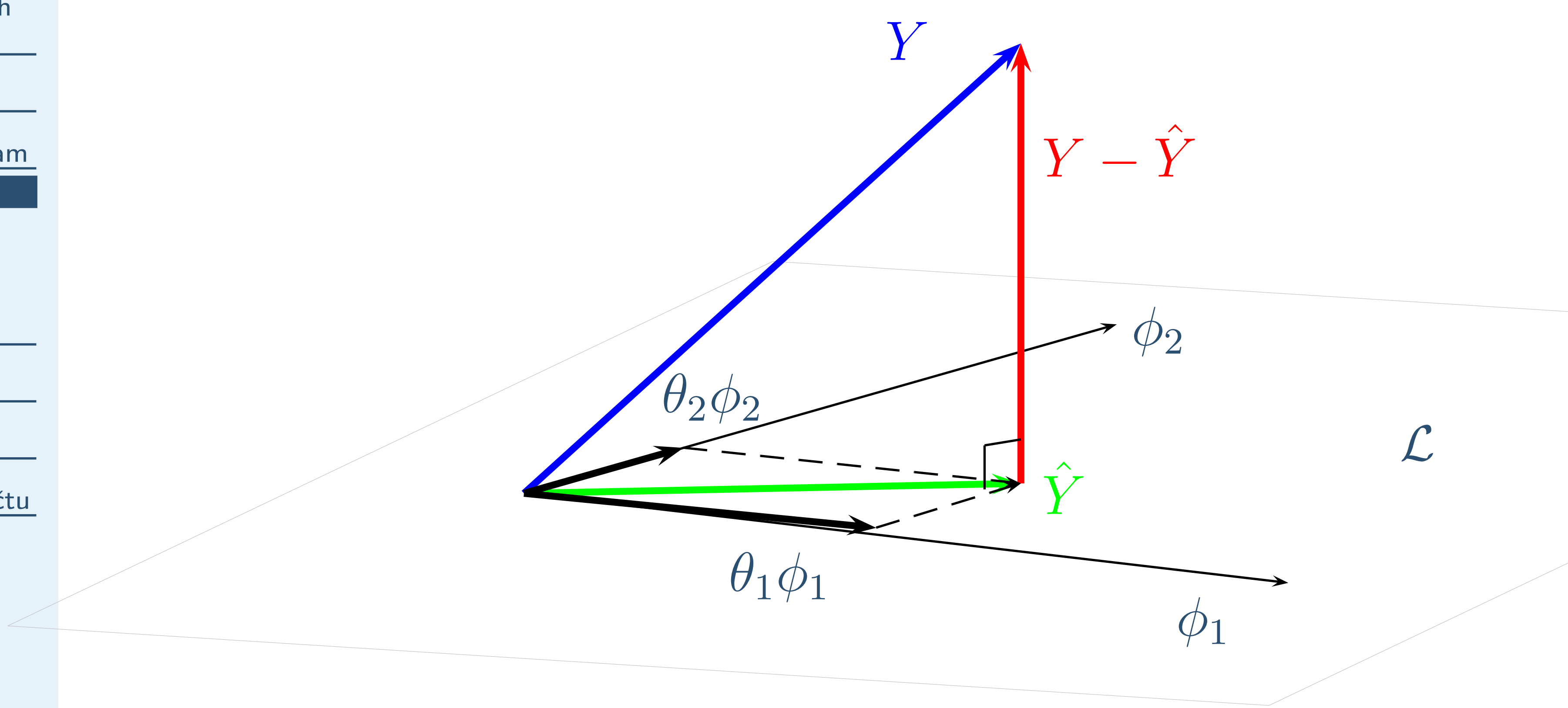
Motivace

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



Motivace

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu



Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Předpoklady

Označme sloupcové vektory matice Φ jako $\phi_1, \dots, \phi_n \in R^N$. Cílem je nalézt takovou lineární kombinaci vektorů $\phi_1, \dots, \phi_n$, která nejlépe aproximuje skutečný výstup Y. Řešením je kolmá projekce vektoru Y do podprostoru tvořeného vektory $\phi_1, \dots, \phi_n$ - vektor $\hat{Y} = \sum_{j=1}^{n} \phi_j \theta_j$.

Platí

$$(Y - \hat{Y}) \perp \phi_i \qquad \text{pro} \qquad i = 1, \dots, n$$

proto také platí

$$\phi_i^T (Y - \hat{Y}) = 0 \qquad \text{pro} \qquad i = 1, \dots, n \tag{2}$$

Odvození

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Motivace
Předpoklady
Odvození
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Dosazením odhadu $\hat{Y}$ do (2) dostaneme

$$\phi_i^T Y = \sum_{j=1}^{n} \phi_i^T \phi_j \theta_j \qquad \text{pro} \qquad i = 1, \dots, n$$

V maticovém zápisu

$$\begin{pmatrix} \phi_1^T \phi_1 & \cdots & \phi_1^T \phi_n \\ & \vdots & \\ \phi_n^T \phi_1 & \cdots & \phi_n^T \phi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^T Y \\ \vdots \\ \phi_n^T Y \end{pmatrix}$$

Což je vlastně dříve odvozená rovnice $\Phi^T \Phi \theta = \Phi^T Y$

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
Rozbor
Bílý šum
Odvození
Barevný šum
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Rozbor metody nejmenších čtverců

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
Rozbor
Bílý šum
Odvození
Barevný šum
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Rozbor metody nejmenších čtverců

Uvažujme data, která vyhovují rovnici

$$y(k) = \varphi^T(k)\theta_0 + e(k)$$

kde θ_0 je vektor skutečných parametrů a $e(k)$ je náhodná proměnná s nulovou střední hodnotou a rozptylem λ^2.
Maticový zápis

$$Y = \Phi\theta_0 + e \qquad \text{kde } e = \begin{pmatrix} e(1) & e(2) & \cdots & e(N) \end{pmatrix}^T$$

evropský sociální fond v ČR EVROPSKÁ UNIE MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Bílý šum

Uvažujme, že $e(k)$ je bílý šum s nulovou střední hustotou a rozptylem λ^2. Potom platí následující vlastnosti

1. odhad $\hat{\theta}$ je neposunutý od vektoru skutečných parametrů θ_0
2. kovarianční matice $\hat{\theta}$ je dán vzorcem

$$\mathrm{cov}(\hat{\theta}) = \lambda^2(\Phi^T\Phi)^{-1}$$

3. neposunutý odhad λ^2 je dán vztahem

$$\hat{\lambda}^2 = 2J(\hat{\theta})/(N-n)$$

Odvození

ad 1.

$$\hat{\theta} = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T(\Phi\theta_0 + e) = \theta_0 + (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T e$$

$$\mathrm{E}\hat{\theta} = \theta_0 + (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T \mathrm{E}e = \theta_0$$

ad 2.

$$\begin{aligned}\mathrm{E}(\hat{\theta} - \theta_0)(\hat{\theta} - \theta_0)^T &= \mathrm{E}[(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T e][(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T e]^T = \\ &= (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T \mathrm{E}ee^T\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1} = \\ &= (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T\lambda^2 I\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1} = \\ &= \lambda^2(\Phi^T\Phi)^{-1}\end{aligned}$$

kde $\mathrm{E}X = \sum_I p_i x_i$ je střední hodnota (expectation).

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
Rozbor
Bílý šum
Odvození
Barevný šum
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Barevný šum

Uvažujme, že $e(k)$ není bílý šum, ale barevný šum, pro který platí rovnice

$$Eee^T = R$$

kde R je pozitivně definitní matice.

Odhad získaný MNČ zůstává neposunutý (odvození je podobné jako v případě bílého šumu), ale kovarianční matice se změní

$$\operatorname{cov}\hat{\theta} = E(\hat{\theta}-\theta_0)(\hat{\theta}-\theta_0)^T = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T R\Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}$$

Nemohu získat odhad s menší hodnotou kovarianční matice?

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
BLUE
Vlastnosti
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Nejlepší lineární neposunutý odhad parametrů

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
BLUE
Vlastnosti
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu

Best Linear Unbiased Estimate - BLUE

Lineární odhad - lze vyjádřit jako lineární funkci měření Y.

$$\hat{\theta} = Z^T Y$$

Odhad metodou nejmenších čtverců je zvláštním případem lineárního odhadu, kdy $Z = \Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}$ $(Z^T = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T)$

Takový lineární odhad vyjádřený maticí Z, který dává neposunutý odhad a který minimalizuje hodnotu kovarianční matice se nazývá BLUE (někdy také **Markovův odhad**). BLUE je dán maticí

$$Z^* = R^{-1}\Phi(\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1} \quad ({Z^*}^T = (\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1}\Phi^T R^{-1})$$

(matice R je symetrická)

Vlastnosti

Odhad je neposunutý, protože platí

$$\theta_0 = E\hat{\theta} = E{Z^*}^T(\Phi\theta_0 + e) = {Z^*}^T\Phi\theta_0$$
$$= (\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1}\Phi^T R^{-1}\Phi\theta_0 = I\theta_0$$

Kovarianční matice BLUE

$$\operatorname*{cov}_{Z^*}(\hat{\theta}) = (\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1}\Phi^T R^{-1} R R^{-1}\Phi(\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1} =$$
$$= (\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1}$$

Platí vztah

$$\operatorname*{cov}_{Z^*}(\hat{\theta}) = (\Phi^T R^{-1}\Phi)^{-1} \leq \operatorname*{cov}_{Z}(\hat{\theta})$$

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Určení řádu odhadu
Reálný případ
Poznámky k výpočtu

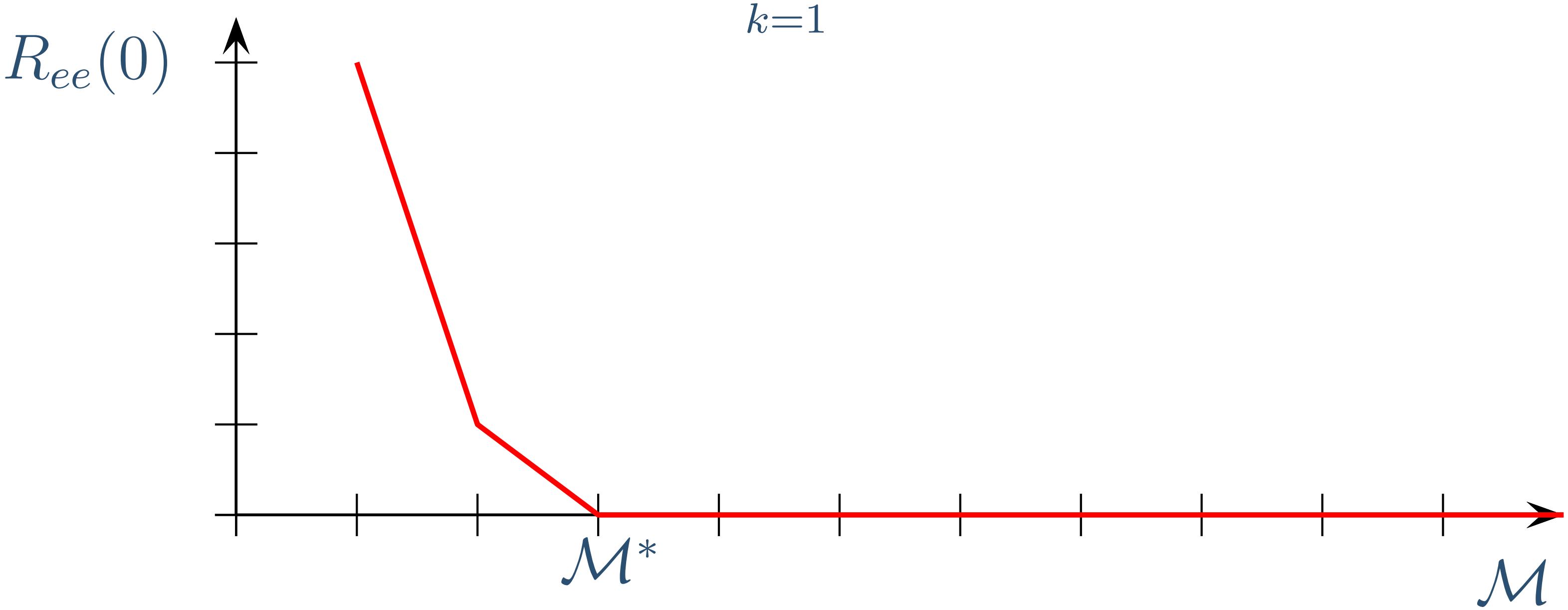
Určení řádu odhadu

Určení řádu odhadu

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Určení řádu odhadu
Reálný případ
Poznámky k výpočtu

V ideálním případě, kdy je měření nezašuměné a je k dispozici nekonečně mnoho hodnot existuje model $\mathcal{M}^*$ který přesně popisuje chování systému. Další zvyšování řádu systému (vyšší počet neznámých parametrů) nevede ke zlepšování kritéria. Jako kritérium lze použít

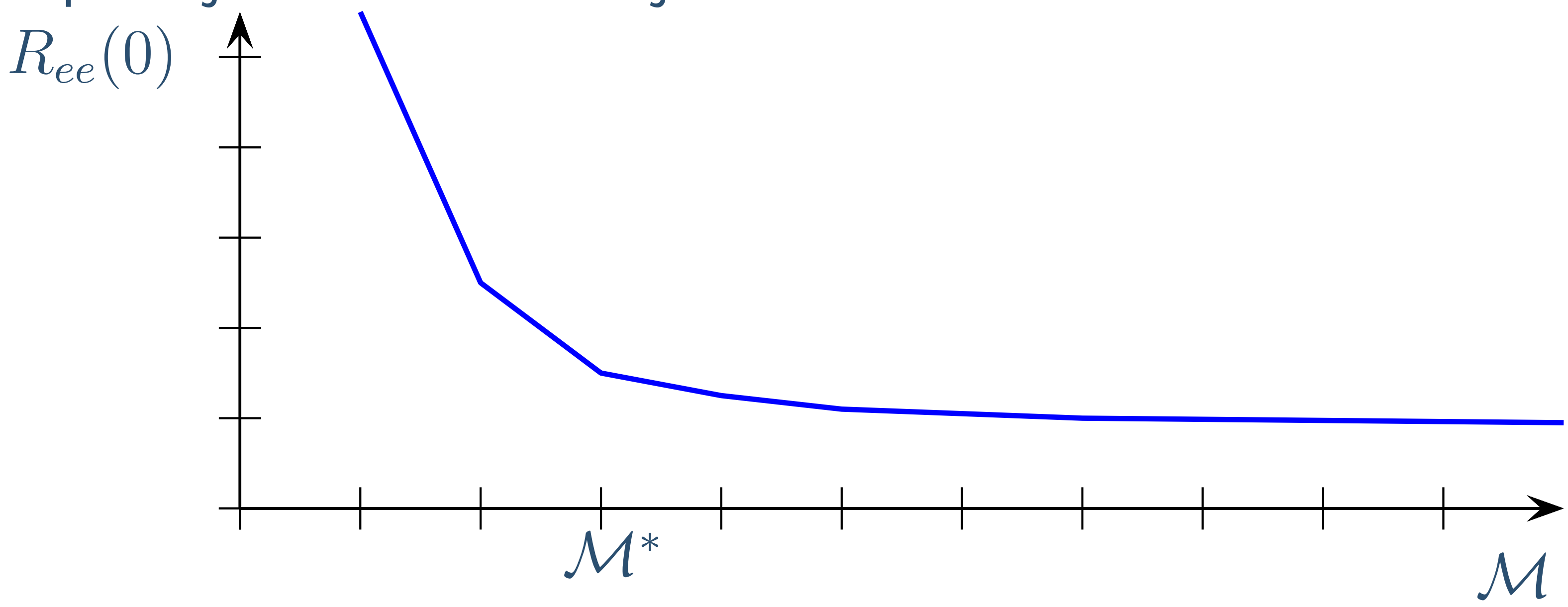
$$R_{ee}(0) = Ee(k)e(k) = \sum_{k=1}^{N} e^2(k)$$



Reálný případ

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Určení řádu odhadu
Reálný případ
Poznámky k výpočtu

V praxi je situace obtížnější.



Obvykle se volí model odpovídající $R_{ee_x}(0)$ pro kterou platí

$$0.8R_{ee_x}(0) \leq R_{ee_{x+1}}(0)$$

kde $R_{ee_{x+1}}(0)$ odpovídá modelu s o jedničku větším počtem parametrů.

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu
Poznámky k výpočtu
QR rozklad matice
Řešení pomocí QR rozkladu
Řešení v programu Matlab

Poznámky k výpočtu

evropský sociální fond v ČR EVROPSKÁ UNIE MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Poznámky k výpočtu

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu
Poznámky k výpočtu
QR rozklad matice
Řešení pomocí QR rozkladu
Řešení v programu Matlab

Výsledné vzorce pro výpočet nejsou vhodné pro přímé použití. Problémy vznikají při výpočtu inverze matice. Používané postupy výpočtu

- řešením rovnice $\Phi^T\Phi\theta = \Phi^T Y$ - jednoduché na výpočet, vysoká citlivost na zaokrouhlovací chyby
- QR metoda - složitější, vyžaduje přibližně dvojnásobek matematických operací ve srovnání s předchozím postupem, vyšší odolnost na zaokrouhlovací chyby
- rekurzivní metody vypočtu - budou probrány později

QR rozklad matice

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu
Poznámky k výpočtu
QR rozklad matice
Řešení pomocí QR rozkladu
Řešení v programu Matlab

Používá se pro řešení soustav lineárních rovnic a pro hledání vlastních čísel matice.
Matice Q je ortonormální. Její sloupce jsou navzájem kolmé.
Platí $Q^T Q = I$, kde I je jednotková matice a R je horní trojúhelníková matice, pro kterou platí

$$\Phi = QR$$

Řešíme soustavu rovnic

$$\Phi\theta = QR\theta = Y$$

Vynásobíme obě strany rovnice maticí Q^T

$$Q^T\Phi\theta = Q^T QR\theta = R\theta = Q^T Y$$

Řešení pomocí QR rozkladu

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu
Poznámky k výpočtu
QR rozklad matice
Řešení pomocí QR rozkladu
Řešení v programu Matlab

Pokud máme k dispozici matice Q a R, je řešení soustavy rovnic $R\theta = Q^T Y$ velmi jednoduché, protože R je trojúhelníková matice.
Ztrátová funkce zůstává stejná

$$(QY - Q\Phi\theta)^T(QY - Q\Phi\theta) =$$
$$= (Y - \Phi\theta)^T Q^T Q(Y - \Phi\theta) = (Y - \Phi\theta)^T(Y - \Phi\theta)$$

V Maltabu lze QR rozklad počítat pomocí příkazu

```
>> [Q,R] = qr(Phi);
```

Řešení v programu Matlab

Lineární regrese
Metoda nejmenších čtverců
Příklad
Geometrický význam
Rozbor MNČ
BLUE
Řád odhadu
Poznámky k výpočtu
Poznámky k výpočtu
QR rozklad matice
Řešení pomocí QR rozkladu
Řešení v programu Matlab

Pro řešení se používá zpětné lomítko. Chování tohoto operátoru závisí na rozměru matice Φ. Pokud se jedná o obdélníkovou matici, pak se pro řešení použije QR rozklad.

```
>> theta = Phi \ Y;
```