Aspetti computazionali

Data Mining
CLAMSES - University of Milano-Bicocca

Aldo Solari

Riferimenti bibliografici

- AS §2.2.1
- HTF §3.2.3
- LKA §2.3, §2.5, §2.6

Table of Contents

Nei libri di testo viene spesso presentata la soluzione ad un certo problema con una formula matematica. Ad esempio, si consideri la soluzione

$$\hat{\beta} = (X^\mathsf{T} X)^{-1} X y$$

Tuttavia la traduzione diretta di questo tipo di formule in codice non è sempre consigliabile perché ci sono molti aspetti problematici dei computer che semplicemente non sono rilevanti quando si scrivono le cose su carta

I potenziali problemi computazionali che possono emergere sono

- *Overflow* :
  Quando i numeri diventano troppo grandi, non possono essere rappresentati su un computer e quindi spesso vengono prodotte NA
- *Underflow* :
  Simile all'overflow, i numeri possono diventare troppo piccoli per essere rappresentati dai computer, provocando errori o avvisi o calcoli imprecisi
- *Dipendenza quasi lineare* :
  Il computer (che ha una precisone finita) può confondere una dipendenza quasi lineare per una dipendenza lineare

Sia $\underset{n\times 1}{y}$ il vettore delle risposte, $\underset{n\times p}{X}$ la matrice del disegno e $\underset{p\times 1}{\beta}$ il vettore dei parametri in un modello lineare. Lo stimatore OLS (Ordinary Least Squares)

$$\hat{\beta} = (X^\mathsf{T} X)^{-1} X y$$

Questa soluzione può essere tradotta in codice R come

```
betahat <- solve(t(X) %*% X) %*% t(X) %*% y
```

Tuttavia non è consigliabile calcolare il valore di $\hat{\beta}$ in questo modo.

La ragione principale è che il calcolo dell'inversa di $X^\mathsf{T} X$ è molto costoso dal punto di vista computazionale ed è un'operazione potenzialmente instabile su un computer quando c'è un'elevata multicollinearità tra i predittori.

Inoltre, per calcolare $\hat{\beta}$ non abbiamo bisogno dell'inversa di $X^\mathsf{T} X$, quindi perché calcolarla?

Le equazioni normali

Basta infatti considerare le equazioni normali

$$X^\mathsf{T} X\beta = X^\mathsf{T} y$$

e risolverle direttamente:

```
solve(crossprod(X), crossprod(X, y))
```

Questo approccio ha il vantaggio di essere più stabile numericamente e di essere molto più veloce

Problemi di multicollinearità

Per ottenere una situazione di multicollinearità, possiamo aggiungere una colonna a X che è molto simile (ma non identica) alla prima colonna di X

```
W <- cbind(X, X[, 1] + rnorm(n, sd = 1e-10))
```

L'approccio "diretto" fallisce quando c'è elevata multicollinearità

```
solve(crossprod(W), crossprod(W, y))
```

La difficoltà nel risolvere un sistema di equazioni lineari può essere descritto dal numero di condizionamento κ (condition number), definito come il rapporto tra il più grande e più piccolo valore singolare di $X^\top X$. Se κ è molto grande, siamo in presenza di un un problema mal condizionato (ill-conditioned, un problema dove le soluzioni sono molto sensibili a piccole perturbazioni dei dati iniziali)

Le equazioni normali

$$X^\mathsf{T} X\beta = X^\mathsf{T} y$$

rappresentano un caso particolare di un generico sistema di equazioni

$$Ax = b$$

La funzione `solve(A, b, ...)` risolve questo sistema di equazioni, dove A è una matrice quadrata e b può essere un vettore o una matrice.

Se b non viene specificato, allora diventa la matrice identità I, quindi il problema si traduce in $Ax = I$, ovvero trovare l'inversa di A.

Table of Contents

La scomposizione di Cholesky

Poichè nel nostro caso la matrice $A = X^\mathsf{T} X$ è simmetrica, e se X è a rango pieno, è anche definita positiva, allora possiamo considerare la decomposizione di Cholesky

$$A = LL^\mathsf{T}$$

dove L è una matrice triangolare inferiore.

Con questa decomposizione possiamo scrivere

$$\begin{aligned} LL^\mathsf{T} x &= b \\ Lz &= b \end{aligned}$$

dove $z = L^\mathsf{T} x$ è la nuova incognita.

Quando nel generico sistema di equazioni $Ax = b$ la matrice A è triangolare inferiore (superiore), si può applicare l'algoritmo di sostituzione in avanti, denominato *forwardsolve* (l'algoritmo di sostituzione in indietro, denominato *backsolve*).

Algoritmo di backsolve

Si consideri la seguente matrice triangolare superiore

$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{1,2} & l_{1,3} \\ 0 & l_{2,2} & l_{2,3} \\ 0 & 0 & l_{3,3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

Dall'ultima riga (equazione) risulta

$$z_3 = \frac{b_3}{l_{3,3}}$$

La seconda riga (equazione) coinvolge solamente z_2 e z_3, quindi

$$z_2 = \frac{b_2}{l_{2,2}} - \frac{l_{2,3} z_3}{l_{2,2}}$$

Infine

$$z_1 = \frac{b_1}{l_{1,1}} - \frac{l_{1,2} z_2}{l_{1,1}} - \frac{l_{1,3} z_3}{l_{1,1}}$$

Forwardsolve e backsolve

L'algoritmo di forwardsolve utilizza sostanzialmente la stessa tecnica per matrici triangolari inferiori. Per il nostro problema, possiamo scrivere

$$
\begin{aligned}
X^\top X x &= X^\top y \\
L L^\top x &= b \\
L z &= b
\end{aligned}
$$

dove $\underset{p \times p}{L}$ è una matrice triangolare inferiore

Prima si risolve $Lz = b$ con

```
forwardsolve(L, b)
```

Poi si risolve $L^\top x = z$ con

```
backsolve(t(L), forwardsolve(L, b))
```

```
# Calcolare la stima OSL con la decomposizione di Cholesky
#
# Argomenti:
# X: la matrice del disegno
# y: il vettore risposta
#
# Ritorna:
# Il vettore hatbeta di lunghezza ncol(X).
ols_chol <- function(X, y)
{
XtX <- crossprod(X)
Xty <- crossprod(X, y)
L <- t(chol(XtX))
betahat <- backsolve(t(L), forwardsolve(L, Xty))
betahat
}
```

Table of Contents

Matrice di proiezione

Sia $L \subseteq \mathbb{R}^n$ un sottospazio vettoriale, i.e. $L = \text{span}\{v_1, \ldots, v_k\}$ per dei vettori $v_1, \ldots, v_k \in \mathbb{R}^n$. Sia $V \in \mathbb{R}^{n \times k}$ la matrice che contiene $v_1, \ldots, v_k$ come sue colonne, allora

$$\text{span}\{v_1, \ldots, v_k\} = \{a_1 v_1 + \ldots + a_k v_k : a_1, \ldots, a_k \in \mathbb{R}\}$$

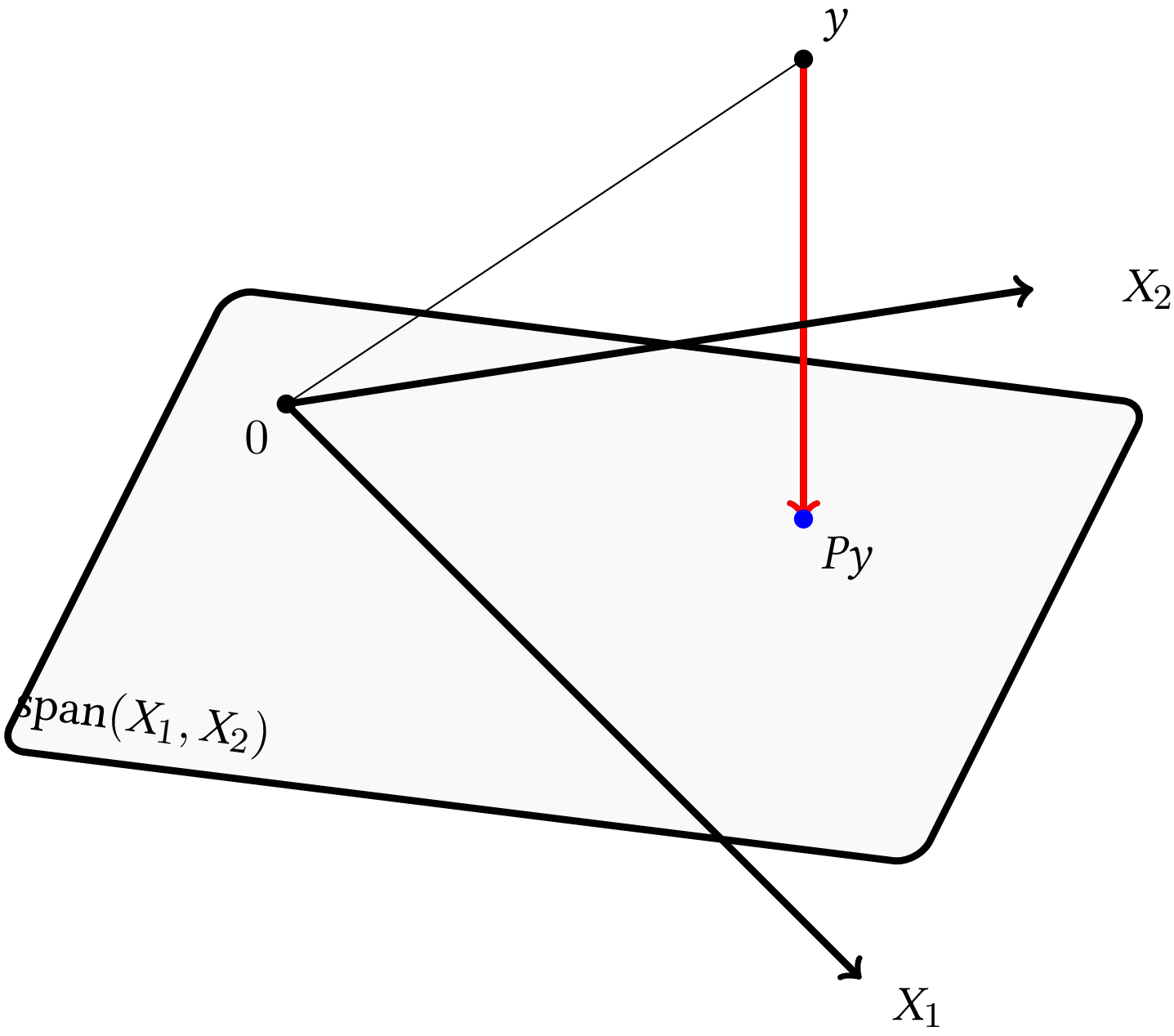
Sia $F(x) = P_L x$ la funzione (lineare) che proietta $x \in \mathrm{R}^n$ su L , dove il test $P_L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è la matrice di proiezione su L. La matrice P_L è simmetrica, i.e. $P_L^t = P_L$ e idempotente, i.e. $P_L^2 = P_L$. Inoltre abbiamo

$$P_L x = x \quad \forall x \in L, \qquad P_L x = 0 \quad \forall x \perp L$$

Per ogni sottospazio L, il suo complemento ortogonale è

$$L^\perp = \{x \in \mathbb{R}^n : x \perp L\} = \{x \in \mathbb{R}^n : x \perp v \text{ per qualsiasi } v \in L\}$$

Geometria del modello lineare



Geometria del modello lineare

La stima

$$\hat{y} = X(X^t X)^{-1} X^t y = Py$$

del modello lineare è esattamente la proiezione di y nel sottospazio $\text{span}\{X_1, \ldots, X_p\}$

Il vettore dei residui

$$y - \hat{y} = (I - P)y = P^{\perp} y$$

è la proiezione di y nel sottospazio $\text{span}\{X_1, \ldots, X_p\}^{\perp}$ quindi $y - \hat{y}$ è ortogonale a ciascun $X_1, \ldots, X_p$

Regressione univariata

Sia $\langle a, b \rangle = a^t b = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$ il il prodotto scalare (Euclidean inner product) di $a, b \in \mathbb{R}^n$

Sia $\|a\|_2^2 = a^t a = \sum_{i=1}^{n} a_i^2$ la norma Euclidea al quadrato

Data la variabile X_j (j-sima colonna di X), il coefficiente di regressione di y su X_j è

$$\hat{\beta}_j = \frac{\langle X_j, y \rangle}{||X_j||_2^2}$$

Se $X_1, \ldots, X_p$ sono ortogonali, allora è anche il coefficiente di X_j della regressione multivariata di y su $X_1, \ldots, X_p$

Regressione univariata con intercetta

Per la regressione di y su $\mathbb{1}, x \in \mathbb{R}^n$, possiamo scrivere

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\langle x - \bar{x}\mathbb{1}, y \rangle}{||x - \bar{x}\mathbb{1}||_2^2}$$

Questo risultato si può ottenere in due passi

1. Regressione di x su $\mathbb{1}$, ottenendo il coefficiente

$$\frac{\langle \mathbb{1}, y \rangle}{||\mathbb{1}||_2^2} = \frac{\langle \mathbb{1}, y \rangle}{n} = \bar{x}$$

   e il vettore dei residui

$$z = x - \bar{x}\mathbb{1} \in \mathbb{R}^n$$

2. Regressione di y su z, ottenendo il coefficiente

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\langle z, y \rangle}{||z||_2^2} = \frac{\langle x - \bar{x}\mathbb{1}, y \rangle}{||x - \bar{x}\mathbb{1}||_2^2}$$

Algoritmo:
regressione multivariata via ortogonalizzazioni successive

1. Sia $Z_1 = X_1$
2. Per $j = 2, \ldots, p$:
   Regressione di X_j su $Z_1, \ldots, Z_{j-1}$ per ottenere i coefficienti

$$\hat{\gamma}_{jk} = \frac{\langle Z_k, X_j \rangle}{||Z_k||_2^2}, \quad k = 1, \ldots, j-1$$

   e il vettore dei residui

$$Z_j = X_j - \sum_{k=1}^{j-1} \hat{\gamma}_{jk} Z_k$$

3. Regressione di y su Z_p per ottenere il coefficiente $\hat{\beta}_p$, ovvero il coefficiente di X_p nella regressione di y su $X_1, \ldots, X_p$

Per ogni j, dalla definizione $Z_j = X_j - \sum_{k=1}^{j-1} \hat{\gamma}_{jk} Z_k$ segue che ciascun Z_j è una combinazione lineare di $X_1, \ldots, X_j$, quindi

$$\text{span}(Z_1, \ldots, Z_j) \subseteq \text{span}(X_1, \ldots, X_j)$$

Riarrangiando i termini, si può mostrare che ciascun X_j è una combinazione lineare di $Z_1, \ldots, Z_j$, quindi

$$\text{spam}(X_1, \ldots, X_j) \subseteq \text{spam}(Z_1, \ldots, Z_j)$$

Poiché $\text{span}(X_1, \ldots, X_j) = \text{span}(Z_1, \ldots, Z_j)$, la regressione di y su $X_1, \ldots, X_p$ è la stessa di la regressione di y su $Z_1, \ldots, Z_p$. Sia

$$\hat{y} = c_1 Z_1 + \ldots + c_p Z_p$$

Poichè $Z_1, \ldots, Z_p$ sono ortogonali, i coefficienti $c_1, \ldots, c_p$ corrispondono a quelli della regressione univariata, in particolare

$$c_p = \frac{\langle Z_p, y \rangle}{||Z_p||_2^2} = \hat{\beta}_p$$

Abbiamo

$$\hat{y} = c_1 Z_1 + \ldots + c_{p-1} Z_{p-1} + \hat{\beta}_p Z_p$$

Si noti che la variabile X_p compare solo attraverso Z_p:

$$Z_p = X_p - \sum_{k=1}^{p-1} \hat{\gamma}_{jk} Z_k$$

Quindi possiamo scrivere, per certe costanti $a_1, \ldots, a_{p-1}$

$$\hat{y} = a_1 X_1 + \ldots + a_{p-1} X_{p-1} + \hat{\beta}_p X_p$$

quindi $\hat{\beta}$ è il coefficiente di X_p nella regressione di y su $X_1, \ldots, X_p$

Table of Contents

La decomposizione QR

Sia

$$X = Z\Gamma$$

dove Z è composta dalle colonne (ordinate) $Z_1, \ldots, Z_p$, e Γ è la matrice triangolare superiore con elementi $\hat{\gamma}_{kj}$.

Sia D la matrice diagonale con elementi $D_jj = \|Z_j\|$. Otteniamo

$$X = ZD^{-1}D\Gamma = QR$$

la decomposizione QR di X, dove il Q è una matrice $n \times p$ ortogonale, i.e. $Q^tQ = I$, e R è una matrice $p \times p$ triangolare superiore.

La decomposizione QR (ridotta) prevede

$$\underset{n\times p}{X} = \underset{n\times p}{Q}\,\underset{p\times p}{R}$$

dove Q è una matrice ortogonale tale che $Q^\mathsf{T} Q = I$, ed R è una matrice triangolare superiore, quindi

$$\begin{aligned} X^\mathsf{T} X\beta &= X^\mathsf{T} y \\ R^\mathsf{T} Q^\mathsf{T} QR\beta &= R^\mathsf{T} Q^\mathsf{T} y \\ R^\mathsf{T} R\beta &= R^\mathsf{T} Q^\mathsf{T} y \\ R\beta &= Q^\mathsf{T} y \end{aligned}$$

Possiamo quindi risolvere il sistema con l'algoritmo backsolve senza dover calcolare $X^\mathsf{T} X$, che potrebbe risultare numericamente instabile.

```
# Calcolare le stime OLS con la decomposizione QR
#
# Argomenti:
# X: la matrice del disegno
# y: il vettore risposta
#
# Ritorna:
# Il vettore hatbeta di lunghezza ncol(X).
ols_qr <-
function(X, y)
{
qr_obj <- qr(X)
Q <- qr.Q(qr_obj)
R <- qr.R(qr_obj)
Qty <- crossprod(Q, y)
betahat <- backsolve(R, Qty)
betahat
}
```

Costo computazionale

La funzione `lm` utilizza la decomposizione QR (programmata in C e richiamata dalla funzione). Questa soluzione ha un costo computazionale di

$$2np^2$$

operazioni, rispetto al costo

$$p^3 + np^2/2$$

della via scomposizione di Cholesky.