Аппроксимация и прогнозирование

Храмов Д. А.

23.01.2019

1. Метод наименьших квадратов (Ordinary Least Squares)

Экспериментальные значения температуры кофе

Время, мин	T,°C	Время, мин	T,°C
0,0	83,0	8,0	64,7
1,0	77,7	9,0	63,4
2,0	75,1	10,0	62,1
3,0	73,0	11,0	61,0
4,0	71,1	12,0	59,9
5,0	69,4	13,0	58,7
6,0	67,8	14,0	57,8
7,0	66,4	15,0	56,6

Постановка задачи

Необходимо найти функцию заданного вида

$$y = f(x)$$

которая в точках $x_1, x_2, \ldots, x_n$ (моменты времени) принимает значения как можно более близкие к табличным $y_1, y_2, \ldots, y_n$ (температура).

Какие функции используют

- $a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_2 x^n$
- $\sin(x)$, $\cos(x)$
- $\exp(x)$, $\log(x)$
- $\ldots$

Метрика качества приближения

Приближающая функция $F(x)$ в точках $x_1, x_2, \ldots, x_n$ имеет значения:

$$f_1, f_2, \ldots, f_n$$

Расстояние между соответствующими точками таблицы и приближающей функции должно быть наименьшим:

$$\sqrt{(y_1 - f_1)^2 + (y_2 - f_2)^2 + \ldots + (y_n - f_n)^2} \to \min$$

Функция потерь (loss function):

$$L(f_1, f_2, \ldots, f_n) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (y_i - f_i)^2}$$

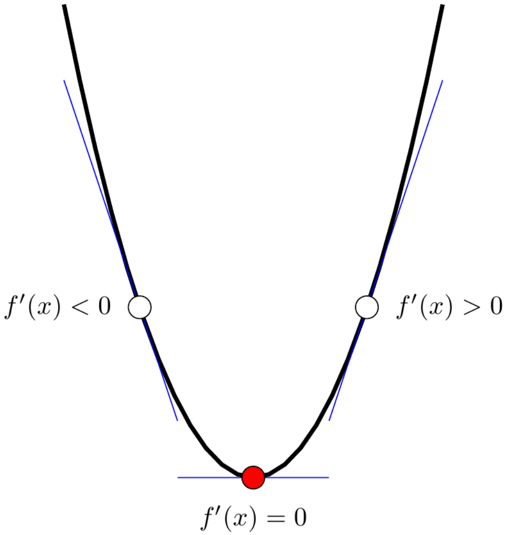
Линейная аппроксимация

$$F(x) = a + bx$$

Нужно подобрать a и b так, чтобы сумма квадратов отклонений точек f_i от наблюдаемых значений y_i была минимальной.

$$L(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i, a, b))^2 \to \min$$

Экстремум функции



Необходимое условие экстремума

$$\frac{\partial L}{\partial a} = \frac{\partial L}{\partial b} = 0.$$

Найдем значения a и b, обращающие $L(a,b)$ в минимум

$$\frac{\partial L}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (a + bx_i)) \frac{\partial f}{\partial a} = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (a + bx_i)) \frac{\partial f}{\partial b} = 0.$$

Вычислим производные $f(x) = a + bx$

$$\frac{\partial f}{\partial a} = 1, \quad \frac{\partial f}{\partial b} = x.$$

Получим

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - (a + bx_i)) = 0,$$

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - (a + bx_i)) x_i = 0.$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n} y_i - an - b\sum_{i=1}^{n} x_i = 0,\\
\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i - b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0.
\end{aligned}
$$

Разделим уравнения на n

$$
\begin{aligned}
a + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i,\\
\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i x_i.
\end{aligned}
$$

Введем обозначения

$$M_x = \frac{1}{n}\sum x_i, \quad M_y = \frac{1}{n}\sum y_i,$$

$$M_{x^2} = \frac{1}{n}\sum x_i^2, \quad M_{xy} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i x_i$$

Перепишем с их помощью систему уравнений

$$\begin{aligned} a + M_x \cdot b &= M_y, \\ M_x \cdot a + M_{x^2} \cdot b &= M_{xy}. \end{aligned}$$

Та-даа-м!

$$\begin{bmatrix} 1 & M_x \\ M_x & M_{x^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_y \\ M_{xy} \end{bmatrix}$$

Получаем формулу для вычисления коэффициентов a и b

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & M_x \\ M_x & M_{x^2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} M_y \\ M_{xy} \end{bmatrix}$$

Вернемся к аппроксимации температуры

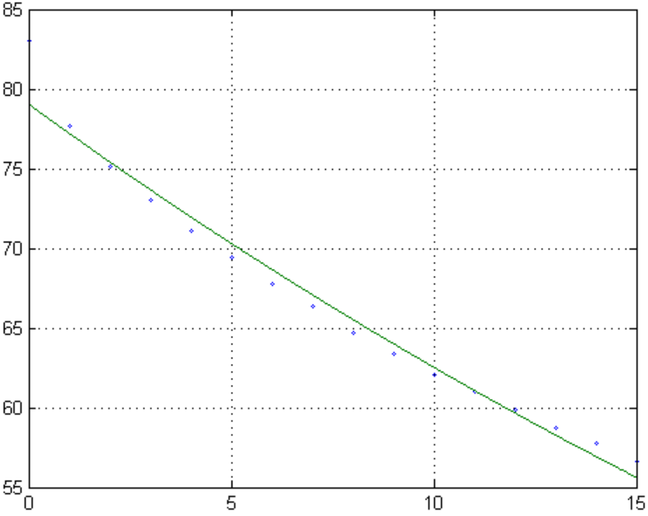
Для приближения табличных данных будем использовать функцию вида

$$f(x) = e^{a+bt}$$

$$\varphi(x) = \ln(f(x)) = a + bt$$

Код

```
x = 0:15; % задание моментов времени
y = [83, 77.7, 75.1, 73.0, 71.1, 69.4, ...
     67.8, 66.4, 64.7, 63.4, 62.1, ...
     61.0, 59.9, 58.7, 57.8, 56.6]; % задание температуры
n = length(x);
y1 = log(y);
% Вычисление элементов матрицы системы
Mx = sum(x)/n;
My = sum(y1)/n;
Mx2 = sum(x.^2)/n;
Mxy = x*y1'/n;
% Задание матрицы системы
M = [1 Mx; Mx Mx2];
% Задание столбца свободных членов системы
d = [My; Mxy];
% Решение системы линейных уравнений
s = M\d;
```


85
80
75
70
65
60
55
0
5
10
15

Чему равна погрешность аппроксимации

```
% Задание дискретных значений независимой переменной
t = 0:0.01:x(n);
% Вычисление значений аппроксимирующей функции
T = exp( s(1)+s(2)*t );
% Визуализация исходных данных и аппроксимирующей функции
plot(x, y, 'o', t, T, 'MarkerSize', 2), grid on

% Вычисление функции потерь
f = exp( s(1)+s(2)*x );
err = sqrt(sum((y-f).^2));

>> err = 4.7362
```

2. Функции Matlab

- `polyfit` — вычисляет коэффициенты аппроксимирующего полинома n-й степени;
- `polyval` — вычисляет значения этого полинома в заданных точках.

polyfit

```
p = polyfit(x, y, n)
```

Находит коэффициенты полинома $p(x)$ степени n

$$p(x) = p_1 x^n + p_2 x^{n-1} + \ldots + p_n x + p_{n+1}$$

который приближает функцию $y(x)$ методом наименьших квадратов.

Ввод: `x`, `y` — табличные значения независимой переменной и функции, `n` — степень полинома.

Вывод: вектор `p` длины `n+1`, содержащий коэффициенты полинома $p(x)$.

polyval

```
y = polyval(p, x)
```

Ввод: `p = [p1 p2 ... pn pn+1]` — вектор коэффициентов аппроксимирующего полинома, полученный с помощью `polyfit`,`x` — вектор значений независимой переменной, в которых нужно вычислить полином.

Вывод: `y` — вычисленные значения аппроксимирующего полинома.

Задача

Экспериментальные данные

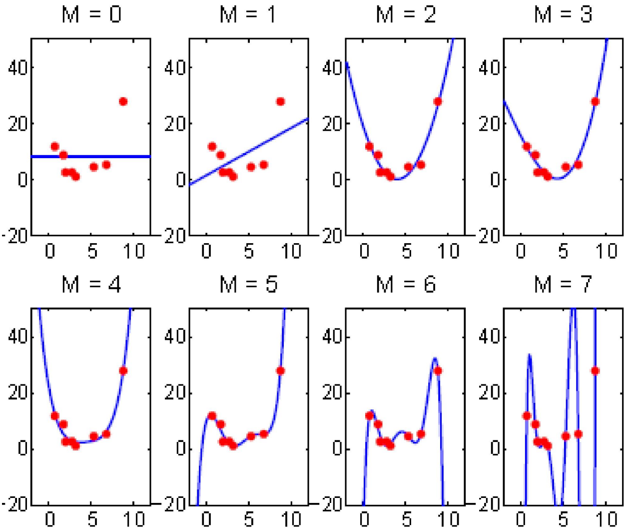
```
x = [1 2.2 2.4 2.7 3.1 3.5 4.5 5];
y = [9.054 15.077 15.754 18.3 17.984 15.852 1.772 -13.042];
```

Требуется:

- аппроксимировать кубическим многочленом;
- вычислить значения найденного многочлена на интервале от 0.9 до 5.5 с шагом 0.1;
- построить график многочлена и экспериментальных точек в общих координатных осях.

3. Прогнозирование

Подгонка данных полиномом степени M



Какая подгонка лучше?

Какая из моделей лучше?

Надо выбрать ту из моделей, которая наилучшим образом подгоняет данные.

То есть ту, у которой наименьшая средняя ошибка (или наименьшая средняя квадратичная ошибка).

Зачем нужна модель?

Чтобы успешно предсказывать будущие наблюдения.

- то есть для **нового** значения x предсказать значение y с маленькой погрешностью.

Наилучшей будет та модель, которая лучше всех будет предсказывать, то есть описывать (подгонять) **новые** данные.

Отличие прогнозирования (регрессии) от аппроксимации:

- Аппроксимация подгоняет имеющиеся данные, регрессия — новые данные.

Переподгонка

Overfitting — чрезмерная подгонка или переобучение.
Использование чрезмерно сложной модели для описания данных.

Лирическое отступление

Портной научился хорошо шить костюмы для мистера Смита.
Пока он шьет для Смита — все идет хорошо.
Но если он будет шить для Джонса по мерке, снятой со Смита, результат может быть несколько хуже.

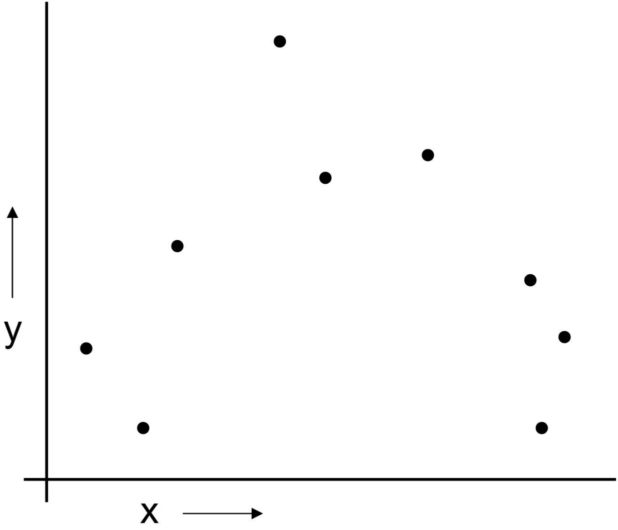
Проблема

- У нас нет будущих значений...

Решение

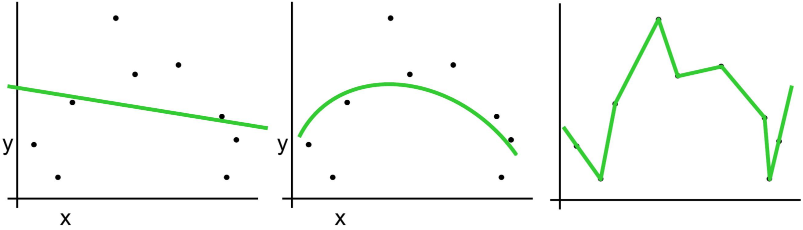
- Так сделаем их из прошлых!
- Отберем часть наблюдений и объявим их “будущими”.

Выбор наилучшего полинома для регрессии



Данные

Три варианта



Какой из трех вариантов лучше?

Метод тестового множества

Случайным образом выберем 30% всех наблюдений и назовем их **тестовой выборкой**.

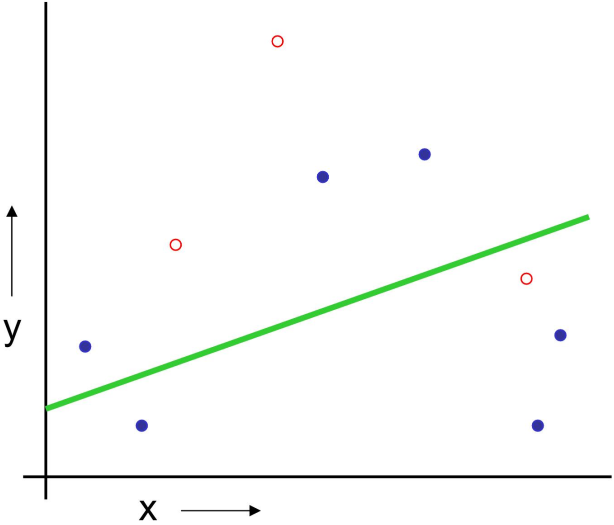
Остальные 70% наблюдений назовем **обучающей выборкой**.

- Обучающая выборка (training set) — имеющиеся наблюдения (образцы).
- Тестовая выборка (test set) — будущие наблюдения.

По наблюдениям из обучающей выборки построим модель.

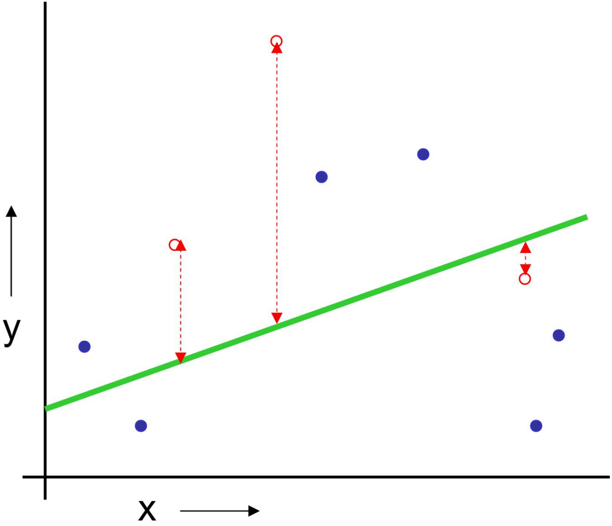
Проверим модель на тестовой выборке.

Обучающая и тестовая выборки

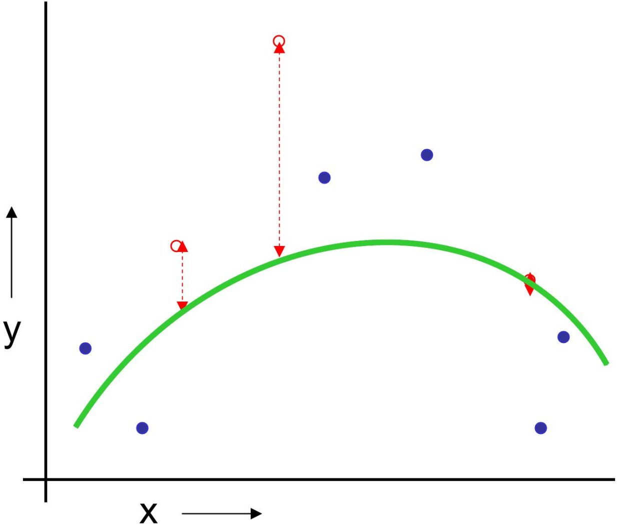


Линейная регрессия

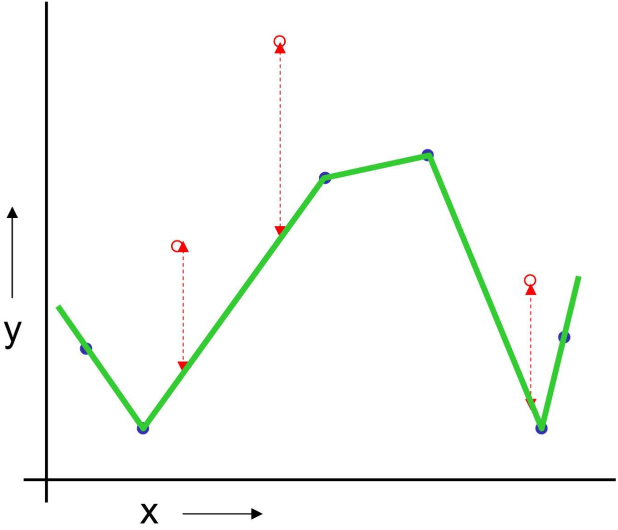
Проверка подгонки на тестовой выборке



Линейная регрессия, Mean Squared Error = 2.4



Квадратичная регрессия, MSE $= 0.9$



Линия по точкам, MSE = 2.2

Обсуждение метода тестового множества

Достоинства

- Понятен.
- Очень просто реализуется;

Недостатки

- Расточителен: при построении модели отбрасывается 30% данных
- Если данных мало, то как распределятся точки между обучающей и тестовой выборками? Дело случая. А это влияет на результат оценивания качества метода.

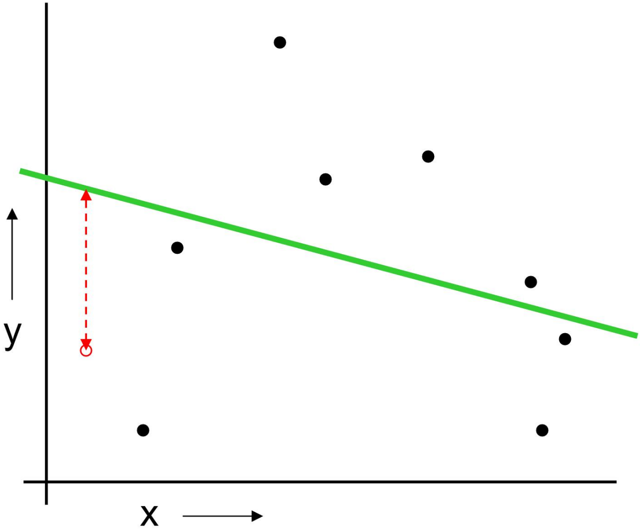
Другими словами: оценка качества модели с помощью тестового множества имеет большую дисперсию

Проверка посредством исключенных наблюдений (leave-one-out cross validation, LOOCV)

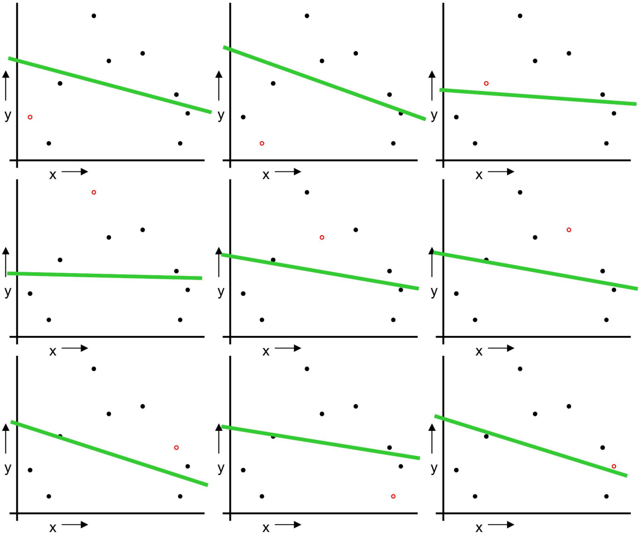
Пусть у нас имеется n точек (наблюдений).

- Предыдущую процедуру выполняем n раз.
- Но: тестовое множество теперь состоит из одной точки, каждый раз новой (обучающее множество состоит из оставшихся n-1 точек).
- За n шагов перебираем все точки множества. Каждый раз подсчитываем значение квадрата ошибки на тестовом наблюдении.
- Посчитаем среднее значение квадратов ошибок по всем n проверкам. Оно и даст нам оценку качества подгонки.

Линейная регрессия



Проверка для первой точки



LOOCV, MSE = 2.12

Средние значения квадратов ошибок

- Для линейной регрессии: MSE $= 2.12$
- Для квадратичной регрессии: MSE $= 0.962$
- Для линии, проведенной по точкам: MSE $= 3.33$

Сравнение методов

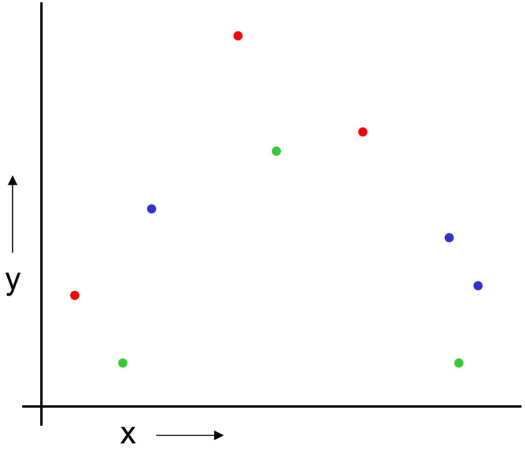
Метод исключенного наблюдения не расходует много данных.

Но: он требует больше вычислений.

Можно ли как-то объединить достоинства методов, сократив расходы на вычисления и более экономно расходуя имеющиеся данные?

k-кратная кросс-валидация (k-fold cross-validation)

Случайным образом разобьем выборку на k одинаковых частей.
В рассматриваемом примере k=3.

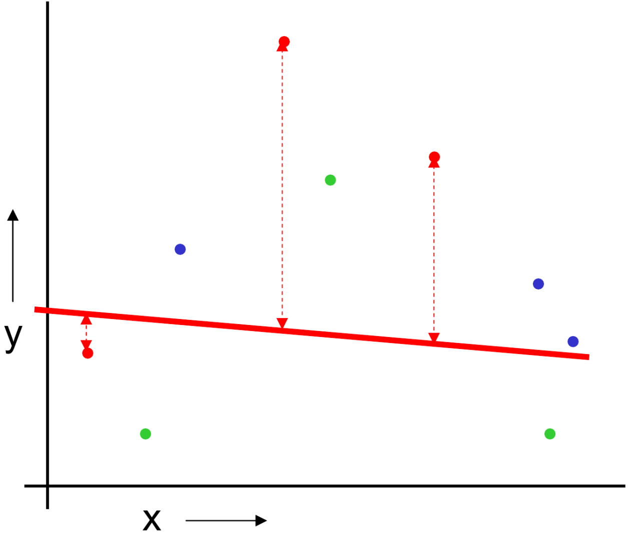


Точки из разных частей отмечены красным, синим и зеленым цветом.

Алгоритм

- Первая часть наблюдений (из k частей) — тестовая выборка.
- Все остальные наблюдения — обучающая выборка.
- Сосчитаем сумму квадратов ошибок для точек из тестового множества.

Линейная регрессия

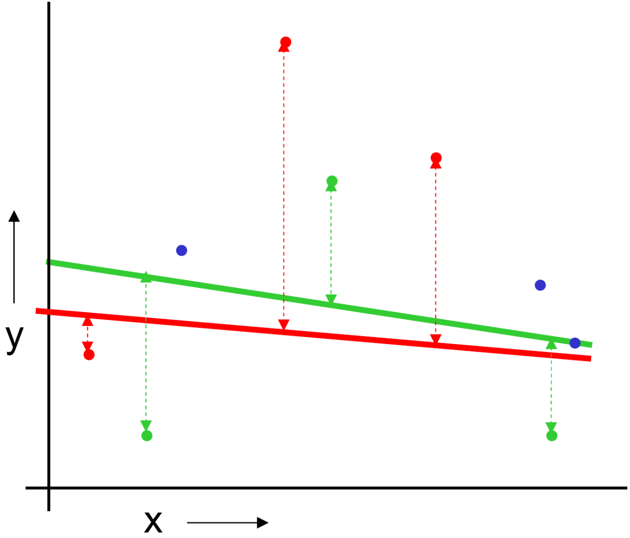


Для первой части выборки

Определяем обучающую выборку и тестовую выборку заново

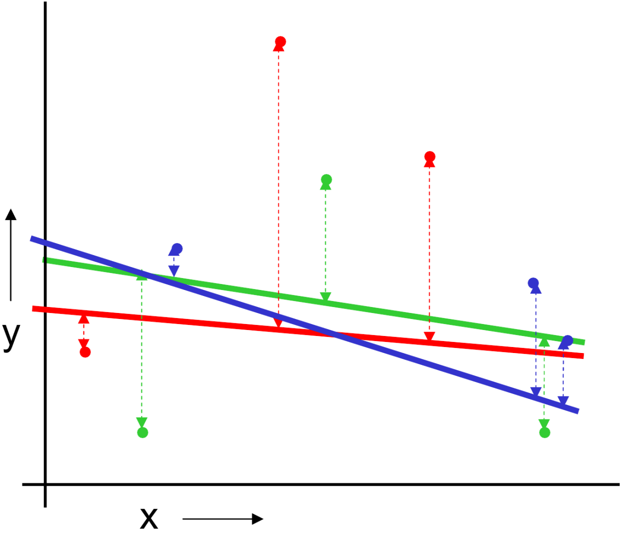
- Вторая часть – тестовая выборка.
- Все остальные наблюдения – обучающая выборка.
- Сосчитаем сумму квадратов ошибок для точек из тестового множества.

и т. д.



Для первой и второй частей выборки

Осталось сосчитать среднее значение квадратов ошибок



Линейная регрессия, MSE(3fold) = 2.05

Сравним результаты k-кратной кросс-валидации

- Для линейной регрессии: MSE $= 2.05$
- Для квадратичной регрессии: MSE $= 1.11$
- Для линии, проведенной по точкам: MSE $= 2.93$

Выбор метода кросс-валидации

- **3-кратная кросс-валидация:** чуть более экономна, чем метод тестового множества; требует немного больше вычислений.
- **10-кратная кросс-валидация:** исключает из обучения 10% данных, чем метод тестового множества; требует в 10 раз больше вычислений чем метод тестового множества, но меньше чем метод исключенного наблюдения.
- **n-кратная кросс-валидация:** совпадает с методом исключенного наблюдения (LOOCV).

Обычно выбираемые методы лежат в диапазоне от 10-кратной кросс-валидации до метода исключенного наблюдения.

Так как же выбрать значение k в методе kNN?

1. Вычислим методом LOOCV среднюю ошибку для моделей с разным значеним k
2. Выберем модель, давшую наименьшую ошибку, обучим ее на всем наборе данных и будем использовать для прогнозов.

Algorithm	TRAINERR	10-fold-CV-ERR	Choice
K=1			
K=2			
K=3			
K=4			⌧
K=5			
K=6			

Ссылки

- Поршнев С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. 2-е изд., испр. СПб.: Издательство «Лань», 2011. 736 с.
- Примеры по кросс-валидации заимствованы из "Cross-validation for detecting and preventing overfitting" Andrew W. Moore (www.cs.cmu.edu/~awm)