Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského, Bratislava

Projekt z lineárneho programovania
A04 - Predikcia kvality vín

Piati proti optimalizácii
Tomáš Antal, 2DAV, 0.2
Erik Božík, 2DAV, 0.2
Róbert Kendereš, 2DAV, 0.2
Teo Pazera, 2DAV, 0.2
Andrej Špitalský, 2DAV, 0.2

Obsah

0 Úvod **2**

1 Úloha A **3**
1.1 Minimalizovanie L^1 normy 3
1.1.1 Prípustnosť a optimalita 3
1.2 Minimalizovanie L^∞ normy 4
1.2.1 Prípustnosť a optimalita 5

2 Úloha B **6**
2.1 Prevedenie úlohy LP do tvaru pre `scipy.optimize.linprog` 6
2.2 Implementovanie regresných LP úloh 6

3 Úloha C **8**

4 Úloha D **10**

5 Úloha E **11**
5.1 Spracovanie všeobecnej triedy pre L^1 a L^∞ regresiu 11
5.2 Porovnanie použitia L^1 a L^∞ lineárnej regresie 12
5.2.1 Minimalizácia váženého súčtu 12
5.2.2 Implementácia `WeightedL1LInfModel` 13

6 Záver a diskusia **14**

7 Prehľad kódu **15**

0 Úvod

V našej práci sa budeme venovať implementácii lineárnej regresie ako úlohy lineárneho programovania. Lineárna regresia je spôsob odhadovania závislej premennej $y \in \mathbb{R}^n$ ako afinnej kombinácie nezávislých premenných $x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}^n$. Na meranie vzdialenosti medzi vektorom y a afinnej kombinácie budeme moužívať L^1 a L^∞ normy, keďže práve pre tie sa dá tento problém naformulovať ako LP úloha.

V kapitole 1 sa venujeme matematickej formulácii LP úlohy a dokazovaniu jej optimality. V kapitole 2 vizualizujeme funkčnosť modelu na arbitrárnych 2D dátach `A04plotregres.npz`. Následne, v kapitole 3 sa venujeme predikovaniu ceny vína podľa dátového súboru `A04wine.csv`. Pre tieto predikcie následne spočítame koeficient determinácie v 4. Na záver, sekcia 5 popisuje našu implementáciu L^1 a L^∞ regresii pre ľubovoľné dáta v programovacom jazyku `Python`. Tiež sa tam venujeme porovnávaniu správania takýchto regresii a formulácii a implementácii minimalizovania váženej sumy týchto noriem.

1 Úloha A

Máme dané vektory $y, x_1, x_2, \dots, x_k$. Chceme nájsť parametre $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ také, aby pre vektor $\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k$, boli normy $||y - \hat{y}||_1$ a $||y - \hat{y}||_\infty$ minimálne.

Vyjadrime vektor $\hat{y}$ ako súčin matice a vektora $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k)^T$.

$$\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k = \begin{pmatrix} | & | & | & & | \\ \mathbf{1}_n & x_1 & x_2 & \dots & x_k \\ | & | & | & & | \end{pmatrix} \beta =: \mathbf{A}\beta$$

1.1 Minimalizovanie L^1 normy

Prevedieme problém zo zadania do tvaru:

$$\begin{aligned} \text{min } & c^T x \\ & Ax \geq b \end{aligned}$$

Zaveďme si nový vektor premenných $t \in \mathbb{R}^n$, ktorým ohraničíme normu $||y - \mathbf{A}\beta||_1$.

$$-t \leq y - \mathbf{A}\beta \leq t$$

Pre obe ohraničenia, odseparujme premenné od konštánt a prevedieme do maticového tvaru.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} \mid \mathbb{I}_n \end{pmatrix} \left(\frac{\beta}{t} \right) \geq y$$
$$\begin{pmatrix} -\mathbf{A} \mid \mathbb{I}_n \end{pmatrix} \left(\frac{\beta}{t} \right) \geq -y$$

Minimalizovanie L^1 normy ako úloha lineárneho programovania vyzerá teda nasledovne.

$$\begin{aligned} \text{min } & \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{k+1}^T \mid \mathbf{1}_n^T \end{pmatrix} \left(\frac{\beta}{t} \right) \\ & \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbb{I}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbb{I}_n \end{array} \right) \left(\frac{\beta}{t} \right) \geq \left(\frac{y}{-y} \right) \\ & \beta \in \mathbb{R}^{k+1},\ t \geq \mathbf{0}_n \end{aligned} \tag{1}$$

1.1.1 Prípustnosť a optimalita

Dokážme, že (1) je úloha, ktorá nadobúda optimálne riešenie pre ľubovoľné vektory $y, x_1, x_2, \dots, x_k$. Nech $|y| := (|y_1|, |y_2|, \dots, |y_n|)^T$ pre $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$. Ukážme prípustnosť zvolením $\beta = \mathbf{0}_{k+1}$ a $t = |y|$:

$$\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbb{I}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbb{I}_n \end{array} \right) \left(\frac{\mathbf{0}_{k+1}}{|y|} \right) = \left(\frac{|y|}{|y|} \right) \geq \left(\frac{y}{-y} \right)$$
$$|y| \geq \mathbf{0}_n$$

Vidíme, že obe ohraničenia platia, čiže $\left(\mathbf{0}_{k+1}^T, |y|^T\right)^T$ je prípustné riešenie.

Optimalitu ukážeme zo silnej duality. Sformulujme duálnu úlohu pre duálne premenné $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}^n$:

$$
\begin{aligned}
\text{max} \; & \left(\; y^T \mid -y^T \; \right) \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \\
& \left(\; \mathbf{A}^T \mid -\mathbf{A}^T \; \right) \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) = \mathbf{0}_{k+1} \\
& \left(\; \mathbb{I}_n \mid \mathbb{I}_n \; \right) \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \leq \mathbf{1}_n \\
& \alpha_1, \alpha_2 \geq \mathbf{0}_n
\end{aligned}
$$

Vidíme, že táto úloha je prípustná pre $\alpha_1 = \alpha_2 = \mathbf{0}_n$. Z prípustnosti primárnej a duálnej úlohy teda vyplýva, že úloha (1) nadobúda optimálne riešenie pre ľubovoľnú voľbu počiatočných vektorov.

1.2 Minimalizovanie L^∞ normy

Budeme používať rovnaké značenie pre predikovaný vektor hodnôt $\hat{y} = \mathbf{A}\beta$ ako pri formulácii L^1 normy. Zaveďme si skalár $\gamma \in \mathbb{R}$, ktorým ohraničíme normu $||y - \mathbf{A}\beta||_\infty$.

$$
-\gamma \mathbf{1}_n \leq y - \mathbf{A}\beta \leq \gamma \mathbf{1}_n
$$

Pre jednotlivé ohraničenia odseparujeme premenné od konštánt a zapíšeme v maticovom tvare.

$$
\begin{aligned}
\left(\; \mathbf{A} \mid \mathbf{1}_n \; \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) &\geq y \\
\left(\; -\mathbf{A} \mid \mathbf{1}_n \; \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) &\geq -y
\end{aligned}
$$

Minimalizovanie L^∞ normy ako úloha lineárneho programovania vyzerá teda nasledovne.

$$
\begin{aligned}
\text{min} \; & \left(\; \mathbf{0}_{k+1}^T \mid 1 \; \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) \\
& \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{1}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbf{1}_n \end{array} \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) \geq \left(\frac{y}{-y} \right) \\
& \beta \in \mathbb{R}^{k+1}, \; \gamma \geq 0
\end{aligned}
\tag{2}
$$

1.2.1 Prípustnosť a optimalita

Podobný spôsobom ako vyššie ukážeme optimalitu (2). Nech $\beta = \mathbf{0}_{k+1}$ a $\gamma = |\tilde{y}|$, kde $|\tilde{y}| := |\max(y_1, y_2, \ldots, y_n)|$ pre $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T$:

$$\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{1}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbf{1}_n \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \mathbf{0}_{k+1} \\ \hline |\tilde{y}| \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} |\tilde{y}|\mathbf{1}_n \\ \hline |\tilde{y}|\mathbf{1}_n \end{array}\right) \geq \left(\begin{array}{c} y \\ \hline -y \end{array}\right)$$
$$|\tilde{y}| \geq 0$$

Obe ohraničenia platia, čiže $(\mathbf{0}_{k+1}^T, |\tilde{y}|)^T$ je prípustné riešenie. Sformulujme duálnu úlohu s duálnymi premennými $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned} \text{max} \; & \left(\, y^T \mid -y^T \, \right) \left(\begin{array}{c} \alpha_1 \\ \hline \alpha_2 \end{array}\right) \\ & \left(\, \mathbf{A}^T \mid -\mathbf{A}^T \, \right) \left(\begin{array}{c} \alpha_1 \\ \hline \alpha_2 \end{array}\right) = \mathbf{0}_{k+1} \\ & \left(\, \mathbf{1}_n^T \mid \mathbf{1}_n^T \, \right) \left(\begin{array}{c} \alpha_1 \\ \hline \alpha_2 \end{array}\right) \leq 1 \\ & \alpha_1, \alpha_2 \geq \mathbf{0}_n \end{aligned}$$

Rovnako vidíme, že táto úloha je prípustná pre $\alpha_1 = \alpha_2 = \mathbf{0}_n$. Teda, zo silnej duality, úloha (2) nadobúda optimálne riešenie pre ľubovoľnú voľbu počiatočných vektorov.

2 Úloha B

2.1 Prevedenie úlohy LP do tvaru pre `scipy.optimize.linprog`

Metóda `linprog` z modulu `scipy.optimize` vyžaduje nasledujúci tvar úlohy LP:

$$
\begin{aligned}
&\text{min } c^T x \\
&\quad A_{ub}x \leq b_{ub} \\
&\quad A_{eq}x \leq b_{eq} \\
&\quad l \leq x \leq u \qquad\qquad l, u \in (\mathbb{R} \cup \{\texttt{None}\})^n
\end{aligned}
$$

Hodnota `None` vo vektoroch $l,\ u$ značí neohraničenosť v danom smere. Upravme teda úlohy vyjadrené vyššie do predpísaného tvaru.

Pre L^1 regresiu:

$$
\begin{aligned}
&\text{min } \left(\mathbf{0}_{k+1}^T \mid \mathbf{1}_n^T \right) \left(\frac{\beta}{t} \right) \\
&\left(\begin{array}{c|c} -\mathbf{A} & -\mathbb{I}_n \\ \hline \mathbf{A} & -\mathbb{I}_n \end{array} \right) \left(\frac{\beta}{t} \right) \leq \left(\frac{-y}{y} \right) \\
&\texttt{None} \leq \beta_i \leq \texttt{None} \qquad\qquad i = 0, 1, \dots, k \\
&0 \leq t_j \leq \texttt{None} \qquad\qquad j = 1, \dots, n
\end{aligned}
$$

Pre L^∞ regresiu:

$$
\begin{aligned}
&\text{min } \left(\mathbf{0}_{k+1}^T \mid 1 \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) \\
&\left(\begin{array}{c|c} -\mathbf{A} & -\mathbf{1}_n \\ \hline \mathbf{A} & -\mathbf{1}_n \end{array} \right) \left(\frac{\beta}{\gamma} \right) \leq \left(\frac{-y}{y} \right) \\
&\texttt{None} \leq \beta_i \leq \texttt{None} \qquad\qquad i = 0, 1, \dots, k \\
&0 \leq \gamma \leq \texttt{None}
\end{aligned}
$$

Úlohy v zdrojovom kóde sú implementované práve v tomto tvare.

2.2 Implementovanie regresných LP úloh

Na implementáciu formulovaných LP úloh využívame tri knžnice:

- `numpy` - tvorenie matíc a vektorov, načítanie dát
- `scipy.optimize` - implementovaný LP solver
- `matplotlib.pyplot` na vykresľovanie grafov.

Dáta relevantné pre túto úlohu sú uložené v súbore `data/A04plotregres.npz`. Jedná sa o 16 bodov v $\mathbb{R}^2$, kde prvá súradnica reprezentuje nezávislú premennú (vektor týchto súradníc označíme `x`) a druhá závislú premennú (označíme `y`).

Vytvorme si potrebné štruktúry pre využitie metódy `scipy.optimize.linprog` pre LP formuláciu s L^1 normou:

```
c = np.array([0,0] + [1] * len(x)) #objective function vector, two zeros
                                    stand for betas
A = np.matrix([[1] * len(x), x]).transpose()
I = np.identity(len(x)) # Identity matrix

A_ub = np.block([[-A,-I], [A,-I]]) #creating a block matrix
b_ub = np.concatenate([-y, y]) #right side vector
bounds = [(None, None), (None, None)] + [(0, None) for _ in range(len(x)
                                   )] # bounds for variables
```

Pomocou solvera získame vektor optimálnych β koeficientov:

$$\beta_0^{(1)} \approx -9.8378, \ \beta_1^{(1)} \approx 2.1297$$

Podobne implementujeme L^∞ formuláciu:

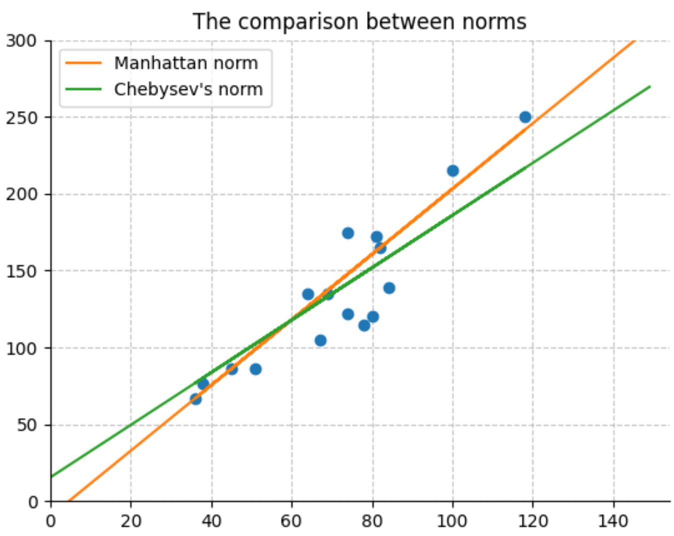
```
c_inf = np.array([0,0,1]) #objective function vector
A_inf = np.matrix([[1] * len(x), x]).transpose()
i_inf = np.array([[1] * len(x)]).transpose() # vector of ones

A_ub_inf = np.block([[-A_inf, -i_inf], [A_inf, -i_inf]]) # creating a
                                    block matrix
b_ub_inf = np.concatenate([-y, y])#right side vector
bounds = [(None, None), (None, None), (0, None)]
```

Znovu, pomocou solvera získame vektor optimálnych β koeficientov:

$$\beta_0^{(\infty)} \approx 15.4545, \ \beta_1^{(\infty)} \approx 1.7045$$

Pomocou získaných β koeficientov vykreslíme regresné priamky spolu s pôvodnými dátami.



3 Úloha C

V tejto úlohe sa snažíme predikovať kvalitu vína, inšpirovaní prístupom Orleya Ashenfeltera k predikcii cien vína z Bordeaux.

Využívame dáta zo súboru `A04wine.csv` a aplikujeme modely L^1 a L^∞ z úlohy A. Budeme využívať podobný postup ako v úlohe B. Na implementáciu formulovaných LP úloh využívame opäť:

- `pandas` - načítanie dát z `csv` súboru
- `numpy` - tvorenie matíc a vektorov
- `scipy.optimize` - implementovaný LP solver

Vyberieme z dát dané nezávislé premenné `x` a závislú premennú `y`:

```
y = data['Price']
x = data[['WinterRain','AGST', 'HarvestRain', 'Age', 'FrancePop']]
```

Z počtu nezávislých premenných získame rozmer vektora β (+1 kvôli konštantnému členu):

```
numberOfVariablesBeta = x.shape[1] + 1
```

Vytvoríme potrebné štruktúry pre zostavenie modelu normy L^1:

```
c = np.array([0]*numberOfVariablesBeta + [1] * len(x.values)) #
                                    Objective function coefficients

ALeft = np.matrix([ [1] * len(x.values)]).transpose() # Coefficients for
                                     beta0
ARigth = np.matrix(x.values) # Coefficients for other independent
                                    variables beta
A = np.block([ALeft, ARigth]) # Concenate coefficients of variables into
                                     one matrix

I = np.identity(len(x.values)) # Identity matrix for intercept term
```

Naformulujeme problém a vyriešime pomocou `scipy.optimize.linprog`

```
A_ub = np.block([[-A, -I], [A, -I]])
b_ub = np.concatenate([-y, y])

solve = linprog(c, A_ub, b_ub, bounds = [(None,None)]*
                                    numberOfVariablesBeta +[(0, None)])
```

Po vyriešení vyberieme z riešenia koeficienty:

```
betas = solve.x[:numberOfVariablesBeta]
```

Čo nám dá:

$$\beta_0^{(1)} \approx -8.8801 \cdot 10^{-1},\ \beta_1^{(1)} \approx 1.5793 \cdot 10^{-3},\ \beta_2^{(1)} \approx 5.2130 \cdot 10^{-1}$$
$$\beta_3^{(1)} \approx -4.5137 \cdot 10^{-3},\ \beta_4^{(1)} \approx 1.1300 \cdot 10^{-2},\ \beta_5^{(1)} \approx -2.2111 \cdot 10^{-5}$$

Z týchto výsledkov môžeme usúdiť, že najviac pozitívne vplýva na cenu vína metrika *AGST - Average growing season temperature* a najsignifikantnejší negatívny vplyv má *dážď počas zberu.*

Ďalej zostrojíme relevantné štruktúry a naformulujeme LP pre L^∞ normu:

```
c_inf = np.array([0]*numberOfVariablesBeta + [1]) # Koeficienty cielovej
                                                   funkcie
A_inf = np.block([ALeft, ARigth]) # Koeficienty pre nezavisle premenne
                                    pre l_inf normu
i_inf = np.array([ [1] * len(x.values)]).transpose() # Koeficienty pre
                                    intercept term pre l_inf normu

A_ub_inf = np.block([[-A_inf,-i_inf],[A_inf,-i_inf]])
b_ub_inf = np.concatenate([-y, y])
```

Vyriešime aj tento problém pomocou `scipy.optimize.linprog()` pre L^∞ normu a vyberieme β koeficienty:

```
solve_inf = linprog(c_inf, A_ub_inf, b_ub_inf, bounds=[(None,None)]*
                                    numberOfVariablesBeta+[(0,None)])
betas_inf = solve_inf.x[:numberOfVariablesBeta]
```

Po čom dostaneme:

$$\beta_0^{(\infty)} \approx 3.4841,\ \beta_1^{(\infty)} \approx 8.3399 \cdot 10^{-4},\ \beta_2^{(\infty)} \approx 6.0027 \cdot 10^{-1}$$
$$\beta_3^{(\infty)} \approx -3.3416 \cdot 10^{-3},\ \beta_4^{(\infty)} \approx -2.3036 \cdot 10^{-2},\ \beta_5^{(\infty)} \approx -1.1958 \cdot 10^{-4}$$

Vidíme, že aj regresia pomocou L^∞ normy odhaduje najväčší pozitívny vplyv metriky *AGST* a najväčší negatívny vplyv *dažďu počas zberu*. Zmenil sa však vplyv premennej *vek* (oproti prechádzajúceu modelu) z pozitívneho na negatívny.

4 Úloha D

Vytvorme funkciu `r_squared(x, y, beta)` - kde `x` je matica vektorov nezávislých premenných, `y` je vektor závislej premennej, `beta` je vektor optimálnych β koeficientov získaných regresiou - ktorá bude počítať R^2 koeficient podľa definície:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2} \qquad \hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k,\ \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

```
def r_squared(x: np.ndarray, y: np.ndarray, beta: np.ndarray) -> float:
  # calculate y-hat and mean of y vector
  y_hat = beta[0] + np.dot(x, beta[1:])
  y_mean = np.mean(y)

  res1 = 0    # partial result for the numerator in the formula
  res2 = 0    # partial result for the denominator in the formula

  # calculate the sums
  for i in range(len(y)):
    res1 += (y[i] - y_hat[i]) ** 2
    res2 += (y[i] - y_mean) ** 2

  # calculate the R^2 coefficient
  result = 1 - (res1 / res2)
  return result
```

Implementujeme metódu na dátach `A04wine.csv`. Načítame dáta pomocou `pandas.read_csv()`, rozdelíme ich do premenných (rovnako ako v predošlých úlohách):

```
  data = pd.read_csv('data/A04wine.csv')
  y = data['Price']
  x = data[['WinterRain', 'AGST', 'HarvestRain', 'Age', 'FrancePop']]
```

Podobne ako vyššie, vyriešime potrebné LP problémy pre načítané dáta a vypočítame R^2 koeficient:

```
  betas = solve.x[:numberOfVariablesBeta]
  betas_inf = solve_inf.x[:numberOfVariablesBeta]

  r_squared(x, y, betas)
  r_squared(x, y, betas_inf)
```

Vypočítané príslušné R-kvadráty teda sú:

$$R^2_{(1)} \approx 0.78813$$
$$R^2_{(\infty)} \approx 0.80649$$

Z toho môžeme usúdiť, že náš model sa dá považovať za relatívne vhodný pre tieto dáta. Tiež vidíme, že regresia pomocou Chebyshevovej normy lepšie zachytáva rozptyl dát.

5 Úloha E

5.1 Spracovanie všeobecnej triedy pre L^1 a L^∞ regresiu

Vypracovali sme modul `Model` pre počítanie L^1 a L^∞ regresie z ľubovoľných číselných dát, ktorý využíva LP formulácie popísané vyššie. Konkrétne `L1Model` využíva formuláciu na minimalizovanie L^1 normy a `LInfModel` minimalizuje L^∞ normu. Príklad použitia tohto modelu sa nachádza v `model_demonstration.ipynb` Následne opíšeme jednotlivé metódy jednotlivých modelov.

`Model.__init__(dependent_vect, independent_vect)`

Konštruktor triedy, spoločný pre oba modely, vytvorí inštanciu, ktorá si drží dáta a vie na nich vykonávať operácie popísané nižšie.
Argumenty:

- `dependent_vect:np.ndarray` - vektor závislých premenných
- `independent_vect:np.ndarray` - matica, ktorej riadky sú vektory nezávislých premenných

`Model.solve()`

Metóda, ktorá vyrieši regresnú LP úlohu na daných dátach. `L1Model.solve()` rieši minimalizáciou L^1 normy a `LInfModel.solve()`, rieši minimalizáciou L^∞ normy.
Vracia:

- `np.ndarray` - vektor optimálnych β premenných

Po zavolaní tejto metódy si inštancia uloží vektor optimálnych β premenných do atribútu `self._beta`, potrebné pre metódy popísané nižšie.

`Model.r2()`

Vypočíta R^2 koeficient pre dané dáta a vypočítaný vektor β.
Vracia:

- `float` - výsledný R^2 koeficient

`Model.visualize()`

Ak je počet nezávislých premenných 1 alebo 2, táto metóda vykreslí graf dát spolu s vypočítanou regresnou priamkou, resp. rovinou.
Vracia:

- `bool` - úspešnosť vizualizácie, kde `False` označuje, že nezávislých premenných je viac ako 2, čiže nie je možné vykresliť graf

5.2 Porovnanie použitia L^1 a L^∞ lineárnej regresie

Nasledujúca tvrdenia popisujú len naše pozorovania správania sa jednotlivých lineárnych regresii na genereovaných dátach

Vyššie v sekcii 1 sme ukázali, že implementácie lineárnej regresie pomocou merania vzdialenost L^1 a L^∞ normou majú optimálne riešenie, pre ľubovoľné vstupné dáta. Snažili sme sa odpozorovať, ako sa jednotlivé prístupy odlišujú pre nejaké konkrétne dáta.

V dátach, v ktorých je výrazná lineárna závislosť, minimalizovanie L^1 normy veľmi dobre zachytáva práve tento lineárny vzťah, aj v prítomnosti pdľahlých dát - outlierov. Toto správanie vie ale viesť aj k tzv. *overfittingu*. Model príliš tesne zachytáva takéto správanie, čo môže viesť k horším odhadom pre budúce pozorovania.

Na druhej strane minimalizovanie L^∞ normy je veľmi ovplyvňované outliermi. Aj pre „jasne“ lineárna dáta s nejakými chybnými pozorovaniami, tieto dátové body výrazne odklonia regresnú priamku/nadrovinu. Napriek tomu takýto odklon je menej výrazný, ako napríklad pri bežne používanej minimalizácii L^2 normy, čo môže byť dôvod pre používanie takejto lineárnej regresie pre dáta, kde očakávame veľa outlierov.

5.2.1 Minimalizácia váženého súčtu

Pre využitie potenciálu oboch (L^1 a L^∞) prístupov sme implementovali aj regresiu pomocou minimalizácie váženej sumy $\omega||y-\hat{y}||_1+(1-\omega)||y-\hat{y}||_\infty,\ \omega \in [0;1]$. Formulovaná LP úloha vyzerá nasledovne (značenie sme prebrali z (1) a (2)):

$$
\begin{aligned}
\text{min}\ & \left(\ \mathbf{0}_{k+1}^T \,\middle|\, \omega\mathbf{1}_n^T \,\middle|\, (1-\omega)\ \right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline t \\ \hline \gamma \end{pmatrix} \\
& \left(\begin{array}{c|c|c} \mathbf{A} & \mathbb{I}_n & \mathbf{0}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbb{I}_n & \mathbf{0}_n \\ \hline \mathbf{A} & \mathbf{0}_{n\times n} & \mathbf{1}_n \\ \hline -\mathbf{A} & \mathbf{0}_{n\times n} & \mathbf{1}_n \end{array}\right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline t \\ \hline \gamma \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} y \\ \hline -y \\ \hline y \\ \hline -y \end{pmatrix} \\
& \beta \in \mathbb{R}^{k+1},\ t \geq \mathbf{0}_n,\ \gamma \geq 0
\end{aligned}
$$

Podobným spôsobom ukážeme, že táto úloha nadobúda optimálne riešenie. Sformulujme duálnu úlohu:

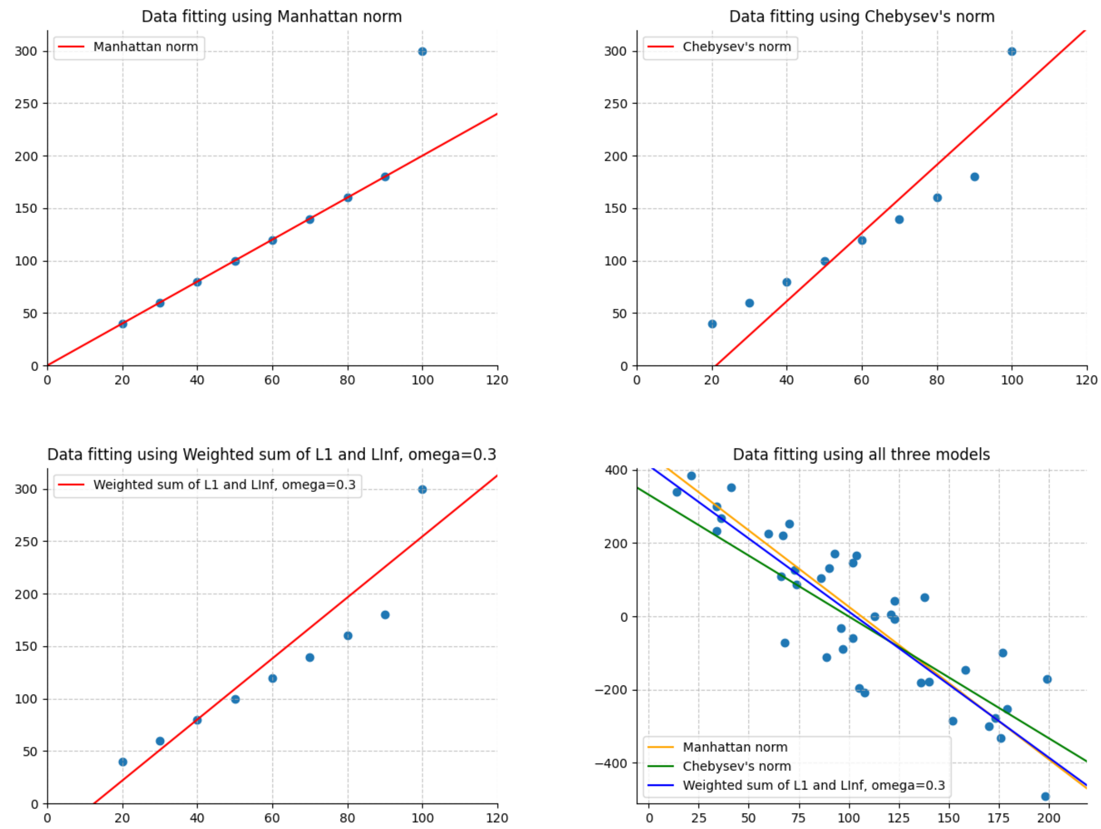
$$
\text{Nech } \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \hline \alpha_2 \\ \hline \alpha_3 \\ \hline \alpha_4 \end{pmatrix},\ \alpha_{1,2,3,4} \in \mathbb{R}^n
$$

$$
\begin{aligned}
\text{max}\ & \left(\ y^T \,\middle|\, -y^T \,\middle|\, y^T \,\middle|\, -y^T\ \right)\alpha \\
& \left(\ \mathbf{A}^T \,\middle|\, -\mathbf{A}^T \,\middle|\, \mathbf{A}^T \,\middle|\, -\mathbf{A}^T\ \right)\alpha = \mathbf{0}_{k+1} \\
& \left(\ \mathbb{I}_n \,\middle|\, \mathbb{I}_n \,\middle|\, \mathbf{0}_{n\times n} \,\middle|\, \mathbf{0}_{n\times n}\ \right)\alpha \leq \omega\mathbf{1}_n \\
& \left(\ \mathbf{0}_n^T \,\middle|\, \mathbf{0}_n^T \,\middle|\, \mathbf{1}_n^T \,\middle|\, \mathbf{1}_n^T\ \right)\alpha \leq 1-\omega \\
& \alpha \geq \mathbf{0}_{4n}
\end{aligned}
$$

Vidíme, že primárna úloha je prípustná pre $\beta = \mathbf{0}_{k+1},\ t = |y|,\ \gamma = |\hat{y}|$ (využitím značenia ako v 1.1.1 a 1.2.1) a duálna úloha je prípustná pre $\alpha = \mathbf{0}_{4n}$, teda zo silnej duality obe riešenia nadobúdajú optimálne riešenie.

5.2.2 Implementácia `WeightedL1LInfModel`

Takáto lineárna regresia je implementovaná v triede `WeightedL1LInfModel`. Jej používanie je rovnaké ako pri predchádzajúcich implementáciách. Jediná zmena je pre metódu `WeightedL1LInfModel.solve(omega)`, ktorá teraz očakáva parameter `omega : float` v intervale $[0; 1]$.



Porovnanie správania sa jednotlivých regresii, prvé tri grafy zobrazujú rovnaké lineárne dáta s jedným outlierom

6 Záver a diskusia

V našom projekte sme sa venovali matematickej formulácii a implementácii lineárnej regresie minimalizovaním L^1 a L^∞ noriem. Vizualizovali sme funkčnosť implementácie na dátach `A04plotregres.npz` a pre dáta `A04wine.csv` sme regresiou predikovali budúcu cenu vína a zisťovali sme, ktoré parametre na ňu najviac vplývajú. Takisto sme pre túto predikciu spočítali R^2 koeficient, ktorý ukázal relatívnu vhodnosť nášho modelu. Nakoniec sme predstavili implementáciu týchto regresných modelov v jazyku `Python` pre ľubovoľné číselné dáta a mierne sme analyzovali správanie sa jednotlivých modelov. Nakoniec sme aj sformulovali a implementovali model pre minimalizovanie váženej sumy noriem.

Myslíme si, že naše modely sú jednoduchým nástrojom pre počítanie lineárnej regresie. Ich výhody oproti klasickej L^2 lineárnej regresii spočívajú aj v ich robustnosti, čiže odľahlé dáta v nich majú menšiu váhu. Ako ďalšie pokračovanie projektu by sme mohli skúmať charakteristiky jednotlivých modelov a zistiť, pre aké dáta je lepšie použiť jednotlivé normy. Tiež by sme sa mohli zaoberať ich časovou komplexitou (napríklad aj v porovnaní s L^2 lineárnou regresiou) a všeobecnou interpretáciou výsledných β koeficientov pre oba prístupy.

7 Prehľad kódu

/
- code
  - data
    - A04plotregres.npz - arbitrárne 2D dáta využívané v 2
    - A04wines.csv - dátový súbor štatistík vín využívaný v 3 a 4
  - models
    - models.py - implementované triedy pre L^1 a L^∞ lineárnu regresiu
  - task_b.py - kód k sekcii 2
  - task_c.py - kód k sekcii 3
  - task_d.py - kód k sekcii 4
- report.pdf - report celého projektu