Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského, Bratislava

Projekt z lineárneho programovania
A04 – Predikcia kvality vína, lineárna regresia pomocou L^1 , L^∞

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

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 lineárnej kombinácie nezávislých premenných $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^n$ s pridaným skalárnym členom: $\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k$. Takýto problém môžeme interpretovať ako n pozorovaní, kde pre každé pozorovanie sledujeme k atribútov, čiže vektor x_i pre $i = 1, \ldots, k$ predstavuje dáta atribútu i pre všetkých n pozorovaní. Pomocou lineárnej funkcie týchto premenných sa budeme snažiť čo najlepšie predikovať atribút y.

Na meranie vzdialenosti medzi vektorom y a predikovaným vektorom $\hat{y}$ budeme používať L^1 a L^∞ normy, keďže práve pre tie sa dá tento problém naformulovať ako úloha lineárneho programovania. 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^∞ lineárnej regresie 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 Formulácia úloh lineárneho programovania

Máme dané vektory $y, x_1, x_2, \dots, x_k$. Chceme nájsť parametre $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ také, ktoré pre vektor $\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k$ minimalizujú normu $||y - \hat{y}||_1$, resp. normu $||y - \hat{y}||_\infty$.

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

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

1.1 Minimalizovanie L^1 normy

Prevedieme problém zo zadania do tvaru:

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

Zaveďme si nový vektor premenných $t \in \mathbb{R}^n$, ktorým ohraničíme vektor $y - \mathbf{A}\beta$. Úloha sa teda z minimalizovania normy $||y - \mathbf{A}\beta||_1$ prevedie na minimalizáciu $\mathbf{1}_n^T t$.

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

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

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

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

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

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 $t = |y|$:

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

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

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

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

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 skalárnu premennú $\gamma \in \mathbb{R}$, vektorom $\gamma\mathbf{1}_n$ ohraničíme vektor $y - \mathbf{A}\beta$. Úloha sa z minimalizácie $||y - \mathbf{A}\beta||_\infty$ prevedie na minimalizáciu γ.

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

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

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

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

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

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 $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T$:

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

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

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

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

2 Implementácia a grafické znázornenie

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

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

$$
\begin{aligned}
&\text{min } c^T x \\
&\quad A_{ub}x \le b_{ub} \\
&\quad A_{eq}x = b_{eq} \\
&\quad x \in [l, u] \qquad\qquad\qquad l \le u;\ l, u \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\})^n
\end{aligned}
$$

Hodnotami $-\infty$ a ∞ značíme neohraničenosť v danom smere, v zdrojovom kóde sa obe nahrádzajú hodnotou `None`. Upravme teda úlohy vyjadrené vyššie do predpísaného tvaru.

Pre L^1 lineárnu regresiu:

$$
\begin{aligned}
&\text{min } \left(\mathbf{0}_{k+1}^T \;\middle|\; \mathbf{1}_n^T \right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline t \end{pmatrix} \\
&\left(\begin{array}{c|c} -\mathbf{A} & -\mathbb{I}_n \\ \hline \mathbf{A} & -\mathbb{I}_n \end{array} \right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline t \end{pmatrix} \le \begin{pmatrix} -y \\ \hline y \end{pmatrix} \\
&\beta_i \in (-\infty, \infty) \qquad\qquad\qquad i = 0, 1, \ldots, k \\
&t_j \in [0, \infty) \qquad\qquad\qquad j = 1, \ldots, n
\end{aligned}
$$

Pre L^∞ lineárnu regresiu:

$$
\begin{aligned}
&\text{min } \left(\mathbf{0}_{k+1}^T \;\middle|\; 1 \right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline \gamma \end{pmatrix} \\
&\left(\begin{array}{c|c} -\mathbf{A} & -\mathbf{1}_n \\ \hline \mathbf{A} & -\mathbf{1}_n \end{array} \right) \begin{pmatrix} \beta \\ \hline \gamma \end{pmatrix} \le \begin{pmatrix} -y \\ \hline y \end{pmatrix} \\
&\beta_i \in (-\infty, \infty) \qquad\qquad\qquad i = 0, 1, \ldots, k \\
&\gamma \in [0, \infty)
\end{aligned}
$$

Úlohy v zdrojovom kóde sú implementované práve v tomto tvare.

2.2 Implementovanie LP úloh

Na implementáciu formulovaných LP úloh využívame tri knižnice:

- `numpy` - tvorenie matíc a vektorov, načítanie dát
- `scipy.optimize` - implementovaný LP solver
- `matplotlib.pyplot` - 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.concatenate(([0, 0], np.ones(len(x))))   # objective function
                                                  vector, zeros stand for betas
A = np.block([np.ones((len(x),1)), x[:,np.newaxis]]) # creating matrix A
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:

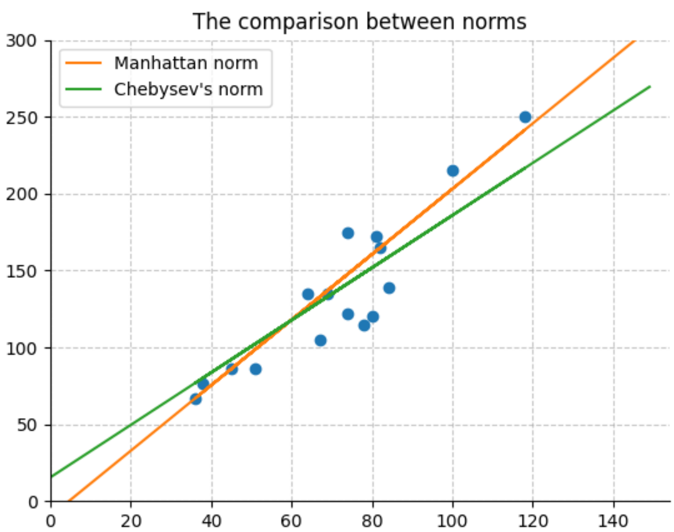
```
c_inf = np.array([0, 0, 1])        # objective function vector
A_inf = np.block([np.ones((len(x), 1)), x[:, np.newaxis]])
i_inf = np.ones((len(x), 1))     # vector of ones

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 Predikcia kvality vína

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^∞ lineárnej regresie z úlohy 1. Budeme využívať podobný postup ako v úlohe 2. Na implementáciu formulovaných LP úloh využívame:

- `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']]
# Calculate the number of variables (features)
k = x.shape[1]
```

Vytvoríme potrebné štruktúry pre zostavenie modelu normy L^1:

```
c = np.concatenate(([0]*(k + 1), np.ones(len(x.values)))) # Objective
                                        function coefficients (plus 1 for
                                        the intercept term)
A = np.block([np.ones((len(x.values), 1)), np.array(x.values)]) #
                                        Concatenate coefficients of
                                        variables into one matrix
```

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

```
# Formulate inequality constraints for L1 norm
A_ub = np.block([[-A, -I], [A, -I]])
b_ub = np.concatenate([-y, y])
bounds = [(None, None)]*(k + 1) +[(0, None)] * len(x.values)

solve = linprog(c, A_ub, b_ub, bounds=bounds)
```

Po vyriešení vyberieme z riešenia koeficienty, 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.concatenate(([0]*(k + 1), [1]))
A_inf = np.block([np.ones((len(x.values), 1)), np.array(x.values)]) #
                                        Coefficients for independent
                                        variables for L-inf norm
i_inf = np.ones((len(x.values), 1)) # Coefficients for gamma scalar
                                        variable

# Formulate inequality constraints for L-inf norm
A_ub_inf = np.block([[-A_inf, -i_inf], [A_inf, -i_inf]])
b_ub_inf = np.concatenate([-y, y])
bounds_inf = [(None, None)]*(k + 1) + [(0, None)]
```

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=bounds_inf)
```

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

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

4 Počítanie R^2

Teraz sa budeme venovať počítaniu koeficientu determinácie (tzv. R^2 koeficient) pre dáta a lineárnu regresiu z predošlej sekcie. R^2 koeficient hovorí o tom, aký podiel variability závislej premennej model zachytáva. Hodnoty v blízkosti 1 naznačujú „lepší“ model.

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 lineárnou 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] + 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
  res1 = np.sum((y - y_hat)**2)
  res2 = np.sum((y - y_mean)**2)

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

Implementujeme funkciu na dátach `A04wine.csv`. Načítame dáta, rozdelíme ich do jednotlivých premenných, vyriešime potrebné LP problémy (rovnako ako v predošlej úlohe) a vypočítame R^2 koeficient:

```
  betas = solve.x[:k+1]
  betas_inf = solve_inf.x[:k+1]

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

Vypočítané príslušné koeficienty determinácie 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 lineárna regresia pomocou Chebyshevovej normy lepšie zachytáva rozptyl dát.

5 Nadstavba

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

Vypracovali sme modul `Model` pre počítanie L^1 a L^∞ lineárnej regresie pre ľubovoľné číselné dáta, ktorý využíva LP formulácie popísané v sekciách 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 lineárnu 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

Nasledujúce tvrdenia popisujú len naše pozorovania správania sa jednotlivých lineárnych regresií na generovaných dátach

Vyššie v sekcii 1 sme ukázali, že implementácie lineárnej regresie pomocou merania vzdialenosti 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 odľahlých 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" lineárne dáta s nejakými chybnými pozorovaniami, tieto dátové body výrazne odklonia regresnú priamku/nadrovinu.

5.2.1 Minimalizácia váženého súčtu

Toto správanie L^∞ lineárnej regresie sa môžeme pokúsiť využiť na zníženie overfittingu L^1 lineárnej regresie. Jeden z možných prístupov môže byť napríklad 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)):

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

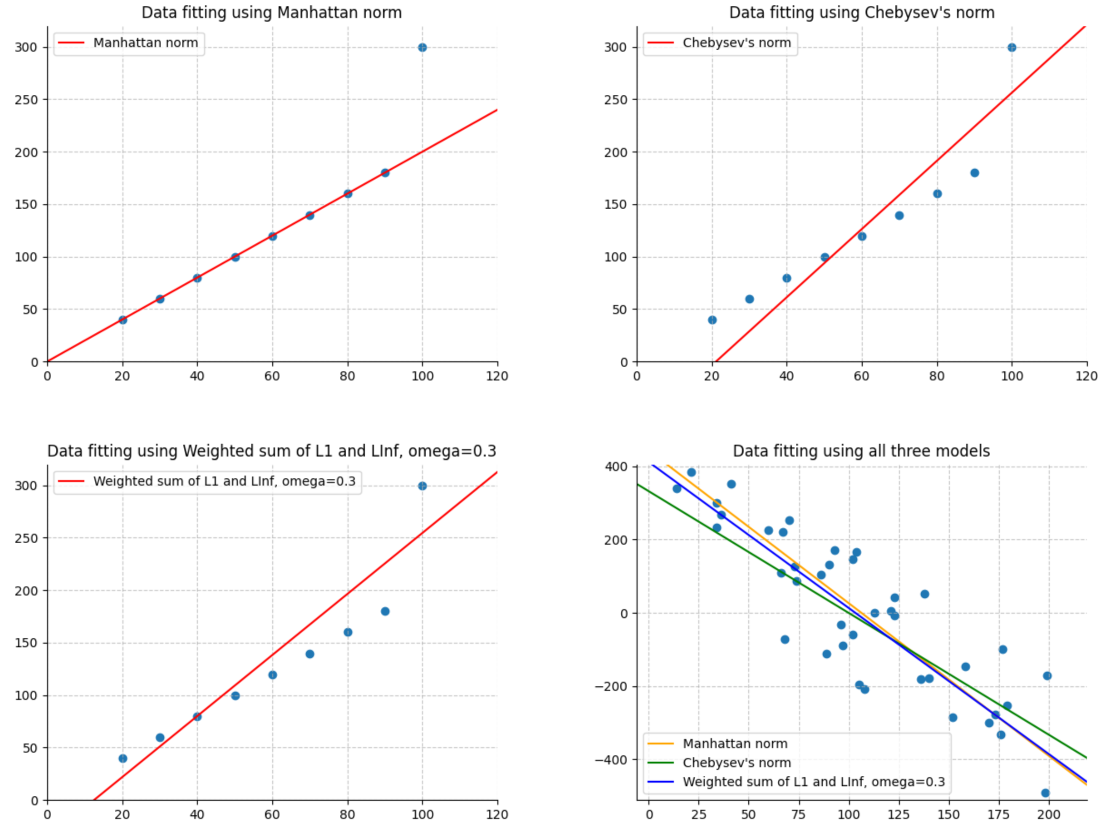
Podobným spôsobom ukážeme, že táto úloha nadobúda optimálne riešenie. Sformulujme duálnu úlohu:

$$\text{Nech } \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \hline \alpha_2 \\ \hline \alpha_3 \\ \hline \alpha_4 \end{pmatrix},\ \alpha_{1,2,3,4} \in \mathbb{R}^n$$
$$\text{max}\ \left(y^T \mid -y^T \mid y^T \mid -y^T \right) \alpha$$
$$\left(\mathbf{A}^T \mid -\mathbf{A}^T \mid \mathbf{A}^T \mid -\mathbf{A}^T \right) \alpha = \mathbf{0}_{k+1}$$
$$\left(\mathbb{I}_n \mid \mathbb{I}_n \mid \mathbf{0}_{n\times n} \mid \mathbf{0}_{n\times n} \right) \alpha \leq \omega \mathbf{1}_n$$
$$\left(\mathbf{0}_n^T \mid \mathbf{0}_n^T \mid \mathbf{1}_n^T \mid \mathbf{1}_n^T \right) \alpha \leq 1-\omega$$
$$\alpha \geq \mathbf{0}_{4n}$$

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 slabej duality, obe úlohy 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 očakáva parameter `omega:float`, pričom akceptuje iba `omega`$\in [0; 1]$.



Porovnanie správania sa jednotlivých lineárnych regresii, prvé tri grafy zobrazujú rovnaké lineárne dáta s jedným outlierom, štvrtý zobrazuje použitie všetkých troch lineárnych regresií na lineárnych dátach s náhodným šumom

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`. 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. 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
    │   └── DataGenerator.py - generátor 2D a 3D dát
    ├── implementation_and_visualization.py - kód k sekcii 2, úloha B
    ├── wine_price_prediction.py - kód k sekcii 3, úloha C
    ├── r_squared_coefficient.py - kód k sekcii 4, úloha D
    └── model_demonstration.ipynb - demonštrácia tried L1Model a LInfModel
└── report.pdf - report celého projektu
```