VL4: Lineare Regression als deterministisches Minimierungsproblem: L^1 und L^2 Regression in einer Dimension, Teil2: R-Beispiel

Beispiel: L^2- und L^1-Regression mit der R-Software: Gegeben seien n Datenpunkte

$$(x_1, y_1), \;\; (x_2, y_2), \;\; \cdots \;\; , \;\; (x_n, y_n) \; .$$

In der letzten Vorlesung hatten wir die folgenden Probleme betrachtet:

$$\textbf{(i)} \qquad F_{L^2}(\beta_0, \beta_1) \;\; := \;\; \sum_{i=1}^{n} \big[y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \big]^2 \;\; \stackrel{!}{\to} \;\; \min$$

$$\textbf{(ii)} \qquad F_{L^1}(\beta_0, \beta_1) \;\; := \;\; \sum_{i=1}^{n} \big| y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \big| \;\; \stackrel{!}{\to} \;\; \min$$

Dabei hatten wir gesehen, dass das Problem (i) explizit lösbar ist, β_0 und β_1 sind gegeben durch die Lösung des folgenden Gleichungssystems

$$A \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \;\; = \;\; b \tag{1}$$

mit

$$A \;\; = \;\; \begin{pmatrix} \vec{e} \cdot \vec{e} & \vec{e} \cdot \vec{x} \\ \vec{e} \cdot \vec{x} & \vec{x} \cdot \vec{x} \end{pmatrix} \; , \qquad b \;\; = \;\; \begin{pmatrix} \vec{e} \cdot \vec{y} \\ \vec{x} \cdot \vec{y} \end{pmatrix} \tag{2}$$

und den Abkürzungen $\vec{e} := (1, 1, 1, ..., 1, 1) \in \mathbb{R}^n$, $\vec{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$, $\vec{y} = (y_1, y_2, ..., y_n)$ und dem Standard-Skalarprodukt

$$\vec{x} \cdot \vec{y} \;\; = \;\; \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \; ,$$

also etwa $\vec{e} \cdot \vec{e} = \sum_{i=1}^{n} 1^2 \;\; = \;\; n$. Das Problem (ii) ist nicht explizit lösbar, aber wir hatten gesehen, dass die β's folgendes Gleichungssystem erfüllen müssen:

$$A_\varepsilon \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \;\; = \;\; b_\varepsilon \tag{3}$$

mit

$$A_\varepsilon \;\; := \;\; \begin{pmatrix} \langle \vec{e}, \vec{e} \rangle_\varepsilon & \langle \vec{e}, \vec{x} \rangle_\varepsilon \\ \langle \vec{e}, \vec{x} \rangle_\varepsilon & \langle \vec{x}, \vec{x} \rangle_\varepsilon \end{pmatrix} \; , \qquad b_\varepsilon \;\; = \;\; \begin{pmatrix} \langle \vec{e}, \vec{y} \rangle_\varepsilon \\ \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle_\varepsilon \end{pmatrix} \tag{4}$$

und

$$\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle_\varepsilon \;\; := \;\; \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i y_i}{\varepsilon_i}$$

wobei $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_n)$ mit

$$\varepsilon_i \;:=\; \big|y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\big| \;=\; \varepsilon_i(\beta_0, \beta_1)\,,$$

die epsilons hängen also auch von den β's ab. Starten Sie jetzt eine R-Session und führen Sie die folgenden Berechnungen durch:

a) Erzeugen Sie $n = 21$ Datenpunkte $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$, indem Sie etwa den folgenden Code eingeben,

```
x     = seq(from = -5, to = 5, by = 0.5)
n     = length(x)
noise = rnorm(n)
y     = 3 - 0.5 * x + noise
```

und schauen Sie sich die Daten dann mit dem Befehl `plot(x,y)` an.

b) Legen Sie die Funktionen F_{L^2} und F_{L^1} aus (i) und (ii) an, indem Sie etwa folgendes Code-Fragment verwenden,

```
FL2 = function(beta0, beta1)
  {
        res = sum( (y - beta0 - beta1 * x)^2 )
        return( res )
  }
```

und etwas analoges für die Funktion F_{L^1}.

c) Bevor wir die Gleichungssysteme $A\beta = b$ und $A_\varepsilon \beta = b_\varepsilon$ lösen, wollen wir das Minimum von F_{L^2} und F_{L^1} dadurch bestimmen, dass wir einfach verschiedene β's in die F's einsetzen und uns dann anschauen, wo die F's am kleinsten werden. Da wir die Minima in der Gegend von $(\beta_0, \beta_1) = (3, -0.5)$ erwarten, legen wir etwa folgende Test-Betas an:

```
beta0 = seq(from = 0, to = 6, by = 0.01)
beta1 = seq(from = -3, to = 3, by = 0.01)
```

Mit dem folgenden Code

```
n0 = length(beta0)
n1 = length(beta1)

matFL2 = matrix(0,n0,n1)
matFL1 = matrix(0,n0,n1)

for(i in 1:n0)
{
  for(j in 1:n1)
  {
    matFL2[i,j] = FL2(beta0[i],beta1[j])
    matFL1[i,j] = FL1(beta0[i],beta1[j])
  }
}

contour(beta0,beta1,matFL2)
contour(beta0,beta1,matFL2,nlevels=50)

contour(beta0,beta1,matFL1)
contour(beta0,beta1,matFL1,nlevels=50)
```

können Sie sich dann einen Überblick über die Funktionen F_{L^2} und F_{L^1} verschaffen.

d) Die Minima selber und die Werte von β_0 und β_1, an denen jeweils das Minimum angenommen wird, können Sie sich dann mit dem folgenden Code anschauen:

```
minFL2 = min(matFL2)
minFL1 = min(matFL1)
minFL2
minFL1

# find position in matrix where
# the minimum is attained:
indicesL2 = which(matFL2 == minFL2, arr.ind = TRUE)
indicesL2
indicesL2[1]
indicesL2[2]

# also:
beta0_L2min = beta0[ indicesL2[1] ]
beta0_L2min                          # sieht ok aus
beta1_L2min = beta1[ indicesL2[2] ]
beta1_L2min                          # sieht ok aus
```

Für die Zahlen `beta0_L1min` und `beta1_L1min` müssen Sie noch entsprechenden Code ergänzen.

Jetzt wollen wir die β's bestimmen, indem wir die Gleichungssysteme $A\beta = b$ und $A_\varepsilon\beta = b_\varepsilon$ lösen. Wir betrachten zunächst den L^2-Fall (i), für den wir β_0 und β_1 explizit berechnen können, indem wir das Gleichungssystem $A\beta = b$, gegeben in den Gleichungen (1) und (2) weiter oben, lösen:

e) Berechnen Sie die Skalarprodukte $\vec{e}\cdot\vec{e}$, $\vec{e}\cdot\vec{x}$, $\vec{x}\cdot\vec{x}$, $\vec{e}\cdot\vec{y}$ und $\vec{x}\cdot\vec{y}$ in R und legen Sie dann die Matrix A und den Vektor b an.

f) Das Gleichungssystem $A\beta = b$ können Sie dann etwa mit dem `solve()`-Befehl lösen. Finden Sie heraus, wie die genaue Syntax lautet. Vergleichen Sie dann Ihre Lösung mit den Zahlen `beta0_L2min` und `beta1_L2min` aus Teil (d). Ihre Lösung wird nicht ganz exakt mit den Zahlen aus (d) überein stimmen, warum nicht? Die Abweichungen sollten von der Grössenordnung 0.01 sein.

g) Im Falle der L^1-Regression müssen wir das Gleichungssystem gegeben durch (3) und (4) weiter oben lösen. Da die Matrix A_ε und der Vektor b_ε aber ebenfalls von den β's abhängen, ist durch $A_\varepsilon^{-1} b_\varepsilon$ keine explizite Lösung gegeben. Aber man kann folgende iterative Methode ausprobieren, um eine Lösung zu erhalten: Wir initialisieren

$$\beta^{(0)} = \begin{pmatrix} \beta_0^{(0)} \\ \beta_1^{(0)} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

und dann wenden wir etwa 100 Mal die Iteration

$$\beta^{(k+1)} = A^{-1}_{\varepsilon(\beta^{(k)})}\, b_{\varepsilon(\beta^{(k)})} \tag{6}$$

an. Programmieren Sie jetzt diese iterative Methode, indem Sie etwa folgendes Code-Fragment benutzen:

```
# L^1-Regression:

betas = c(0,0)
e = rep(1,n)
for(k in 1:100)
{
  eps = abs( y - betas[1] - betas[2]*x )
  eps = pmax( eps , 10^(-12) )
  ee = sum(e*e/eps)
  ex = sum(e*x/eps)
  xx = ...
  ...
  ...
  b = c(ey,..)
  a1 = c(ee,ex)
  a2 = ...
  A = rbind(a1,a2)
  betas = solve( ... )
  print(betas)
}
beta0 = betas[1]
beta1 = betas[2]
beta0
beta1
```

An den mit ... gekennzeichneten Stellen müssen Sie noch entsprechenden Code einfügen. Vergleichen Sie dann Ihre Lösung mit den Zahlen `beta0_L1min` und `beta1_L1min` aus Teil (d).

h) In dem obigen Code-Fragment haben wir den `pmax()`-Befehl benutzt, wieso? Informieren Sie sich mit `?pmax()` über diesen Befehl. Was ist der Unterschied zum `max()`-Befehl?

i) In R gibt es eine eingebaute Funktion, die die lineare Regression durchführt, genauer, die lineare L^2-Regression. Das ist die Funktion `lm()`. Dabei stehen die Buchstaben lm für "Linear Model". Das Problem (i) von oben können Sie damit einfach lösen, indem Sie den Befehl

```
lm( y ~ x )
```

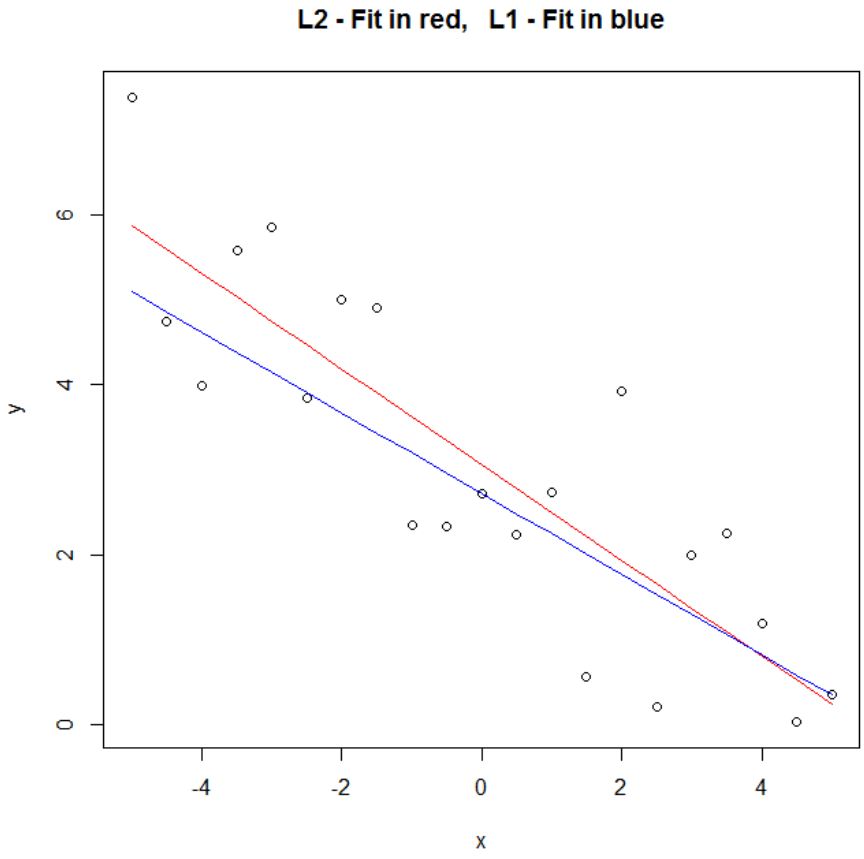
eingeben. Die Zahlen, die Sie so erhalten, sollten exakt mit der Lösung von $A\beta = b$ aus Teil (f) übereinstimmen. Geben Sie dann noch folgende Befehle ein, um sich etwas mit der `lm()`-Funktion vertraut zu machen:

```
res = lm( y ~ x )
res
summary(res)

names(res)
res$coef
res$fit

mode(res)
str(res)
```

j) Stellen Sie schliesslich den L^2-Regression-Fit und den L^1-Regression-Fit zusammen mit den Datenpunkten graphisch dar:



Wie bekommt man eine Überschrift "L^2-Fit in rot, L^1-Fit in blau" in das Plot-Fenster?