



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Ondřej Semela

Robustní optimalizace v klasifikačních a regresních úlohách

Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Jan Kalina, Ph.D.

Studijní program: Matematika

Studijní obor: Pravděpodobnost, matematická statistika
a ekonometrie

Praha 2016

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Název práce: Robustní optimalizace v klasifikačních a regresních úlohách

Autor: Ondřej Semela

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Jan Kalina, Ph.D., Ústav informatiky AV ČR, v.v.i.

Abstrakt: Předložená práce pojednává o vybraných metodách regresní a klasifikační analýzy z pohledu robustní optimalizace, jejímž cílem je vhodně zohlednit případné nepřesnosti v datech nebo chyby měření. V první části je představena metoda nejmenších čtverců a její zobecnění, které lze odvodit v kontextu robustní optimalizace – hřebenová regrese a metoda Lasso. Následně je ukázána souvislost mezi těmito zobecněními a metodou nejmenších čtverců v robustní optimalizaci. Teoretické výsledky doplňuje simulační studie zkoumající z různých hledisek robustnost jednotlivých metod. Ve druhé části práce je čtenář seznámen s jednou z moderních klasifikačních metod – metodou SVM. Získané poznatky jsou následně využity k vybudování metody SVM, která se uplatňuje v robustní klasifikaci. Závěrečná část je věnována aplikaci vyložené teorie na příkladu biometrické identifikace stylu psaní a osob podle dynamiky stisku počítačových kláves.

Klíčová slova: robustní optimalizace; hřebenová regrese; metoda Lasso; metoda SVM

Title: Robust optimization in classification and regression problems

Author: Ondřej Semela

Department: Department of Probability and Mathematical Statistics

Supervisor: RNDr. Jan Kalina, Ph.D., Institute of Computer Science CAS

Abstract: In this thesis, we present selected methods of regression and classification analysis in terms of robust optimization which aim to compensate for data imprecisions and measurement errors. In the first part, ordinary least squares method and its generalizations derived within the context of robust optimization – ridge regression and Lasso method are introduced. The connection between robust least squares and stated generalizations is also shown. Theoretical results are accompanied with simulation study investigating from a different perspective the robustness of stated methods. In the second part, we define a modern classification method – Support Vector Machines (SVM). Using the obtained knowledge, we formulate a robust SVM method, which can be applied in robust classification. The final part is devoted to the biometric identification of a style of typing and an individual based on keystroke dynamics using the formulated theory.

Keywords: robust optimization; ridge regression; Lasso method; Support Vector Machines (SVM)

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu mé diplomové práce RNDr. Janu Kalinovi, Ph.D. za množství podnětných rad, doporučení a čas, který mi věnoval během konzultací. Děkuji také Anně Schlenker za poskytnutá data a uvedení do problematiky, jichž se tato data týkají, a dále Daliboru Slovákovi a Veronice Janíkové za nalezené nejasnosti a překlepy v textu práce a poskytnutí výpočetní kapacity. V neposlední řadě děkuji své rodině a přátelům za podporu nejen při psaní této práce.

Obsah

Úvod	3
1 Regresní analýza	4
1.1 Úvodní poznámky	4
1.2 Metoda nejmenších čtverců	6
1.3 Regularizovaná regrese	7
1.3.1 Multikolinearita	7
1.3.2 Hřebenová regrese	9
1.3.3 Metoda Lasso	15
1.4 Metoda nejmenších čtverců v robustní optimalizaci	18
1.4.1 Koncept sdružených omezení	19
1.4.2 Koncept marginálních omezení	31
1.5 Simulační studie	34
1.5.1 Robustnost regresních metod v přítomnosti odlehlého pozorování	36
1.5.2 Robustnost regresních metod v přítomnosti chyb měření	39
1.5.3 Robustnost regresních metod v přítomnosti chyb měření a multikolinearity	41
2 Klasifikační analýza	44
2.1 Úvodní poznámky k metodě SVM	44
2.2 Lineární metoda SVM	46
2.2.1 Klasifikace lineárně oddělitelných tříd	46
2.2.2 Klasifikace lineárně neoddělitelných tříd	52
2.3 Nelineární metoda SVM	58
2.3.1 Jádrové funkce a Hilbertův prostor reprodukcí jádrových funkcí	60
2.3.2 Přesná klasifikace	66
2.3.3 Klasifikace s využitím penalizace	67
2.4 Metoda SVM v robustní klasifikaci	69
2.4.1 Lineární metoda SVM v robustní klasifikaci	70
2.4.2 Nelineární metoda SVM v robustní klasifikaci	73
2.5 Studie dynamiky stisku počítačových kláves	76
2.5.1 Identifikace stylu psaní	77
2.5.2 Identifikace osob	78
Závěr	80
A Pomocná tvrzení a definice	82

Seznam použité literatury	85
Seznam obrázků	90
Seznam tabulek	91

Úvod

Prudký rozmach digitalizace a obecně moderních technologií s sebou přináší obrovské množství nejruznějších dat, které je třeba analyzovat. Na základě těchto analýz poté vyvozujeme určité závěry a rozhodnutí. Reálná data ovšem často bývají zatížena chybami měření nebo jinými nepřesnostmi. Zanedbání i drobných nepřesností potom může vést k výrazně odlišné interpretaci a chybným rozhodnutím (viz např. Ben-Tal a kol. (2009)).

V regresní a klasifikační analýze se proto velké oblibě těší metody, které dokáží nalézt optimální řešení, které je v jistém smyslu necitlivé vůči (malým) změnám ve vstupních datech. Taková optimální řešení budeme v této práci nazývat robustní. Studium metod, které vedou k získání robustních optimálních řešení, se zabývá robustní optimalizace. Aby nedošlo k omylu, poznamenejme, že s pojmem robustnost se lze setkat v mnoha matematických disciplínách. Každá disciplína ovšem může tento pojem používat v odlišném významu.

Naším cílem je představit čtenáři některé z metod regresní a klasifikační analýzy formulované v kontextu robustní optimalizace a následně dokázat, že optimální řešení nalezená pomocí těchto metod jsou skutečně robustní. Samotná práce je rozdělena do dvou kapitol, z nichž v první kapitole se zabýváme regresní analýzou a ve druhé klasifikační analýzou.

V první kapitole ukazujeme souvislost mezi metodou nejmenších čtverců v robustní optimalizaci a hřebenovou regresí a metodou Lasso, které formulujeme jako robustní zobecnění metody nejmenších čtverců. Kromě teoretických výsledků je robustnost těchto zobecnění demonstrována na náhodně generovaných datech.

Ve druhé kapitole představujeme lineární verzi metody SVM a poté verzi nelineární, kterou odvodíme využitím teorie jádrových funkcí. Následně uvádíme metodu SVM, která nachází uplatnění v robustní klasifikaci. V závěrečné části aplikujeme uvedené metody na příkladu biometrické identifikace stylu psaní a osob podle dynamiky stisku počítačových kláves.

Kapitola 1

Regresní analýza

Pojem regrese použil jako první ve svých pracích britský učenec Francis Galton již před 130 lety (viz Galton (1886a) a Galton (1886b)). Zabýval se v nich zkoumáním závislosti průměrné výšky potomků na výšce rodičů. Mimo jiné vypořádal, že synové otců se stejnou nadprůměrnou výškou jsou sice v průměru vyšší než synové otců s průměrnou výškou, nicméně rozdíl těchto průměrných výšek synů je nižší než rozdíl průměrných výšek otců. Jedná se tedy o jakýsi „návrat (směřování) k průměru“.

Postupem let se pojem regrese (příp. také regresní analýza) ustálil jako souhrnné označení pro zkoumání závislosti mezi závisle proměnnou náhodnou veličinou (někdy též nazývanou odezva nebo vysvětlovaná proměnná) a jednou nebo více nezávislými (náhodnými) veličinami (nazývanými také jako prediktory, regresory nebo vysvětlující proměnné).

V první části této kapitoly se seznámíme s patrně nejznámější klasickou regresní metodou, která se nazývá metoda nejmenších čtverců. V navazující části představíme hřebenovou regresi a metodu Lasso, které spadají mezi metody tzv. regularizované regrese a které zobecňují metodu nejmenších čtverců. V závěrečné části ukážeme souvislost mezi metodou nejmenších čtverců v robustní optimalizaci a zmíněnými metodami regularizované regrese. Teoretické výsledky doplníme simulační studií, ve které budeme zkoumat robustnost jednotlivých metod.

Definice základních pojmů a obecně známé poznatky, které formulujeme v této kapitole, budeme přejímat z knih Anděl (2007) a Zvára (2008).

1.1 Úvodní poznámky

V této sekci představíme pojmy a značení, které budeme používat v následujících sekcích této kapitoly.

Uvažujme nekorelované náhodné veličiny $Y_1, \dots, Y_n, n \in \mathbb{N}$, které budou reprezentovat závisle proměnné, a vektory

$$\mathbf{x}_1 = (x_{1,1}, \dots, x_{1,p})^\top, \dots, \mathbf{x}_n = (x_{n,1}, \dots, x_{n,p})^\top,$$

kde $p \in \mathbb{N}$ a $x_{i,j}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, p$ jsou předem známé reálné konstanty. Jednotlivé složky těchto vektorů potom obsahují nezávisle proměnné. Rozdělení náhodné veličiny Y_i může (ale také nemusí) pro dané $i = 1, \dots, n$ záviset na

regresoru \mathbf{x}_i . Konečně necht' pro všechna i platí, že $\text{var } Y_i = \sigma^2$, kde $\sigma^2 > 0$ je neznámý parametr.

Zavedme značení:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_n = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

$$\mathbb{X} = \mathbb{X}_{n \times p} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^\top \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^\top \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ x_{n,1} & \cdots & x_{n,p} \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Nyní již můžeme zformulovat následující definici.

Definice 1.1 (Lineární model). Necht' \mathbf{Y} je náhodný vektor dimenze n definovaný předpisem (1.1) s varianční maticí $\text{var } \mathbf{Y} = \sigma^2 \mathbf{I}_n$, kde $\sigma^2 > 0$ je neznámý parametr. Dále necht' \mathbb{X} je matice známých reálných čísel typu $n \times p$ definovaná předpisem (1.2). Konečně necht' $n > p$ a pro hodnotu \mathbb{X} necht' platí $\text{rank}(\mathbb{X}) \leq p$.

Řekneme, že \mathbf{Y} se řídí lineárním modelem s maticí modelu \mathbb{X} (a píšeme $\mathbf{Y} \sim (\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$), pokud pro p -dimenzionální vektor $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^\top$ reálných konstant platí:

$$\mathbb{E} Y_i = \beta_1 x_{i,1} + \cdots + \beta_p x_{i,p} = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.3)$$

jinými slovy

$$\mathbb{E} \mathbf{Y} = \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}.$$

Pokud $\text{rank}(\mathbb{X}) = p$, hovoříme o lineárním modelu s plnou hodnotí.

Poznámka 1.2. Pro definici 1.1 platí:

- (i) Vektor $\boldsymbol{\beta}$ se nazývá vektor regresních koeficientů (nebo též vektor regresních parametrů). Parametr σ^2 , resp. σ , se nazývá reziduální rozptyl, resp. reziduální směrodatná odchylka.
- (ii) Rovnici (1.3) je možné nahradit rovnicí

$$\mathbf{Y} = \mathbb{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1.4)$$

kde $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)^\top$ je náhodný vektor splňující $\mathbb{E} \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$ a $\text{var} \boldsymbol{\varepsilon} = \sigma^2 \mathbf{I}_n$.

- (iii) Je-li $p = 2$, potom se jedná o úlohu jednoduché regrese, je-li $p > 2$, potom hovoříme o úloze vícenásobné regrese.
- (iv) Místo náhodného vektoru \mathbf{Y} lze coby odezvu uvažovat matici typu $n \times m$ (pro $m > 1$). V takovém případě potom mluvíme o úloze vícerozměrné regrese. Zájemcům o tuto problematiku lze doporučit např. knihu Christensen (2001).

Poznámka 1.3. Až doposud jsme předpokládali, že hodnoty $x_{i,j}, i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, p$, známe dříve, než realizace náhodných veličin Y_1, \dots, Y_n . Tento přístup se využívá např. pro experimenty v průmyslu nebo zemědělství.

V některých situacích je naopak výhodnější předpokládat, že regresory jsou náhodné veličiny. V takovém případě se potom zajímáme o podmíněnou střední hodnotu Y_i při daných hodnotách $\mathbf{X}_i = \mathbf{x}_i$.

1.2 Metoda nejmenších čtverců

Tato metoda původně vznikla pro eliminaci chyb v astronomických a geodetických měřeních. Postupem času našla uplatnění také v regresní analýze, ekonomii, při zpracování signálu a v mnoha dalších oblastech. Poprvé byla publikována v knize Legendre (1805). Velmi pravděpodobně nezávisle na této knize byla o několik let později publikována také v knize německého matematika a fyzika Carla Friedricha Gausse (viz Gauss (1809)).

Metodě nejmenších čtverců se někdy zkráceně říká metoda OLS (jedná se o zkratku anglického výrazu „ordinary least squares“). S využitím značení zavedeného v sekci 1.1 formulujeme metodu OLS jako následující optimalizační úlohu

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2, \quad (1.5)$$

kde $\|\cdot\|_2$ značí eukleidovskou normu na \mathbb{R}^n . Geometricky bychom mohli úlohu (1.5) interpretovat tak, že se snažíme nalézt vektor β takový, že součet vzdáleností bodů $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ od nadroviny definované předpisem $\beta^\top \mathbf{w} - \mathbf{Y} = 0$ (kde \mathbf{w} je nezávisle proměnná) je minimální.

Pokusme se nalézt analytické řešení optimalizační úlohy (1.5), které budeme značit $\hat{\beta}_{OLS}$. Jelikož nemáme žádné omezující podmínky, Lagrangeovu funkci lze ztotožnit s účelovou funkcí. Po úpravě platí, že

$$L(\beta) = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2 = (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta)^\top (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta) = \mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^\top \mathbb{X}\beta + \beta^\top \mathbb{X}^\top \mathbb{X}\beta.$$

Hessova matice (matice druhých partiálních derivací) funkce $L(\beta)$ je tvaru

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \beta \partial \beta^\top}(\beta) = 2\mathbb{X}^\top \mathbb{X},$$

což je pozitivně semidefinitní matice. Účelová funkce je tedy konvexní funkce a každé lokální minimum funkce $L(\beta)$ na \mathbb{R}^p je globálním minimem funkce $L(\beta)$ na \mathbb{R}^p . Podle nutné podmínky optimality musí platit

$$\frac{\partial L}{\partial \beta}(\beta) = \mathbf{0},$$

což je ekvivalentní soustavě lineárních rovnic

$$\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\beta = \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}. \quad (1.6)$$

Kombinací faktu, že soustava (1.6) je vždy řešitelná (neboť na obou stranách se vyskytuje nějaká lineární kombinace řádků matice \mathbb{X}), a věty A.3 aplikované na tuto soustavu dostáváme, že hledaný vektor $\hat{\beta}_{OLS}$ je dán předpisem

$$\hat{\beta}_{OLS} = (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^- \mathbb{X}^\top \mathbf{Y},$$

kde $(\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^-$ označuje nějakou pseudoinverzi matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ (viz definice A.1). Jedním z nejrozšířenějších zobecnění pseudoinverze je tzv. Mooreova–Penroseova pseudoinverze (viz definice A.4). Důvodem je fakt, že Mooreova–Penroseova pseudoinverze existuje pro libovolnou reálnou matici a navíc je určena jednoznačně.

Poznámka 1.4. (i) Soustava rovnic (1.6) se nazývá soustava normálních rovnic (příp. pouze normální rovnice).

(ii) Pokud se \mathbf{Y} řídí lineárním modelem s plnou hodnotí (tj. $\text{rank}(\mathbb{X}) = p < n$), je matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ regulární (a pozitivně definitní) a řešení optimalizační úlohy (1.5) má tvar

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} = (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}.$$

Pokud by čtenáře zajímal podrobnější popis metody OLS a případně její další vlastnosti, odkazujeme jej např. na knihu Zvára (2008, kapitola 2).

1.3 Regularizovaná regrese

V této sekci se zaměříme na hřebenovou regresi a metodu Lasso, které jsou zobecněním metody OLS. Motivací k jejich vzniku a rozvoji byla snaha překonat problémy způsobené multikolinearitou. Vysvětlení tohoto pojmu můžeme, spolu s informacemi, jak multikolinearitu rozpoznat a jaké problémy její přítomnost způsobuje, nalézt v následující podsekci.

1.3.1 Multikolinearita

Rozlišujeme dva typy multikolinearity. Prvním případem je tzv. perfektní multikolinearita, při které dochází k tomu, že sloupce regresní matice \mathbb{X} jsou lineárně závislé, a tedy $\text{rank}(\mathbb{X}) < p$. Tato situace nastane např. v případě, když uvažujeme velké množství regresorů a jeden z nich je omylem použit dvakrát.

Častějším případem, kterým se budeme zabývat ve zbytku této podsekcce, je případ (téměř) multikolinearity, kdy sloupce matice \mathbb{X} jsou sice lineárně nezávislé (tj. platí, že $\text{rank}(\mathbb{X}) = p$), ovšem v jistém slova smyslu je můžeme považovat za téměř lineárně závislé.

Vyjděme z následující věty, ve které můžeme nahlédnout vzorec k výpočtu střední hodnoty čtverce délky odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}$.

Věta 1.5. *Nechť $\mathbf{Y} \sim (\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$, $\text{rank}(\mathbb{X}) = p$ a $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} = (\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS,1}, \dots, \hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS,p})^\top$ nechť je optimální řešení úlohy (1.5). Potom*

$$E \|\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}\|_2^2 = \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \sigma^2 \text{tr} \left\{ (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \right\} = \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \sum_{i=1}^p \text{var} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS,i}, \quad (1.7)$$

kde $\text{tr} \left\{ (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \right\}$ označuje stopu matice $(\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1}$.

Důkaz. Viz Zvára (2008), věta 11.1. □

Uvažujme nyní SVD rozklad matice \mathbb{X} . Aplikací věty A.5 získáváme vyjádření

$$\mathbb{X} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^\top = \sum_{i=1}^p d_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top, \quad (1.8)$$

kde \mathbb{U} , resp. \mathbb{V} , je ortogonální matice řádu n , resp. řádu p , a

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \mathbb{D}_p \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

je matice typu $n \times p$, přičemž $\mathbb{D}_p = \text{diag}(d_1, \dots, d_p)$ a $d_1 \geq \dots \geq d_p > 0$ tvoří singulární čísla matice \mathbb{X} . Jsou-li sloupce matice \mathbb{X} téměř lineárně závislé, potom matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ je téměř singulární maticí a hodnota d_p^2 je blízko hodnotě 0.

S využitím rozkladu (1.8) a faktu, že \mathbb{U} je ortogonální matice, můžeme matici $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ vyjádřit ve tvaru

$$\mathbb{X}^\top \mathbb{X} = \mathbb{V} \mathbb{D}^\top \mathbb{D} \mathbb{V}^\top = \sum_{i=1}^p d_i^2 \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\top. \quad (1.9)$$

Připomeňme, že matice \mathbb{X} má plnou hodnost. To znamená, že matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ je regulární. S využitím znalosti rozkladu (1.9) můžeme vyjádřit inverzní matici pomocí výrazu

$$\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\right)^{-1} = \mathbb{V} \mathbb{D}_p^{-2} \mathbb{V}^\top = \sum_{i=1}^p \frac{1}{d_i^2} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\top.$$

Jelikož

$$\text{tr} \left\{ \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\top \right\} = \text{tr} \left\{ \mathbf{v}_i^\top \mathbf{v}_i \right\} = 1,$$

můžeme stopu matice $\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\right)^{-1}$ zapsat jako

$$\text{tr} \left\{ \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\right)^{-1} \right\} = \sum_{i=1}^p \frac{1}{d_i^2}. \quad (1.10)$$

Z rovností (1.7) a (1.10) získáváme vyjádření

$$\mathbb{E} \left\| \hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} \right\|_2^2 - \left\| \boldsymbol{\beta} \right\|_2^2 = \sum_{i=1}^p \text{var} \hat{\beta}_{OLS,i} = \sigma^2 \text{tr} \left\{ \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\right)^{-1} \right\} = \sigma^2 \sum_{i=1}^p \frac{1}{d_i^2}.$$

To tedy znamená, že multikolinearita způsobuje vysoké rozptyly odhadů jednotlivých regresních koeficientů. Někdy se může dokonce stát, že pro určité i z množiny $\{1, \dots, p\}$ je hodnota $\text{var} \hat{\beta}_{OLS,i}$ tak vysoká, že je tento odhad v praxi nepoužitelný. Další nepříjemnou vlastností je, že i drobná změna v datech může způsobit naprosto odlišné hodnoty jednotlivých odhadů (včetně změn znamének).

Jedním z nejčastěji používaných kritérií pro odhalení dvojice regresorů způsobujících multikolinearitu je velká absolutní hodnota výběrového korelačního koeficientu mezi danou dvojicí regresorů. Dalšími kritérii jsou např. hodnota inflačních čísel VIF (viz Kutner a kol. (2005, sekce 10.5)) nebo přímo statistické testy multikolinearity (viz Cipra (2008, poznámka 4.5.1 na str. 119)).

1.3.2 Hřebenová regrese

Tato metoda byla poprvé publikována v článku Hoerl (1962) a následně o několik let později došlo k jejímu rozpracování v člancích Hoerl a Kennard (1970a) a Hoerl a Kennard (1970b). Jak již bylo řečeno na začátku této sekce, hřebenová regrese je zobecněním metody OLS. Můžeme ji formulovat jako následující optimalizační úlohu

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_2^2 = \min_{\beta_1, \dots, \beta_p \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=1}^p x_{i,j} \beta_j \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p \beta_j^2, \quad (1.11)$$

kde $\lambda \geq 0$ je parametr. Podobně jako v případě metody OLS se snažíme minimalizovat součet čtverců odchylek $\mathbb{X}\beta$ od \mathbf{Y} , ovšem navíc uvažujeme penalizační člen $\lambda \|\beta\|_2^2$. Parametr λ potom udává velikost této penalizace, jinými slovy poměr mezi oběma minimalizovanými funkcemi. Povšimněme si, že pro hodnotu parametru $\lambda = 0$ se jedná o metodu OLS.

Lze dokázat, že optimalizační úloha (1.11) je ekvivalentní s optimalizační úlohou

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|\beta\|_2^2 \leq t, \end{aligned} \quad (1.12)$$

pokud $t = \|\beta^*\|_2^2$, kde β^* je optimální řešení úlohy (1.11). Hlavní kroky důkazu vychází z konceptu Karushových-Kuhnových-Tuckerových (zkráceně KKT) podmínek optimality (viz např. Bazaraa a kol. (2006, kapitola 4)). Podrobný důkaz ekvivalence pro obecnější situaci lze nalézt v článku Kloft a kol. (2009).

Jelikož optimalizační úloha (1.11) neobsahuje žádné omezující podmínky, lze Lagrangeovu funkci $L_1(\beta)$ ztotožnit s účelovou funkcí. Podle nutné podmínky optimality potom musí platit

$$\frac{\partial L_1}{\partial \beta}(\beta(\lambda)) = \mathbf{0}, \quad (1.13)$$

kde zápisem $\beta(\lambda)$ zdůrazňujeme, že optimální řešení závisí na hodnotě parametru λ .

Lagrangeova funkce příslušná optimalizační úloze (1.12) je dána předpisem

$$L_2(\beta, u) = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2 + u \left(\|\beta\|_2^2 - t \right), \quad u \geq 0$$

a KKT podmínky jsou potom tvaru

$$\frac{\partial L_2}{\partial \beta}(\beta, u) = \mathbf{0}, \quad (1.14)$$

$$\|\beta\|_2^2 - t \leq 0, \quad (1.15)$$

$$u \left(\|\beta\|_2^2 - t \right) = 0, \quad u \geq 0. \quad (1.16)$$

Soustava rovnic (1.14) odpovídá podmínce optimality, nerovnost (1.15) odpovídá podmínce přípustnosti a rovnice (1.16) odpovídá podmínce komplementarity. Účelová funkce optimalizační úlohy (1.12) i funkce objevující se v nerovnosti

(1.15) jsou konvexní, a tedy splnění KKT podmínek optimality je nutnou a zároveň postačující podmínkou pro existenci optimálního řešení.

Předpokládejme, že pro zvolené pevné λ je $\beta^*(\lambda)$ optimální řešení úlohy (1.11). Definujme $t := \|\beta^*(\lambda)\|_2^2$. Potom $u = \lambda$ a $\beta = \beta^*(\lambda)$ splňují KKT podmínky (1.14) a (1.16). To znamená, že každé optimální řešení úlohy (1.11) je také optimálním řešením úlohy (1.12).

Nyní uvažujme, že KKT bod optimalizační úlohy (1.12) je tvaru (β^*, u^*) . Položíme-li $\lambda = u^*$, potom $\beta(u^*) = \beta^*$ splňuje nutnou podmínku optimality (1.13), a tedy také každé optimální řešení úlohy (1.12) je optimálním řešením úlohy (1.11).

Tato ekvivalence zaručuje, že na hřebenovou regresi můžeme ekvivalentně nahlížet jako na minimalizaci součtu čtverců odchylek $\mathbb{X}\beta$ od \mathbf{Y} , zároveň ovšem povolujeme, aby druhá mocnina délky vektoru β byla nejvýše hodnota t .

Poznámka 1.6. (i) Pojmeme ekvivalence dvou optimalizačních úloh budeme v této práci rozumět situaci, kdy obě tyto úlohy mají shodné optimální řešení.

(ii) Zápis omezujících podmínek příslušné optimalizační úlohy budeme začínat zkratkou *s.t.*, což je zkratka anglického výrazu „subject to“, který se do češtiny překládá jako „za podmínek“.

Nyní se pokusme nalézt analytické řešení optimalizační úlohy (1.11). Toto řešení budeme značit $\hat{\beta}_{\text{ridge}}$ (pojem „ridge regression“ totiž v anglickém jazyce znamená hřebenová regrese).

Jak jsme si již všimli výše, Lagrangeovu funkci $L_1(\beta)$ můžeme ztotožnit s účelovou funkcí. Dále platí, že funkce $L_1(\beta)$ je konvexní. V sekci 1.2 jsme již ukázali, že funkce $\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2$ je konvexní. Dále triviálně platí, že funkce $\lambda\|\beta\|_2^2 = \lambda\sum_{j=1}^p \beta_j^2$ je taktéž konvexní (dokonce striktně konvexní) a součet konvexních funkcí je opět konvexní funkce. Tedy každé lokální minimum funkce $L_1(\beta)$ na \mathbb{R}^p je globálním minimum funkce $L_1(\beta)$ na \mathbb{R}^p .

Nutnou podmínku optimality, danou vztahem (1.13), můžeme vyjádřit jako

$$\mathbb{X}^\top \mathbb{X}\beta + \lambda\beta = \mathbb{X}^\top \mathbf{Y},$$

což můžeme vyjádřit jako soustavu lineárních rovnic

$$\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda\mathbf{I}_p\right)\beta = \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}. \quad (1.17)$$

Jelikož k diagonálním prvkům matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ přičítáme kladnou konstantu, matice $\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda\mathbf{I}_p\right)$ bude vždy regulární (dokonce i v případě, že $\mathbb{X}^\top \mathbb{X}$ je singulární matice, tj. v případě výskytu perfektní multikolinearity).

Proto $\hat{\beta}_{\text{ridge}}$ je dán předpisem

$$\hat{\beta}_{\text{ridge}} = \hat{\beta}_{\text{ridge}}(\lambda) = \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda\mathbf{I}_p\right)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}, \quad (1.18)$$

a tedy $\hat{\beta}_{\text{ridge}}$ je (podobně jako $\hat{\beta}_{\text{OLS}}$) lineární funkcí odezvy \mathbf{Y} .

Poznámka 1.7. (i) Z předpisu (1.18) můžeme nahlédnout, že pro hodnotu parametru $\lambda = 0$ platí, že $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$. Pokud naopak hodnota λ poroste nade všechny meze, platí zřejmě $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} = \mathbf{0}$. Pro parametr λ z intervalu $(0, \infty)$ se potom snažíme nalézt kompromis v tom, jak moc penalizovat délku vektoru regresních koeficientů.

- (ii) Pokud je hodnota parametru t z optimalizační úlohy (1.12) větší než hodnota $\|\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}\|_2^2$, potom zřejmě je $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$ optimálním řešením této úlohy.
- (iii) Jelikož penalizační člen je dán jako druhá mocnina délky vektoru $\boldsymbol{\beta}$, obsahujícího regresní koeficienty příslušné jednotlivým regresorům, zdá se rozumné požadovat, aby tyto nezávisle proměnné byly měřeny ve stejných jednotkách. Pokud tomu tak není, doporučuje se nejdříve provést standardizaci závisle proměnné a regresorů. To znamená, že místo vektoru \mathbf{Y} uvažujeme vektor \mathbf{Y}^* daný předpisem

$$\mathbf{Y}^* = \left(\frac{Y_1 - \bar{Y}}{T_Y}, \dots, \frac{Y_n - \bar{Y}}{T_Y} \right)^\top = \frac{1}{T_Y} (\mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1}_n), \quad (1.19)$$

kde

$$\begin{aligned} \bar{Y} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \\ T_Y &= \|\mathbf{Y} - \bar{Y} \mathbf{1}_n\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}, \\ \mathbf{1}_n &= (1, \dots, 1)^\top \end{aligned}$$

označují po řadě výběrový průměr, eukleidovskou normu centrované odezvy a vektor dimenze n . Místo matice \mathbb{X} se uvažuje matice \mathbb{X}^* daná předpisem

$$\mathbb{X}^* = \left(\frac{1}{T_1} (\mathbf{x}_1 - \bar{x}_1 \mathbf{1}_n), \dots, \frac{1}{T_p} (\mathbf{x}_p - \bar{x}_p \mathbf{1}_n) \right), \quad (1.20)$$

kde pro $k \in \{1, \dots, p\}$ je

$$\begin{aligned} \bar{x}_k &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{i,k}, \\ T_k &= \|\mathbf{x}_k - \bar{x}_k \mathbf{1}_n\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i,k} - \bar{x}_k)^2} \end{aligned}$$

výběrový průměr k -tého sloupce matice \mathbb{X} , resp. eukleidovská norma centrovaného k -tého sloupce matice \mathbb{X} .

Řešíme tedy optimalizační úlohu

$$\min_{\boldsymbol{\beta}^* \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y}^* - \mathbb{X}^* \boldsymbol{\beta}^*\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}^*\|_2^2,$$

kde $\lambda \geq 0$ je parametr. Optimální řešení označme jako

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}^* = \left(\hat{\beta}_{\text{ridge},1}^*, \dots, \hat{\beta}_{\text{ridge},p}^* \right)^\top.$$

Odhad

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} = \left(\hat{\beta}_{\text{ridge},1}, \dots, \hat{\beta}_{\text{ridge},p} \right)^\top$$

vektoru regresních koeficientů $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^\top$, příslušného původním nezávisle proměnným $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$, můžeme spočítat pomocí následujícího vzorce (viz Draper a Smith (1998, sekce 16.3 a sekce 17.2))

$$\hat{\beta}_{\text{ridge},k} = \hat{\beta}_{\text{ridge},k}^* \frac{T_Y}{T_k}, \quad k = 1, \dots, p. \quad (1.21)$$

(iv) Uvažujme nyní speciální případ lineárního modelu, a to lineární model s absolutním členem, tj. model, jenž je dán maticí

$$(\mathbf{1}_n, \mathbb{X}) = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{1,p} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \cdots & x_{n,p} \end{pmatrix}.$$

Pro tento speciální případ má optimalizační úloha (1.11) tvar

$$\min_{\beta_0 \in \mathbb{R}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - (\beta_0 \mathbf{1}_n + \mathbb{X}\boldsymbol{\beta})\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2. \quad (1.22)$$

Povšimněme si, že se v penalizačním členu neuvažuje regresní parametr příslušný absolutnímu členu. Obvykle se postupuje níže uvedeným způsobem:

Nejdříve se provede standardizace závisle proměnné \mathbf{Y} a nezávisle proměnných $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$ a získáme tak novou odezvu \mathbf{Y}^* a novou matici modelu

$$(\mathbf{1}_n, \mathbb{X}^*) = \left(\mathbf{1}_n, \frac{1}{T_1} (\mathbf{x}_1 - \bar{x}_1 \mathbf{1}_n), \dots, \frac{1}{T_p} (\mathbf{x}_p - \bar{x}_p \mathbf{1}_n) \right).$$

Po standardizaci proměnných se od optimalizační úlohy (1.22) přechází k optimalizační úloze tvaru

$$\min_{\boldsymbol{\beta}^* \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y}^* - \mathbb{X}^* \boldsymbol{\beta}^*\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}^*\|_2^2.$$

Vyřešením této úlohy získáme odhad

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}^* = \left(\hat{\beta}_{\text{ridge},1}^*, \dots, \hat{\beta}_{\text{ridge},p}^* \right)^\top$$

vektoru regresních parametrů $(\beta_1^*, \dots, \beta_p^*)^\top$. Nás ale především zajímá odhad

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} = \left(\hat{\beta}_{\text{ridge},0}, \hat{\beta}_{\text{ridge},1}, \dots, \hat{\beta}_{\text{ridge},p} \right)^\top$$

vektoru regresních koeficientů $\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p)^\top$, příslušného absolutnímu členu a původním nezávisle proměnným $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$. Podle vzorce (1.21) můžeme spočítat odhady $\hat{\beta}_{\text{ridge},1}, \dots, \hat{\beta}_{\text{ridge},p}$. Odhad $\hat{\beta}_{\text{ridge},0}$ dopočteme podle následujícího vzorce

$$\hat{\beta}_{\text{ridge},0} = \bar{Y} - \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_{\text{ridge},i}^* \bar{x}_i.$$

Nyní vyvstává otázka, jak zvolit hodnotu parametru λ . V článku Hoerl a Kennard (1970b) doporučují autoři volit hodnotu λ na základě vizuální kontroly grafu, který nazývají hřebenová stopa. V něm jsou vykresleny hodnoty složek odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}(\lambda)$ jako funkce λ .

Jako optimální hodnotu λ doporučují volit takovou (co možná nejmenší) hodnotu, při které došlo k ustálení hodnot složek $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}(\lambda)$ a od níž dále jsou tyto hodnoty (alespoň přibližně) konstantní.

Pokud bychom se nechtěli spoléhat pouze na značně subjektivní vizuální kontrolu hřebenové stopy, lze hledat vhodnou hodnotu λ křížovou validací. Existuje také velké množství iterativních procedur (viz např. Brown (2002, sekce 4.4)).

Na závěr této podsekcce ještě uvedme některá zajímavá srovnání plynoucí z vlastností odhadů $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}$ a $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$. Platí, že odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}$ může být vyjádřen pomocí odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$. Je totiž

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} &= (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y} = \\ &= (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \left((\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y} \right) = \\ &= (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}} = \left(\mathbf{I}_p + \lambda (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \right)^{-1} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$ je nestranným odhadem vektoru $\boldsymbol{\beta}$, neboť

$$\mathbf{E} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}} = \mathbf{E} \left((\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y} \right) = (\mathbb{X}^\top \mathbb{X})^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}.$$

Naproti tomu z vyjádření (1.23) je zřejmé, že odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}$ je vychýleným odhadem $\boldsymbol{\beta}$ a pro jeho vychýlení platí

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \left(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}} - \boldsymbol{\beta} \right) &= (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta} = \left((\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} - \mathbf{I}_p \right) \boldsymbol{\beta} = \\ &= \left((\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} - (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p) \right) \boldsymbol{\beta} = \\ &= (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} - \mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p) \boldsymbol{\beta} = \\ &= -\lambda (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}. \end{aligned}$$

V následující větě si ovšem ukážeme, že ve smyslu střední kvadratické chyby MSE (viz definice A.7) je pro určité hodnoty λ odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ridge}}(\lambda)$ vždy lepší než odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$.

Věta 1.8. Necht $\mathbf{Y} \sim (\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{I}_n)$. Potom pro $0 < \lambda < 2\sigma^2/\|\boldsymbol{\beta}^*\|_2^2$ platí

$$MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}) > MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)),$$

tj. $MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}) - MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda))$ je pozitivně definitní matice.

Důkaz. Z důvodu větší přehlednosti označme $\mathbb{A}_\lambda = (\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + \lambda\mathbf{I}_p)^{-1}$. Počítejme nejdříve střední kvadratickou chybu odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)$

$$\begin{aligned} MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)) &= \\ &= \text{var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)) + (\mathbf{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)) - \boldsymbol{\beta})(\mathbf{E}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)) - \boldsymbol{\beta})^\top = \\ &= \text{var}(\mathbb{A}_\lambda\mathbb{X}^\top\mathbf{Y}) + \lambda^2\mathbb{A}_\lambda\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top\mathbb{A}_\lambda^\top = \\ &= \mathbb{A}_\lambda\mathbb{X}^\top\text{var}(\mathbf{Y})\mathbb{X}\mathbb{A}_\lambda^\top + \lambda^2\mathbb{A}_\lambda\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top\mathbb{A}_\lambda^\top = \\ &= \sigma^2\mathbb{A}_\lambda\mathbb{X}^\top\mathbb{X}\mathbb{A}_\lambda^\top + \lambda^2\mathbb{A}_\lambda\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top\mathbb{A}_\lambda^\top = \\ &= \mathbb{A}_\lambda(\sigma^2\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + \lambda^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top)\mathbb{A}_\lambda^\top. \end{aligned}$$

Nyní spočtěme střední kvadratickou chybu odhadu $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}$

$$\begin{aligned} MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}) &= \mathbf{E}\left((\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} - \boldsymbol{\beta})(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS} - \boldsymbol{\beta})^\top\right) = \\ &= \text{var}\left((\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^\top\mathbf{Y}\right) = (\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\mathbb{X}^\top\text{var}(\mathbf{Y})\mathbb{X}(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1} = \\ &= \sigma^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1} = \sigma^2\mathbb{A}_\lambda\mathbb{A}_\lambda^{-1}(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\mathbb{A}_\lambda^{-1}\mathbb{A}_\lambda = \\ &= \mathbb{A}_\lambda\left(\sigma^2\mathbb{A}_\lambda^{-1}(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\mathbb{A}_\lambda^{-1}\right)\mathbb{A}_\lambda = \\ &= \mathbb{A}_\lambda\sigma^2\left(\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + 2\lambda\mathbf{I}_p + \lambda^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\right)\mathbb{A}_\lambda = \\ &= \mathbb{A}_\lambda\left(\sigma^2\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + 2\sigma^2\lambda\mathbf{I}_p + \sigma^2\lambda^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\right)\mathbb{A}_\lambda. \end{aligned}$$

Uvědomme si ještě, že platí $\mathbb{A}_\lambda = \mathbb{A}_\lambda^\top$, a potom tedy

$$\begin{aligned} MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}) - MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda)) &= \\ &= \mathbb{A}_\lambda\left(\sigma^2\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + 2\sigma^2\lambda\mathbf{I}_p + \sigma^2\lambda^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}\right)\mathbb{A}_\lambda^\top - \\ &\quad - \mathbb{A}_\lambda\left(\sigma^2\mathbb{X}^\top\mathbb{X} + \lambda^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top\right)\mathbb{A}_\lambda^\top = \\ &= \mathbb{A}_\lambda\left(2\sigma^2\lambda\mathbf{I}_p + \sigma^2\lambda^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1} - \lambda^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top\right)\mathbb{A}_\lambda^\top. \end{aligned}$$

Víme, že matice $\sigma^2\lambda^2(\mathbb{X}^\top\mathbb{X})^{-1}$ je pozitivně semidefinitní. Pokud tedy matice

$$2\sigma^2\lambda\mathbf{I}_p - \lambda^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top \tag{1.24}$$

bude pozitivně definitní, potom také matice $MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{OLS}) - MSE(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{ridge}(\lambda))$ bude pozitivně definitní.

Matice daná předpisem (1.24) je pozitivně definitní právě tehdy, když

$$2\sigma^2\lambda\mathbf{I}_p - \lambda^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top > 0,$$

což je ekvivalentní s nerovností

$$\frac{2\sigma^2}{\lambda}\mathbf{I}_p - \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^\top > 0, \quad (1.25)$$

neboť předpokládáme, že $\lambda > 0$. Použijeme lemma A.8 (pro $c := 2\sigma^2/\lambda$, $\mathbb{A} := \mathbf{I}_p$ a $\mathbf{b} := \boldsymbol{\beta}$) a vidíme, že výraz (1.25) je ekvivalentní výrazu

$$\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{I}_p^{-1} \boldsymbol{\beta} = \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 < 2\sigma^2/\lambda,$$

což je ekvivalentní s nerovností

$$\lambda < \frac{2\sigma^2}{\|\boldsymbol{\beta}^*\|_2^2}.$$

Platnost této nerovnosti požadujeme v předpokladech této věty. □

1.3.3 Metoda Lasso

Tato metoda, jejíž název je akronymem anglického výrazu „Least Absolute Shrinkage and Selection Operator“, byla poprvé publikována v článku Tibshirani (1996). Formulujeme ji jako následující optimalizační úlohu

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1 = \min_{\beta_1, \dots, \beta_p \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=1}^p x_{i,j} \beta_j \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|, \quad (1.26)$$

kde $\lambda \geq 0$ je parametr. Všimněme si podobnosti s optimalizační úlohou (1.11). Stejně jako v případě hřebenové regrese se tedy snažíme minimalizovat součet čtverců odchylek $\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}$ od \mathbf{Y} , ovšem penalizační člen je nyní tvaru $\lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1$. Parametr λ opět udává velikost této penalizace a pokud je jeho hodnota nulová, jedná se o metodu OLS.

Lze ukázat, že optimalizační úloha (1.26) je ekvivalentní s optimalizační úlohou

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|\boldsymbol{\beta}\|_1 \leq t, \end{aligned} \quad (1.27)$$

pokud $t = \|\boldsymbol{\beta}^*\|_1$, kde $\boldsymbol{\beta}^*$ je optimální řešení úlohy (1.26). Analogicky jako v případě ekvivalence optimalizačních úloh (1.11) a (1.12) vychází hlavní kroky důkazu z konceptu KKT podmínek optimality. Pro podrobný důkaz odkazujeme čtenáře na článek Osborne a kol. (2000b).

Optimalizační úlohy (1.26) a (1.27) jsou úlohami kvadratického programování. Na rozdíl od hřebenové regrese ale (pro obecně zadanou matici \mathbb{X}) neexistuje jejich analytické řešení. Existuje proto množství algoritmů, které se iterativně snaží nalézt optimální řešení. Jedním z nejefektivnějších je např. LARS (akronym anglického výrazu „Least angle regression“) algoritmus (viz Efron a kol. (2004)) nebo tzv. „homotopy algorithm“ (viz Osborne a kol. (2000a)).

Ukážeme, že ve speciálním případě, když je matice \mathbb{X} ortogonální (tj. platí-li $\mathbb{X}^\top \mathbb{X} = \mathbf{I}_p$), existuje analytické řešení optimalizační úlohy (1.26). Toto řešení budeme značit

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{Lasso}} = \left(\hat{\beta}_{\text{Lasso},1}, \dots, \hat{\beta}_{\text{Lasso},p} \right)^\top.$$

Optimalizační úloha (1.26) je ekvivalentní úloze

$$\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} + \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \left\{ -2\mathbf{Y}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\beta} + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_1 \right\}, \quad (1.28)$$

neboť výraz $\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y}$ nezávisí na hodnotě $\boldsymbol{\beta}$ a díky rovnosti $\mathbb{X}^\top \mathbb{X} = \mathbf{I}_p$ se výraz $\boldsymbol{\beta}^\top \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}$ redukuje pouze na výraz $\boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\beta}$. Dále si uvědomme, že odhad $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$ je pro ortogonální matici \mathbb{X} dán jako

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}} = \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} \right)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y} = \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}. \quad (1.29)$$

S využitím rovnosti (1.29) lze úlohu (1.28) přepsat na tvar

$$\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} + \min_{\beta_1, \dots, \beta_p \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^p \left(-2\hat{\beta}_{\text{OLS},i} \beta_i + \beta_i^2 + \lambda |\beta_i| \right),$$

což je ekvivalentní s následujícím vyjádřením

$$\mathbf{Y}^\top \mathbf{Y} + \min_{\beta_1 \in \mathbb{R}} \left\{ -2\hat{\beta}_{\text{OLS},1} \beta_1 + \beta_1^2 + \lambda |\beta_1| \right\} + \dots + \min_{\beta_p \in \mathbb{R}} \left\{ -2\hat{\beta}_{\text{OLS},p} \beta_p + \beta_p^2 + \lambda |\beta_p| \right\}.$$

Uvažujme $i \in \{1, \dots, p\}$ pevné a definujme funkci

$$f(\beta_i) := -2\hat{\beta}_{\text{OLS},i} \beta_i + \beta_i^2 + \lambda |\beta_i|.$$

Budeme řešit optimalizační úlohu

$$\min_{\beta_i \in \mathbb{R}} f(\beta_i). \quad (1.30)$$

Rozlišíme dva případy:

1. Je-li $\hat{\beta}_{\text{OLS},i} > 0$, potom pro libovolné $x > 0$ je

$$f(x) = -2\hat{\beta}_{\text{OLS},i} x + x^2 + \lambda x < 2\hat{\beta}_{\text{OLS},i} x + x^2 + \lambda x = f(-x),$$

a tedy minimum funkce f stačí hledat pro $\beta_i \in [0, \infty)$.

Řešíme tedy optimalizační úlohu

$$\min_{\beta_i \geq 0} \left\{ -2\hat{\beta}_{\text{OLS},i} \beta_i + \beta_i^2 + \lambda \beta_i \right\} =: \min_{\beta_i \geq 0} g_1(\beta_i).$$

Podle nutné podmínky optimality musí platit

$$g'_1(\beta_i) = -2\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} + 2\beta_i + \lambda = 0, \quad \beta_i \geq 0,$$

a tedy

$$\widehat{\beta}_{\text{Lasso},i} = \max \left\{ \widehat{\beta}_{\text{OLS},i} - \frac{1}{2}\lambda, 0 \right\}, \quad (1.31)$$

kde $\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} > 0$.

2. Je-li $\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} \leq 0$, potom pro libovolné $x > 0$ je

$$f(x) = -2\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}x + x^2 + \lambda x > 2\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}x + x^2 + \lambda x = f(-x),$$

a tedy minimum funkce f stačí hledat pro $\beta_i \in (-\infty, 0]$.

Řešíme tedy optimalizační úlohu

$$\min_{\beta_i \leq 0} -2\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}\beta_i + \beta_i^2 - \lambda\beta_i =: \min_{\beta_i \leq 0} g_2(\beta_i).$$

Podle nutné podmínky optimality nyní musí platit

$$g'_2(\beta_i) = -2\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} + 2\beta_i - \lambda = 0, \quad \beta_i \leq 0,$$

a tedy

$$\widehat{\beta}_{\text{Lasso},i} = \min \left\{ \widehat{\beta}_{\text{OLS},i} + \frac{1}{2}\lambda, 0 \right\} = -\max \left\{ -\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} - \frac{1}{2}\lambda, 0 \right\}, \quad (1.32)$$

kde $\widehat{\beta}_{\text{OLS},i} \leq 0$.

Uvážíme-li optimální řešení dané předpisem (1.31) a předpisem (1.32), vidíme, že lze optimální řešení vyjádřit ve tvaru

$$\widehat{\beta}_{\text{Lasso},i} = \text{sgn}(\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}) \max \left\{ |\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}| - \frac{1}{2}\lambda, 0 \right\}, \quad i = 1, \dots, p,$$

kde $\text{sgn}(\cdot)$ označuje funkci signum.

Poznámka 1.9. Někteří autoři formulují optimalizační úlohu (1.26) ve tvaru

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_1.$$

Tím je mj. zajištěno, že pro ortogonální matici \mathbb{X} je optimální řešení této úlohy dáno jako

$$\widehat{\beta}_{\text{Lasso},i} = \text{sgn}(\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}) \max \left\{ |\widehat{\beta}_{\text{OLS},i}| - \lambda, 0 \right\}, \quad i = 1, \dots, p.$$

Poznámka 1.10. (i) Připomeňme, že z předpisu (1.26) můžeme nahlédnout, že pro $\lambda = 0$ je optimálním řešením této úlohy odhad $\widehat{\beta}_{\text{OLS}}$. Pokud hodnota λ naopak poroste nade všechny meze, obvykle potom dojde k situaci, že odhady některých uvažovaných regresních koeficientů vyjdou nulové a ostatní budou v absolutní hodnotě velmi malé. To znamená, že metoda Lasso může sloužit i jako nástroj pro výběr vhodných regresorů (podrobněji viz např. Tibshirani (1996)).

- (ii) Pokud je hodnota parametru t z optimalizační úlohy (1.27) větší než hodnota $\|\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}\|_1$, potom zřejmě je $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{OLS}}$ optimálním řešením této úlohy.
- (iii) Podobně jako v případě hřebenové regrese i pro metodu Lasso je rozumné požadovat, aby nezávisle proměnné byly měřeny ve stejných jednotkách.
Pokud tomu tak není, provádí se standardizace závisle proměnné \mathbf{Y} a nezávisle proměnných $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$. Tyto standardizované proměnné potom vystupují v optimalizační úloze (1.26). Vyřešením této úlohy nalezneme odhad vektoru regresních parametrů příslušný standardizovaným proměnným. Vzorac pro odhad jednotlivých složek vektoru regresních parametrů příslušného původním proměnným je analogií vzorce (1.21).
- (iv) V případě, že bychom uvažovali lineární model s absolutním členem, je postup pro nalezení odhadu vektoru regresních koeficientů analogický postupu uvedenému v poznámce 1.7 (iv).

Pokud bychom se zajímali o některé statistické vlastnosti odhadu vektoru regresních parametrů metodou Lasso, dá se obecně říci, že je tento odhad vychýlený, přičemž pro rostoucí hodnotu parametru λ toto vychýlení roste. Na druhou stranu ovšem s rostoucí hodnotou λ klesá rozptyl tohoto odhadu.

Poznámka 1.11. Zobecněním hřebenové regrese a metody Lasso je následující optimalizační úloha

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\beta}\|_q^q = \min_{\beta_1, \dots, \beta_p \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \sum_{j=1}^p x_{i,j} \beta_j \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|^q, \quad (1.33)$$

kde $\lambda \geq 0$ je parametr a $q > 0$. Volbou $q = 1$, resp. volbou $q = 2$, získáme optimalizační úlohu odpovídající metodě Lasso, resp. hřebenové regresi.

Optimalizační úlohu (1.33) s hodnotou $q \in (1,2)$ tedy můžeme považovat za jistý kompromis mezi metodou Lasso a hřebenovou regresi.

Jinou možností kompromisu mezi těmito dvěma metodami je uvažovat penalizační člen, který byl navržen a poprvé publikován v článku Zou a Hastie (2005) pod názvem „elastic net penalty“, který je definován jako

$$\lambda \sum_{j=1}^p \left(\alpha \beta_j^2 + (1 - \alpha) |\beta_j| \right)$$

pro vhodné $\alpha \in (0,1)$.

1.4 Metoda nejmenších čtverců v robustní optimalizaci

Na nejrůznějších příkladech z praxe se velmi často ukazuje, že data, která máme analyzovat, jsou zatížena nějakou chybou. Typicky se jedná o chyby související se získáváním jednotlivých proměnných – chyby měření nebo zaokrouhlovací

chyby. Místo odezvy \mathbf{Y} , resp. regresní matice \mathbb{X} , definované předpisem (1.1), resp. předpisem (1.2), uvažujeme jako odezvu vektor $\mathbf{Y} + \Delta\mathbf{Y}$, resp. jako regresní matici $\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X}$. i -tý řádek vektoru $\Delta\mathbf{Y}$, resp. matice $\Delta\mathbb{X}$, potom reprezentuje chyby, kterých se pro příslušné proměnné v i -tém pozorování dopouštíme.

Jednou z hlavních motivací vzniku a rozvoje metody nejmenších čtverců v robustní optimalizaci tedy byla snaha zohlednit v analýze chyby a nepřesnosti obsažené v datech. Zároveň se ale také ukazuje, že použitím této metody dokážeme nalézt optimální řešení, která jsou v jistém smyslu necitlivá vůči (malým) změnám ve vstupních datech.

Metodu nejmenších čtverců v robustní optimalizaci obecně definujeme jako následující optimalizační úlohu

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \max_{\Delta\mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}, \Delta\mathbf{Y} \in \mathcal{U}_{\mathbf{Y}}} \|(\mathbf{Y} + \Delta\mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X})\beta\|_2. \quad (1.34)$$

Na tuto optimalizační úlohu můžeme nahlížet jako na tzv. analýzu nejhoršího scénáře (někdy se také lze setkat s označením analýza nejméně příznivého případu nebo s původním anglickým výrazem „worst case analysis“). Cílem této analýzy je nalézt nejlepší možné řešení, tj. nejvhodnější vektor regresních parametrů, při zohlednění nejhoršího možného scénáře, tj. nejhorší možné varianty chyb jednotlivých měření.

Existuje poměrně velké množství přístupů, které vycházejí z optimalizační úlohy (1.34), ale navzájem se odlišují tím, jaké požadavky kladou na množiny $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ a $\mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$. V následujících dvou podsekcích představíme dva od sebe odlišné koncepty a u každého z nich uvedeme jeden speciální případ obecně formulované optimalizační úlohy (1.34). Současně se budeme snažit ukázat, že oba tyto speciální případy úzce souvisí s hřebenovou regresí, resp. s metodou Lasso. Připomeňme, že obě tyto metody byly teoreticky vyloženy v předchozí sekci.

1.4.1 Koncept sdružených omezení

První koncept, kterým se budeme zabývat, se často označuje jako koncept sdružených omezení (v angličtině se označuje jako „coupled uncertainty“). Lze jej charakterizovat tak, že požadavky na chyby (resp. nepřesnosti) obsažené v datech nejsou formulovány jako omezení pro chyby (resp. nepřesnosti) jednotlivých proměnných nebo pozorování, ale jako omezení pro chyby (resp. nepřesnosti) spojené se závisle proměnnou a s nezávisle proměnnými jako celkem. Uvedeme konkrétní příklad.

Předpokládejme, že $\rho_{\mathbb{X}}$ a $\rho_{\mathbf{Y}}$ jsou známé, nezáporné, reálné konstanty. Dále uvažujme množiny $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ a $\mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$ definované jako

$$\mathcal{U}_{\mathbb{X}} := \{ \Delta\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n \times p} : \|\Delta\mathbb{X}\|_2 \leq \rho_{\mathbb{X}} \}, \quad (1.35)$$

$$\mathcal{U}_{\mathbf{Y}} := \{ \Delta\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n : \|\Delta\mathbf{Y}\|_2 \leq \rho_{\mathbf{Y}} \}, \quad (1.36)$$

kde $\|\Delta\mathbb{X}\|_2$ označuje eukleidovskou normu matice $\Delta\mathbb{X}$ (pro formální definici a nejdůležitější vlastnosti odkazujeme čtenáře na knihu Duintjer Tebbens a kol. (2012,

sekke 1.7)). Optimalizační úlohu (1.34) tedy nyní můžeme formulovat jako

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \max_{\|\Delta \mathbb{X}\|_2 \leq \rho_{\mathbb{X}}, \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 \leq \rho_{\mathbf{Y}}} \|(\mathbf{Y} + \Delta \mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2. \quad (1.37)$$

Lze dokázat, že pro vhodně zvolenou hodnotu parametru λ je optimalizační úloha (1.37) ekvivalentní s optimalizační úlohou (1.11), tj. s hřebenovou regresí.

První důkaz tohoto tvrzení byl publikován v článku El Ghaoui a Lebret (1997). Autoři tohoto článku přeformulovali optimalizační úlohu (1.37) na úlohu semidefinitního programování a k nalezení optimálního řešení poté použili metodu vnitřního bodu (popis této metody, resp. úlohy semidefinitního programování lze nalézt např. v článku Vandenberghe a Boyd (1996)). O rok později byl v článku Chandrasekaran a kol. (1998) uveřejněn jiný důkaz tohoto tvrzení. Klíčovou roli v něm sehrál SVD rozklad matice \mathbb{X} .

Věty, které v této sekci formulujeme, budou spolu s hlavními myšlenkami jejich důkazů převzaty právě z článku Chandrasekaran a kol. (1998).

Prvním krokem je ekvivalentní přeformulování optimalizační úlohy (1.37), které představíme v následující větě.

Věta 1.12. *Optimalizační úloha (1.37) je ekvivalentní s optimalizační úlohou*

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \{ \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\beta\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}} \}. \quad (1.38)$$

Důkaz. Pro libovolné pevné $\beta \in \mathbb{R}^p$ uvažujme optimalizační úlohu

$$\max_{\|\Delta \mathbb{X}\|_2 \leq \rho_{\mathbb{X}}, \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 \leq \rho_{\mathbf{Y}}} \|(\mathbf{Y} + \Delta \mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2. \quad (1.39)$$

Vezměme libovolné $\Delta \mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$, $\Delta \mathbf{Y} \in \mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$. Opakovaným užitím trojúhelníkové nerovnosti a s využitím vlastností normy a předpisu (1.36) množiny $\mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$, resp. předpisu (1.35) množiny $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ dostaneme, že pro účelovou funkci optimalizační úlohy (1.39) platí následující nerovnosti

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{Y} + \Delta \mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2 &= \|(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta) + (\Delta \mathbf{Y} - \Delta \mathbb{X}\beta)\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \|\Delta \mathbf{Y} - \Delta \mathbb{X}\beta\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 + \|\Delta \mathbb{X}\beta\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \|\Delta \mathbb{X}\|_2 \|\beta\|_2 + \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\beta\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Pokud tedy dokážeme nalézt $\Delta \mathbf{Y}_0 \in \mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$ a $\Delta \mathbb{X}_0 \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$, pro které v nerovnosti (1.40) nastane rovnost, bude díky předchozím úvahám platit, že

$$\max_{\|\Delta \mathbb{X}\|_2 \leq \rho_{\mathbb{X}}, \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 \leq \rho_{\mathbf{Y}}} \|(\mathbf{Y} + \Delta \mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2 = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\beta\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}$$

a tím bude důkaz této věty hotov.

Definujme

$$\begin{aligned} \Delta \mathbb{X}_0 &:= -\frac{\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2} \frac{\beta^\top}{\|\beta\|_2} \rho_{\mathbb{X}}, \\ \Delta \mathbf{Y}_0 &:= \frac{\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2} \rho_{\mathbf{Y}}. \end{aligned}$$

Potom zřejmě $\Delta\mathbb{X}_0 \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ a $\Delta\mathbf{Y}_0 \in \mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$.

Provedeme dosazení do nerovnosti (1.40) a dostáváme

$$\begin{aligned}
& \|(\mathbf{Y} + \Delta\mathbf{Y}_0) - (\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X}_0)\boldsymbol{\beta}\|_2 = \\
& = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta} + \Delta\mathbf{Y}_0 - \Delta\mathbb{X}_0\boldsymbol{\beta}\|_2 = \\
& = \left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta} + \frac{\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \rho_{\mathbf{Y}} + \frac{\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \frac{\boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} \rho_{\mathbb{X}} \right\|_2 = \\
& = \left\| (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}) \left(1 + \frac{\rho_{\mathbf{Y}}}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} + \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2 \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \rho_{\mathbb{X}} \right) \right\|_2 = \\
& = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 \left(1 + \frac{\rho_{\mathbf{Y}}}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} + \rho_{\mathbb{X}} \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \right) = \\
& = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}.
\end{aligned}$$

Jelikož vektor $\boldsymbol{\beta}$ byl volen libovolně, je tímto ekvivalence optimalizační úlohy (1.37) a optimalizační úlohy (1.38) dokázána. □

Poznámka 1.13. Povšimněme si, že v účelové funkci optimalizační úlohy (1.38) nezávisí proměnná $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$ na hodnotě $\rho_{\mathbf{Y}}$. Optimalizační úlohu (1.38) bychom tedy mohli ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$\rho_{\mathbf{Y}} + \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \{ \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\boldsymbol{\beta}\|_2 \}.$$

Nyní se zaměříme na nalezení optimálního řešení úlohy (1.38). Jelikož nemáme žádné omezující podmínky, Lagrangeovu funkci lze ztotožnit s účelovou funkcí. Definujme tedy

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}.$$

Později dokážeme, že funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ je konvexní, a tedy každé lokální minimum funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ na \mathbb{R}^p je globálním minimem funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ na \mathbb{R}^p . Podle nutné podmínky optimality musí optimální řešení úlohy (1.38), označme jej $\boldsymbol{\beta}^*$, buď splňovat soustavu rovnic

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}^*) = \mathbf{0},$$

nebo musí platit, že funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ není v bodě $\boldsymbol{\beta}^*$ diferencovatelná.

Nejdříve zkusme ty body, pro něž funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ je diferencovatelná. Pro tyto body platí

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{-1}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \mathbb{X}^\top (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}) + \frac{\rho_{\mathbb{X}}}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}. \quad (1.41)$$

Ze soustavy rovnic (1.41) tedy můžeme nahlédnout, že body, pro které není funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ diferencovatelná, jsou body $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$ a libovolný bod $\boldsymbol{\beta}$ splňující

$$\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}.$$

Pro tuto chvíli vyloučíme tyto body z naší další analýzy a budeme se jimi zabývat až ve větě 1.18 v závěru této podsekcce.

Soustava rovnic (1.41) je ekvivalentní soustavě

$$\frac{1}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbb{X}^\top \mathbf{Y} + \rho_{\mathbb{X}} \frac{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} \boldsymbol{\beta} \right) = \mathbf{0},$$

kterou lze dále upravit na tvar

$$\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \rho_{\mathbb{X}} \frac{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} \mathbf{I}_p \right) \boldsymbol{\beta} = \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}. \quad (1.42)$$

Definujeme-li parametr λ předpisem

$$\lambda := \rho_{\mathbb{X}} \frac{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}, \quad (1.43)$$

ihned vidíme, že parametr λ je kladné reálné číslo. Soustava rovnic (1.42) je potom totožná se soustavou rovnic (1.17), kterou jsme se zabývali v podsekcí 1.3.2.

Každý stacionární bod funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ (tj. řešení soustavy rovnic (1.41)) lze tedy vyjádřit předpisem

$$\boldsymbol{\beta} = \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{X}^\top \mathbf{Y}, \quad (1.44)$$

kde parametr λ je definován předpisem (1.43). Tento předpis ovšem závisí na proměnné $\boldsymbol{\beta}$. Pokusíme se proto nalézt vyjádření parametru λ v závislosti pouze na konstantě $\rho_{\mathbb{X}}$, regresní matici \mathbb{X} a odezvě \mathbf{Y} .

Vyjdeme z SVD rozkladu matice \mathbb{X} . Předpokládejme, že $\text{rank}(\mathbb{X}) = r > 0$. Aplikací věty A.5 získáváme vyjádření

$$\mathbb{X} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^\top, \quad (1.45)$$

kde \mathbf{U} , resp. \mathbf{V} , je ortogonální matice řádu n , resp. řádu p , a

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

je matice typu $n \times p$, přičemž $\mathbf{D}_r = \text{diag}(d_1, \dots, d_r)$ a $d_1 \geq \dots \geq d_r > 0$ tvoří singulární čísla matice \mathbb{X} .

Nejdříve hledíme ekvivalentní vyjádření jmenovatele výrazu (1.43). Definujme matici \mathbb{A}_p řádu p předpisem

$$\mathbb{A}_p = \text{diag}(d_1, \dots, d_r, 0, \dots, 0).$$

Dosadíme-li výraz (1.45) do předpisu (1.44) dostáváme, že

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\beta} &= \left(\mathbf{V} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}^\top + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbf{V} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{Y} = \\ &= \left(\mathbf{V} \mathbb{A}_p^2 \mathbf{V}^\top + \lambda \mathbf{V} \mathbf{V}^\top \right)^{-1} \mathbf{V} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{Y} = \\ &= \left(\mathbf{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right) \mathbf{V}^\top \right)^{-1} \mathbf{V} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{Y} = \\ &= \mathbf{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbf{V}^\top \mathbf{V} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{Y} = \\ &= \mathbf{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbf{D}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Zavedme značení

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{t}_2 \\ \mathbf{s} \end{pmatrix} := \mathbf{U}^\top \mathbf{Y}, \quad (1.48)$$

kde \mathbf{t}_1 , resp. \mathbf{t}_2 , resp. \mathbf{s} , je reálný vektor dimenze r , resp. $p - r$, resp. $n - p$. Výraz (1.47) tedy můžeme dále upravit na tvar

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top. \quad (1.49)$$

S využitím předpisu (1.49) tedy lze jmenovatel výrazu (1.43) vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\beta}\|_2 &= \sqrt{\boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\beta}} = \\ &= \sqrt{\left(\mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right)^\top \left(\mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right)} = \\ &= \sqrt{\left(\left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right)^\top \left(\mathbb{V}^\top \mathbb{V} \right) \left(\left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right)} = \\ &= \left\| \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbb{D}_r \mathbf{t}_1 \right\|_2. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Nyní hledejme ekvivalentní vyjádření čitatele výrazu (1.43). V odvozování využijeme základní vlastnosti unitárních matic, SVD rozklad matice \mathbb{X} , rozklad (1.49) a fakt, že násobení diagonálních matic je komutativní:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 &= \\ &= \left\| \mathbf{U}\mathbf{U}^\top \mathbf{Y} - \mathbf{U}\mathbb{D}\mathbf{V}^\top \mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \mathbf{U} \left(\mathbf{U}^\top \mathbf{Y} - \mathbb{D}\mathbf{V}^\top \mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right) \right\|_2 = \\ &= \left\| \mathbf{U}^\top \mathbf{Y} - \mathbb{D}\mathbf{V}^\top \mathbb{V} \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right) - \left(\mathbf{t}_1^\top, \mathbf{t}_2^\top \right) \mathbb{A}_p \left(\mathbb{A}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{A}_p \mathbf{s}^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\mathbf{t}_1^\top - \mathbf{t}_1^\top \mathbb{D}_r \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbb{D}_r \mathbf{s}^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\mathbf{t}_1^\top \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right) \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} - \mathbf{t}_1^\top \mathbb{D}_r^2 \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbf{s}^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\mathbf{t}_1^\top \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r - \mathbb{D}_r^2 \right) \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbf{s}^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \left\| \left(\lambda \mathbf{t}_1^\top \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbf{s}^\top \right)^\top \right\|_2 = \\ &= \sqrt{\lambda^2 \mathbf{t}_1^\top \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-2} \mathbf{t}_1 + \mathbf{s}^\top \mathbf{s}} = \\ &= \sqrt{\lambda^2 \left\| \left(\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r \right)^{-1} \mathbf{t}_1 \right\|_2^2 + \|\mathbf{s}\|_2^2}. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Díky vyjádřením (1.50) a (1.51) tedy lze předpis (1.43) přeformulovat jako následující nelineární rovnici:

$$\lambda = \rho_{\mathbb{X}} \frac{\sqrt{\lambda^2 \left\| (\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r)^{-1} \mathbf{t}_1 \right\|_2^2 + \|\mathbf{s}\|_2^2}}{\left\| (\mathbb{D}_r^2 + \lambda \mathbf{I}_r)^{-1} \mathbb{D}_r \mathbf{t}_1 \right\|_2}. \quad (1.52)$$

Povšimněme si, že ve výrazu (1.52) nás zajímá pouze čtverec eukleidovské normy vektoru \mathbf{s} , nikoliv jeho jednotlivé složky.

Poznámka 1.14. Platí-li $\text{rank}(\mathbb{X}) = p$, tj. \mathbb{X} je matice s plnou hodnotí, potom matice \mathbb{D} z předpisu (1.46) má nyní tvar

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \mathbb{D}_p \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (1.53)$$

přičemž $\mathbb{D}_p = \text{diag}(d_1, \dots, d_p)$ a $d_1 \geq \dots \geq d_p > 0$ tvoří singulární čísla matice \mathbb{X} . Pro výše uvedená odvození tedy nyní místo matice \mathbb{A}_p lze přímo psát matici \mathbb{D}_p a výraz (1.48) se redukuje na výraz

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{s} \end{pmatrix} := \mathbf{U}^\top \mathbf{Y}, \quad (1.54)$$

kde \mathbf{t} , resp. \mathbf{s} , je reálný vektor dimenze p , resp. $n - p$. Podobně výraz (1.49) se redukuje na výraz

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbb{V} \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{D}_p \mathbf{t}. \quad (1.55)$$

Předpis (1.43) parametru λ je potom ekvivalentní s nelineární rovnicí

$$\lambda = \rho_{\mathbb{X}} \frac{\sqrt{\lambda^2 \left\| (\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbf{t} \right\|_2^2 + \|\mathbf{s}\|_2^2}}{\left\| (\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{D}_p \mathbf{t} \right\|_2}. \quad (1.56)$$

Ve zbytku této podsekcce budeme pracovat pouze s regresní maticí \mathbb{X} s plnou hodnotí.

Následující věta udává souvislost mezi kladnými řešeními nelineární rovnice (1.56), vyjádřením (1.44) a optimálními řešeními úlohy (1.38).

Věta 1.15. *Nechť \mathbb{X} je regresní matice s plnou hodnotí, tj. $\text{rank}(\mathbb{X}) = p$. Předpokládejme, že existuje kladné řešení nelineární rovnice (1.56). Toto řešení označme λ^* . Potom vektor $\boldsymbol{\beta}^*$ definovaný předpisem (1.44) pro $\lambda = \lambda^*$ je jediným optimálním řešením úlohy (1.38).*

Důkaz. Jelikož u optimalizační úlohy (1.38) neuvažujeme žádné omezující podmínky, optimální řešení této úlohy bude globálním minimem Lagrangeovy funkce

$$L(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbb{X}} \|\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}.$$

Dále proto budeme pracovat s funkcí $L(\boldsymbol{\beta})$. Samotný důkaz se skládá z pěti hlavních kroků.

1. Nejdříve ukážeme, že funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ je konvexní.

Uvažujme libovolné $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2 \in \mathbb{R}^n$ a libovolné $\alpha \in [0,1]$. Použitím trojúhelníkové nerovnosti a faktu, že α a $(1 - \alpha)$ jsou kladná čísla, dostáváme, že

$$\begin{aligned}
L(\alpha\boldsymbol{\beta}_1 + (1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2) &= \\
&= \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}(\alpha\boldsymbol{\beta}_1 + (1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2)\|_2 + \\
&\quad + \rho_{\mathbb{X}}\|\alpha\boldsymbol{\beta}_1 + (1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}} = \\
&= \|\mathbf{Y} + \alpha\mathbf{Y} - \alpha\mathbf{Y} - \alpha\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_1 - (1 - \alpha)\mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \\
&\quad + \rho_{\mathbb{X}}\|\alpha\boldsymbol{\beta}_1 + (1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}} = \\
&= \|\alpha(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_1) + (1 - \alpha)(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_2)\|_2 + \\
&\quad + \rho_{\mathbb{X}}\|\alpha\boldsymbol{\beta}_1 + (1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}} \leq \\
&\leq \|\alpha(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_1)\|_2 + \|(1 - \alpha)(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_2)\|_2 + \\
&\quad + \rho_{\mathbb{X}}(\|\alpha\boldsymbol{\beta}_1\|_2 + \|(1 - \alpha)\boldsymbol{\beta}_2\|_2) + \rho_{\mathbf{Y}} = \\
&= |\alpha|\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_1\|_2 + |1 - \alpha|\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \\
&\quad + \rho_{\mathbb{X}}(|\alpha|\|\boldsymbol{\beta}_1\|_2 + |1 - \alpha|\|\boldsymbol{\beta}_2\|_2) + \alpha\rho_{\mathbf{Y}} + (1 - \alpha)\rho_{\mathbf{Y}} = \\
&= \alpha(\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_1\|_2 + \rho_{\mathbb{X}}\|\boldsymbol{\beta}_1\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}) + \\
&\quad + (1 - \alpha)(\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \rho_{\mathbb{X}}\|\boldsymbol{\beta}_2\|_2 + \rho_{\mathbf{Y}}) = \\
&= \alpha L(\boldsymbol{\beta}_1) + (1 - \alpha)L(\boldsymbol{\beta}_2),
\end{aligned}$$

což je definice konvexní funkce.

2. Uvažujme reálnou funkci f definovanou předpisem

$$f(\lambda) = \mathbf{t}^\top \left(\mathbb{D}_p^2 - \rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p \right) \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-2} \mathbf{t} - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^2} \|\mathbf{s}\|_2^2. \quad (1.57)$$

Připomeňme, že vektor $(\mathbf{t}^\top, \mathbf{s}^\top)^\top$ je dán předpisem (1.54) a matice \mathbb{D}_p je diagonální matice řádu p z UDV rozkladu matice \mathbb{X} .

Ukážeme, že λ^* je kladné řešení nelineární rovnice (1.56) právě tehdy, když $\lambda^* > 0$ a zároveň $f(\lambda^*) = 0$.

Rovnici (1.56) můžeme ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned}
&\lambda^2 \left(\left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{D}_p \mathbf{t} \right)^\top \left(\left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbb{D}_p \mathbf{t} \right) = \\
&= \rho_{\mathbb{X}}^2 \left(\|\mathbf{s}\|_2^2 + \lambda^2 \left(\left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbf{t} \right)^\top \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-1} \mathbf{t} \right),
\end{aligned}$$

což lze dále upravit na

$$\mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-2} \mathbf{t} - \rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{t}^\top \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-2} \mathbf{t} - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^2} \|\mathbf{s}\|_2^2 = 0$$

a konečně dostáváme, že

$$\mathbf{t}^\top \left(\mathbb{D}_p^2 - \rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p \right) \left(\mathbb{D}_p^2 + \lambda \mathbf{I}_p \right)^{-2} \mathbf{t} - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^2} \|\mathbf{s}\|_2^2 = 0. \quad (1.58)$$

Rovnici (1.58) lze přepsat jako

$$f(\lambda) = 0, \quad (1.59)$$

a tedy množina (kladných) řešení rovnice (1.56) je totožná s množinou (kladných) řešení rovnice (1.59).

3. Uvažujme opět funkci f definovanou předpisem (1.57). Ukážeme, že je-li λ^* kladné řešení rovnice (1.59), potom $f'(\lambda^*) > 0$.

S využitím následujícího značení dokážeme nalézt ekvivalentní předpis funkce f . Necht k je počet diagonálních prvků matice \mathbb{D}_p , které jsou větší než $\rho_{\mathbb{X}}$. Dále necht

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \mathbb{A}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbb{A}_2 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \mathbb{D}_p & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

je reálná matice řádu $p + 1$, kde

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_1 &= \text{diag}(d_1, \dots, d_k), \\ \mathbb{A}_2 &= \text{diag}(d_{k+1}, \dots, d_p, 0) \end{aligned}$$

jsou matice řádu k , resp. $p + 1 - k$. Konečně necht \mathbf{b} je k -rozměrný reálný vektor, který je tvořen prvními k složkami vektoru $\sqrt{\mathbb{D}_p^2 - \rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p} \mathbf{t}$, a \mathbf{c} necht je $(p + 1 - k)$ -rozměrný reálný vektor, který je tvořen posledními $p + 1 - k$ složkami vektoru

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p - \mathbb{D}_p^2} & 0 \\ \mathbf{0} & \rho_{\mathbb{X}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \|\mathbf{s}\|_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p - \mathbb{D}_p^2} \mathbf{t} \\ \rho_{\mathbb{X}} \|\mathbf{s}\|_2 \end{pmatrix}.$$

Funkci f lze tedy ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$f(\lambda) = \mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda \mathbf{I}_k)^{-2} \mathbf{b} - \mathbf{c}^\top (\mathbb{A}_2^2 + \lambda \mathbf{I}_{p+1-k})^{-2} \mathbf{c},$$

a tedy

$$f'(\lambda) = -2 \left(\mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda \mathbf{I}_k)^{-3} \mathbf{b} - \mathbf{c}^\top (\mathbb{A}_2^2 + \lambda \mathbf{I}_{p+1-k})^{-3} \mathbf{c} \right).$$

Stačí tedy dokázat, že

$$\mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-3} \mathbf{b} - \mathbf{c}^\top (\mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k})^{-3} \mathbf{c} < 0. \quad (1.60)$$

Z definice eukleidovské normy diagonální matice plyne následující nerovnost

$$\mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-3} \mathbf{b} \leq \left\| (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-1} \right\|_2 \mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-2} \mathbf{b}. \quad (1.61)$$

Předpokládáme, že $f(\lambda^*) = 0$. To je ekvivalentní s

$$\mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-2} \mathbf{b} = \mathbf{c}^\top (\mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k})^{-2} \mathbf{c}.$$

Nerovnost (1.61) lze tedy upravit na nerovnost

$$\mathbf{b}^\top (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-3} \mathbf{b} \leq \left\| (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-1} \right\|_2 \mathbf{c}^\top (\mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k})^{-2} \mathbf{c}. \quad (1.62)$$

Z definice eukleidovské normy a toho, jak jsou matice \mathbb{A}_1 a \mathbb{A}_2 definovány, získáváme následující nerovnost

$$\left\| (\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k)^{-1} \right\|_2 \left\| \mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k} \right\|_2 < 1,$$

což je ekvivalentní s nerovností

$$\left\| \left(\mathbb{A}_1^2 + \lambda \mathbf{I}_k \right)^{-1} \right\|_2 < \frac{1}{\left\| \mathbb{A}_2^2 + \lambda \mathbf{I}_{p+1-k} \right\|_2}.$$

Nerovnost (1.62) tedy můžeme dále upravit na

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^\top \left(\mathbb{A}_1^2 + \lambda^* \mathbf{I}_k \right)^{-3} \mathbf{b} &< \frac{1}{\left\| \mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k} \right\|_2} \mathbf{c}^\top \left(\mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k} \right)^{-2} \mathbf{c} \leq \\ &\leq \mathbf{c}^\top \left(\mathbb{A}_2^2 + \lambda^* \mathbf{I}_{p+1-k} \right)^{-3} \mathbf{c}, \end{aligned}$$

což je ekvivalentní s nerovností (1.60). Tím je tedy dokázáno, že $f'(\lambda^*) > 0$.

4. Nyní dokážeme, že Hessova matice funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ v bodě $\boldsymbol{\beta}^*$ je pozitivně definitní matice.

Vyjdeme-li z rovnice (1.41), dostáváme, že

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top}(\boldsymbol{\beta}^*) &= \frac{\mathbb{X}^\top \mathbb{X}}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} - \frac{1}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^3} \left(\mathbb{X}^\top \mathbf{Y} - \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right) \left(\mathbb{X}^\top \mathbf{Y} - \right. \\ &\quad \left. - \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right)^\top + \frac{\rho_{\mathbb{X}}}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \mathbf{I}_p - \frac{\rho_{\mathbb{X}}}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^3} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top}. \end{aligned} \quad (1.63)$$

Z předpisu (1.44) pro $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^*$ plyne, že

$$\mathbb{X}^\top \mathbf{Y} = \mathbb{X}^\top \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* + \lambda \boldsymbol{\beta}^*. \quad (1.64)$$

Dosadíme-li do druhého sčítance předpisu (1.63) z předpisu (1.64), dostáváme postupnými úpravami a užitím vzorce (1.43) pro $\lambda = \lambda^*$, že

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top}(\boldsymbol{\beta}^*) &= \frac{1}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \mathbb{X}^\top \mathbb{X} - \frac{\lambda^{*2}}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^3} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} + \\ &\quad + \frac{\rho_{\mathbb{X}}}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \mathbf{I}_p - \frac{\rho_{\mathbb{X}}}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^3} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} = \\ &= \frac{1}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} - \frac{\lambda^{*2} \left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2} \frac{1}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} + \right. \\ &\quad \left. + \rho_{\mathbb{X}} \frac{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \mathbf{I}_p - \rho_{\mathbb{X}} \frac{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \frac{1}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right) = \\ &= \frac{1}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} + \right. \\ &\quad \left. + \lambda^* \mathbf{I}_p - \frac{\lambda^*}{\left\| \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2^2} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right) = \\ &= \frac{1}{\left\| \mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}^* \right\|_2} \left(\left(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p \right) - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^*} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right). \end{aligned}$$

Protože předpokládáme, že λ^* je kladné, je zřejmě matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p$ pozitivně definitní. Můžeme tedy nahlédnout, že matice $\partial^2 L / \partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top(\boldsymbol{\beta}^*)$ má nejvýše jedno nekladné vlastní číslo. Abychom dokázali pozitivní definitnost

této matice, je tedy nutné a postačující dokázat, že determinant této matice, který budeme značit jako

$$\det \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} (\boldsymbol{\beta}^*) \right],$$

je kladný.

Využitím regularity matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p$ a základních vlastností determinantu matic dostáváme, že

$$\begin{aligned} & \det \left[\frac{\partial^2 L}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} (\boldsymbol{\beta}^*) \right] = \\ &= \det \left[\frac{1}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}^*\|_2} \left((\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p) - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^*} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right) \right] = \\ &= \frac{\det \left[(\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p) \left(\mathbf{I}_p - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^*} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right) \right]}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}^*\|_2^p} = \\ &= \frac{\det [\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p]}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}^*\|_2^p} \det \left[\mathbf{I}_p - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^*} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* \boldsymbol{\beta}^{*\top} \right] = \\ &= \frac{\det [\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p]}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}^*\|_2^p} \left(1 - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^*} \boldsymbol{\beta}^{*\top} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* \right) = \\ &= \frac{\det [\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p]}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}^*\|_2^p} \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}^*\|_2^2} \left(\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^* - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \boldsymbol{\beta}^{*\top} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* \right). \end{aligned}$$

Jelikož norma je nezáporná funkce a matice $\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p$ je regulární, stačí tedy dokázat, že

$$\boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^* - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \boldsymbol{\beta}^{*\top} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* > 0.$$

Postupným užitím vzorce (1.55) pro $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^*$ a $\lambda = \lambda^*$, faktu, že $\mathbb{V}^{-1} = \mathbb{V}^\top$, vzorce (1.56) pro $\lambda = \lambda^*$ a derivace funkce f definované předpisem (1.57) lze psát

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\beta}^{*\top} \boldsymbol{\beta}^* - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \boldsymbol{\beta}^{*\top} (\mathbb{X}^\top \mathbb{X} + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \boldsymbol{\beta}^* = \\ &= \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-2} \mathbb{D}_p \mathbf{t} - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} = \\ &= \left\| (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbb{D}_p \mathbf{t} \right\|_2^2 - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} = \\ &= \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 \left(\lambda^{*2} \left\| (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-1} \mathbf{t} \right\|_2^2 + \|\mathbf{s}\|_2^2 \right)}{\lambda^{*2}} - (\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*) \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} = \\ &= \lambda^* \left(\frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^*} \mathbf{t}^\top (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-2} \mathbf{t} + \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^{*3}} \|\mathbf{s}\|_2^2 - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\lambda^*} \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} \right) = \\ &= \lambda^* \left(\frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^*} \mathbf{t}^\top (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p) (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\lambda^*} \mathbf{t}^\top \mathbb{D}_p^2 (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^{*3}} \|\mathbf{s}\|_2^2 \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda^* \left[\mathbf{t}^\top \left(\frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^*} (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p) - \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2 + \lambda^*}{\lambda^*} \mathbb{D}_p^2 \right) (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} + \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^{*3}} \|\mathbf{s}\|_2^2 \right] = \\
&= \frac{\lambda^*}{2} \left(-2\mathbf{t}^\top (\mathbb{D}_p^2 - \rho_{\mathbb{X}}^2 \mathbf{I}_p) (\mathbb{D}_p^2 + \lambda^* \mathbf{I}_p)^{-3} \mathbf{t} + 2 \frac{\rho_{\mathbb{X}}^2}{\lambda^{*3}} \|\mathbf{s}\|_2^2 \right) = \\
&= \frac{\lambda^*}{2} f'(\lambda^*),
\end{aligned}$$

což je kladné číslo, neboť předpokládáme, že λ^* je kladné číslo a ve třetím kroku důkazu jsme ukázali, že také $f'(\lambda^*)$ je kladné číslo.

Dokázali jsme tedy, že Hessova matice funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ je v bodě $\boldsymbol{\beta}^*$ pozitivně definitní.

5. Ještě před formulací této věty jsme ukázali, že bod $\boldsymbol{\beta}^*$ je stacionárním bodem funkce $L(\boldsymbol{\beta})$. Ve čtvrtém kroku důkazu jsme dále ukázali, že Hessova matice funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ je v bodě $\boldsymbol{\beta}^*$ pozitivně definitní. Odtud plyne, že funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ má v bodě $\boldsymbol{\beta}^*$ ostré lokální minimum.

Dle prvního kroku důkazu je funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ konvexní, a tedy každé (ostré) lokální minimum funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ na \mathbb{R}^p je (ostrým) globálním minimem funkce $L(\boldsymbol{\beta})$ na \mathbb{R}^p . Bod $\boldsymbol{\beta}^*$ je tedy ostrým globálním minimem funkce $L(\boldsymbol{\beta})$, a tedy také jediným optimálním řešením úlohy (1.38).

□

Klíčovým předpokladem věty 1.15 je existence kladného řešení nelineární rovnice (1.56). V následující větě formulujeme nutnou a postačující podmínku pro existenci takového řešení.

Věta 1.16. *Nechť \mathbf{s} je reálný vektor dimenze $n - p$ definovaný předpisem (1.54).*

- (i) *Jestliže $\mathbf{s} \neq \mathbf{0}$, potom existuje právě jedno kladné řešení nelineární rovnice (1.56) právě tehdy, když*

$$\rho_{\mathbb{X}} < \frac{\|\mathbb{X}^\top \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2}.$$

- (ii) *Jestliže $\mathbf{s} = \mathbf{0}$, potom existuje právě jedno kladné řešení nelineární rovnice (1.56) právě tehdy, když*

$$\frac{\|\mathbb{D}_p^{-1} \mathbf{t}\|_2}{\|\mathbb{D}_p^{-2} \mathbf{t}\|_2} < \rho_{\mathbb{X}} < \frac{\|\mathbb{X}^\top \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2},$$

kde \mathbb{D}_p je matice řádu p definovaná předpisem (1.53) a \mathbf{t} je reálný vektor dimenze p definovaný předpisem (1.54).

Důkaz. Viz Chandrasekaran a kol. (1998), lemma 3.3 a lemma 3.4.

□

Následující věta, která je vrcholem této podsekcce, shrnuje všechny hlavní poznatky, ke kterým jsme v této podsekcce dospěli.

Věta 1.17. *Nechť $\rho_{\mathbb{X}}$ a $\rho_{\mathbf{Y}}$ jsou známé nezáporné reálné konstanty. Je-li vektor \mathbf{s} definovaný předpisem (1.54) nenulový, potom necht*

$$\rho_{\mathbb{X}} < \frac{\|\mathbb{X}^{\top} \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2}.$$

Naopak, jestliže vektor \mathbf{s} je nulový, potom necht

$$\frac{\|\mathbb{D}_p^{-1} \mathbf{t}\|_2}{\|\mathbb{D}_p^{-2} \mathbf{t}\|_2} < \rho_{\mathbb{X}} < \frac{\|\mathbb{X}^{\top} \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2},$$

kde matice \mathbb{D}_p je definovaná předpisem (1.53) a vektor \mathbf{t} je definovaný předpisem (1.54). Dále necht λ^ je kladné řešení nelineární rovnice (1.56).*

Potom optimalizační úloha

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_2^2,$$

tj. hřebenová regrese s hodnotou parametru $\lambda = \lambda^$, je ekvivalentní s optimalizační úlohou*

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \max_{\|\Delta \mathbb{X}\|_2 \leq \rho_{\mathbb{X}}, \|\Delta \mathbf{Y}\|_2 \leq \rho_{\mathbf{Y}}} \|(\mathbf{Y} + \Delta \mathbf{Y}) - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X})\beta\|_2.$$

Důkaz. Z věty 1.16 plyne existence právě jednoho kladného řešení rovnice (1.56). Samotné tvrzení věty potom plyne z věty 1.12 a věty 1.15. □

V závěrečné větě této podsekcce uvedeme, jak budou vypadat optimální řešení úlohy (1.37) v případě, že není splněna nutná a postačující podmínka existence kladného řešení rovnice (1.56). Tato optimální řešení úzce souvisí s body, pro které není funkce $L(\beta)$ diferencovatelná.

Věta 1.18. (i) *Jestliže*

$$\rho_{\mathbb{X}} \geq \frac{\|\mathbb{X}^{\top} \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2},$$

potom existuje právě jedno optimální řešení úlohy (1.37). Toto řešení je triviální.

(ii) *Nechť vektor \mathbf{s} definovaný předpisem (1.54) je nulový.*

(I) *Jestliže*

$$\rho_{\mathbb{X}} \leq \frac{\|\mathbb{D}_p^{-1} \mathbf{t}\|_2}{\|\mathbb{D}_p^{-2} \mathbf{t}\|_2},$$

potom existuje právě jedno optimální řešení úlohy (1.37). Toto řešení je dáno předpisem

$$\beta = \mathbb{X}^- \mathbf{Y},$$

kde \mathbb{X}^- označuje nějakou pseudoinverzi matice \mathbb{X} .

(II) Jestliže

$$\frac{\|\mathbb{D}_p^{-1}\mathbf{t}\|_2}{\|\mathbb{D}_p^{-2}\mathbf{t}\|_2} = \rho_{\mathbb{X}} = \frac{\|\mathbb{X}^\top \mathbf{Y}\|_2}{\|\mathbf{Y}\|_2},$$

potom existuje nekonečně mnoho optimálních řešení úlohy (1.37).
Tato řešení jsou dána předpisem

$$\boldsymbol{\beta} = \alpha \mathbb{X}^- \mathbf{Y},$$

kde $0 \leq \alpha \leq 1$ a \mathbb{X}^- označuje nějakou pseudoinverzi matice \mathbb{X} .

Důkaz. Viz Chandrasekaran a kol. (1998), věta 3.6. □

1.4.2 Koncept marginálních omezení

Nyní se zaměříme na zbývající druhý koncept, který se často označuje jako koncept marginálních omezení (v angličtině se označuje jako „uncoupled uncertainty“). Jeho hlavní charakteristikou je to, že požadavky na chyby (resp. nepřesnosti) obsažené v datech neformulujeme pomocí jediného (sdruženého) omezení, ale jako několik (obecně různých) omezení pro jednotlivé nezávislé proměnné.

Opět budeme ilustrovat tento koncept na konkrétním příkladě. Předpokládejme, že ρ_1, \dots, ρ_p jsou známé nezáporné reálné konstanty. Tentokrát uvažujme množinu $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ definovanou předpisem

$$\mathcal{U}_{\mathbb{X}} := \left\{ \Delta \mathbb{X} = (\boldsymbol{\delta}_1, \dots, \boldsymbol{\delta}_p) \in \mathbb{R}^{n \times p} : \|\boldsymbol{\delta}_i\|_2 \leq \rho_i, i = 1, \dots, p \right\}. \quad (1.65)$$

O množině $\mathcal{U}_{\mathbf{Y}}$ předpokládáme, že obsahuje pouze nulový vektor dimenze n . Jinými slovy předpokládáme, že měření (resp. data) týkající se závisle proměnné nejsou zatížena žádnou chybou.

Lze tedy nahlédnout, že koncept marginálních omezení je speciálním případem konceptu sdružených omezení, který jsme představili v předchozí podsekcí.

Optimalizační úloha (1.34) se v tomto případě modifikuje na úlohu

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \max_{\Delta \mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \boldsymbol{\beta}\|_2. \quad (1.66)$$

Ukážeme, že za platnosti jistých dodatečných předpokladů je optimalizační úloha (1.66) ekvivalentní s optimalizační úlohou (1.26), tj. s metodou Lasso.

Hlavní myšlenky důkazu a později formulovaného zobecnění budou převzaty z článku Xu a kol. (2010).

Věta 1.19. *Optimalizační úloha (1.66) je ekvivalentní s optimalizační úlohou*

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X} \boldsymbol{\beta}\|_2 + \sum_{i=1}^p \rho_i |\beta_i|. \quad (1.67)$$

Speciálně je-li $\rho_i = \rho$ pro všechna $i = 1, \dots, p$, potom pro vhodnou hodnotu parametru λ je optimalizační úloha (1.66) ekvivalentní s optimalizační úlohou (1.26), tj. s metodou Lasso.

Důkaz. Pro libovolné pevné $\beta \in \mathbb{R}^p$ uvažujme optimalizační úlohu

$$\max_{\Delta \mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2. \quad (1.68)$$

Vezměme libovolné $\Delta \mathbb{X} = (\delta_1, \dots, \delta_p) \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$. Využitím trojúhelníkové nerovnosti a předpisu (1.65) množiny $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ můžeme pro účelovou funkci optimalizační úlohy (1.68) získat následující nerovnost

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}) \beta\|_2 &= \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + (\delta_1, \dots, \delta_p)) \beta\|_2 = \\ &= \|(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta) - (\delta_1, \dots, \delta_p) \beta\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \|(\delta_1, \dots, \delta_p) \beta\|_2 = \\ &= \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \left\| \sum_{i=1}^p \beta_i \delta_i \right\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \sum_{i=1}^p |\beta_i| \|\delta_i\|_2 \leq \\ &\leq \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Nyní dokážeme, že existuje matice $\Delta \mathbb{X}_0 = (\delta_{1,0}, \dots, \delta_{p,0}) \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$, pro niž v nerovnosti (1.69) nastane rovnost. Rozlišíme dva případy:

1. Předpokládejme, že platí $\mathbb{X}\beta = \mathbf{Y}$.

Pro $i = 1, \dots, p$ definujme

$$\delta_{i,0} := -\rho_i \operatorname{sgn}(\beta_i) \mathbf{a},$$

kde \mathbf{a} je libovolný reálný vektor dimenze n s jednotkovou eukleidovskou normou. Potom zřejmě $\Delta \mathbb{X}_0 := (\delta_{1,0}, \dots, \delta_{p,0}) \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ a dále

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta \mathbb{X}_0) \beta\|_2 &= \|(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta) - \Delta \mathbb{X}_0 \beta\|_2 = \\ &= \|-(\delta_{1,0}, \dots, \delta_{p,0}) \beta\|_2 = \\ &= \left\| -\sum_{i=1}^p (-\beta_i \rho_i \operatorname{sgn}(\beta_i) \mathbf{a}) \right\|_2 = \\ &= \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i \|\mathbf{a}\|_2 = \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i = \\ &= \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2 + \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Pro zvolenou matici $\Delta \mathbb{X}_0$ tedy skutečně v nerovnosti (1.69) nastává rovnost.

2. Nyní předpokládejme, že $\mathbb{X}\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{Y}$.

Pro $i = 1, \dots, p$ definujme

$$\boldsymbol{\delta}_{i,0} := -\frac{\rho_i \operatorname{sgn}(\beta_i)}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}).$$

Je zřejmé, že $\Delta\mathbb{X}_0 := (\boldsymbol{\delta}_{1,0}, \dots, \boldsymbol{\delta}_{p,0}) \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}$. Současně platí, že

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X}_0)\boldsymbol{\beta}\|_2 &= \|(\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}) - (\boldsymbol{\delta}_{1,0}, \dots, \boldsymbol{\delta}_{p,0})\boldsymbol{\beta}\|_2 = \\ &= \left\| (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}) + \sum_{i=1}^p \left(\frac{|\beta_i| \rho_i}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} (\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}) \right) \right\|_2 = \\ &= \left[1 + \frac{1}{\|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2} \left(\sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i \right) \right] \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 = \\ &= \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i. \end{aligned} \quad (1.71)$$

Také v tomto případě nastává pro zvolenou matici $\Delta\mathbb{X}_0$ v nerovnosti (1.69) rovnost.

Z nerovnosti (1.69) a rovností (1.70) a (1.71) plyne, že

$$\max_{\Delta\mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X})\boldsymbol{\beta}\|_2 = \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \sum_{i=1}^p |\beta_i| \rho_i,$$

a jelikož byl vektor $\boldsymbol{\beta}$ volen libovolně, je dokázáno, že optimalizační úloha (1.66) je ekvivalentní s optimalizační úlohou (1.67).

Nechť $\rho_i = \rho$ pro všechna $i = 1, \dots, p$ a $\boldsymbol{\beta}^*$ buď optimální řešení úlohy (1.67). Důkaz speciální části potom plyne z článku Belloni a kol. (2011), ve kterém autoři dokázali ekvivalenci optimalizační úlohy

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\boldsymbol{\beta}\|_2 + \rho \sum_{i=1}^p |\beta_i|,$$

kterou označují jako „square-root lasso“, s optimalizační úlohou (1.26), kde parametr $\lambda = \|\boldsymbol{\beta}^*\|_1$. □

Množinu $\mathcal{U}_{\mathbb{X}}$ a větu 1.19 lze snadno zobecnit i pro jinou než eukleidovskou normu.

Věta 1.20. *Nechť $q \geq 1$ a uvažujme množinu*

$$\mathcal{U}_{\mathbb{X}}^q := \left\{ \Delta\mathbb{X} = (\boldsymbol{\delta}_1, \dots, \boldsymbol{\delta}_p) \in \mathbb{R}^{n \times p} : \|\boldsymbol{\delta}_i\|_q \leq \rho_i, i = 1, \dots, p \right\}.$$

Optimalizační úloha

$$\min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p} \max_{\Delta\mathbb{X} \in \mathcal{U}_{\mathbb{X}}^q} \|\mathbf{Y} - (\mathbb{X} + \Delta\mathbb{X})\boldsymbol{\beta}\|_2$$

je ekvivalentní s optimalizační úlohou

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_q + \sum_{i=1}^p \rho_i |\beta_i|.$$

Důkaz. Jedná se o analogii důkazu věty 1.19. □

V příkladech z praxe často není zcela zřejmé, jak velkou hodnotu parametru $\rho_{\mathbb{X}}$ z předpisu (1.35) bychom měli zvolit. Totéž se týká i volby hodnot parametrů ρ_1, \dots, ρ_p z předpisu (1.65). V praxi se proto při modelování chyb měření spíše využívají přístupy, na které lze v určitém smyslu nahlížet jako na zobecnění konceptu sdružených, resp. marginálních omezení.

Pro ilustraci nyní stručně popíšeme a v podsekcích 1.5.2 a 1.5.3 na náhodně generovaných datech otestujeme jeden z nejčastěji preferovaných přístupů, který je podrobně zkoumán v knize Buonaccorsi (2010):

Abychom zohlednili případné chyby měření, definujeme regresní matici \mathbb{X}^* předpisem

$$\mathbb{X}^* := \left(x_{i,j}^*\right)_{i,j=1}^{n,p} = \left(x_{i,j} + \Delta x_{i,j}\right)_{i,j=1}^{n,p},$$

kde $\mathbf{x}_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,p})^\top$, $i = 1, \dots, n$, označuje i -té pozorování a $\Delta \mathbf{x}_i = (\Delta x_{i,1}, \dots, \Delta x_{i,p})^\top$, $i = 1, \dots, n$, obsahuje chyby jednotlivých proměnných v i -tém pozorování, přičemž předpokládáme, že $\Delta x_{1,j}, \dots, \Delta x_{n,j}$, $j = 1, \dots, p$, jsou realizace náhodné veličiny ΔX_j s rozdělením $N(0, \kappa_j^2)$, kde $\kappa_j \geq 0$. V našich příkladech budeme předpokládat, že hodnota κ_j , $j = 1, \dots, p$, je známá. V praxi lze tuto hodnotu odhadnout např. na základě předchozích měření. Předpokládáme tedy platnost modelu

$$Y_i = (\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_i)^\top \beta + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.72)$$

kde $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)^\top$ je hledaný vektor regresních parametrů a $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)^\top$ je náhodný vektor splňující $E \varepsilon = \mathbf{0}$ a $\text{var} \varepsilon = \sigma^2 \mathbf{I}_n$.

1.5 Simulační studie

V této sekci budeme na náhodně generovaných datech zkoumat a porovnávat robustnost odhadů vektoru regresních parametrů získaných metodou nejmenších čtverců, hřebenovou regresí, metodou Lasso a jednou z nejznámějších metod robustní regrese tzv. metodou LTS.

Název metody LTS je akronymem anglického výrazu „Least Trimmed Squares“, který nám může napovědět, že se jedná o zobecnění metody nejmenších čtverců. Vyjdeme-li totiž z definice 1.1 a rovnice (1.4), je odhad vektoru regresních parametrů získaný metodou LTS dán jako

$$\hat{\beta}_{LTS} = \underset{\beta \in \mathbb{R}^p}{\text{argmin}} \sum_{i=1}^h u_{(i)}^2(\beta), \quad (1.73)$$

kde pro libovolné $\beta \in \mathbb{R}^p$ a $j = 1, \dots, n$ definujeme j -té residuum předpisem

$$u_j(\beta) = Y_j - \mathbf{x}_j^\top \beta$$

a výrazem $u_{(i)}^2(\beta)$ potom rozumíme i -tou pořadovou statistiku mezi čtverci residuí $u_1^2(\beta), \dots, u_n^2(\beta)$, tj. požadujeme, aby platilo

$$u_{(1)}^2(\beta) \leq \dots \leq u_{(n)}^2(\beta).$$

Konstanta h se označuje jako tzv. usekávací konstanta (jedná se o překlad anglického výrazu „trimming constant“) a požaduje se, aby vyhovovala nerovnosti

$$0,5n \leq h \leq n.$$

Z předpisu (1.73) tedy plyne, že $n - h$ pozorování s největšími hodnotami residuí nemá žádný vliv na hledaný odhad $\hat{\beta}_{LTS}$. Charakteristickou vlastností metody LTS je tedy fakt, že má velký bod selhání, tzn. je velmi rezistentní vůči přítomnosti výrazně odlehých hodnot.

Je-li $h = n$, potom odhad $\hat{\beta}_{LTS}$ je totožný s odhadem vektoru regresních parametrů získaným metodou nejmenších čtverců. Připomeňme, že tento odhad značíme $\hat{\beta}_{OLS}$. Pro podrobnější informace o LTS regresi odkazujeme čtenáře na článek Rousseeuw (1984).

Ke generování dat jakož i k implementaci jednotlivých odhadů použijeme statistický program R (R Core Team (2016)). Zdrojové kódy odpovídající jednotlivým podsekcím obsahují ve svém názvu číslo příslušné podseky a lze je nalézt na přiloženém disku CD-ROM ve složce Regresní analýza.

V tabulce 1.1 spolu s názvy funkcí programu R užitých k výpočtu jednotlivých odhadů uvádíme také názvy balíčků, které tyto funkce obsahují a informace, ve které z následujících podsekcí tyto funkce používáme.

Tabulka 1.1: Přehled funkcí programu R použitých k implementaci odhadů vektoru regresních parametrů

Regresní metoda	R balíček	Funkce	Podseky
OLS	stats	lm	1.5.1, 1.5.2, 1.5.3
Ridge	parcor	ridge.cv	1.5.1
	MASS	lm.ridge	1.5.2, 1.5.3
Lasso	lars	lars	1.5.1, 1.5.2, 1.5.3
LTS	robustbase	ltsReg	1.5.1, 1.5.2, 1.5.3

Vhodnou hodnotu parametru λ z optimalizační úlohy (1.11) budeme v sekci 1.5.1 hledat pomocí křížové validace, přesněji řečeno minimalizací chyby validace. V sekci 1.5.2 použijeme zobecněnou křížovou validaci, která byla navržena v článku Golub a kol. (1979).

Při hledání odhadu vektoru regresních parametrů metodou Lasso budeme vycházet z optimalizační úlohy

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbb{X}\beta\|_2^2, \\ \text{s.t.} \quad & \|\beta\|_1 \leq s \|\hat{\beta}_{OLS}\|_1, \end{aligned} \tag{1.74}$$

kde $s \in [0,1]$ je parametr. Povšimněme si, že optimalizační úloha (1.74) je ekvivalentní s optimalizační úlohou (1.27), jestliže položíme

$$t = s \left\| \widehat{\beta}_{OLS} \right\|_1. \quad (1.75)$$

Vhodnou hodnotu parametru s budeme následně hledat pomocí křížové validace. Uvědomme si, že v případě volby $s = 1$ je optimálním řešením úlohy (1.74) odhad $\widehat{\beta}_{OLS}$. Poznamenejme ještě, že pouze v případě funkce `ltsReg` používáme jiné než defaultní nastavení vstupních parametrů. Hodnotu usekávací konstanty h totiž definujeme jako $h := 0.75n$.

1.5.1 Robustnost regresních metod v přítomnosti odlehlého pozorování

V této podsekcí budeme zkoumat robustnost regresních metod uvedených v tabulce 1.1 vůči přítomnosti odlehlého pozorování. Bude nás tedy zajímat, jak se změní odhady vektoru regresních parametrů, pokud nejdříve naše data obsahují odlehlé pozorování a poté je-li toto odlehlé pozorování odstraněno.

Data, se kterými budeme dále pracovat, jsme získali následujícím způsobem. Zvolili jsme:

počet pozorování $n := 20$,
 počet regresorů $p := 2$,
 $\beta = (\beta_0, \beta_1)^\top := (-1, 2)^\top$,
 $x_{1,0} = \dots = x_{n-1,0} := 1$,
 $X_1 \sim N(0, 1)$ s realizacemi $x_{1,1}, \dots, x_{n-1,1}$,
 $\varepsilon \sim N(0, 9/100)$ s realizacemi $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-1}$,
 $Y_i := \beta_0 x_{i,0} + \beta_1 x_{i,1} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n-1$,
 odlehlé pozorování $((x_{n,0}, x_{n,1}), Y_n) := ((0, M \max \{x_{1,1}, \dots, x_{n-1,1}\}), 0)$,
 kde $M = 2$.

Nejdříve uvažujme data obsahující odlehlé pozorování. V souladu se značením zavedeným v sekci 1.1 tedy máme

$$\mathbb{X}_{20 \times 2}^{\text{op}} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{19,1} \\ 0 & x_{20,1} \end{pmatrix}, \mathbf{Y}_{20}^{\text{op}} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_{19} \\ 0 \end{pmatrix}, \beta^{\text{op}} = (\beta_0^{\text{op}}, \beta_1^{\text{op}})^\top = (-1, 2)^\top.$$

V tabulce 1.2 potom můžeme nalézt odhady regresních parametrů β_0^{op} a β_1^{op} , které jsme označili $\widehat{\beta}_0^{\text{op}}$ a $\widehat{\beta}_1^{\text{op}}$, odpovídající uvažovaným regresním metodám.

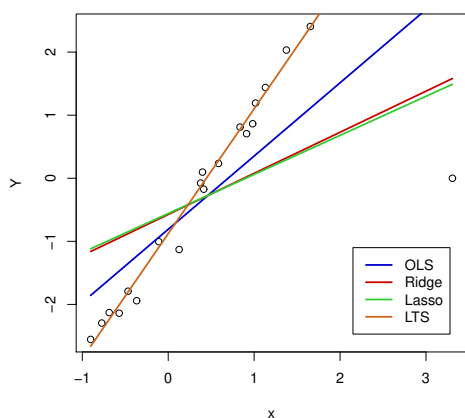
Pomocí křížové validace jsme zjistili, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 14,87 a parametr s příslušný metodě Lasso má hodnotu 0,53.

Tabulka 1.2: Odhady vektoru regresních parametrů pro data s odlehlým pozorováním a pro totožná data bez odlehlého pozorování

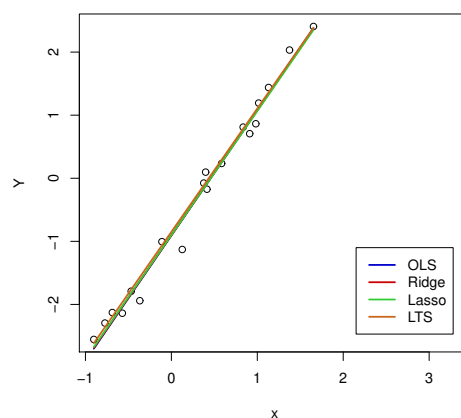
Regresní metoda	$\hat{\beta}_0^{\text{op}}$	$\hat{\beta}_1^{\text{op}}$	$\hat{\beta}_0^{\text{bop}}$	$\hat{\beta}_1^{\text{bop}}$	$ \hat{\beta}_0^{\text{op}} - \hat{\beta}_0^{\text{bop}} $	$ \hat{\beta}_1^{\text{op}} - \hat{\beta}_1^{\text{bop}} $
OLS	-0,8088	1,1611	-0,9071	1,9875	0,0983	0,8264
Ridge	-0,5734	0,6513	-0,9047	1,9798	0,3312	1,3284
Lasso	-0,5587	0,6194	-0,9007	1,9670	0,3420	1,3476
LTS	-0,8780	1,9790	-0,8497	1,9555	0,0283	0,0235

Abychom získali určitou geometrickou představu spojenou s těmito odhady, lze v obrázku 1.1 nalézt regresní přímky zkonstruované na základě spočtených odhadů regresních parametrů (viz tabulka 1.2) odpovídajících jednotlivým regresním metodám. Např. regresní přímka označená jako OLS je tedy dána předpisem

$$Y = -0,8088 + 1,1611x.$$



Obrázek 1.1: Regresní přímky v přítomnosti odlehlého pozorování



Obrázek 1.2: Regresní přímky po odstranění odlehlého pozorování

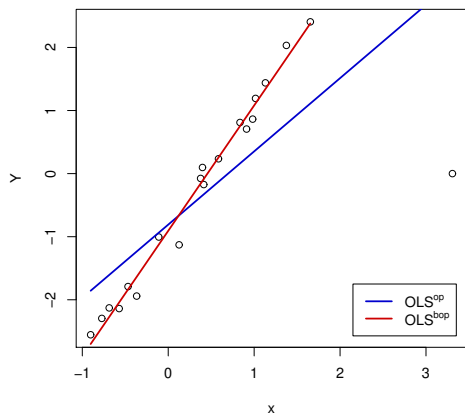
Nyní uvažujme data po odstranění odlehlého pozorování. Opět s využitím značení ze sekce 1.1 máme

$$\mathbb{X}_{19 \times 2}^{\text{bop}} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{19,1} \end{pmatrix}, \mathbf{Y}_{19}^{\text{bop}} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_{19} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta}^{\text{bop}} = (\beta_0^{\text{bop}}, \beta_1^{\text{bop}})^\top = (-1, 2)^\top.$$

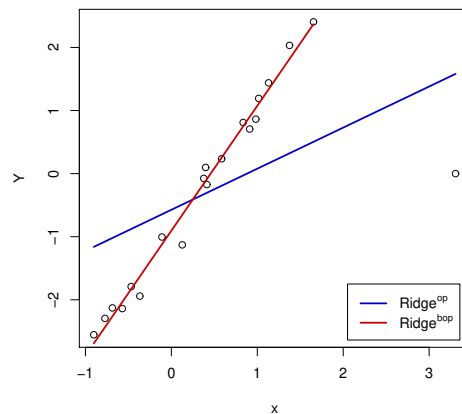
V tabulce 1.2 potom opět lze nalézt odhady regresních parametrů β_0^{bop} a β_1^{bop} (označené jako $\hat{\beta}_0^{\text{bop}}$ a $\hat{\beta}_1^{\text{bop}}$) odpovídající uvažovaným regresním metodám. Pomocí křížové validace bylo zjištěno, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 0,07 a parametr s příslušný metodě Lasso má hodnotu 0,99. Povšimněme

si, že odhady $\hat{\beta}_0^{\text{bop}}$ a $\hat{\beta}_1^{\text{bop}}$ pro jednotlivé regresní metody jsou nyní takřka totožné. Příslušné regresní přímky budou proto taktéž téměř shodné, což potvrzuje obrázek 1.2.

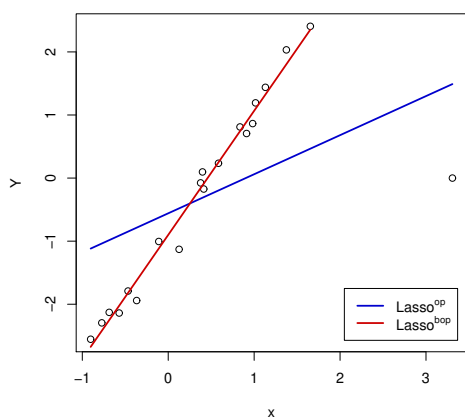
V obrázcích 1.3 - 1.6 je poté modrou barvou znázorněna regresní přímka zkonstruovaná na základě odhadů $\hat{\beta}_0^{\text{op}}$ a $\hat{\beta}_1^{\text{op}}$ spočtených příslušnou regresní metodou. Červenou barvou je následně znázorněna regresní přímka zkonstruovaná na základě odhadů $\hat{\beta}_0^{\text{bop}}$ a $\hat{\beta}_1^{\text{bop}}$ spočtených příslušnou regresní metodou.



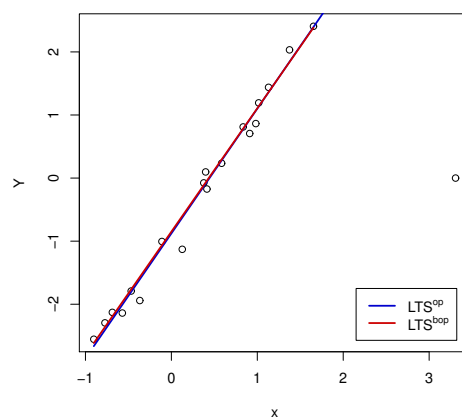
Obrázek 1.3: Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou nejmenších čtverců



Obrázek 1.4: Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných hřebenovou regresí



Obrázek 1.5: Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou Lasso



Obrázek 1.6: Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou LTS

Konečně v tabulce 1.2 můžeme nalézt absolutní hodnoty rozdílu odhadů $\hat{\beta}_i^{\text{op}}$ a $\hat{\beta}_i^{\text{bop}}$, $i = 0, 1$. Největšího rozdílu nabývají odhady spočtené metodou Lasso a hřebenovou regresí. Mnohem menšího rozdílu potom dosahují odhady

spočtené metodou nejmenších čtverců. Nejmenšího rozdílu je dosaženo s odhady spočtenými metodou LTS.

Dospěli jsme tedy k zajímavému závěru, že metoda Lasso a hřebenová regrese jsou méně robustní vůči přítomnosti odlehlého pozorování než metoda nejmenších čtverců. Máme-li tedy podezření, že naše data obsahují odlehlá pozorování, není obecně vhodné preferovat místo metody nejmenších čtverců použití některé z metod regularizované regrese. V takovém případě by spíše stálo za zvážení, zda raději nepoužít metodu LTS, která pro naše data vyšla jako nejvíce robustní vůči přítomnosti odlehlého pozorování.

1.5.2 Robustnost regresních metod v přítomnosti chyb měření

V této podsekcí budeme zkoumat robustnost regresních metod uvedených v tabulce 1.1 vůči přítomnosti chyb měření vysvětlujících proměnných. Bude nás tedy zajímat, jak se změní odhady regresních parametrů, pokud nejdříve vyjdeme z rovnice (1.3) a následně zohledníme-li skutečnost, že jednotlivé vysvětlující proměnné jsou zatíženy chybou měření, a proto budeme předpokládat platnost modelu (1.72), který lze ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$E Y_i = \beta_1(x_{i,1} + \Delta x_{i,1}) + \cdots + \beta_p(x_{i,p} + \Delta x_{i,p}), \quad i = 1, \dots, n,$$

kde $\Delta x_{1,j}, \dots, \Delta x_{n,j}$, $j = 1, \dots, p$, jsou realizace náhodné veličiny ΔX_j s rozdělením $N(0, \kappa_j^2)$, kde $\kappa_j \geq 0$ je známé. Jinými slovy chyby měření jsou uvažovány formou matice $\Delta \mathbb{X} = (\Delta x_{i,j})_{i,j=1}^{n,p}$.

Data, se kterými budeme pracovat v této podsekcí jsme získali s využitím následujícího nastavení:

$$\begin{aligned} &\text{počet pozorování } n := 30, \\ &\text{počet regresorů } p := 3, \\ &\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)^\top := (-2, 2, -1)^\top, \\ &x_{1,0} = \cdots = x_{n,0} := 1, \\ &X_1 \sim N(5, 1) \text{ s realizacemi } x_{1,1}, \dots, x_{n,1}, \\ &X_2 \sim N(0, 4) \text{ s realizacemi } x_{1,2}, \dots, x_{n,2}, \\ &\Delta X_1 \sim N(0, 1/2500) \text{ s realizacemi } \Delta x_{1,1}, \dots, \Delta x_{n,1}, \\ &\Delta X_2 \sim N(0, 1/10000) \text{ s realizacemi } \Delta x_{1,2}, \dots, \Delta x_{n,2}, \\ &\varepsilon \sim N(0, 49/400) \text{ s realizacemi } \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n, \\ &Y_i := \beta_0 x_{i,0} + \beta_1(x_{i,1} + \Delta x_{i,1}) + \beta_2(x_{i,2} + \Delta x_{i,2}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Nejdříve uvažujme data, která nezohledňují chyby měření. Vyjdeme ze značení zavedeného v sekci 1.1 a označme

$$\mathbb{X}_{30 \times 3}^0 = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} & x_{30,2} \end{pmatrix}, \mathbf{Y}_{30}^0 = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_{30} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta}^0 = (\beta_0^0, \beta_1^0, \beta_2^0)^\top.$$

V tabulce 1.3 lze nalézt odhady regresních parametrů $\beta_i^0, i = 0, 1, 2$, které jsme označili $\hat{\beta}_i^0, i = 0, 1, 2$, odpovídající uvažovaným regresním metodám. Pomocí zobecněné křížové validace jsme zjistili, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 0,0460. Parametr s příslušný metodě Lasso hledaný křížovou validací má hodnotu 0,9896.

Tabulka 1.3: Odhady vektoru regresních parametrů pro data (ne)zohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných

Regresní metoda	$\hat{\beta}_0^0$	$\hat{\beta}_1^0$	$\hat{\beta}_2^0$	$\hat{\beta}_0^\Delta$	$\hat{\beta}_1^\Delta$	$\hat{\beta}_2^\Delta$
OLS	-2,2227	2,0307	-1,0626	-2,1439	2,0163	-1,0614
Ridge	-2,2090	2,0282	-1,0610	-2,1314	2,0140	-1,0600
Lasso	-2,0756	2,0033	-1,0536	-2,0063	1,9907	-1,0529
LTS	-2,2227	2,0307	-1,0626	-2,4372	2,0750	-1,0674

Nyní uvažujme data zohledňující chyby měření. Regresní matice je dána předpisem

$$\begin{aligned} \mathbb{X}_{30 \times 3}^\Delta &= \mathbb{X}_{30 \times 3}^0 + \Delta \mathbb{X}_{30 \times 3}^0 = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} & x_{30,2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \Delta x_{1,1} & \Delta x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \Delta x_{30,1} & \Delta x_{30,2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} + \Delta x_{1,1} & x_{1,2} + \Delta x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} + \Delta x_{30,1} & x_{30,2} + \Delta x_{30,2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

a vektor regresních parametrů nyní označme

$$\beta^\Delta = (\beta_0^\Delta, \beta_1^\Delta, \beta_2^\Delta)^\top = (-2, 2, -1)^\top.$$

Odezva zůstává stejná, tj. $\mathbf{Y}_{30}^\Delta = \mathbf{Y}_{30}^0$. V tabulce 1.3 můžeme následně nalézt odhady regresních parametrů $\beta_i^\Delta, i = 0, 1, 2$, (budeme je značit jako $\hat{\beta}_i^\Delta, i = 0, 1, 2$) odpovídající uvažovaným regresním metodám. Pomocí zobecněné křížové validace jsme zjistili, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 0,0420. Parametr s příslušný metodě Lasso hledaný křížovou validací má hodnotu 0,9901. Nás ale především zajímají absolutní hodnoty rozdílů odhadů $\hat{\beta}_i^0$ a $\hat{\beta}_i^\Delta, i = 0, 1, 2$, které uvádíme v tabulce 1.4.

V tabulce 1.4 posléze můžeme nahlédnout, že nejmenšího rozdílu nabývají odhady spočtené metodou Lasso a hřebenovou regresi. O něco většího rozdílu dosahují odhady spočtené metodou nejmenších čtverců. Nejhůře z tohoto srovnání tedy vychází odhady spočtené metodou LTS.

Z uvažovaných regresních metod se tedy metoda Lasso a hřebenová regrese (těsně následované metodou nejmenších čtverců) zdají být nejvíce robustní vůči

přítomnosti chyb měření vysvětlujících proměnných. Metoda LTS, která v předchozí podsekcí vyšla ze srovnání jako nejvíce robustní, je nyní velmi citlivá vůči přítomnosti chyb měření, což je dáno tím, že principiálně vychází z metody nejmenších čtverců.

Tabulka 1.4: Absolutní hodnoty rozdílu odhadů regresních parametrů pro data zohledňující a nezohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných

Regresní metoda	$ \hat{\beta}_0^0 - \hat{\beta}_0^\Delta $	$ \hat{\beta}_1^0 - \hat{\beta}_1^\Delta $	$ \hat{\beta}_2^0 - \hat{\beta}_2^\Delta $
OLS	0,0789	0,0144	0,0012
Ridge	0,0776	0,0141	0,0010
Lasso	0,0693	0,0126	0,0006
LTS	0,2145	0,0443	0,0048

1.5.3 Robustnost regresních metod v přítomnosti chyb měření a multikolinearity

Při zkoumání robustnosti uvažovaných regresních metod nyní navážeme na předchozí podsekcí, navíc ale budeme předpokládat, že kromě výskytu chyb měření vysvětlujících proměnných nastává problém s multikolinearitou (viz podsekcce 1.3.1).

Data se kterými budeme ve zbytku této podsekcce pracovat, jsme zvolili pomocí tohoto nastavení:

počet pozorování $n := 30$,

počet regresorů $p := 3$,

$\boldsymbol{\beta} = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)^\top := (-6, 1, -3)^\top$,

$x_{1,0} = \dots = x_{n,0} := 1$,

$X_1 \sim N(5, 9/4)$ s realizacemi $x_{1,1}, \dots, x_{n,1}$,

$X_2 = X_1 + Z$, kde $Z \sim N(0, 1/4)$ s realizacemi z_1, \dots, z_n , realizace náhodné veličiny X_2 necht' jsou tedy $x_{1,2} = x_{1,1} + z_1, \dots, x_{n,2} = x_{n,1} + z_n$,

$\Delta X_1 \sim N(0, 9/250000)$ s realizacemi $\Delta x_{1,1}, \dots, \Delta x_{n,1}$,

$\Delta X_2 \sim N(0, 81/1000000)$ s realizacemi $\Delta x_{1,2}, \dots, \Delta x_{n,2}$,

$\varepsilon \sim N(0, 9/25)$ s realizacemi $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$,

$Y_i := \beta_0 x_{i,0} + \beta_1(x_{i,1} + \Delta x_{i,1}) + \beta_2(x_{i,2} + \Delta x_{i,2}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$.

Opět nejdříve uvažujme data, která nezohledňují chyby měření. Zavedeme následující značení

$$\mathbb{X}_{30 \times 3}^{m,0} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,1} + z_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} & x_{30,1} + z_{30} \end{pmatrix}, \mathbf{Y}_{30}^{m,0} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_{30} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta}^{m,0} = (\beta_0^{m,0}, \beta_1^{m,0}, \beta_2^{m,0})^\top.$$

Hodnota výběrového korelačního koeficientu mezi druhým a třetím regresorem má v našem případě hodnotu 0,88. Tyto regresory tedy mohou zapříčinit vznik multikolinearity. Odhady regresních parametrů $\beta_i^{m,0}$, $i = 0, 1, 2$, které jsme označili $\hat{\beta}_i^{m,0}$, $i = 0, 1, 2$, odpovídající uvažovaným regresním metodám lze nalézt v tabulce 1.5. Pomocí zobecněné křížové validace jsme dále zjistili, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 0,0290. Parametr s příslušný metodě Lasso hledaný křížovou validací má hodnotu 0,9224.

Tabulka 1.5: Odhady vektoru regresních parametrů pro data (ne)zohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných při nebezpečí multikolinearity

Regresní metoda	$\hat{\beta}_0^0$	$\hat{\beta}_1^0$	$\hat{\beta}_2^0$	$\hat{\beta}_0^\Delta$	$\hat{\beta}_1^\Delta$	$\hat{\beta}_2^\Delta$
OLS	-6,1986	1,4668	-3,4487	-6,1645	1,4350	-3,4227
Ridge	-6,1975	1,4467	-3,4288	-6,1637	1,4155	-3,4034
Lasso	-6,1284	1,2671	-3,2615	-6,0976	1,2409	-3,2405
LTS	-6,5512	1,5787	-3,4903	-6,5044	1,5413	-3,4612

Konečně uvažujme data zohledňující chyby měření. Regresní matice je nyní

$$\begin{aligned} \mathbb{X}_{30 \times 3}^{m,\Delta} &= \mathbb{X}_{30 \times 3}^{m,0} + \Delta \mathbb{X}_{30 \times 3}^{m,0} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{1,1} + z_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} & x_{30,1} + z_{30} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \Delta x_{1,1} & \Delta x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \Delta x_{30,1} & \Delta x_{30,2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} + \Delta x_{1,1} & x_{1,1} + z_1 + \Delta x_{1,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{30,1} + \Delta x_{30,1} & x_{30,1} + z_{30} + \Delta x_{30,2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

vektor regresních parametrů je potom dán jako

$$\boldsymbol{\beta}^{m,\Delta} = (\beta_0^{m,\Delta}, \beta_1^{m,\Delta}, \beta_2^{m,\Delta})^\top = (-6, 1, -3)^\top.$$

Odezva splňuje rovnost $\mathbf{Y}_{30}^{m,\Delta} = \mathbf{Y}_{30}^{m,0}$. Odhady regresních parametrů $\beta_i^{m,\Delta}$, $i = 0, 1, 2$, které značíme jako $\hat{\beta}_i^{m,\Delta}$, $i = 0, 1, 2$, odpovídající uvažovaným regresním metodám můžeme taktéž nalézt v tabulce 1.5. Zobecněnou křížovou validací jsme zjistili, že parametr λ příslušný hřebenové regresi má hodnotu 0,0290. Křížovou validací jsme zjistili, že parametr s příslušný metodě Lasso má hodnotu 0,9236.

Nás ovšem hlavně zajímají absolutní hodnoty rozdílů odhadů $\hat{\beta}_i^{m,0}$ a $\hat{\beta}_i^{m,\Delta}$, $i = 0, 1, 2$, které lze nalézt v tabulce 1.6. Nejmenšího rozdílů v absolutní hodnotě opět nabývají odhady spočtené metodou Lasso a hřebenovou regresi, dále následují metoda nejmenších čtverců a metoda LTS.

Tabulka 1.6: Absolutní hodnoty rozdílu odhadů regresních parametrů pro data zohledňující a nezohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných při nebezpečí multikolinearity

Regresní metoda	$ \hat{\beta}_0^{m,0} - \hat{\beta}_0^{m,\Delta} $	$ \hat{\beta}_1^{m,0} - \hat{\beta}_1^{m,\Delta} $	$ \hat{\beta}_2^{m,0} - \hat{\beta}_2^{m,\Delta} $
OLS	0,0342	0,0318	0,0260
Ridge	0,0338	0,0312	0,0255
Lasso	0,0308	0,0262	0,0210
LTS	0,0469	0,0374	0,0291

I při hrozbě multikolinearity tak metoda Lasso a hřebenová regrese zůstávají nejvíce robustní vůči přítomnosti chyb měření vysvětlujících proměnných. Metoda nejmenších čtverců se ve srovnání s metodou Lasso s touto situací vyrovnává mnohem hůře. LTS odhad trpí nejen kvůli přítomnosti chyb měření, ale také kvůli multikolinearitě.

Kapitola 2

Klasifikační analýza

Úloha klasifikace (nebo ekvivalentně klasifikační analýza) je studována v kontextu mnohorozměrné statistiky a strojového učení. Touto úlohou rozumíme situaci, kdy máme k dispozici několik objektů (tzv. trénovací množinu), které náleží do právě jedné z předem specifikovaných disjunktních tříd. Zároveň na každém z objektů pozorujeme určitou sadu znaků. Cílem klasifikační analýzy je na základě těchto pozorování stanovit tzv. rozhodovací pravidlo (nazývané také jako klasifikátor), které umožní jednoznačně zařadit do jedné z uvažovaných tříd objekt s libovolnou sadou znaků. Získáváme tak nástroj, s jehož pomocí dokážeme zařadit i nově uvažovaný objekt, u něhož známe pouze jeho sadu znaků.

Patrně nejznámější klasickou metodou klasifikační analýzy je lineární diskriminační analýza, která byla poprvé publikována v článku anglického statistika a evolučního biologa sira Ronalda A. Fishera již před 80 lety (viz Fisher (1936)).

Vznik a neustálý rozvoj moderních klasifikačních metod je spojen především s prudkým navyšováním výkonu procesorů (viz článek Moore (1965), ve kterém autor formuluje domněnku, která později vešla ve známost jako tzv. Mooreův zákon, že počet tranzistorů na čipu se každé dva roky zdvojnásobí) a zlepšováním paměti výpočetních systémů. Zájemce o studium moderních klasifikačních metod v kontextu strojového učení odkazujeme na knihu Berka (2003). Mezi nejznámější moderní klasifikační metody patří náhodné lesy (viz Breiman (2001)), neuronové sítě (viz Haykin (2009)) nebo metoda SVM, kterou se v této kapitole budeme zabývat.

V první části této kapitoly seznámíme čtenáře s lineární metodou SVM. V další části představíme základy teorie jádrových funkcí, díky nimž dokážeme zobecnit lineární metodu SVM na metodu nelineární. Následně díky uvedeným poznatkům vybudujeme metodu SVM, kterou lze uplatnit v robustní klasifikaci. V závěru této kapitoly se budeme zabývat praktickým příkladem biometrické identifikace stylu psaní a osob podle dynamiky stisku počítačových kláves.

2.1 Úvodní poznámky k metodě SVM

Název této metody je akronymem anglického výrazu „Support Vector Machines“. V česky psané literatuře bohužel pro tento výraz neexistuje jednotný

ustálený překlad. Někteří autoři používají ve svých pracích pojem metoda (příp. algoritmus) podpůrných (příp. nosných) vektorů, jiní se přiklánějí k pojmu podpůrné vektorové stroje nebo SVM klasifikátor. My budeme ve zbytku této kapitoly používat terminologii zavedenou ve skriptech Holeňa (2006) a hovořit tak o této metodě jako o metodě SVM.

Ústřední postavou spojenou se vznikem metody SVM je ruský matematik a informatik Vladimir N. Vapnik, který se prakticky celý svůj profesní život věnuje teorii strojového učení. V kontextu této teorie lze na metodu SVM nahlížet jako na algoritmus učení s učitelem (tzv. „supervised learning“) – pro detailnější informace odkazujeme čtenáře na knihu Vapnik (2000). Od konce 90. let minulého století potom aplikací poznatků z teorie optimalizace, funkcionální analýzy, matematické statistiky a dalších disciplín dochází k rozvoji a zobecnění původní metody.

Na závěr této sekce zavedme značení, které budeme ve zbytku kapitoly používat. Pro $n \in \mathbb{N}$ uvažujme konečnou posloupnost dvojic

$$(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, \quad (2.1)$$

kde $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p, p \in \mathbb{N}$ a $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$. Jinými slovy uvažujeme trénovací množinu obsahující n objektů, přičemž p -dimenzionální reálný vektor $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$, nazýváme instancí i -tého objektu a y_i udává příslušnost buď ke třídě označené číslicí -1 , nebo příslušnost ke třídě označené číslicí 1 . Toto značení tříd jsme zavedli z čistě technických důvodů. Předpokládejme, že existuje alespoň jedna dvojice indexů $i, j, i \neq j$, pro které $y_i \neq y_j$. Uvažujeme tedy dvě třídy a zabýváme se tak úlohou tzv. binární klasifikace.

Konečně definujme množiny T_+ a T_- předpisem

$$T_+ := \{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n : y_i = 1\}, \quad (2.2)$$

$$T_- := \{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n : y_i = -1\}. \quad (2.3)$$

Množina T_+ , resp. množina T_- , tedy obsahuje instance objektů náležících do třídy označené číslicí 1 , resp. číslicí -1 .

Nášim cílem bude s využitím posloupnosti dvojic (2.1) sestavit rozhodovací pravidlo $R : \mathbb{R}^p \rightarrow \{-1, 1\}$ umožňující klasifikovat nově uvažovaný objekt podle jeho instance \mathbf{x} . Toto rozhodovací pravidlo založíme na (v jistém slova smyslu) optimální funkci $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ a definujeme jej předpisem

$$R(\mathbf{x}) := \text{sgn}(f(\mathbf{x})). \quad (2.4)$$

V sekci 2.2 se nejdříve omezíme pouze na lineární funkce f , v sekci 2.3 potom naše úvahy zobecníme i pro nelineární funkce f .

Aby bylo možné takovou funkci f nalézt, je nutné připojit požadavek, aby mezi objekty z trénovací množiny a nově uvažovanými objekty existovala nějaká souvislost. Toho lze dosáhnout např. tím, že budeme požadovat, aby dané dvojice (2.1) a nově uvažované dvojice (\mathbf{x}, y) byly nezávisle generovány stejnou (zřejmě

neznámou) pravděpodobnostní mírou P definovanou na množině $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$. Ekvivalentně bychom mohli požadovat, aby instance \mathbf{x} byla generována vzhledem k (neznámé) marginální pravděpodobnostní míře $P_{\mathcal{X}}$ na \mathcal{X} a následně aby hodnota y byla generována vzhledem k (neznámé) pravděpodobnostní míře $P(\cdot|\mathbf{x})$ na \mathcal{Y} . Využitím těchto poznatků můžeme nahlédnout, že možnost, že by instance \mathbf{x} nově uvažovaného objektu splňovala rovnost $R(\mathbf{x}) = 0$, nastává s nulovou pravděpodobností. Tím je zaručena korektnost předpisu (2.4).

2.2 Lineární metoda SVM

V této sekci se při hledání optimálního rozhodovacího pravidla omezíme pouze na lineární funkce. To znamená, že budeme předpokládat, že hledaná funkce $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ je dána předpisem

$$f(\mathbf{x}) := \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0, \quad (2.5)$$

kde $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$ a $\beta_0 \in \mathbb{R}$. Rozhodovací pravidlo založené na této funkci je potom tvaru

$$R(\mathbf{x}) := \text{sgn}(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0).$$

Jak ukážeme v následujících dvou podsekcích, hodnoty neznámých parametrů $\boldsymbol{\beta}$ a β_0 lze získat vyřešením vhodně formulovaných optimalizačních úloh. Zároveň uvidíme, že úvahy, které použijeme k sestavení těchto optimalizačních úloh, i optimalizační úlohy samotné se od sebe poměrně výrazně odlišují tím, zda předpokládáme lineární oddělitelnost množin T_+ a T_- či nikoliv.

Hlavní myšlenky jednotlivých úvah, pomocí nichž zformulujeme příslušné optimalizační úlohy, budeme spolu s předpisy těchto úloh přejímat z knih Hastie a kol. (2011, kapitola 12), Schölkopf a Smola (2002, kapitola 7) a Vapnik (2000, sekce 5.5).

2.2.1 Klasifikace lineárně oddělitelných tříd

Jak již napovídá název této podsekce, k předpokladům, které jsme formulovali dříve na začátku kapitoly, připojujeme navíc i požadavek, aby množiny T_+ a T_- byly lineárně oddělitelné. Tím je dle definice A.9 zaručena existence funkce f dané předpisem (2.5) splňující

$$f(\mathbf{x}_i) \begin{cases} > 0, & \text{jestliže } \mathbf{x}_i \in T_+, \\ < 0, & \text{jestliže } \mathbf{x}_i \in T_-. \end{cases} \quad (2.6)$$

Rozhodovací pravidlo založené na této funkci se potom nazývá přesné lineární rozhodovací pravidlo, neboť správně klasifikuje všechny objekty z trénovací množiny. Takových lineárních funkcí (a tedy i rozhodovacích pravidel) vyhovujících podmínce (2.6) ovšem obecně existuje nekonečně mnoho.

Vyvstávají tedy následující otázky:

1. Jakým způsobem stanovit kritérium, na základě kterého nalezneme optimální funkci?

2. Bude nalezená optimální funkce určena jednoznačně?

Odpovědi na tyto otázky uvedeme v první části této podsekcce. Zároveň se pokusíme poskytnout i geometrickou interpretaci.

Uvažujme libovolnou funkci f danou předpisem (2.5) splňující podmínku (2.6). Potom nadrovina H daná předpisem

$$H := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 = 0\} \quad (2.7)$$

rozděluje prostor \mathbb{R}^p na dva otevřené poloprostory, přičemž jeden z těchto poloprostorů (označme jej P_+) obsahuje množinu T_+ , opačný poloprostor (označme jej P_-) obsahuje množinu T_- . Bez újmy na obecnosti (jinak bychom dále místo f psali $-f$) jsou oba zmíněné poloprostory definovány jako

$$P_+ := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 > 0\},$$

$$P_- := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 < 0\}.$$

Dále definujme nadrovinu H_+ předpisem

$$H_+ := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 - d_+ = 0\},$$

kde

$$d_+ := \text{dist}(H, T_+) = \min_{\mathbf{x} \in H, \mathbf{x}_i \in T_+} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2,$$

tj. nadrovina H_+ je obsažena v poloprostoru P_+ , je rovnoběžná s nadrovinou H a obsahuje bod (příp. body) množiny T_+ s minimální vzdáleností od nadroviny H (tato vzdálenost má hodnotu d_+).

Analogicky definujme nadrovinu H_- , tj.

$$H_- := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 + d_- = 0\},$$

přičemž

$$d_- := \text{dist}(H, T_-) = \min_{\mathbf{x} \in H, \mathbf{x}_i \in T_-} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2.$$

Nadrovina H_- je tedy obsažena v poloprostoru P_- , je rovnoběžná s nadrovinou H a obsahuje bod (příp. body) množiny T_- s minimální vzdáleností od nadroviny H (tato vzdálenost má hodnotu d_-). Povšimněme si, že z definice A.9 a předpisu množin T_+ a T_- plyne, že d_+ a d_- jsou nenulová čísla.

Nadroviny H_+ a H_- se nazývají podpůrné (příp. nosné) nadroviny. Instance, kterými tyto nadroviny procházejí, tj. vektory

$$\mathbf{x} \in (H_+ \cup H_-) \cap (T_+ \cup T_-),$$

se nazývají podpůrné (příp. nosné) vektory. Jak uvidíme později, tyto vektory budou hrát klíčovou roli při hledání optimální funkce f . Pro tuto chvíli pouze poznamenejme, že právě podle těchto vektorů odvozuje metoda SVM svůj název.

Povšimněme si, že podpůrné nadroviny H_+ a H_- tvoří okolo nadroviny H jakýsi pomyslný pás, přičemž vnitřek tohoto pásu neobsahuje žádné instance, ale jeho hranice obsahuje všechny podpůrné vektory. Šířka tohoto pásu (tj. vzdálenost nadrovin H_+ a H_-) má zřejmě velikost

$$d := d_+ + d_-.$$

Problém nalezení optimální funkce f je tedy ekvivalentní s problémem nalezení optimální nadroviny H . V knize Vapnik (2000, sekce 5.5) považuje autor za optimální nadrovinu takovou nadrovinu, která lineárně odděluje množiny T_+ a T_- a zároveň vzdálenost této nadroviny od nejbližší instance je maximalizována. Toto doporučení vychází z konceptu, který byl poprvé představen v článku Boser a kol. (1992) a v průběhu následujících let vešel ve známost jako „hard margine SVM“. Jeden z možných argumentů, který potvrzuje vhodnost tohoto přístupu, uvádíme v poznámce 2.14 v sekci 2.4.1.

Ekvivalentně lze toto doporučení přeformulovat tak, že hledáme nadrovinu H , která lineárně odděluje množiny T_+ a T_- a u níž je maximalizována šířka pásu určeného podpůrnými nadrovinami H_+ a H_- (tj. maximalizujeme hodnotu d), přičemž uvažujeme pouze takové nadroviny H , pro něž je vzdálenost od nadrovin H_+ a H_- totožná (tj. musí platit $d_+ = d_-$).

Bez újmy na obecnosti proto pro další analýzu stačí uvažovat pouze takové nadroviny H dané předpisem (2.7), jejichž podpůrné nadroviny jsou definovány jako

$$H_+ := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 = 1 \}, \quad (2.8)$$

$$H_- := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \beta_0 = -1 \}. \quad (2.9)$$

Jinak bychom totiž dále místo β_0 psali $\beta_0 - d_+ + 1$, resp. $\beta_0 + d_- - 1$. Z předpisů (2.8) a (2.9) plyne, že

$$T_+ = \{ \mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \geq 1 \}, \quad (2.10)$$

$$T_- = \{ \mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n : \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \leq -1 \}. \quad (2.11)$$

Z předpisu (2.2) plyne, že (2.10) je ekvivalentní s předpokladem

$$\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \geq 1, \text{ jestliže } y_i = 1, \text{ kde } i = 1, \dots, n. \quad (2.12)$$

Analogicky z předpisu (2.3) plyne, že (2.11) je ekvivalentní s předpokladem

$$\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \leq -1, \text{ jestliže } y_i = -1, \text{ kde } i = 1, \dots, n. \quad (2.13)$$

Předpoklady (2.12) a (2.13) potom lze souhrnně vyjádřit ve tvaru

$$y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.14)$$

Spočtěme nyní šířku pásu určeného podpůrnými nadrovinami H_+ a H_- danými předpisy (2.8) a (2.9). Připomeňme, že vzdálenost libovolného bodu $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^p$ od nadroviny obecně definované předpisem $\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x} + \alpha_0 = 0 \}$ je definována vzorcem

$$\frac{|\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbf{x}_0 + \alpha_0|}{\|\boldsymbol{\alpha}\|_2}.$$

Je-li tedy $\mathbf{x}_0 \in H_+$ libovolný bod nadroviny H_+ , dostáváme, že

$$\text{dist}(H, \mathbf{x}_0) = \min_{\mathbf{x} \in H} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_2 = \frac{|\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_0 + \beta_0|}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} = \frac{|1|}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2} = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}.$$

Vzdálenost nadrovin H a H_+ je tedy

$$d_+ = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}.$$

Jelikož předpokládáme, že $d_+ = d_-$, je také vzdálenost nadrovin H a H_-

$$d_- = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}.$$

Odtud plyne, že vzdálenost nadrovin H_+ a H_- je

$$d = d_+ + d_- = \frac{2}{\|\boldsymbol{\beta}\|_2}.$$

Aby tedy hodnota d byla maximalizována, je nutno minimalizovat hodnotu $\|\boldsymbol{\beta}\|_2$. Jelikož druhá odmocnina z kladného čísla je rostoucí funkce, lze ekvivalentně minimalizovat hodnotu $\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2/2$.

Tudíž úlohu nalezení optimální nadroviny H (neboli optimálních hodnot parametrů $\boldsymbol{\beta}$ a β_0) lze formulovat jako úlohu minimalizace hodnoty $\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2/2$ za podmínky, že příslušná nadrovina H lineárně odděluje množiny T_+ a T_- , přičemž vnitřek pásu určeného podpůrnými nadrovinami H_+ a H_- neobsahuje žádné instance (tj. je splněna podmínka (2.14)), což znamená řešit optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}} \quad & \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2, \\ \text{s.t.} \quad & y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Optimalizační úloha (2.15) je úlohou tzv. kvadratického programování. Připomeňme, že předpokládáme lineární oddělitelnost množin T_+ a T_- a povšimněme si, že účelová funkce je striktně konvexní, jednotlivá omezení jsou lineární, a tedy množina přípustných řešení optimalizační úlohy (2.15) je konvexní. Odtud plyne, že existuje jednoznačně určené řešení optimalizační úlohy (2.15), označme jej $\widehat{\boldsymbol{\beta}}, \widehat{\beta}_0$, a tedy i jednoznačně určené přesné lineární rozhodovací pravidlo.

K nalezení analytického předpisu tohoto optimálního řešení využijeme koncept KKT podmínek optimality. Sestavme nejdříve příslušnou Lagrangeovu funkci L

$$L(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - 1], \quad (2.16)$$

kde $\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0$. Nyní formulujme odpovídající KKT podmínky. Dle podmínky optimality musí platit, že

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = \boldsymbol{\beta} - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \mathbf{x}_i = \mathbf{0}, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_0}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) = - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \quad (2.18)$$

dále dle podmínky přípustnosti musí platit, že

$$1 - y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \leq 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.19)$$

a konečně dle podmínky komplementarity musí platit, že

$$\alpha_i [y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - 1] = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.20)$$

Ze soustavy rovnic (2.17) plyne, že optimální řešení $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ je dáno předpisem

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \sum_{i=1}^n \widehat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i = \sum_{i:y_i=1} \widehat{\alpha}_i \mathbf{x}_i - \sum_{i:y_i=-1} \widehat{\alpha}_i \mathbf{x}_i, \quad (2.21)$$

tj. jedná se o lineární kombinaci (ovšem pouze některých – jak zjistíme později) instancí objektů z trénovací množiny.

Přestože optimální řešení $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$ musí být určeno jednoznačně, v případě optimálních Lagrangeových multiplikátorů $\widehat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, tomu tak obecně být nemusí (viz Schölkopf a Smola (2002, sekce 7.3)). Nicméně z podmínky (2.19) a (2.20) vyplývá, že je-li pro nějaké $i = 1, \dots, n$

$$1 - y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) < 0,$$

tj. instance \mathbf{x}_i není podpůrným vektorem, potom odpovídající Lagrangeův multiplikátor $\widehat{\alpha}_i$ je nulový. Pouze podpůrné vektory, tj. instance \mathbf{x}_i , pro něž platí

$$1 - y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) = 0,$$

mohou mít dle podmínky (2.20) kladný Lagrangeův multiplikátor $\widehat{\alpha}_i$, a tedy v lineární kombinaci (2.21) se mohou objevit pouze podpůrné vektory.

Povšimněme si ještě, že podmínka (2.18) je ekvivalentní s podmínkou

$$\sum_{i:y_i=1} \alpha_i = \sum_{i:y_i=-1} \alpha_i, \quad (2.22)$$

kteřou bychom mohli interpretovat tak, že vliv podpůrných vektorů z třídy označené číslicí 1 je totožný vlivu podpůrných vektorů z třídy označené číslicí -1 .

S využitím předpisu (2.21) tedy lze formulovat optimální přesné lineární rozhodovací pravidlo jako

$$R(\mathbf{x}) = \text{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \widehat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x} + \widehat{\beta}_0 \right).$$

V závěru této podsekcce se ještě vraťme k samotné optimalizační úloze (2.15). S využitím konceptu Lagrangeovy duality (viz Bazaraa a kol. (2006, kapitola 6)), který na optimalizační úlohu (2.15) nahlíží jako na tzv. primární úlohu, formulujeme novou optimalizační úlohu, tzv. duální úlohu, která bude ekvivalentní s optimalizační úlohou (2.15) a současně výpočetně méně náročnější.

Připomeňme, že účelová funkce optimalizační úlohy (2.15) je konvexní (dokonce striktně konvexní), funkce

$$g_i(\boldsymbol{\beta}, \beta_0) = 1 - y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0), \quad i = 1, \dots, n,$$

jsou také konvexní funkce a existuje optimální řešení úlohy (2.15). Jelikož množiny T_+ a T_- jsou lineárně oddělitelné, existuje $\widetilde{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbb{R}^p$ a $\widetilde{\beta}_0 \in \mathbb{R}$ takové, že $g_i(\widetilde{\boldsymbol{\beta}}, \widetilde{\beta}_0) < 0$ pro všechna $i = 1, \dots, n$. Z věty O silné dualitě (věta A.10) plyne, že optimalizační úloha (2.15) je ekvivalentní s (duální) optimalizační úlohou

$$\max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} \theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n), \quad (2.23)$$

kde

$$\theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \min_{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}} L(\beta, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n), \quad (2.24)$$

kde Lagrangeova funkce $L(\beta, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ je definována předpisem (2.16). Souhrnně lze tedy optimalizační úlohu (2.23) formulovat jako

$$\max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}} L(\beta, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n).$$

Nechť $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ jsou pevně zvolená nezáporná čísla a řešme optimalizační úlohu (2.24). Nutné podmínky optimality jsou dány předpisy (2.17) a (2.18). Dosazením výrazu (2.17) a následným využitím předpisu (2.18) lze Lagrangeovu funkci $L(\beta, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$ vyjádřit jako

$$\begin{aligned} L(\beta, \beta_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n) &= L(\beta, \beta_0) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \right)^\top \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j y_j \mathbf{x}_j \right) - \sum_{i=1}^n \alpha_i \left[y_i \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j y_j \mathbf{x}_j^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \right) - 1 \right] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j - \beta_0 \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i + \sum_{i=1}^n \alpha_i = \\ &= \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j, \end{aligned}$$

což je výraz, který nezávisí na proměnných β a β_0 . Duální funkci $\theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ tedy lze vyjádřit jako

$$\theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j. \quad (2.25)$$

S využitím předpisu (2.25) a podmínky (2.18) dostáváme, že duální optimalizační úloha je tedy definována jako

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j \right\}, \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Optimalizační úloha (2.26) je sice stejně jako optimalizační úloha (2.15) úlohou kvadratického programování, ovšem díky jednodušším omezujícím podmínkám je výpočetně méně náročnější. V praxi se proto častěji lze setkat právě s optimalizační úlohou (2.26). Aby pak bylo možné zkonstruovat optimální přesné lineární rozhodovací pravidlo, je nutné dopočítat optimální hodnoty β a β_0 . Jsou-li $\hat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, optimální řešení úlohy (2.26), potom z věty O silné dualitě (věta A.10) plyne, že pro všechna $i = 1, \dots, n$ musí platit

$$\hat{\alpha}_i \left[y_i \left(\hat{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \hat{\beta}_0 \right) - 1 \right] = 0. \quad (2.27)$$

Odtud a z předpisu (2.17) plyne, že $\widehat{\beta}$ lze vyjádřit předpisem (2.21). Zbývá tedy ještě dopočítat optimální hodnotu $\widehat{\beta}_0$. Necht $\widehat{\alpha}_k$ je nenulový Lagrangeův multiplikátor. Z rovnosti (2.27) potom plyne, že musí platit

$$y_k (\widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_k + \widehat{\beta}_0) - 1 = 0, \quad (2.28)$$

tj. \mathbf{x}_k je podpůrný vektor. Odtud plyne vyjádření

$$\widehat{\beta}_0 = \begin{cases} 1 - \widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_k, & \text{jestliže } y_k = 1, \\ -1 - \widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_k, & \text{jestliže } y_k = -1. \end{cases} \quad (2.29)$$

Nicméně z důvodu zlepšení numerické stability výpočtu lze v knize Vapnik (2000, sekce 5.5) nalézt doporučení dopočítat hodnotu $\widehat{\beta}_0$ podle vzorce

$$\widehat{\beta}_0 = -\frac{1}{2} (\widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_l + \widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_m), \quad (2.30)$$

přičemž předpokládáme, že $\widehat{\alpha}_l$, resp. $\widehat{\alpha}_m$, je libovolný nenulový optimální Lagrangeův multiplikátor úlohy (2.26) a \mathbf{x}_l , resp. \mathbf{x}_m , je odpovídající podpůrný vektor z třídy označené číslicí 1, resp. číslicí -1 .

2.2.2 Klasifikace lineárně neoddělitelných tříd

Jak jsme si mohli povšimnout v předchozí podsekci, při konstrukci optimálního přesného lineárního rozhodovacího pravidla hrál klíčovou roli předpoklad lineární oddělitelnosti množin T_+ a T_- . V mnoha příkladech z praxe ovšem tento předpoklad splněn není. Je tedy nutné přesné lineární rozhodovací pravidlo nějakým způsobem zobecnit i pro případ, kdy není splněn předpoklad lineární oddělitelnosti množin T_+ a T_- .

Protože tento předpoklad zajišťuje existenci lineárního rozhodovacího pravidla, které správně klasifikuje všechny objekty z trénovací množiny, bude nutné vycházet z toho, že námi zkonstruované optimální lineární rozhodovací pravidlo bude nutně některé instance z trénovací množiny klasifikovat chybně. Přirozeně by nás proto mohlo napadnout konstruovat optimální lineární rozhodovací pravidlo na základě dodatečného požadavku minimalizace počtu nesprávně klasifikovaných objektů z trénovací množiny. Jak je ovšem dokázáno v článku Ben-David a Simon (2001), takto formulovaný problém patří mezi tzv. NP-těžké problémy.

Zmíněnou úvahu tedy není možné efektivně aplikovat v praktických příkladech, nicméně mohla by nás přivést k myšlence zohlednit v dodatečném požadavku spíše polohu instancí nesprávně klasifikovaných objektů z trénovací množiny (vzhledem k podpůrným nadrovinám) než jejich samotný počet. Z této myšlenky vychází i koncept známý pod názvem „soft margin SVM“, který byl poprvé představen v článku Cortes a Vapnik (1995) a který navíc zohledňuje i polohu instancí nacházejících se v pásu určeném podpůrnými nadrovinami.

Podobně jako v předchozí podsekcí i nyní se pokusíme sestavit vhodnou optimalizační úlohu, jejímž vyřešením bychom získali předpis optimální nadroviny, a tedy i optimálního lineárního rozhodovacího pravidla.

Uvažujme libovolnou nadrovinu H danou předpisem (2.7), kde $\beta \in \mathbb{R}^p$ a $\beta_0 \in \mathbb{R}$, lineární rozhodovací pravidlo založené na nadrovině H a nadroviny H_+ a H_- definované předpisy (2.8) a (2.9) tvořící pomyslný pás okolo nadroviny H . Nechť $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$, je instance libovolného objektu z trénovací množiny. Potom nastává právě jedna z následujících možností:

1. Objekt s instancí \mathbf{x}_i je správně klasifikován a instance \mathbf{x}_i neleží ve vnitřku pásu určeného nadrovinami H_+ a H_- , tj. platí podmínka

$$y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1. \quad (2.31)$$

2. Objekt s instancí \mathbf{x}_i je správně klasifikován a instance \mathbf{x}_i leží ve vnitřku pásu určeného nadrovinami H_+ a H_- , tj. platí podmínka

$$0 < y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) < 1. \quad (2.32)$$

3. Objekt s instancí \mathbf{x}_i je nesprávně klasifikován, tj. platí podmínka

$$y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) < 0. \quad (2.33)$$

4. Objekt s instancí \mathbf{x}_i je obsažen v nadrovině H , tj. platí podmínka

$$y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) = 0. \quad (2.34)$$

Podmínky (2.31), (2.32), (2.33) a (2.34) potom lze souhrnně vyjádřit podmínkou

$$y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1 - \xi_i,$$

kde ξ_i je tzv. volná proměnná (v angličtině se označuje jako „slack variable“), přičemž 1. možnost odpovídá volbě $\xi_i = 0$, 2. možnost volbě $0 < \xi_i < 1$, 3. možnost volbě $\xi_i > 1$ a 4. možnost volbě $\xi_i = 1$.

Připomeňme, že v předchozí podsekcí jsme požadovali, aby všechny instance $\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$, splňovaly podmínku (2.31). Existence optimální nadroviny potom byla zaručena předpokladem lineární oddělitelnosti množin T_+ a T_- . Pokud se tedy nelze domnívat, že je tento předpoklad splněn, je pro existenci optimální nadroviny nutné připustit, že některé instance budou vyhovovat jedné z podmínek (2.32), (2.33) nebo (2.34).

Budeme proto požadovat, aby optimální nadrovina splňovala předpoklad

$$y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.35)$$

$$\xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.36)$$

Mohlo by se zdát, že úlohu nalezení optimální nadroviny H bychom poté mohli formulovat jako úlohu maximalizace vzdálenosti nadrovin H_+ a H_- (neboli, jak jsme ukázali v předchozí podsekcí, ekvivalentně minimalizaci hodnoty $\|\beta\|_2^2/2$) za podmínek (2.35) a (2.36).

Nicméně povšimněme si, že pro libovolné hodnoty $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p$ a $\beta_0 \in \mathbb{R}$ existují dostatečně velké hodnoty umělých proměnných $\xi_i, i = 1, \dots, n$, pro něž bude podmínka (2.35) splněna. Jednou z možností, jak se tomuto vyhnout, je zahrnout proměnné $\xi_i, i = 1, \dots, n$, do účelové funkce, tzn. minimalizovat účelovou funkci

$$\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \sum_{i=1}^n \xi_i.$$

V knize Vapnik (2000, sekce 5.5) lze potom nalézt doporučení uvažovat druhý sčítanec ve tvaru $\lambda \sum_{i=1}^n \xi_i$, kde $\lambda > 0$ je parametr. Formulujeme tedy následující optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Podobně jako v případě optimalizační úlohy (2.15) se snažíme minimalizovat hodnotu $\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2/2$, ovšem navíc uvažujeme penalizační člen $\lambda \sum_{i=1}^n \xi_i$, kde λ udává velikost této penalizace. Velikost parametru λ je ovlivněna kompromisem mezi snahou o dosažení co největší vzdálenosti mezi podpůrnými nadrovinami a snahou o co nejmenší penalizaci jak kvůli špatně klasifikovaným objektům z trénovací množiny, tak kvůli správně klasifikovaným objektům z trénovací množiny, jejichž instance se ale nachází ve vnitřku pásu určeného podpůrnými nadrovinami. Správně klasifikované objekty z trénovací množiny, jejichž instance se nenachází uvnitř pásu určeného podpůrnými nadrovinami, do penalizačního členu přispívají nulovou hodnotou.

Hodnotou parametru λ blízkou nule tedy obecně dokážeme zajistit poměrně velkou šířku pásu určeného nadrovinami H_+ a H_- , ovšem pouze za cenu toho, že tento pás bude obsahovat velké množství instancí. Zároveň mnoho objektů z trénovací množiny může být nesprávně klasifikováno. Naopak poroste-li hodnota parametru λ nade všechny meze, dostáváme úlohu (2.15).

Vhodná hodnota parametru λ se nejčastěji určuje pomocí křížové validace.

Z výše uvedených úvah plyne, že optimální nadrovina zkonstruovaná na základě vyřešení optimalizační úlohy (2.37) by v případě odlehlých pozorování mohla částečně eliminovat jejich vliv (např. u instancí, jejichž objekt byl omylem zařazen do opačné třídy). Z tohoto důvodu se často v situaci, kdy je splněn předpoklad lineární oddělitelnosti množin T_+ a T_- , dává přednost optimalizační úloze (2.37) před optimalizační úlohou (2.15). Na druhou stranu připomeňme, že v takovém případě je nutno navíc určit hodnotu parametru λ .

Optimalizační úloha (2.37) je stejně jako optimalizační úloha (2.15) úlohou kvadratického programování. Účelová funkce je opět striktně konvexní a taktéž jednotlivá omezení jsou lineární. Množina přípustných řešení optimalizační úlohy (2.37) je proto konvexní. Existuje tudíž nejvýše jedno optimální řešení úlohy (2.37). Pokusme se toto řešení, které budeme případně označovat $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ a $\hat{\beta}_0$, nalézt.

Opět využijeme koncept KKT podmínek optimality. Lagrangeova funkce L je

definována předpisem

$$L(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i - \sum_{i=1}^n \alpha_i \left[y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - (1 - \xi_i) \right] - \sum_{i=1}^n \mu_i \xi_i, \quad (2.38)$$

kde $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n \geq 0$. Dále formulujeme příslušné KKT podmínky. Z podmínky optimality víme, že musí platit:

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = \boldsymbol{\beta} - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \mathbf{x}_i = \mathbf{0}, \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_0}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = - \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi_i}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = \lambda - \alpha_i - \mu_i = 0, \quad (2.41)$$

kde $i = 1, \dots, n$. Dle podmínky přípustnosti musí platit, že

$$1 - \xi_i - y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) \leq 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.42)$$

$$-\xi_i \leq 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.43)$$

Konečně dle podmínky komplementarity musí platit, že

$$\alpha_i \left[y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - (1 - \xi_i) \right] = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.44)$$

$$\mu_i \xi_i = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.45)$$

Ze soustavy rovnic (2.39) plyne, že optimální řešení $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je dáno předpisem

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i = \sum_{i:y_i=1} \hat{\alpha}_i \mathbf{x}_i - \sum_{i:y_i=-1} \hat{\alpha}_i \mathbf{x}_i, \quad (2.46)$$

kde $\hat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, jsou optimální Lagrangeovy multiplikátory. Analogicky označme $\hat{\mu}_i, i = 1, \dots, n$, zbývající optimální Lagrangeovy multiplikátory.

Z podmínky (2.44) plyne, že pouze instance \mathbf{x}_i splňující rovnost

$$1 - \hat{\xi}_i - y_i (\hat{\boldsymbol{\beta}}^\top \mathbf{x}_i + \hat{\beta}_0) = 0 \quad (2.47)$$

mohou být ve výrazu (2.46) násobeny nenulovým Lagrangeovým multiplikátorem $\hat{\alpha}_i$. Pro tyto instance poté rozlišujeme tři možnosti:

1. Je-li hodnota $\hat{\xi}_i$ nulová, potom z rovnosti (2.47) plyne, že instance \mathbf{x}_i je podpůrný vektor, a z podmínek (2.45) a (2.41) plyne, že optimální Lagrangeův multiplikátor $\hat{\alpha}_i$ je charakterizován nerovnostmi

$$0 < \hat{\alpha}_i < \lambda.$$

2. Je-li $\widehat{\xi}_i$ kladné, ale ostře menší než hodnota 1, potom objekt z trénovací množiny, jehož instancí je \mathbf{x}_i , je správně klasifikován, ovšem s nenulovou penalizací, a tedy leží uvnitř pásu určeného optimálními podpůrnými nadrovinami. Tato instance se někdy označuje jako vázaný podpůrný (příp. vázaný nosný) vektor. Z podmínky (2.45) a (2.41) plyne, že optimální Lagrangeův multiplikátor $\widehat{\alpha}_i$ je charakterizován rovností

$$\widehat{\alpha}_i = \lambda.$$

3. Konečně je-li $\widehat{\xi}_i$ ostře větší než hodnota 1, potom je objekt z trénovací množiny s instancí \mathbf{x}_i klasifikován nesprávně. Podobně jako v předchozím případě i nyní musí optimální Lagrangeův multiplikátor $\widehat{\alpha}_i$ splňovat rovnost

$$\widehat{\alpha}_i = \lambda.$$

Dále platí, že podmínka (2.40) je ekvivalentní s podmínkou (2.22), a tedy stejně jako v optimalizační úloze (2.15) zůstává v platnosti, že vliv podpůrných vektorů z třídy označené číslicí 1 je totožný vlivu podpůrných vektorů z třídy označené číslicí -1 .

Díky předpisu (2.46) potom můžeme optimální lineární rozhodovací pravidlo, které je založené na optimalizační úloze (2.37) a které budeme označovat jako optimální penalizační rozhodovací pravidlo, vyjádřit jako

$$R(\mathbf{x}) = \operatorname{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \widehat{\alpha}_i y_i \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x} + \widehat{\beta}_0 \right).$$

Nyní formulujeme duální úlohu (ve smyslu Lagrangeovy duality) k (primární) optimalizační úloze (2.37). Budeme postupovat analogicky jako v předchozí podsekcí.

Protože účelová funkce optimalizační úlohy (2.37) je (striktně) konvexní, funkce

$$\begin{aligned} g_i(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n) &= 1 - \xi_i - y_i \left(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^\top \mathbf{x}_i + \widehat{\beta}_0 \right), & i = 1, \dots, n, \\ g_{i+n}(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n) &= g_{i+n}(\xi_i) = -\xi_i, & i = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

jsou taktéž konvexní a pro dostatečně velké kladné hodnoty $\widetilde{\xi}_i, i = 1, \dots, n$, je

$$\begin{aligned} g_i(\widetilde{\boldsymbol{\beta}}, \widetilde{\beta}_0, \widetilde{\xi}_1, \dots, \widetilde{\xi}_n) &< 0, & i = 1, \dots, n, \\ g_{i+n}(\widetilde{\xi}_i) &< 0, & i = 1, \dots, n, \end{aligned}$$

kde $\widetilde{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbb{R}^p$ a $\widetilde{\beta}_0$ je libovolné, jsou splněny předpoklady věty O silné dualitě (věta A.10). Z této věty plyne, že optimalizační úloha (2.37) je ekvivalentní s (duální) optimalizační úlohou

$$\max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n \geq 0} \theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n), \quad (2.48)$$

kde

$$\begin{aligned} \theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) &= \\ &= \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}} L(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n), \end{aligned} \quad (2.49)$$

kde Lagrangeova funkce L je dána vzorcem (2.38). Necht $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n$ jsou pevně zvolená nezáporná čísla. Budeme řešit optimalizační úlohu (2.49). Nutné podmínky optimality jsou vyjádřeny předpisy (2.39), (2.40) a (2.41). Dosadíme-li výraz (2.39) do předpisu (2.38) a následně využijeme-li předpisů (2.40) a (2.41), dostáváme, že

$$\begin{aligned}
L(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) &= L(\boldsymbol{\beta}, \beta_0, \xi_1, \dots, \xi_n) = \\
&= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \right)^\top \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j y_j \mathbf{x}_j \right) + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i - \sum_{i=1}^n \alpha_i \left[y_i \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j y_j \mathbf{x}_j^\top \mathbf{x}_i + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \beta_0 \right) - (1 - \xi_i) \right] - \sum_{i=1}^n \mu_i \xi_i = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j - \beta_0 \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i + \\
&\quad + \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{i=1}^n \xi_i (-\alpha_i - \mu_i) = \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i + \sum_{i=1}^n \alpha_i + \sum_{i=1}^n \xi_i (-\lambda) = \\
&= \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j.
\end{aligned}$$

Tento výraz nezávisí na proměnných $\boldsymbol{\beta}, \beta_0$ a ξ_1, \dots, ξ_n a duální funkci $\theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n)$ lze proto vyjádřit vzorcem

$$\theta(\alpha_1, \dots, \alpha_n, \mu_1, \dots, \mu_n) = \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j. \quad (2.50)$$

Dále si uvědomme, že α_i a $\mu_i, i = 1, \dots, n$, jsou nezáporná čísla, což v kombinaci s podmínkou (2.41) dává podmínku

$$0 \leq \alpha_i \leq \lambda, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.51)$$

Dosadíme-li výraz (2.50) do optimalizační úlohy (2.48) a zároveň zohledníme-li podmínky (2.40) a (2.51), dostáváme, že duální optimalizační úloha je dána předpisem

$$\begin{aligned}
\max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} \quad & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j \right\}, \\
s.t. \quad & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \\
& 0 \leq \alpha_i \leq \lambda, \quad i = 1, \dots, n.
\end{aligned} \quad (2.52)$$

Jedná se opět o úlohu kvadratického programování. Všimněme si, že v optimalizační úloze (2.52) se nevyskytují proměnné μ_1, \dots, μ_n , a dále podobnosti optimalizační úlohy (2.26) a optimalizační úlohy (2.52). Podobně jako v předchozí

podsekcí, v praxi se kvůli menší výpočetní náročnosti řeší spíše (duální) optimalizační úloha (2.52) než (primární) optimalizační úloha (2.37).

Zbývá ještě odvodit vzorce pro vyjádření $\widehat{\beta}$ a $\widehat{\beta}_0$. Necht $\widehat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, označují optimální řešení úlohy (2.52). Z věty O silné dualitě (věta A.10) plyne, že pro všechna $i = 1, \dots, n$ musí platit

$$\widehat{\alpha}_i \left[y_i \left(\widehat{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \widehat{\beta}_0 \right) - \left(1 - \widehat{\xi}_i \right) \right] = 0, \quad (2.53)$$

$$\widehat{\mu}_i \widehat{\xi}_i = 0. \quad (2.54)$$

Odtud a z podmínky (2.39) plyne, že $\widehat{\beta}$ lze vyjádřit vzorcem (2.46). Při hledání vzorce pro vyjádření hodnoty $\widehat{\beta}_0$ využijeme podpurných vektorů. Nejdříve si uvědomme, že díky (2.41) lze podmínku (2.54) nahradit podmínkou

$$(\lambda - \widehat{\alpha}_i) \widehat{\xi}_i = 0. \quad (2.55)$$

Necht k je index, pro nějž $\widehat{\alpha}_k$ je nenulové a různé od hodnoty λ . Z podmínek (2.53) a (2.55) plyne, že potom musí platit podmínka (2.28). Odtud plyne vyjádření $\widehat{\beta}_0$ dané vzorcem (2.29). Při požadavku větší numerické stability výpočtu lze hodnotu $\widehat{\beta}_0$ dopočítat podle vzorce (2.30).

2.3 Nelineární metoda SVM

V této sekci budeme optimální rozhodovací pravidlo hledat mezi rozhodovacími pravidly založenými na obecně nelineární funkci $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$. Hlavní motivací vzniku nelineární metody SVM byla snaha nalézt východisko ze situace, kdy množiny T_+ a T_- (definované předpisy (2.2) a (2.3)) nejsou lineárně oddělitelné, a tedy není možné aplikovat postup navržený v podsekcí 2.2.1, neboť optimalizační úlohy (2.15) a (2.26) nemají řešení. Připomeňme, že lineární alternativu jsme popsali v podsekcí 2.2.2.

Samotný vznik byl umožněn díky Coverově větě, která vychází z poznatků představených v článku Cover (1965). Jedním z důsledků této věty je skutečnost, že pro dané množiny bodů, které nejsou lineárně oddělitelné, existuje (obecně ne nutně lineární) zobrazení těchto množin do prostoru dostatečně vysoké dimenze, v němž již obrazy těchto množin lineárně oddělitelné jsou.

Uvažujme tedy posloupnost dvojic (2.1) takovou, že množiny T_+ a T_- nejsou lineárně oddělitelné. Potom existuje (obecně ne nutně lineární) zobrazení $\Phi : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$ (v angličtině označované jako „feature map“) takové, že množiny

$$T_+^q := \{ \Phi(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, n : y_i = 1 \}, \quad (2.56)$$

$$T_-^q := \{ \Phi(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, n : y_i = -1 \}, \quad (2.57)$$

jsou lineárně oddělitelné. Hodnota $q \in \mathbb{N}$ představuje dostatečně vysokou dimenzi, příp. připouštíme i možnost $q = \infty$; prostorem \mathbb{R}^∞ potom rozumíme Hilbertův prostor reálných posloupností. Poznamenejme ještě, že prostor \mathbb{R}^q se v angličtině označuje jako tzv. „feature space“. Jinými slovy, získali jsme posloupnost dvojic

$$(\Phi(\mathbf{x}_1), y_1), \dots, (\Phi(\mathbf{x}_n), y_n) \in \mathbb{R}^q \times \{-1, 1\},$$

přičemž množiny T_+^q a T_-^q definované předpisy (2.56) a (2.57) jsou lineárně oddělitelné. Můžeme proto postupovat analogicky jako v podsekcí 2.2.1. Sestavíme příslušnou optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle \right\}, \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0. \end{aligned} \quad (2.58)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ představuje skalární součin definovaný na prostoru \mathbb{R}^q .

Jsou-li $\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n$ optimální řešení úlohy (2.58), potom optimální přesné lineární rozhodovací pravidlo pro instance $\mathbf{z} = \Phi(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^q$ je definováno předpisem

$$R(\mathbf{z}) = \text{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \mathbf{z} \rangle + \hat{\beta}_0 \right), \quad (2.59)$$

kde

$$\hat{\beta}_0 = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_l) + \Phi(\mathbf{x}_m) \rangle \right),$$

kde $\hat{\alpha}_l$, resp. $\hat{\alpha}_m$, je nenulové optimální řešení úlohy (2.58) a $\Phi(\mathbf{x}_l)$, resp. $\Phi(\mathbf{x}_m)$, je podpurný vektor z třídy označené číslicí 1, resp. číslicí -1 .

Je-li $q < \infty$, potom lze ekvivalentně hovořit o optimální nadrovině, která je dána předpisem

$$H := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^q : \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \Phi(\mathbf{x}_i)^\top \mathbf{x} + \hat{\beta}_0 = 0 \right\}.$$

Vrátíme-li se nyní k původní posloupnosti dvojic (2.1), potom z předpisu (2.59) plyne, že optimální přesné nelineární rozhodovací pravidlo pro instance $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ je definováno předpisem

$$R(\mathbf{x}) = \text{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle + \hat{\beta}_0 \right), \quad (2.60)$$

neboli ekvivalentně optimální kontura je definována jako

$$H := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}) \rangle + \hat{\beta}_0 = 0 \right\}. \quad (2.61)$$

Výše navržený postup má ovšem svá úskalí. Díky důsledku Coverovy věty je sice zaručena existence zobrazení $\Phi : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$, ovšem vyvstává otázka, jak nalézt předpis tohoto zobrazení, příp. jak mezi uvažovanými zobrazeními zvolit nejvhodnější.

Druhé úskalí potom souvisí se samotnou implementací zobrazení Φ . Dimenze prostoru \mathbb{R}^p , který obsahuje instance \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, n$, objektů z trénovací množiny,

je v příkladech z praxe často již dosti vysoká. Dimenze prostoru \mathbb{R}^q následně musí být mnohem vyšší, eventuálně i nekonečná. Spočtení obrazů $\Phi(\mathbf{x}_i)$, $i = 1, \dots, n$, a poté skalárního součinu všech možných dvojic je proto výpočetně velmi obtížné, často prakticky nemožné.

Tyto obtížnosti lze překonat s využitím tzv. „jádrového triku“ (jedná se o překlad anglického výrazu „kernel trick“), který byl sice poprvé explicitně formulován až v knize Schölkopf a Smola (2002, kapitola 2), ale již předtím byl využit v článcích Aizerman a kol. (1964) a Boser a kol. (1992).

Tento trik vychází z pozorování, že v předpisu optimalizační úlohy (2.58), optimálního přesného nelineárního pravidla (2.60) i optimální kontury (2.61) se zobrazení Φ objevuje pouze ve tvaru $\langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{z}) \rangle$, kde $i = 1, \dots, n$ a $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^p$. Není tedy nutné hledat přímo zobrazení Φ a následně pro všechny dvojice $\Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j)$ počítat skalární součin. Místo toho stačí nalézt vhodnou funkci $k : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ splňující

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{z}) \rangle, \quad \mathbf{x}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^p.$$

Taková funkce se potom nazývá jádrová funkce (z anglického výrazu „kernel function“).

Hlavním cílem následující podsekcce bude ukázat, že aplikací jádrového triku získáváme především dva klíčové přínosy:

1. Jakmile si zvolíme některou konkrétní jádrovou funkci, není již nutné znát odpovídající zobrazení Φ a prostor \mathbb{R}^q . Jinými slovy místo hledání vhodného prostoru \mathbb{R}^q , následně vhodného zobrazení Φ a poté obecně velmi obtížného výpočtu skalárního součinu všech dvojic $\Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j)$, můžeme pracovat s daleko méně výpočetně náročnými jádrovými funkcemi.
2. Uvědomíme-li si, že funkce k vlastně definuje skalární součin (na prostoru \mathbb{R}^q), můžeme uvedený postup aplikovat i na objekty z trénovací množiny, jejichž instance jsou prvky libovolné množiny \mathcal{X} . Funkce Φ se potom uvažuje jako zobrazení z množiny \mathcal{X} do Hilbertova prostoru \mathcal{F} , přičemž jádrová funkce definuje skalární součin na tomto prostoru.

Toto zobecnění potom umožňuje využít metodu SVM pro úlohu rozpoznávání obrazů (např. rukou psaných číslic a písmen - viz např. Schölkopf a Smola (2002, kapitola 11)), obličejů, řeči a textu (např. jako spam filtr - viz např. Sculley a Wachman (2007)) nebo při studiu DNA řetězce (viz např. Öz a Kaya (2013)).

2.3.1 Jádrové funkce a Hilbertův prostor reprodukcí jádrových funkcí

Pojem jádrová funkce byl poprvé použit v pracích slavných matematiků švédského a německého původu Ivara Fredholma a Davida Hilberta (viz Fredholm (1903) a Hilbert (1904)), které se zabývaly teorií integrálních operátorů. Postupem let tento pojem pronikl i do teorie algebry, pravděpodobnosti, statistiky nebo strojového učení.

V této podsekcí se pokusíme vysvětlit teoretické pozadí jádrového triku, formálně definujeme jádrovou funkci, seznámíme se s některými jejími vlastnostmi, uvedeme nutnou a postačující podmínku pro to, aby funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ byla jádrovou funkcí, a konečně představíme nejznámější a nejpoužívanější příklady jádrových funkcí. Vyloženou teorii poté aplikujeme v podsekcích 2.3.2 a 2.3.3.

Budeme při tom vycházet ze značení, které jsme zavedli v samotném závěru předchozí sekce. Dále učiníme úmluvu, že symbolem \mathbb{F} budeme označovat množinu reálných nebo komplexních čísel.

Definice a věty, které formulujeme v této podsekcí, budeme přejímat z knih Steinwart a Christmann (2008, kapitola 4) a Schölkopf a Smola (2002, kapitola 2). Zájemce o hlubší seznámení se s touto problematikou odkazujeme na dizertační práci Kudová (2006) a citace v ní uvedené.

Začněme definicí jádrové funkce.

Definice 2.1. Necht \mathcal{X} je neprázdná množina. Řekneme, že funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$ je jádrová funkce na \mathcal{X} , jestliže existuje Hilbertův prostor \mathcal{F} nad \mathbb{F} a zobrazení $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ takové, že pro všechny $x_1, x_2 \in \mathcal{X}$ platí

$$k(x_1, x_2) = \langle \Phi(x_2), \Phi(x_1) \rangle, \quad (2.62)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{F} .

Poznámka 2.2. (i) Je-li $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, potom podmínku (2.62) lze ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$k(x_1, x_2) = \langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle.$$

Je-li $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, potom lze využít antisymetrie skalárního součinu $\langle \cdot, \cdot \rangle$ a podmínku (2.62) tak ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$k(x_1, x_2) = \overline{\langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle},$$

kde $\overline{\langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle}$ označuje komplexně sdružené číslo k číslu $\langle \Phi(x_1), \Phi(x_2) \rangle$.

(ii) Je-li k jádrová funkce na \mathcal{X} , potom ani zobrazení Φ , ani Hilbertův prostor \mathcal{F} nad \mathbb{F} nejsou obecně určeny jednoznačně, což ilustruje příklad uvedený v knize Steinwart a Christmann (2008, str. 112 - 113):

Necht $\mathcal{X} := \mathbb{R}$ a $\mathbb{F} := \mathbb{R}$. Potom funkce

$$k(x_1, x_2) := x_1 x_2, \quad x_1, x_2 \in \mathbb{R}$$

je jádrovou funkcí na \mathbb{R} , neboť za Hilbertův prostor \mathcal{F}_1 nad \mathbb{R} lze volit přímo reálný prostor (tj. $\mathcal{F}_1 := \mathbb{R}$) a zobrazení $\Phi_1 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ lze definovat jako identické zobrazení (tj. $\Phi_1(x) := x, x \in \mathbb{R}$).

Nicméně zároveň lze volit $\mathcal{F}_2 := \mathbb{R}^2$ a $\Phi_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$, kde

$$\Phi_2(x) := \left(\frac{x}{\sqrt{2}}, \frac{x}{\sqrt{2}} \right),$$

čímž pro libovolné $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ dostáváme, že

$$\begin{aligned}\langle \Phi_2(x_2), \Phi_2(x_1) \rangle &= \Phi_2(x_2)^\top \Phi_2(x_1) = \frac{x_2}{\sqrt{2}} \frac{x_1}{\sqrt{2}} + \frac{x_2}{\sqrt{2}} \frac{x_1}{\sqrt{2}} = \\ &= x_1 x_2 = k(x_1, x_2).\end{aligned}$$

- (iii) Z předpisu (2.62), resp. definice 2.1, je zřejmé, že jádrový trik lze využít k zobecnění regresních, resp. klasifikačních metod, které jsou založeny na skalárním součinu jednotlivých pozorování, resp. instancí. Definujeme tak např. jádrovou hřebenovou regresi, resp. jádrovou lineární diskriminační analýzu - viz Schölkopf a kol. (2013, kapitola 11), resp. Schölkopf a Smola (2002, kapitola 15).

V následující větě uvádíme základní vlastnosti jádrových funkcí.

Věta 2.3. (i) *Nechť \mathcal{X} je neprázdná množina, α_1, α_2 nezáporná reálná čísla a k_1, k_2 jádrové funkce na \mathcal{X} . Potom také*

$$k := \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2$$

je jádrová funkce na \mathcal{X} .

Speciálně množina jádrových funkcí na \mathcal{X} tvoří kužel.

- (ii) *Nechť \mathcal{X}_1 , resp. \mathcal{X}_2 , je neprázdná množina a k_1 , resp. k_2 , je jádrová funkce na \mathcal{X}_1 , resp. na \mathcal{X}_2 . Potom*

$$k := k_1 k_2$$

je jádrová funkce na $\mathcal{X}_1 \times \mathcal{X}_2$.

Speciálně je-li $\mathcal{X}_1 = \mathcal{X}_2 =: \mathcal{X}$, potom

$$k(x_1, x_2) := k_1(x_1, x_2) k_2(x_1, x_2), \quad x_1, x_2 \in \mathcal{X},$$

je jádrová funkce na \mathcal{X} .

Důkaz. Viz Steinwart a Christmann (2008), lemma 4.5 a lemma 4.6. □

Nyní uvedeme nutnou a postačující podmínku pro existenci reálné jádrové funkce na \mathcal{X} . Nejdříve si ale připomeňme definici symetrické a pozitivně (semi)definitní funkce.

Definice 2.4. Necht \mathcal{X} je neprázdná množina. Řekneme, že funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ je symetrická, jestliže pro všechny $x_1, x_2 \in \mathcal{X}$ platí

$$k(x_1, x_2) = k(x_2, x_1).$$

Definice 2.5. Necht \mathcal{X} je neprázdná množina. Řekneme, že funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ je pozitivně semidefinitní, jestliže pro všechna $n \in \mathbb{N}$, $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$ a $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ platí

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j k(x_i, x_j) \geq 0. \quad (2.63)$$

Jestliže pro navzájem různá $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ nastává v nerovnosti (2.63) rovnost pouze pro $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 0$, potom řekneme, že funkce k je pozitivně definitní.

Poznámka 2.6. (i) Někteří autoři místo o pozitivně semidefinitní funkci hovoří o pozitivně definitní funkci. Pozitivně definitní funkci poté nazývají striktně pozitivně definitní funkcí.

- (ii) Je-li $n \in \mathbb{N}$ a $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$, potom podmínka (2.63) je ekvivalentní s požadavkem, aby matice \mathbb{K} daná předpisem

$$\mathbb{K} := (k(x_i, x_j))_{i,j=1}^n$$

byla pozitivně semidefinitní. Podobně k je pozitivně definitní právě tehdy, když \mathbb{K} je pozitivně definitní.

Věta 2.7. *Nechť \mathcal{X} je neprázdná množina. Funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ je jádrová funkce na \mathcal{X} právě tehdy, když k je symetrická a pozitivně semidefinitní funkce.*

Důkaz. Viz Steinwart a Christmann (2008), věta 4.16. □

Nyní představíme tzv. reprodukční jádrovou funkci a odpovídající Hilbertův prostor reprodukčních jádrových funkcí.

Definice 2.8. Nechť \mathcal{X} je neprázdná množina a \mathcal{H} Hilbertův prostor sestávající z funkcí $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$. Řekneme, že:

- (i) funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$ je reprodukční jádrová funkce Hilbertova prostoru \mathcal{H} , jestliže pro všechny $x \in \mathcal{X}$ platí, že

$$k(\cdot, x) \in \mathcal{H}$$

a zároveň pro všechny $f \in \mathcal{H}$ a $x \in \mathcal{X}$ platí tzv. reprodukční vlastnost, tj.

$$f(x) = \langle f, k(\cdot, x) \rangle,$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{H} .

- (ii) \mathcal{H} je Hilbertův prostor reprodukčních jádrových funkcí nad \mathcal{X} , jestliže pro všechny $x \in \mathcal{X}$ je tzv. Diracův funkcionál $\delta_x : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{F}$, definovaný předpisem

$$\delta_x(f) = f(x), \quad f \in \mathcal{H},$$

spojitý.

Poznámka 2.9. Místo celého názvu Hilbertův prostor reprodukčních jádrových funkcí budeme ve zbytku práce používat zkratku RKHS, což je akronym anglického výrazu „reproducing kernel Hilbert space“.

Platí, že každá reprodukční jádrová funkce je také jádrovou funkcí (ve smyslu definice 2.1). Zároveň lze dokázat, že každý Hilbertův prostor sestávající z funkcí $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$, kterému přísluší reprodukční jádrová funkce, je RKHS. Obě tato tvrzení shrnuje následující věta.

Věta 2.10. *Nechť \mathcal{X} je neprázdná množina, \mathcal{H} je Hilbertův prostor sestávající z funkcí $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$ a $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$ nechť je reprodukční jádrová funkce Hilbertova prostoru \mathcal{H} . Potom:*

(i) \mathcal{H} je RKHS nad \mathcal{X} ,

(ii) k je jádrová funkce na \mathcal{X} a \mathcal{H} tvoří příslušný Hilbertův prostor nad \mathbb{F} a odpovídající zobrazení $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$ je definováno předpisem

$$\Phi(x) = k(\cdot, x), \quad x \in \mathcal{X}.$$

Důkaz. Viz Steinwart a Christmann (2008), lemma 4.19. □

V následující větě uvidíme, že každému Hilbertovu prostoru reprodukčních jádrových funkcí přísluší právě jedna reprodukční jádrová funkce, která je dle věty 2.10 jádrovou funkcí.

Současně uvidíme, že naopak každá jádrová funkce umožňuje vzniknout právě jednomu Hilbertovu prostoru reprodukčních jádrových funkcí, pro nějž je k reprodukční jádrovou funkcí.

Věta 2.11. *Nechť \mathcal{X} je neprázdna množina.*

(i) *Jestliže \mathcal{H} je RKHS nad \mathcal{X} , potom funkce $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F}$ definovaná předpisem*

$$k(x_1, x_2) = \langle \delta_{x_1}, \delta_{x_2} \rangle, \quad x_1, x_2 \in \mathcal{X},$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{H} , je jediná reprodukční jádrová funkce prostoru \mathcal{H} .

(ii) *Nechť k je jádrová funkce na \mathcal{X} , \mathcal{F} odpovídající Hilbertův prostor nad \mathbb{F} a Φ odpovídající zobrazení z množiny \mathcal{X} do \mathcal{F} . Definujme prostor \mathcal{H} předpisem*

$$\mathcal{H} = \{f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{F} \mid \exists \beta \in \mathcal{F} \text{ splňující } f(x) = \langle \beta, \Phi(x) \rangle_{\mathcal{F}} \quad \forall x \in \mathcal{X}\} \quad (2.64)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F}}$ definuje skalární součin na \mathcal{F} , na němž je definována norma $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ předpisem

$$\|f\|_{\mathcal{H}} = \inf \{\|\beta\|_{\mathcal{F}} : \beta \in \mathcal{F} \text{ a splňuje } f = \langle \beta, \Phi(\cdot) \rangle_{\mathcal{F}}\}, \quad (2.65)$$

kde $\|\cdot\|_{\mathcal{F}}$ definuje normu na \mathcal{F} . Potom \mathcal{H} je jediný RKHS, jehož reprodukční jádrová funkce je k .

Předpisy (2.64) a (2.65) nezávisí na konkrétní volbě prostoru \mathcal{F} a zobrazení Φ příslušných jádrové funkci k .

Důkaz. Viz Steinwart a Christmann (2008), věty 4.20 a 4.21. □

Uvedeme ještě jednu důležitou vlastnost pozitivně definitních jádrových funkcí. Předtím ale formulujme potřebnou definici.

Definice 2.12. *Nechť \mathcal{X} je metrický prostor, k jádrová funkce na \mathcal{X} , \mathcal{H} RKHS nad \mathcal{X} , jehož reprodukční jádrová funkce je k , a $A, B \subset \mathcal{X}$ disjunktní množiny. Řekneme, že jádrová funkce k odděluje množiny A a B , jestliže existuje $f \in \mathcal{H}$ taková, že:*

- (i) $f(x) > 0$ pro všechny $x \in A$,
- (ii) $f(x) < 0$ pro všechny $x \in B$.

Věta 2.13. *Nechť \mathcal{X} je metrický prostor, $A, B \subset \mathcal{X}$ konečné, disjunktní množiny a $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ jádrová funkce. Potom k odděluje množiny A a B právě tehdy, když k je pozitivně definitní funkce.*

Důkaz. Náznak důkazu viz Steinwart a Christmann (2008), cvičení 11.4 na str. 164. □

Na závěr této podsekcce představíme příklady nejpoužívanějších jádrových funkcí. Jednotlivá odvození, že se skutečně jedná o jádrové funkce, lze nalézt v knihách Schölkopf a Smola (2002, sekce 2.3) a Steinwart a Christmann (2008, důsledek 4.58).

1. Zvolíme-li za zobrazení Φ identitu, potom získáváme lineární jádrovou funkci

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2, \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p.$$

2. Jádrová funkce

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \left(\mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2 + a \right)^b, \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p,$$

kde $a > 0$ a $b \in \mathbb{N}$, se nazývá nehomogenní polynomiální jádrová funkce. Předpokládáme-li, že $a = 0$ a $b \in \mathbb{N}$, potom hovoříme o (homogenní) polynomiální jádrové funkci.

3. Jádrová funkce

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \tanh \left(a \mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2 + b \right), \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p,$$

kde $a > 0$ a $b < 0$, se nazývá sigmoidová (někdy také neurální) jádrová funkce.

4. Jádrová funkce

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp \left\{ -a \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2 \right\}, \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p,$$

kde $a > 0$ a $\|\cdot\|_2$ označuje eukleidovskou normu, se nazývá exponenciální jádrová funkce.

5. Jádrová funkce

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp \left\{ -\sigma \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2^2 \right\}, \quad \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^p, \quad (2.66)$$

kde $\sigma > 0$, se nazývá gaussovská radiální bazická funkce.

Hodnoty parametrů obsažené v předpisech jednotlivých jádrových funkcí se v praxi nejčastěji určují pomocí křížové validace.

2.3.2 Přesná klasifikace

V této sekci zúročíme teoretické poznatky ohledně jádrových funkcí, které jsme představili v předchozí podsekci. Uvidíme, že se vlastně jedná o zobecnění postupu pro klasifikaci lineárně oddělitelných tříd, který jsme představili v podsekci 2.2.1.

Pro $n \in \mathbb{N}$ uvažujme konečnou posloupnost dvojic

$$(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, \quad (2.67)$$

kde \mathcal{X} je metrický prostor a $\mathcal{Y} = \{-1, 1\}$. Předpokládejme, že existuje alespoň jedna dvojice indexů $i, j, i \neq j$, pro které $y_i \neq y_j$. Připomeňme, že množiny T_+ a T_- jsou dány předpisy

$$\begin{aligned} T_+ &:= \{x_i, i = 1, \dots, n : y_i = 1\}, \\ T_- &:= \{x_i, i = 1, \dots, n : y_i = -1\}. \end{aligned}$$

Konečně necht $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ je pevně zvolená pozitivně definitní jádrová funkce (např. gaussovská radiální bazická funkce definovaná na konci předchozí sekce).

Z definice 2.1 potom plyne, že existuje (ne nutně jednoznačně určený) Hilbertův prostor \mathcal{F} nad \mathbb{R} a zobrazení $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ takové, že pro všechny $x, z \in \mathcal{X}$ platí

$$k(x, z) = \langle \Phi(x), \Phi(z) \rangle, \quad (2.68)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{F} .

Jestliže \mathcal{H} je RKHS nad \mathcal{X} , jehož reprodukční jádrová funkce je k , pak z věty 2.13 dostáváme, že existuje $f \in \mathcal{H}$ taková, že:

1. $f(x) > 0$ pro všechny $x \in T_+$,
2. $f(x) < 0$ pro všechny $x \in T_-$,

neboli ekvivalentně

$$y_i f(x_i) > 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Konečně z věty 2.11, resp. z předpisu (2.64) víme, že tato funkce f je dána předpisem

$$f(x) = \langle \beta, \Phi(x) \rangle, \quad x \in \mathcal{X} \quad (2.69)$$

pro vhodné $\beta \in \mathcal{F}$. Navíc víme, že při hledání vhodné funkce f , dané předpisem (2.69), můžeme vycházet z libovolného prostoru \mathcal{F} a libovolného zobrazení Φ příslušných jádrové funkci k .

Předpis hledaného $\beta \in \mathcal{F}$ získáme vyřešením optimalizační úlohy

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathcal{F}} \quad & \frac{1}{2} \langle \beta, \beta \rangle, \\ \text{s.t.} \quad & y_i \langle \beta, \Phi(x_i) \rangle \geq 1, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Jelikož připouštíme i možnost, že Hilbertův prostor \mathcal{F} je nekonečně dimenzionální, řešit optimalizační úlohu (2.70) je výpočetně velmi obtížné, často prakticky nemožné. Podobně jako v podsekci 2.2.1 lze ukázat, že optimalizační úloha

(2.70) je ekvivalentní s optimalizační úlohou

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j \langle \Phi(x_i), \Phi(x_j) \rangle \right\}, \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Využitím předpisu (2.68) poté dostáváme, že optimalizační úloha (2.71) je ekvivalentní s optimalizační úlohou

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \geq 0} & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(x_i, x_j) \right\}, \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Protože funkce k je symetrická a pozitivně definitní, plyne z definice 2.5, že optimalizační úloha (2.72) je úlohou kvadratického programování.

Pro nalezení optimálního řešení $\hat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, úlohy (2.72) lze opět postupovat analogicky jako v podsekcí 2.2.1. Optimální přesné nelineární rozhodovací pravidlo je potom dáno předpisem

$$R(x) := \operatorname{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i k(x_i, x) \right), x \in \mathcal{X}.$$

Optimální kontura je definována jako

$$H := \left\{ x \in \mathcal{X} : \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i k(x_i, x) = 0 \right\}.$$

2.3.3 Klasifikace s využitím penalizace

V předchozí podsekcí jsme mohli nahlédnout, že při vhodné volbě jádrové funkce a dodatečném požadavku, aby množina \mathcal{X} byla metrický prostor, dokážeme pro libovolnou posloupnost dvojic (2.67) sestavit rozhodovací pravidlo, které správně klasifikuje všechny objekty z trénovací množiny.

V příkladech z praxe se ovšem ukazuje, že tato jeho velká výhoda se paradoxně může stát jeho slabinou. Takto zkonstruované pravidlo totiž žádným způsobem nebere v potaz vliv možných odlehlých pozorování. Může tak dojít k situaci, která se v terminologii strojového učení označuje jako „přetrénovanost“: sice správně klasifikujeme všechny objekty z trénovací množiny, nicméně vyzkoušíme-li pomocí tohoto rozhodovacího pravidla klasifikovat nově uvažované objekty (u nichž ale víme, k jaké třídě náleží a máme tak možnost kontroly správnosti klasifikace), nebudeme příliš úspěšní.

Z tohoto důvodu se v praxi umožňuje, aby některé objekty z trénovací množiny byly klasifikovány chybně. Postup při konstrukci rozhodovacího pravidla je zobecněním postupu navrženého v podseksi 2.2.2.

Předpokládejme, že máme k dispozici posloupnost dvojic (2.67), přičemž lze relaxovat požadavek, aby \mathcal{X} byl metrický prostor, tj. předpokládáme, že \mathcal{X} je množina. Dále předpokládejme, že existuje alespoň jedna dvojice indexů $i, j, i \neq j$, pro které $y_i \neq y_j$. Konečně necht $k : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ je pevně zvolená jádrová funkce.

Díky definici 2.1 víme, že existuje (ne nutně jednoznačně určený) Hilbertův prostor \mathcal{F} nad \mathbb{R} a zobrazení $\Phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ splňující

$$k(x, z) = \langle \Phi(x), \Phi(z) \rangle, \quad x, z \in \mathcal{X}, \quad (2.73)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{F} .

Uvažujme tedy posloupnost dvojic

$$(\Phi(x_1), y_1), \dots, (\Phi(x_n), y_n) \in \mathcal{F} \times \{-1, 1\}$$

a předpokládejme, že rozhodovací pravidlo je dáno předpisem

$$R(x) = \text{sgn}(\langle \beta, \Phi(x) \rangle + \beta_0), \quad x \in \mathcal{X}.$$

Při hledání vhodného $\beta \in \mathcal{F}$ a $\beta_0 \in \mathbb{R}$ bychom postupovali analogicky jako v podseksi 2.2.2 a zjistili bychom, že jejich předpisy lze získat vyřešením optimalizační úlohy

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathcal{F}, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \frac{1}{2} \langle \beta, \beta \rangle + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\langle \beta, \Phi(x_i) \rangle + \beta_0) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.74)$$

kde $\lambda > 0$ je parametr. Povšimněme si, že optimalizační úloha (2.74) je vlastně zobecněná optimalizační úloha (2.37).

Je-li \mathcal{H} RKHS nad \mathcal{X} , jehož jádrová funkce je k , potom z věty 2.11 plyne, že \mathcal{H} je určený jednoznačně a sestává z funkcí $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ daných předpisem

$$g(x) = \langle \beta, \Phi(x) \rangle, \quad x \in \mathcal{X},$$

pro vhodná $\beta \in \mathcal{F}$. Dále z této věty plyne, že prostor \mathcal{H} se nezmění, pokud budeme uvažovat jiný prostor \mathcal{F} a jiné zobrazení Φ příslušné jádrové funkci k .

Při hledání ekvivalentní, ale výpočetně méně náročnější optimalizační úlohy k úloze (2.74) lze tedy postupovat analogicky jako v podseksi 2.2.2 (příp. odkazujeme čtenáře na postup uvedený v knize Steinwart a Christmann (2008, příklad 11.3 na str. 414)). Využijeme-li navíc předpisu (2.73), dostáváme, že ekvivalentní optimalizační úloha k úloze (2.74) je

$$\begin{aligned} \max_{\alpha_1, \dots, \alpha_n} & \left\{ \sum_{i=1}^n \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j y_i y_j k(x_i, x_j) \right\}, \\ \text{s.t. } & \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \\ & 0 \leq \alpha_i \leq \lambda, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Z věty 2.7 víme, že funkce k je symetrická a pozitivně semidefinitní, což dle definice 2.5 implikuje, že optimalizační úloha (2.75) je úlohou kvadratického programování.

Optimální řešení $\hat{\alpha}_i, i = 1, \dots, n$, lze nalézt podobným postupem jako v podsekcí 2.2.2. Optimální penalizační nelineární rozhodovací pravidlo je potom dáno předpisem

$$R(x) := \operatorname{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i k(x_i, x) + \hat{\beta}_0 \right), x \in \mathcal{X},$$

kde

$$\hat{\beta}_0 = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i (k(x_i, x_l) + k(x_i, x_m)) \right),$$

kde $\hat{\alpha}_l$ a $\hat{\alpha}_m$, jsou libovolná nenulová optimální řešení úlohy (2.75).

Optimální kontura je dána předpisem

$$H := \left\{ x \in \mathcal{X} : \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i y_i k(x_i, x) + \hat{\beta}_0 = 0 \right\}.$$

2.4 Metoda SVM v robustní klasifikaci

Připomeňme, že v sekci 1.4 jsme představili některé z mnoha konceptů, jak se v regresní analýze vypořádat se situací, kdy data, která máme analyzovat, jsou zatížena nějakou chybou. Obdobně v této sekci seznámíme čtenáře s několika modifikacemi původní metody SVM, představené v předchozích sekcích této kapitoly, které zohledňují možnost, že data o objektech z trénovací množiny mohou obsahovat chyby nebo nepřesnosti.

Jednotlivé přístupy k těmto chybám a z nich vycházející koncepty bychom mohli rozdělit do tří hlavních proudů:

1. Patří sem přístupy vycházející z předpokladu, že instance některých objektů z trénovací množiny jsou částečně nebo dokonce úplně neznámé. Čtenáře lze odkázat např. na článek Globerson a Roweis (2006).
2. Jedná se o přístupy vycházející z předpokladu, že údaje o příslušnosti k dané třídě některých objektů z trénovací množiny jsou chybné, tj. že se některé objekty z trénovací množiny nachází v opačné třídě, než která je u nich uvedena. Podrobněji se této problematice věnuje např. článek Caramanis a Mannor (2008).
3. Jedná se o přístupy, které vycházejí z předpokladu, že instance jednotlivých objektů z trénovací množiny mohou být zatíženy nějakou chybou. Nejčastěji se jedná o chyby měření nebo zaokrouhlovací chyby. Těmito přístupy se budeme ve zbytku této sekce zabývat podrobněji.

Místo posloupnosti dvojic (2.1) proto uvažujeme posloupnost dvojic

$$(\mathbf{x}_1 + \Delta \mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n + \Delta \mathbf{x}_n, y_n) \in \mathbb{R}^p \times \{-1, 1\}, \quad (2.76)$$

kde složky vektoru $\Delta \mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$, reprezentují velikost chyb u jednotlivých složek i -té instance \mathbf{x}_i . Jinými slovy předpokládáme, že i -tá instance je tvaru $\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_i$, přičemž o vektoru $\Delta \mathbf{x}_i$ víme pouze to, že je prvkem neznámé množiny $\mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}$. Jednotlivé přístupy se poté od sebe odlišují rozdílnými požadavky na množiny $\mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}, i = 1, \dots, n$.

Podobně jako v sekci 1.4 lze konstatovat, že využitím těchto přístupů zohledňujících chyby jednotlivých instancí dokážeme sestavit rozhodovací pravidla, která jsou v jistém smyslu necitlivá vůči (malým) změnám ve vstupních datech.

V následujících dvou podsekcích představíme koncept, který vychází ze speciálních předpisů množin $\mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}, i = 1, \dots, n$. V podsekcí 2.4.1 při tom vyjdeme z lineární metody SVM představené v podsekcí 2.2.2 a ukážeme, jak původně navrženou metodu modifikovat tak, aby zohledňovala chyby $\Delta \mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$. Konečně v podsekcí 2.4.2 ukážeme, jak s využitím poznatků z podsekcí 2.3.1 a 2.4.1 modifikovat nelineární metodu SVM představenou v podsekcí 2.3.3.

2.4.1 Lineární metoda SVM v robustní klasifikaci

Koncept, který představíme v této podsekcí, vychází z posloupnosti dvojic (2.76), přičemž předpokládá, že množiny $\mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}, i = 1, \dots, n$, jsou dány předpisem

$$\mathcal{U}_{\mathbf{x}_i} := \{\Delta \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p : \|\Delta \mathbf{x}_i\|_s \leq \rho_i\}, \quad (2.77)$$

kde $s \geq 1$ a pro $i = 1, \dots, n$ je $\rho_i \geq 0$. Geometricky bychom např. pro $s = 2$ mohli tento koncept interpretovat tak, že jako i -tou instancí uvažujeme vlastně libovolný bod nacházející se uvnitř a na povrchu p -rozměrné hyperkoule o poloměru ρ_i se středem v bodě \mathbf{x}_i .

Poznamenejme, že připouštíme i možnost $s = \infty$, v tom případě pro $\Delta \mathbf{x}_i = (\Delta \mathbf{x}_{i,1}, \dots, \Delta \mathbf{x}_{i,p})^\top \in \mathbb{R}^p$ definujeme

$$\|\Delta \mathbf{x}_i\|_\infty := \max \{|\Delta \mathbf{x}_{i,1}|, \dots, |\Delta \mathbf{x}_{i,p}|\}.$$

V následující motivační poznámce se vrátíme k lineární metodě SVM představené v podsekcí 2.2.1 a ukážeme jeden z důvodů, proč je za optimální nadrovinu vhodné volit takovou nadrovinu H , u níž je maximalizována šířka pásu určeného podpůrnými nadrovinami H_+ a H_- , které jsou dány předpisy (2.8) a (2.9).

Poznámka 2.14. Předpokládejme, že $s = 2$, pro $i = 1, \dots, n$ je $\rho_i \geq 0$ a množiny T_+ a T_- dané předpisy (2.2) a (2.3) jsou lineárně oddělitelné. Existuje-li optimální nadrovinu H zkonstruovaná na základě optimálního řešení úlohy (2.15) taková, že šířka d pásu určeného podpůrnými nadrovinami H_+ a H_- splňuje nerovnost

$$d > \max \{\rho_1, \dots, \rho_n\},$$

potom všechny objekty z trénovací množiny budou správně klasifikovány i v případě, že skutečná i -tá instance je dána jako $\mathbf{x}_i + \Delta \mathbf{x}_i$, kde $\|\Delta \mathbf{x}_i\|_2 \leq \rho_i$.

Ve zbytku této podsekcce se pokusíme nalézt modifikaci lineární metody SVM z podsekcce 2.2.2, která by vhodným způsobem využívala předpoklad (2.77). Hlavní myšlenky jednotlivých úvah budeme spolu s optimalizačními úlohami přebírat z článku Trafalis a Gilbert (2006) a knihy Xanthopoulos a kol. (2013, sekce 5.2). Uvedme ještě, že podobné výsledky byly publikovány již v článku Trafalis a Alwazzi (2003) a zobecnění tohoto konceptu lze nalézt v článku Xu a kol. (2009).

Naše úvahy budou vycházet z optimalizační úlohy (2.37). Povšimněme si ale, že je nejdříve nutné modifikovat podmínku (2.35), neboť nyní předpokládáme instance tvaru $\mathbf{x}_i + \Delta\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, n$. S využitím předpokladu (2.77) následně formulujeme lineární metodu SVM v robustní klasifikaci jako optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t.} \quad \min_{\Delta\mathbf{x}_i \in \mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}} & \left\{ y_i \left(\boldsymbol{\beta}^\top (\mathbf{x}_i + \Delta\mathbf{x}_i) + \beta_0 \right) \right\} \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.78)$$

kde $\lambda > 0$ je parametr. Na tuto novou optimalizační úlohu můžeme nahlížet jako na tzv. analýzu nejhoršího scénáře, někdy označovanou také jako analýza nejméně příznivého případu (v angličtině se používá výraz „worst case analysis“). Pro pevné $i = 1, \dots, n$ podmínka (2.35) odpovídá požadavku, aby objekt s instancí \mathbf{x}_i byl správně klasifikován a instance \mathbf{x}_i neležela ve vnitřku pásu určeného nadrovinami H_+ a H_- (proměnná ξ_i případně udává velikost penalizace, pokud tento požadavek není splněn). Podmínka

$$\min_{\Delta\mathbf{x}_i \in \mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}} \left\{ y_i \left(\boldsymbol{\beta}^\top (\mathbf{x}_i + \Delta\mathbf{x}_i) + \beta_0 \right) \right\} \geq 1 - \xi_i \quad (2.79)$$

potom pro totožné pevné $i = 1, \dots, n$ zohledňuje nejhorší možný scénář, tj. instanci $\mathbf{x}_i + \Delta\mathbf{x}_i$ s nejhorší možnou polohou vzhledem k optimální nadrovině.

Nyní odvodíme ekvivalentní vyjádření podmínky (2.79) a tím i ekvivalentní předpis optimalizační úlohy (2.78). Uvažujme libovolné pevné $i = 1, \dots, n$, dále libovolné pevné $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}$ a $\xi_i \geq 0$. Podmínka (2.79) je potom ekvivalentní s podmínkou

$$y_i \left(\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0 \right) + \min_{\Delta\mathbf{x}_i \in \mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}} y_i \boldsymbol{\beta}^\top \Delta\mathbf{x}_i \geq 1 - \xi_i.$$

Stačí tedy nalézt optimální hodnotu úlohy

$$\min_{\|\Delta\mathbf{x}_i\|_s \leq \rho_i} y_i \boldsymbol{\beta}^\top \Delta\mathbf{x}_i. \quad (2.80)$$

Připomeňme, že pro libovolné $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ a libovolné konstanty s, t splňující

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{t} = 1, \quad s \geq 1$$

podle Hölderovy nerovnosti (viz Boyd a Vandenberghe (2009, sekce 3.1.9)) platí

$$\mathbf{a}^\top \mathbf{b} = \sum_{i=1}^p a_i b_i \leq \left(\sum_{i=1}^p |a_i|^s \right)^{\frac{1}{s}} \left(\sum_{i=1}^p |b_i|^t \right)^{\frac{1}{t}} = \|\mathbf{a}\|_s \|\mathbf{b}\|_t.$$

Aplikujeme-li Hölderovu nerovnost na účelovou funkci optimalizační úlohy (2.80), dostáváme, že pro libovolné $\Delta \mathbf{x}_i \in \mathcal{U}_{\mathbf{x}_i}$ platí

$$|y_i \boldsymbol{\beta}^\top \Delta \mathbf{x}_i| \leq |y_i| \|\Delta \mathbf{x}_i\|_s \|\boldsymbol{\beta}\|_t \leq \rho_i \|\boldsymbol{\beta}\|_t,$$

a tedy

$$-\rho_i \|\boldsymbol{\beta}\|_t \leq y_i \boldsymbol{\beta}^\top \Delta \mathbf{x}_i,$$

což znamená, že hodnota $-\rho_i \|\boldsymbol{\beta}\|_t$ je optimální hodnotou úlohy (2.80). Jelikož index i , vektor $\boldsymbol{\beta}$ a konstanty β_0 a ξ_i byly voleny libovolně, optimalizační úloha (2.78) je tedy dána předpisem

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - \rho_i \|\boldsymbol{\beta}\|_t \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.81)$$

kde $\lambda > 0$ je parametr a konstanta t vyhovuje rovnosti

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{t} = 1. \quad (2.82)$$

Je-li $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$, $\widehat{\beta}_0$ a $\widehat{\xi}_i$, $i = 1, \dots, n$, optimální řešení úlohy (2.81), potom optimální robustní lineární rozhodovací pravidlo pro instance $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ je definováno předpisem

$$R(\mathbf{x}) = \text{sgn} \left(\widehat{\boldsymbol{\beta}}^\top \mathbf{x} + \widehat{\beta}_0 \right).$$

Optimální nadrovina je dána jako

$$H = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \widehat{\boldsymbol{\beta}}^\top \mathbf{x} + \widehat{\beta}_0 = 0 \right\}.$$

Na závěr uvedme, jak se změní předpis optimalizační úlohy (2.81) pro několik v praxi nejpoužívanějších speciálních voleb konstanty s :

1. Je-li $s = 2$, potom dle (2.82) také $t = 2$. Zavedením pomocné proměnné α můžeme optimalizační úlohu (2.81) přeformulovat jako optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0, \alpha \geq 0} & \left\{ \alpha + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & \left\| \frac{\sqrt{2}}{2} \boldsymbol{\beta} \right\|_2 \leq \alpha, \\ & \|\rho_i \boldsymbol{\beta}\|_2 \leq y_i (\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - 1 + \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.83)$$

což je úloha tzv. kuželového programování druhého řádu. Tato úloha je známá také pod zkratkou SOCP, což je akronym anglického výrazu „second order cone programming“. Pro podrobnější informace o úlohách SOCP odkazujeme čtenáře např. na článek Alizadeh a Goldfarb (2003).

2. Je-li $s = 1$, potom dle (2.82) je $t = \infty$. Nahradíme-li v účelové funkci optimalizační úlohy (2.81) výraz $\|\cdot\|_2^2/2$ maximovou normou, získáváme optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \|\beta\|_\infty + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - \rho_i \|\beta\|_\infty \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Zavedením pomocné proměnné α poté můžeme optimalizační úlohu (2.84) přeformulovat jako úlohu lineárního programování

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0, \alpha \geq 0} & \left\{ \alpha + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - \rho_i \alpha \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \\ & \alpha \geq \beta_i, \quad i = 1, \dots, p, \\ & \alpha \geq -\beta_i, \quad i = 1, \dots, p. \end{aligned}$$

3. Je-li $s = \infty$, potom dle (2.82) je $t = 1$. Nahradíme-li v účelové funkci optimalizační úlohy (2.81) výraz $\|\cdot\|_2^2/2$ 1-normou, získáme optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \|\beta\|_1 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - \rho_i \|\beta\|_1 \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Zavedením pomocných proměnných $\alpha_1, \dots, \alpha_p$ potom lze podobně jako v předchozím případě optimalizační úlohu (2.85) přeformulovat jako úlohu lineárního programování

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\beta \in \mathbb{R}^p, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0, \\ \alpha_1, \dots, \alpha_p \geq 0}} & \left\{ \sum_{i=1}^p \alpha_i + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\beta^\top \mathbf{x}_i + \beta_0) - \rho_i \sum_{i=1}^p \alpha_i \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \\ & \alpha_i \geq \beta_i, \quad i = 1, \dots, p, \\ & \alpha_i \geq -\beta_i, \quad i = 1, \dots, p. \end{aligned}$$

2.4.2 Nelineární metoda SVM v robustní klasifikaci

V této podsekcí ukážeme, jak koncept představený v předchozí podsekcí zobecnit tak, abychom získali robustní nelineární rozhodovací pravidlo. Jak napovídá i název samotné podsekcí, současně uvidíme, že se jedná o zobecnění penalizačního nelineárního rozhodovacího pravidla, které jsme představili v podsekcí 2.3.3.

Hlavní myšlenky úvah, které zde učiníme, budeme spolu s optimalizačními úlohami přebírat z článku Trafalis a Gilbert (2006). Podobné výsledky byly

o několik let dříve představeny v článku Trafalis a Alwazzi (2003). Zobecnění tohoto konceptu lze opět nalézt v článku Xu a kol. (2009).

Nechť $k : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ je pevně zvolená jádrová funkce. Podle definice 2.1 potom existuje (ne nutně jednoznačně určený) Hilbertův prostor \mathcal{F} nad \mathbb{R} a zobrazení $\Phi : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathcal{F}$ splňující

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{z}) \rangle, \quad \mathbf{x}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^p, \quad (2.86)$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definuje skalární součin na \mathcal{F} .

Dále uvažujme posloupnost dvojic

$$(\Phi(\mathbf{x}_1) + \Delta\Phi(\mathbf{x}_1), y_1), \dots, (\Phi(\mathbf{x}_n) + \Delta\Phi(\mathbf{x}_n), y_n) \in \mathcal{F} \times \{-1, 1\},$$

kde $\Delta\Phi(\mathbf{x}_i) \in \mathcal{U}_{\Phi(\mathbf{x}_i)}$, $i = 1, \dots, n$, přičemž předpokládejme, že

$$\mathcal{U}_{\Phi(\mathbf{x}_i)} = \{\Delta\Phi(\mathbf{x}_i) \in \mathcal{F} : \|\Delta\Phi(\mathbf{x}_i)\|_{\mathcal{F}} \leq \eta_i\}, \quad i = 1, \dots, n,$$

kde

$$\|\cdot\|_{\mathcal{F}} = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$$

definuje normu na \mathcal{F} a pro $i = 1, \dots, n$ je $\eta_i \geq 0$. Hodnota η_i může být stanovena na základě odpovídající hodnoty ρ_i z předpisu (2.77).

Nelineární metodu SVM v robustní klasifikaci poté formulujeme jako optimalizační úlohu

$$\begin{aligned} \min_{\beta \in \mathcal{F}, \beta_0 \in \mathbb{R}, \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0} & \left\{ \|\beta\|_{\mathcal{F}}^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \\ \text{s.t. } & y_i (\langle \beta, \Phi(\mathbf{x}_i) \rangle + \beta_0) - \eta_i \|\Delta\Phi(\mathbf{x}_i)\|_{\mathcal{F}} \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.87)$$

kde $\lambda > 0$ je regularizační parametr. Povšimněme si podobnosti optimalizační úlohy (2.87) s optimalizačními úlohami (2.74) a (2.81).

Z teorie jádrových funkcí (viz Schölkopf a Smola (2002, sekce 2.2.3)) plyne, že $\beta \in \mathcal{F}$ lze vyjádřit předpisem

$$\beta = \sum_{i=1}^n \alpha_i \Phi(\mathbf{x}_i), \quad (2.88)$$

kde α_i , $i = 1, \dots, n$, jsou vhodně zvolená reálná čísla. Definujme matici \mathbb{K} řádu n předpisem

$$\mathbb{K} := (k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{i,j=1}^n \quad (2.89)$$

a vektor

$$\boldsymbol{\alpha} := (\alpha_1, \dots, \alpha_n)^\top. \quad (2.90)$$

Dosadíme-li do skalárního součinu v účelové funkci optimalizační úlohy (2.87) a poté postupně využijeme předpisů (2.88), (2.86), (2.90) a (2.89), dostáváme

$$\begin{aligned}
\|\beta\|_{\mathcal{F}}^2 &= \langle \beta, \beta \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n \alpha_i \Phi(\mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^n \alpha_j \Phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle = \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \langle \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \\
&= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \\
&= \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbb{K} \boldsymbol{\alpha}. \tag{2.91}
\end{aligned}$$

Dále si uvědomme, že z věty 2.7 a poznámky 2.6 (ii) plyne, že matice \mathbb{K} je symetrická a pozitivně semidefinitní, a tedy existuje reálná matice \mathbb{A} řádu n taková, že

$$\mathbb{K} = \mathbb{A}^\top \mathbb{A}.$$

Odtud a z rovnosti (2.91) plyne, že

$$\|\beta\|_{\mathcal{F}} = \sqrt{\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbb{K} \boldsymbol{\alpha}} = \sqrt{(\mathbb{A} \boldsymbol{\alpha})^\top (\mathbb{A} \boldsymbol{\alpha})} = \|\mathbb{A} \boldsymbol{\alpha}\|_2. \tag{2.92}$$

Analogicky pro skalární součin $\langle \beta, \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle$, $j = 1, \dots, n$, dostáváme, že

$$\langle \beta, \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n \alpha_i \Phi(\mathbf{x}_i), \Phi(\mathbf{x}_j) \right\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \boldsymbol{\alpha}^\top \mathbb{K}_j, \tag{2.93}$$

kde \mathbb{K}_j označuje j -tý sloupec (nebo ekvivalentně také j -tý řádek) matice \mathbb{K} .

Zavedením pomocné proměnné γ a využitím předpisů (2.92) a (2.93) poté můžeme optimalizační úlohu (2.87) přeformulovat jako následující úlohu SOCP

$$\begin{aligned}
&\min_{\substack{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n, \beta_0 \in \mathbb{R}, \\ \xi_1, \dots, \xi_n \geq 0, \gamma \geq 0}} \left\{ \gamma + \lambda \sum_{i=1}^n \xi_i \right\}, \tag{2.94} \\
&\text{s.t. } \|\mathbb{A} \boldsymbol{\alpha}\|_2 \leq \gamma, \\
&\quad \|\eta_i \mathbb{A} \boldsymbol{\alpha}\|_2 \leq y_i \left(\boldsymbol{\alpha}^\top \mathbb{K}_j + \beta_0 \right) - 1 + \xi_i, \quad i = 1, \dots, n.
\end{aligned}$$

Je-li $\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \hat{\beta}_0, \hat{\gamma}$ a $\hat{\xi}_i, i = 1, \dots, n$, optimální řešení úlohy (2.94), potom optimální robustní nelineární rozhodovací pravidlo pro instance $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ je dáno jako

$$R(\mathbf{x}) = \text{sgn} \left(\sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \hat{\beta}_0 \right).$$

Optimální kontura je definována předpisem

$$H = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + \hat{\beta}_0 = 0 \right\}.$$

2.5 Studie dynamiky stisku počítačových kláves

Kromě nesporných výhod přináší rozvoj moderních technologií také vyšší požadavky na jejich zabezpečení. Často se tak lze setkat s tzv. vícefázovým ověřováním totožnosti uživatele. Jedná se např. o používání platební karty v kombinaci se znalostí PIN kódu nebo znalostí hesla a využití některé z behaviorální charakteristiky uživatele. Tímto pojmem rozumíme např. sítnici oka uživatele, jeho hlas, otisky prstů nebo podpis. V článku Loy a kol. (2007) je ukázáno, že také dynamika stisku počítačových kláves je vhodnou behaviorální charakteristikou.

V následujících podsekcích se budeme věnovat biometrické identifikaci stylu psaní a osob, přičemž využijeme právě této charakteristiky. Deset osob (pět mužů a pět žen) bylo požádáno, aby alespoň desetkrát rychle a desetkrát pomalu napsali slovo „kladruby“. Během psaní byl každé osobě měřen čas, který uplynul mezi zmáčknutím příslušné klávesy a jejím uvolněním (celkem se tedy jedná o 8 proměnných: K, L, A, D, R, U, B, Y), a dále čas, který uplynul mezi uvolněním klávesy a stiskem klávesy bezprostředně následující (celkem se tedy jedná o 7 proměnných: K - L, L - A, A - D, D - R, R - U, U - B, B - Y). Pokud se stalo, že např. klávesa K byla uvolněna až potom, co byla stisknuta klávesa L, nabývá proměnná K - L záporné hodnoty. Každé pozorování tedy sestává z 15 proměnných. Pokud během psaní slova „kladruby“ došlo k překlepu, bylo toto pozorování vyřazeno. Pro účely klasifikace tedy máme 200 pozorování.

V podsekcí 2.5.1 se budeme zabývat binární klasifikací stylu psaní, tj. zda klíčové slovo „kladruby“ bylo napsáno rychle nebo pomalu. V podsekcí 2.5.2 budeme zkoumat klasifikaci uživatelů, tj. kterou z uvažovaných deseti osob bylo klíčové slovo „kladruby“ napsáno.

Klasifikační analýzu budeme v obou podsekcích provádět pomocí:

- (i) lineární diskriminační analýzy (LDA),
- (ii) lineární metody SVM představené v podsekcí 2.2.2 a založené na optimalizační úloze (2.52),
- (iii) nelineární metody SVM představené v podsekcí 2.3.3 a založené na optimalizační úloze (2.75), přičemž jako jádrovou funkci uvažujeme gaussovskou radiální bazickou funkci danou předpisem (2.66),
- (iv) lineární robustní metody SVM představené v podsekcí 2.4.1.

K samotnému modelování použijeme statistický program R (R Core Team (2016)). K implementaci lineární diskriminační analýzy použijeme funkci `lda` z R balíčku MASS. K nalezení hodnot regularizačních parametrů, resp. k implementaci lineární i nelineární metody SVM použijeme funkci `tune.svm`, resp. funkci `svm` z R balíčku `e1071`. Lineární robustní metodu SVM založíme na optimalizační úloze (2.83). K nalezení optimálního řešení úlohy SOCP využijeme stejnojmenné funkce `Socp` z R balíčku FRAP0. Zdrojové kódy odpovídající jednotlivým podsekcím jsme pojmenovali číslem a názvem příslušné podsekcce a lze je nalézt na přiloženém disku CD-ROM ve složce Klasifikační analýza.

2.5.1 Identifikace stylu psaní

V této podsekcí se budeme zabývat binární klasifikací stylu psaní. Uvažujeme tedy dvě třídy (rychlý nebo pomalý styl psaní), trénovací množinu velikosti 200 objektů a jednotlivé instance jako reálné vektory dimenze 15.

Před zahájením samotné klasifikace je ale ještě třeba stanovit hodnoty parametru λ pro optimalizační úlohy (2.52), (2.75) a (2.83). K jejich nalezení použijeme tzv. 10-násobnou křížovou validaci:

Pro parametr λ uvažme interval a vhodnou posloupnost jeho dělení. Pro všechny prvky této posloupnosti provedeme následující dva kroky. Instance všech 200 objektů náhodně rozdělíme do 10 skupin. Následně každou skupinu použijeme právě jednou ke zjištění procentuální klasifikační chyby rozhodovacího pravidla (založeného na příslušné metodě) zkonstruovaného z dat sestávajících ze zbývajících 9 skupin. Výsledná procentuální klasifikační chyba daného prvku posloupnosti dělení je dána jako průměr procentuálních klasifikačních chyb uvažovaných 10 skupin. Prvek posloupnosti dělení s minimální výslednou procentuální klasifikační chybou je zvolen za hledanou hodnotu parametru λ příslušné metody. Pokud takovýchto prvků existuje více, vybereme z nich ten nejmenší.

Optimální hodnoty parametrů λ uvádíme v tabulce 2.1. Připomeňme, že při 10-násobné křížové validaci u nelineární metody SVM navíc ještě hledáme hodnotu parametru σ . Výsledná hodnota je v tomto případě 0,080. Poznamenejme ještě, že v případě lineární robustní metody SVM jsme experimentálně pro všechna i zvolili $\rho_i = \rho = 0,100$.

Pro posouzení úspěšnosti klasifikace jednotlivých metod použijeme tzv. „leave-one-out“ metodu. V jejím i -tém kroku, $i = 1, \dots, 200$, odstraníme z dat i -tý objekt a zbývajících 199 objektů použijeme k vytvoření rozhodovacích pravidel založených na uvažovaných metodách. Následně použijeme tato rozhodovací pravidla ke klasifikaci i -tého objektu a zapamatujeme si, pokud byla tato klasifikace úspěšná. Úspěšnost klasifikace jednotlivých metod, kterou uvádíme v tabulce 2.1, je poté definována jako podíl správně klasifikovaných objektů a všech objektů.

Tabulka 2.1: Úspěšnost klasifikace stylu psaní pro jednotlivé metody

	LDA	Lineární SVM	Nelineární SVM	Lineární robustní SVM
Úspěšnost klasifikace	0,595	0,615	0,730	0,645
Optimální hodnota λ	–	0,160	3,000	0,700

V tabulce 2.1 můžeme nahlédnout, že výrazně největší úspěšnosti klasifikace dosahuje nelineární metoda SVM. Následuje námi implementovaná lineární robustní metoda SVM, která v úspěšnosti klasifikace překonává lineární metodu SVM a lineární diskriminační analýzu. Další náhled na úspěšnost klasifikace jednotlivých metod poskytuje tabulka 2.2.

Pro každou metodu udávají jednotlivé hodnoty v tabulce 2.2 podíl správně klasifikovaných objektů z dané třídy a velikosti dané třídy. Můžeme si povšimnout, že všechny metody jsou úspěšnější při rozpoznávání rychlého stylu psaní. Pořadí metod při úspěšnosti rozpoznávání stylů psaní odpovídá pořadí metod při úspěšnosti klasifikace.

Tabulka 2.2: Úspěšnost rozpoznávání stylu psaní pro jednotlivé metody

Styl psaní	LDA	Lineární SVM	Nelineární SVM	Lineární robustní SVM
pomalů	0,500	0,520	0,684	0,531
rychle	0,686	0,706	0,775	0,755

Závěrem poznamenejme, že úspěšnosti v tabulkách 2.1 a 2.2 nejsou nijak zvlášť vysoké. To nás může vést k přesvědčení, že dochází k určité asymetrii. Osoby navyklé na rychlý styl psaní budou stejným stylem psát i tehdy, pokud je požádáme, aby psaly pomaleji, kdežto osoby zvyklé na pomalý styl psaní dokáží požadavku na zvýšení rychlosti vyhovět.

2.5.2 Identifikace osob

V této podsececi budeme zkoumat klasifikaci osob podle dynamiky stisku počítačových kláves. Uvažujeme tedy 10 tříd (osoba 1, ..., osoba 10), trénovací množinu obsahující 200 objektů a instance ve tvaru reálných vektorů dimenze 15.

Připomeňme, že uvažované metody SVM jsou definovány pouze pro případ binární klasifikace. Je-li počet tříd roven k , kde $k > 2$, využívá se pro klasifikaci nově uvažovaného objektu tzv. volební schéma (viz přístup nazvaný „Majority voting scheme“ uvedený v knize Xanthopoulos a kol. (2013) na str. 40):

Zkonstruujeme rozhodovací pravidla pro všechny dvojice uvažovaných tříd. Celkem tedy získáme $k(k-1)/2$ rozhodovacích pravidel. Máme-li poté rozhodnout o příslušnosti k jedné ze tříd u nově uvažovaného objektu, dosadíme instanci tohoto objektu postupně do všech rozhodovacích pravidel, přičemž třídě, do které bychom nový objekt zařadili, přičteme hlas. Objekt nakonec zařadíme do třídy s největším počtem hlasů.

V námi provedené analýze nastalo několik případů, kdy existovala více než jedna třída s největším počtem hlasů. Takovou situaci jsme řešili následovně:

Jsou-li t_1, \dots, t_{m_1} , $m_1 \leq k$, třídy s největším počtem hlasů, potom dosadíme instanci uvažovaného objektu do rozhodovacích pravidel všech dvojic tříd t_1, \dots, t_{m_1} . Bez újmy na obecnosti necht t_1, \dots, t_{m_2} , $m_2 \leq m_1$, jsou třídy s největším počtem hlasů. Je-li bez újmy na obecnosti $m_2 = 1$, potom objekt zařadíme do třídy 1. V opačném případě opět dosadíme instanci uvažovaného objektu do rozhodovacích pravidel všech dvojic tříd t_1, \dots, t_{m_2} . Tento postup opakujeme, dokud nezískáme pouze jednu třídu s největším počtem hlasů. Jestliže od určitého kroku N platí $m_N = m_{N+1} = \dots$, potom objekt zařadíme do náhodně zvolené třídy $1, \dots, m_N$.

Před samotnou klasifikací je opět třeba určit hodnoty parametru λ pro optimalizační úlohy (2.52), (2.75) a (2.83). K nalezení hodnoty parametrů λ pro uvažované metody SVM pro všechny dvojice uvažovaných tříd opět použijeme 10-násobnou křížovou validaci. Pro danou metodu SVM tak získáme $10 \times 9/2 = 45$ hodnot parametrů λ , v případě nelineární penalizační metody SVM navíc ještě 45 hodnot parametrů σ . Poznamenejme ještě, že v případě lineární robustní metody SVM jsme experimentálně pro všechna i zvolili $\rho_i = \rho = 2,200$.

Pro posouzení úspěšnosti klasifikace jednotlivých metod použijeme opět „leave-one-out“ metodu, přičemž ke klasifikaci osoby v i -tém kroku, $i = 1, \dots, 200$, metodami SVM využijeme výše uvedeného volebního schématu. Úspěšnost klasifikace jednotlivých metod, uvedenou v tabulce 2.3, definujeme jako podíl správně klasifikovaných objektů a všech objektů.

Tabulka 2.3: Úspěšnost klasifikace osob pro jednotlivé metody

	LDA	Lineární SVM	Nelineární SVM	Lineární robustní SVM
Úspěšnost klasifikace	0,830	0,835	0,850	0,715

V tabulce 2.3 vidíme, že největší úspěšnosti klasifikace je opět dosaženo nelineární metodou SVM, nicméně lineární metoda SVM a lineární diskriminační analýza zaostávají pouze nepatrně. Námí implementovaná lineární robustní metoda SVM, která v předchozí podsekcí překonala v úspěšnosti klasifikace lineární metodu SVM a lineární diskriminační analýzu, nyní dosahuje výrazně nejhorší úspěšnosti. To může být dáno několika faktory. Předně si uvědomme, že identifikace osob je úlohou klasifikace do více než dvou tříd, a tedy principiálně obtížnější úloha než binární klasifikace stylu psaní. Vystává proto otázka, zda by jiný přístup než volební schéma nebyl vhodnější. Další z možností zlepšení úspěšnosti klasifikace lineární robustní metody SVM by možná mohlo být použití adaptivní volby parametrů ρ_i , při níž bychom např. pro různé osoby stanovili různé hodnoty těchto parametrů.

Závěr

V předložené práci jsme se zabývali několika metodami regresní a klasifikační analýzy, formulovaných ve tvaru optimalizační úlohy. Abychom zohlednili chyby měření a jiné nepřesnosti, podrobně jsme popsali odvození jejich robustních verzí. Pomocí numerických experimentů jsme následně potvrdili, že optimální řešení těchto nově formulovaných úloh jsou skutečně robustní.

V části věnované regresní analýze jsme nejdříve představili dvě z metod regularizované regrese – hřebenovou regresi a metodu Lasso. V navazující části jsme formulovali dva koncepty vycházející z metody nejmenších čtverců v robustní optimalizaci a mnohem podrobněji než ve zdrojových člancích dokázali, že s hřebenovou regresí a metodou Lasso velmi úzce souvisí. Tím jsme robustnost hřebenové regrese a metody Lasso demonstrovali po teoretické stránce.

Na rozdíl od teoretické části jsme v praktické části využívali obecnější podmínku na chyby měření. Jejím využitím jsme na náhodně generovaných datech ukázali, že optimální řešení hřebenové regrese a metody Lasso jsou robustní nejen v přítomnosti chyb měření, ale i pokud navíc nastává problém s multikolinearitou. Zároveň jsme ovšem ukázali, že obě tyto metody jsou méně robustní vůči přítomnosti odlehlého pozorování než metoda nejmenších čtverců, což naznačuje, že hřebenová regrese a metoda Lasso jsou robustní jen vůči drobným změnám v datech.

V části věnované klasifikační analýze jsme představili jednu z moderních klasifikačních metod – metodu SVM. V našem výkladu jsme se snažili na tuto metodu nahlížet nejen z pohledu (robustní) optimalizace, ale i strojového učení a statistiky. Podrobně jsme popsali odvození jak lineární verze metody SVM, tak i nelineární verze vycházející z teorie jádrových funkcí. V závěru teoretické části jsme ukázali, jak obě tyto verze zobecnit tak, aby zohledňovaly chyby měření obsažené v datech.

V praktické části jsme vyloženou teorii aplikovali na příkladu biometrické identifikace stylu psaní a osob podle dynamiky stisku počítačových kláves. V případě identifikace stylu psaní jsme výrazně největší úspěšnosti klasifikace dosáhli nelineární metodou SVM. Druhou v pořadí byla námi implementovaná lineární robustní metoda SVM, která v úspěšnosti klasifikace překonala lineární metodu SVM a lineární diskriminační analýzu.

Protože identifikace osob je úlohou klasifikace do více než dvou tříd, využili jsme při implementaci jednotlivých metod SVM tzv. volební schéma. Největší úspěšnosti klasifikace jsme opět dosáhli nelineární metodou SVM, nicméně lineární metoda SVM a lineární diskriminační analýza zaostaly pouze nepatrně. Výrazně horší úspěšnosti klasifikace jsme dosáhli námi implementovanou lineární

robustní metodou SVM. Jednou z možností zlepšení její úspěšnosti by možná mohlo být použití adaptivní volby jí odpovídajících parametrů.

Co se týče možností rozšíření této práce, v případě regresní analýzy by to mohla být snaha spojit regularizaci a statistickou robustnost a navrhnout tak novou metodu zobecňující hřebenovou regresi nebo metodu Lasso. Jinou možností by mohlo být studium obecnějších, ale v praxi snadněji aplikovatelných podmínek na chyby měření.

V případě metody SVM existuje velké množství otevřených problémů. Jedná se např. o kritérium pro volbu jádrové funkce nelineární metody SVM nebo studie tvaru podmínek nepřesností obsažených v datech. Další možností rozšíření práce by mohlo být nahrazení účelové funkce (v optimalizačních úlohách jednotlivých verzí metody SVM) obecnou ztrátovou funkcí, příp. její robustní analogií.

Příloha A

Pomocná tvrzení a definice

Definice A.1 (Pseudoinverze). Necht \mathbb{A} je reálná matice typu $n \times p$. Řekneme, že reálná matice \mathbb{A}^- typu $p \times n$ je pseudoinverzní matice (případně stručně jen pseudoinverze) k matici \mathbb{A} , jestliže platí

$$\mathbb{A}\mathbb{A}^-\mathbb{A} = \mathbb{A}.$$

Poznámka A.2. Pro libovolnou reálnou matici existuje její pseudoinverze. Ne nutně je ovšem určena jednoznačně.

Věta A.3. Necht \mathbb{A} je reálná matice typu $n \times p$ a \mathbf{b} je reálný vektor dimenze n . Předpokládejme, že soustava lineárních rovnic $\mathbb{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ má řešení. Necht \mathbb{A}^- je nějaká pseudoinverze matice \mathbb{A} .

Potom vektor

$$\mathbf{x}_0 = \mathbb{A}^-\mathbf{b}$$

dimenze p je řešením této soustavy lineárních rovnic.

Důkaz. Viz Anděl (2007), věta A.23. □

Definice A.4 (Mooreova–Penroseova pseudoinverze). Necht \mathbb{A} je reálná matice typu $n \times p$. Řekneme, že reálná matice \mathbb{A}^+ typu $p \times n$ je Mooreova–Penroseova pseudoinverze matice \mathbb{A} , jestliže platí následující podmínky:

- (i) $\mathbb{A}\mathbb{A}^+\mathbb{A} = \mathbb{A}$,
- (ii) $\mathbb{A}^+\mathbb{A}\mathbb{A}^+ = \mathbb{A}^+$,
- (iii) $(\mathbb{A}\mathbb{A}^+)^\top = \mathbb{A}\mathbb{A}^+$,
- (iv) $(\mathbb{A}^+\mathbb{A})^\top = \mathbb{A}^+\mathbb{A}$.

Věta A.5 (SVD - rozklad podle singulárních hodnot). Necht \mathbb{A} je reálná matice typu $n \times p$, kde $n \geq p$ a $\text{rank}(\mathbb{A}) = r > 0$. Potom existuje rozklad matice \mathbb{A} daný předpisem

$$\mathbb{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\top = \sum_{i=1}^r d_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top,$$

kde

- (i) $\mathbb{U} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)$ je ortogonální matice řádu n , přičemž vektory $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$ jsou ortonormálními vlastními vektory matice $\mathbb{A}\mathbb{A}^\top$,
- (ii) $\mathbb{V} = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p)$ je ortogonální matice řádu p , jejíž sloupce tvoří (všechny) ortonormální vlastní vektory matice $\mathbb{A}^\top\mathbb{A}$,
- (iii) \mathbb{D} je reálná matice typu $n \times p$ definovaná jako

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \mathbb{D}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

kde $\mathbb{D}_r = \text{diag}(d_1, \dots, d_r)$ je diagonální matice řádu r , přičemž

$$d_1^2 \geq \dots \geq d_r^2 > 0$$

jsou všechna nenulová vlastní čísla matice $\mathbb{A}\mathbb{A}^\top$ a zároveň všechna nenulová vlastní čísla matice $\mathbb{A}^\top\mathbb{A}$.

Hodnoty $d_i, i = 1, \dots, r$, nazýváme singulárními čísly matice \mathbb{A} a požadujeme, aby splňovaly nerovnosti

$$d_1 \geq \dots \geq d_r > 0.$$

Tento rozklad nazýváme SVD rozklad matice \mathbb{A} .

Důkaz. Viz Duintjer Tebbens a kol. (2012), věta 5.6. □

Poznámka A.6. Ve statistické literatuře se často nerozlišuje mezi SVD rozkladem a spektrálním rozkladem matice. Principiálně se však jedná o dva odlišné koncepty. Zároveň je nutné si uvědomit, že postupy numerické lineární algebry, kterých lze použít k výpočtu spektrálního rozkladu, jsou efektivnější v porovnání s nástroji pro výpočet SVD rozkladu.

Pokud by čtenáře zajímalo porovnání numerických vlastností standardních algoritmů pro výpočet těchto rozkladů a jejich důležitost v oblasti redukce dimenze dat, odkazujeme jej např. na článek Kalina a Duintjer Tebbens (2014).

Definice A.7 (Střední kvadratická chyba odhadu). Necht X_1, \dots, X_n jsou náhodné veličiny z parametrické rodiny, která závisí na parametru $\boldsymbol{\theta}$. Necht $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}(X_1, \dots, X_n)$ je odhad parametru $\boldsymbol{\theta}$. Střední kvadratickou chybu odhadu $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ definujeme předpisem

$$MSE(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{E}((\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta})^\top) = \text{var}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) + (\mathbf{E}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - \boldsymbol{\theta})(\mathbf{E}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - \boldsymbol{\theta})^\top.$$

Věta A.8. Necht \mathbb{A} je pozitivně definitní matice řádu p , \mathbf{b} je nenulový vektor dimenze p a $c \in (0, \infty)$. Potom

$$c\mathbb{A} - \mathbf{b}\mathbf{b}^\top > 0,$$

tj. $c\mathbb{A} - \mathbf{b}\mathbf{b}^\top$ je pozitivně definitní matice, právě tehdy, když

$$\mathbf{b}^\top \mathbb{A}^{-1} \mathbf{b} < c.$$

Důkaz. Viz Farebrother (1976), appendix. □

Definice A.9 (Lineární oddělitelnost reálných množin). Řekneme, že neprázdné množiny $A, B \subset \mathbb{R}^p$ jsou lineárně oddělitelné, jestliže existuje vektor $\beta \in \mathbb{R}^p$ a konstanta $\beta_0 \in \mathbb{R}$ splňující:

(i) $\forall \mathbf{a} \in A$ platí, že

$$\beta^\top \mathbf{a} + \beta_0 > 0,$$

(ii) $\forall \mathbf{b} \in B$ platí, že

$$\beta^\top \mathbf{b} + \beta_0 < 0.$$

Věta A.10 (O silné dualitě). Necht $X \subset \mathbb{R}^p$ je neprázdná konvexní množina. Dále necht $f : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ a $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_m) : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^m$ jsou konvexní funkce a $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_n) : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$ afinní funkce.

Předpokládejme, že existuje $\hat{\mathbf{x}} \in X$ takové, že $\mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) < \mathbf{0}$, $\mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$ a $\mathbf{0} \in \text{int}(\mathbf{h}(X))$, kde int označuje vnitřek množiny a $\mathbf{h}(X) = \{\mathbf{h}(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in X\}$. Tento požadavek se nazývá podmínka regularity.

Potom

$$\inf\{f(\mathbf{x}) : \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in X\} = \sup\{\theta(\mathbf{u}, \mathbf{v}) : \mathbf{u} \geq \mathbf{0}\},$$

kde

$$\theta(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \theta(u_1, \dots, u_m, v_1, \dots, v_n) = \inf_{\mathbf{x} \in X} \{f(\mathbf{x}) + \mathbf{u}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^\top \mathbf{h}(\mathbf{x})\}.$$

Je-li navíc optimalizační úloha

$$\begin{aligned} & \inf_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}), \\ & \text{s.t. } \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \\ & \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

konečná, tj. je nabyto minima, potom také optimalizační úloha

$$\sup_{\mathbf{u} \geq \mathbf{0}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n} \theta(\mathbf{u}, \mathbf{v})$$

je konečná, tj. v bodě $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$, kde $\mathbf{u}^* \geq \mathbf{0}$, je nabyto maxima. Je-li potom \mathbf{x}^* optimální řešení úlohy

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}), \\ & \text{s.t. } \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \\ & \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \end{aligned}$$

potom pro všechna $i = 1, \dots, m$ je

$$u_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0.$$

Důkaz. Viz Bazaraa a kol. (2006), věta 6.2.4. □

Seznam použité literatury

- AIZERMAN, M., BRAVERMAN, E. a ROZONOER, L. (1964). Theoretical foundations of the potential function method in pattern recognition learning. *Automation Remote Control*, **25**, 821–837.
- ALIZADEH, F. a GOLDFARB, D. (2003). Second-order cone programming. *Mathematical Programming*, **95**(1), 3–51.
- ANDĚL, J. (2007). *Základy matematické statistiky*. Druhé opravené vydání. Matfyzpress, Praha. ISBN 80-7378-001-1.
- BAZARAA, M. S., SHERALI, H. D. a SHETTY, C. M. (2006). *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. Třetí vydání. Wiley-Interscience, New Jersey. ISBN 0-471-48600-0.
- BELLONI, A., CHERNOZHUKOV, V. a WANG, L. (2011). Square-root lasso: pivotal recovery of sparse signals via conic programming. *Biometrika*, **98**(4), 791–806.
- BEN-DAVID, S. a SIMON, H. U. (2001). Efficient learning of linear perceptrons. In *Advances in Neural Information Processing Systems 13*, pages 189–195. MIT Press, Cambridge.
- BEN-TAL, A., EL GHAOU, L. a NEMIROVSKI, A. S. (2009). *Robust Optimization*. Princeton University Press, New Jersey. ISBN 978-0-691-14368-2.
- BERKA, P. (2003). *Dobývání znalostí z databází*. Academia, Praha. ISBN 80-200-1062-9.
- BOSER, B. E., GUYON, I. M. a VAPNIK, V. N. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. In *Proceedings of the 5th Annual ACM Workshop on Computational Learning Theory*, pages 144–152. ACM Press, New York.
- BOYD, S. a VANDENBERGHE, L. (2009). *Convex Optimization*. Sedmé přepracované vydání. Cambridge University Press, Cambridge. ISBN 978-0-521-83378-3.
- BREIMAN, L. (2001). Random forests. *Machine Learning*, **45**(1), 5–32.
- BROWN, P. J. (2002). *Measurement, Regression, and Calibration*. Oxford statistical science series 12. Clarendon Press, Oxford. ISBN 0-19-852245-2.
- BUONACCORSI, J. P. (2010). *Measurement error: models, methods, and applications*. CRC Press, Boca Raton. ISBN 978-1-4200-6656-2.

- CARAMANIS, C. a MANNOR, S. (2008). Learning in the Limit with Adversarial Disturbances. In *Proceedings of the 21st Annual Conference on Learning Theory*, pages 467–478. Omnipress, Helsinki.
- CHANDRASEKARAN, S., GOLUB, G., GU, M. a SAYED, A. (1998). Parameter estimation in the presence of bounded data uncertainties. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, **19**(1), 235–252.
- CHRISTENSEN, R. (2001). *Advanced Linear Modeling*. Druhé vydání. Springer, New York. ISBN 978-1-4757-3847-6.
- CIPRA, T. (2008). *Finanční ekonometrie*. Ekopress, Praha. ISBN 978-80-86929-43-9.
- CORTES, C. a VAPNIK, V. N. (1995). Support vector networks. *Machine Learning*, **20**, 273–297.
- COVER, T. M. (1965). Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition. *IEEE Transactions on Electronic Computers*, **14**, 326–334.
- DRAPER, N. R. a SMITH, H. (1998). *Applied Regression Analysis*. Třetí vydání. Wiley-Interscience, New York. ISBN 0-471-17082-8.
- DUINTJER TEBBENS, J., HNĚTYNKOVÁ, I., PLEŠINGER, M., STRAKOŠ, Z. a TICHÝ, P. (2012). *Analýza metod pro maticové výpočty. Základní metody*. Matfyzpress, Praha. ISBN 978-80-7378-201-6.
- EFRON, B., HASTIE, T., JOHNSTONE, I. a TIBSHIRANI, R. (2004). Least angle regression (with discussion). *Annals of Statistics*, **32**, 407–499.
- EL GHAOUI, L. a LEBRET, H. (1997). Robust solutions to least-squares problems with uncertain data. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, **18** (4), 1035–1064.
- FAREBROTHER, R. W. (1976). Further Results on the Mean Square Error of Ridge Regression. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **38**, 248–250.
- FISHER, R. A. (1936). The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems. *Annals of Eugenics*, **7**(2), 179–188.
- FREDHOLM, I. (1903). Sur une classe d'équations fonctionnelles. *Acta Mathematica*, **27**(1), 365–390.
- GALTON, F. (1886a). Family likeness in stature. *Proceedings of the Royal Society of London*, **40**, 42–63.
- GALTON, F. (1886b). Regression towards mediocrity in hereditary stature. *Journal of the Anthropological Institute*, **15**, 246–263.
- GAUSS, C. F. (1809). *Theoria Motus Corporum Coelestium in Sectionibus Conicis Solem Ambientium*. Friedrich Perthes et I. H. Besser, Hamburg.

- GLOBERSON, A. a ROWEIS, S. (2006). Nightmare at Test Time: Robust Learning by Feature Deletion. In *Proceedings of the 23rd International Conference on Machine Learning*, page 353–360. ACM Press, New York.
- GOLUB, G. H., HEATH, M. a WAHBA, G. (1979). Generalized Cross-Validation as a Method for Choosing a Good Ridge Parameter. *Technometrics*, **21**(2), 215–223.
- HASTIE, T., TIBSHIRANI, R. a FRIEDMAN, J. (2011). *The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*. Druhé vydání. Springer, New York. ISBN 978-0-387-84857-0.
- HAYKIN, S. (2009). *Neural Networks and Learning Machines*. Třetí vydání. Pearson Prentice Hall, New Jersey. ISBN 978-0-13-147139-9.
- HILBERT, D. (1904). Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen. In *Nachrichten von der Königlischen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, pages 49–91. Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen.
- HOERL, A. E. (1962). Application of Ridge Analysis to regression problems. *Chemical Engineering Progress*, **58**, 54–59.
- HOERL, A. E. a KENNARD, R. W. (1970a). Ridge Regression: Biased Estimation for Nonorthogonal Problems. *Technometrics*, **12**, 55–67.
- HOERL, A. E. a KENNARD, R. W. (1970b). Ridge Regression: Applications to Nonorthogonal Problems. *Technometrics*, **12**, 69–82.
- HOLEŇA, M. (2006). *Statistické aspekty dobývání znalostí z dat*. Karolinum, Praha. ISBN 80-246-1186-4.
- KALINA, J. a DUINTJER TEBBENS, J. (2014). Metody pro redukci dimenze v mnohorozměrné statistice a jejich výpočet. *Informační bulletin České statistické společnosti*, **25**(1), 13–29.
- KLOFT, M., BREFELD, U., SONNENBURG, S., LASKOV, P., MÜLLER, K.-R. a ZIEN, A. (2009). Efficient and Accurate Lp-Norm Multiple Kernel Learning. In *Advances in Neural Information Processing Systems 22*, pages 997–1005. Curran Associates, New York.
- KUDOVÁ, P. (2006). *Learning with Regularization Networks*. Dizertační práce, MFF UK, Praha.
- KUTNER, M. H., NACHTSHEIM, C. J., NETER, J. a LI, W. (2005). *Applied Linear Statistical Models*. Páté vydání. McGraw-Hill/Irwin, New York. ISBN 0-07-238688-6.
- LEGENDRE, A. M. (1805). *Nouvelles Méthodes Pour la Détermination des Orbites des Comètes*. F. Didot.

- LOY, C. C., LAI, W. K. a LIM, C. P. (2007). Keystroke Patterns Classification Using the ARTMAP-FD Neural Network. In *Proceedings of International Conference on Intelligent Information Hiding and Multimedia Signal Processing*, pages 61–64. IEEE Press, Kaohsiung.
- MOORE, G. E. (1965). Cramming More Components onto Integrated Circuits. *Electronics*, **38**(8), 114–117.
- OSBORNE, M., PRESNELL, B. a TURLACH, B. (2000a). A new approach to variable selection in least squares problems. *IMA Journal of Numerical Analysis*, **20**(3), 389–404.
- OSBORNE, M., PRESNELL, B. a TURLACH, B. (2000b). On the lasso and its dual. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **9**(2), 319–337.
- ÖZ, E. a KAYA, H. (2013). Support vector machines for quality control of DNA sequencing. *Journal of Inequalities and Applications*, **2013**(1), 1–9.
- R CORE TEAM (2016). *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna. URL <http://www.R-project.org>. ISBN 3-900051-07-0.
- ROUSSEEUW, P. J. (1984). Least Median of Squares Regression. *Journal of the American Statistical Association*, **79**(388), 871–880.
- SCHÖLKOPF, B., LUO, Z. a VOVK, V. (2013). *Empirical Inference: Festschrift in Honor of Vladimir N. Vapnik*. Springer, Berlin. ISBN 978-3-642-41136-6.
- SCHÖLKOPF, B. a SMOLA, A. J. (2002). *Learning with kernels: support vector machines, regularization, optimization and beyond*. The MIT Press, Cambridge. ISBN 0-262-194-75-9.
- SCULLEY, D. a WACHMAN, G. M. (2007). Relaxed Online SVMs for Spam Filtering. In *Proceedings of the 30th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, pages 415–422. ACM Press, New York.
- STEINWART, I. a CHRISTMANN, A. (2008). *Support Vector Machines*. Springer, New York. ISBN 978-0-387-77241-7.
- TIBSHIRANI, R. (1996). Regression Shrinkage and Selection via the Lasso. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **58**, 267–288.
- TRAFALIS, T. B. a ALWAZZI, S. (2003). Robust Optimization in Support Vector Machine Training with Bounded Errors. In *Proceedings of the International Joint Conference On Neural Networks*, pages 2039–2042. IEEE Press, Portland.
- TRAFALIS, T. B. a GILBERT, R. C. (2006). Robust classification and regression using support vector machines. *European Journal of Operational Research*, **173**(3), 893–909.
- VANDENBERGHE, L. a BOYD, S. (1996). Semidefinite programming. *SIAM Review*, **38**(1), 49–95.

- VAPNIK, V. N. (2000). *The nature of statistical learning theory*. Druhé vydání. Springer, New York. ISBN 0-387-98780-0.
- XANTHOPOULOS, P., PARDALOS, P. M. a TRAFALIS, T. B. (2013). *Robust Data Mining*. Springer, New York. ISBN 978-1-4419-9878-1.
- XU, H., CARAMANIS, C. a MANNOR, S. (2009). Robustness and Regularization of Support Vector Machines. *Journal of Machine Learning Research*, **10**, 1485–1510.
- XU, H., CARAMANIS, C. a MANNOR, S. (2010). Robust Regression and Lasso. *IEEE Transactions on Information Theory*, **56**(7), 3561–3574.
- ZOU, H. a HASTIE, T. (2005). Regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **67**(2), 301–320.
- ZVÁRA, K. (2008). *Regrese*. Matfyzpress, Praha. ISBN 978-80-7378-041-8.

Seznam obrázků

1.1	Regresní přímky v přítomnosti odlehlého pozorování	37
1.2	Regresní přímky po odstranění odlehlého pozorování	37
1.3	Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou nejmenších čtverců	38
1.4	Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných hřebenovou regresí	38
1.5	Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou Lasso	38
1.6	Regresní přímky zkonstruované na základě odhadů získaných metodou LTS	38

Seznam tabulek

1.1	Přehled funkcí programu R použitých k implementaci odhadů vektoru regresních parametrů	35
1.2	Odhady vektoru regresních parametrů pro data s odlehlým pozorováním a pro totožná data bez odlehlého pozorování	37
1.3	Odhady vektoru regresních parametrů pro data (ne)zohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných	40
1.4	Absolutní hodnoty rozdílu odhadů regresních parametrů pro data zohledňující a nezohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných	41
1.5	Odhady vektoru regresních parametrů pro data (ne)zohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných při nebezpečí multikolinearity	42
1.6	Absolutní hodnoty rozdílu odhadů regresních parametrů pro data zohledňující a nezohledňující chyby měření vysvětlujících proměnných při nebezpečí multikolinearity	43
2.1	Úspěšnost klasifikace stylu psaní pro jednotlivé metody	77
2.2	Úspěšnost rozpoznávání stylu psaní pro jednotlivé metody	78
2.3	Úspěšnost klasifikace osob pro jednotlivé metody	79