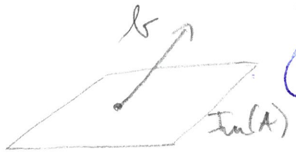
Téma 3: Řešení lin. aproximačních úloh ①

úloha: $Ax \approx b$, $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$

$\Rightarrow$ lin. model je dán obdélníkovou maticí

chyby: modelování, měření, ukládání dat v FPA způsobují, že $b \notin \mathrm{Im}(A)$ (nekompatibilní problém) $\Rightarrow$ neex. přesné řešení x $\Rightarrow$ „$\approx$" v nějakém smyslu



ozn.: $\mathrm{Im}(A) = \mathcal{R}(A)$ ... image, range A

$\mathrm{Ker}(A) = \mathcal{N}(A)$ ... jádro, nulový prostor A

$\mathrm{rank}(A)$ ... hodnost A

- chyby pouze v b, A - přesné:

idea: najdi nejmenší korekci b tak, aby opravená úloha byla kompatibilní

$f = ?$: $f \in \mathbb{C}^n$, $\|f\|$ - malá, $Ax \overset{\text{kompatibilní}}{=} b + f$ oprava pozorování

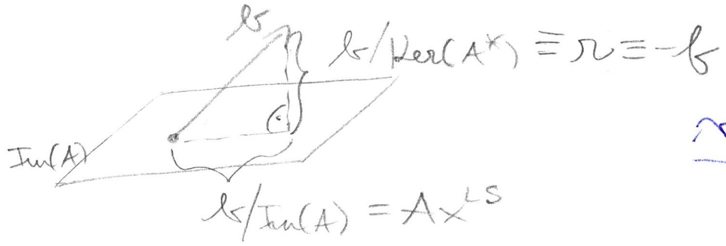
$\Rightarrow f = Ax - b =: -r$ ... residuum

$\Rightarrow$ ekvivalentně hledám $x \in \mathbb{C}^m$ tak, aby $\|b - Ax\|$ byla minimální

def: Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$. Problém nejmenších čtverců (LS) nazveme úlohu nalezení $x^{LS} \in \mathbb{C}^m$ tak, aby

$$\min_{f \in \mathbb{C}^n} \|f\| \text{ za podmínky } Ax = b + f.$$

$$\Longleftrightarrow x^{LS} = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{C}^m} \|b - Ax\|$$



víme: $\mathbb{C}^n = \mathrm{Im}(A) \oplus \mathrm{Ker}(A^*)$, $\mathrm{Im}(A) \perp \mathrm{Ker}(A^*)$

$$\Rightarrow b - Ax = \underbrace{b/_{\mathrm{Im}(A)} - Ax}_{\in \mathrm{Im}(A)} + \underbrace{b/_{\mathrm{Ker}(A^*)}}_{\in \mathrm{Ker}(A^*)}$$

$$\Rightarrow \|b - Ax\|^2 = \|b/_{\mathrm{Im}(A)} - Ax\|^2 + \|b/_{\mathrm{Ker}(A)^*}\|^2$$

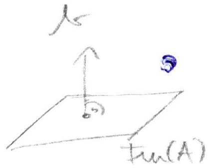
x^{LS}: $\|b - Ax^{LS}\|^2 = 0 + \|b/\mathrm{Ker}(A^*)\|^2$

existence a jednoznačnost f a x^{LS}:

- $f = -r = b/\mathrm{Ker}(A^*)$ je jednoznačně určená minimální korekce b
- x^{LS} existuje vždy a je řešením opravené soustavy $Ax^{LS} = b/\mathrm{Im}(A)$
- x^{LS} je určeno jedn. $\Leftrightarrow$ lze $b/_{\mathrm{Im}(A)}$ reprezentovat jednoznačně v $\mathrm{Im}(A)$ $\Leftrightarrow$ $\Leftrightarrow$ A má LN sloupce $\Leftrightarrow$ $\mathrm{rank}(A) = m$

$$A = [a_1 \ldots a_m],\ x^{LS} = \begin{bmatrix} x_1^{LS} \\ \vdots \\ x_m^{LS} \end{bmatrix} \Rightarrow \sum_{i=1}^{m} \underset{\uparrow}{x_i^{LS}} \cdot a_i = b/_{\mathrm{Im}(A)}$$

koeficienty lineární kombinace



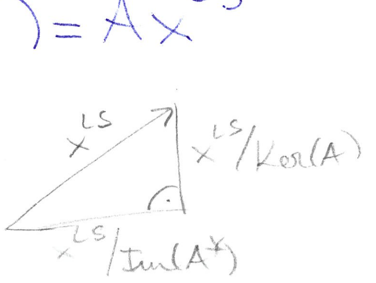
- $x^{LS} = 0 \Leftrightarrow b \perp \mathrm{Im}(A)$ ... pozorování b není korelováno s modelem A

případ $\mathrm{rank}(A) < m$:

nějaké LS řešení

pozorování: $z \in \mathrm{Ker}(A) \Rightarrow A(z + \overset{\downarrow}{x^{LS}}) = Ax^{LS}$

$\Rightarrow \exists\ \infty$ mnoho x^{LS}



$\|x^{LS}\|^2 = \|x^{LS}/_{Im(A^*)}\|^2 + \|x^{LS}/_{Ker(A)}\|^2 \geq$

$\geq \|x^{LS}/_{Im(A^*)}\|^2$ a $x^{LS}/_{Im(A^*)}$ je také LS řešení $Ax \approx b$

důsledek: $\exists!\, x^{LS}_{min}$ řešení LS problému s minimální normou a je dáno vztahy
$$Ax^{LS}_{min} = b/_{Im(A)}, \quad x^{LS}_{min} \in Im(A^*).$$

D(∃): z konstrukce

D(jed): sporem: nechť ex. x_1, x_2 splňující vztahy výše $\Rightarrow$ $Ax_1 - Ax_2 = b/_{Im(A)} - b/_{Im(A)} = 0$

$(x_1 - x_2) \in Im(A^*)$

$\Rightarrow (x_1 - x_2) \in Ker(A)$ a zároveň $(x_1 - x_2) \in Im(A^*)$

$\Rightarrow x_1 - x_2 = 0 \Rightarrow x_1 = x_2$ □

množina všech LS řešení: $x^{LS}_{min} + Ker(A)$

- chyby v A i b:

idea: najdi nejmenší korekci A, b tak, aby úloha byla kompatibilní

def: Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$. Problém úplných nejmenších čtverců (TLS) nazveme úlohu nalezení $x^{TLS} \in \mathbb{C}^m$ tak, aby
$$\min_{\substack{f \in \mathbb{C}^n \\ E \in \mathbb{C}^{n\times m}}} \|[f, E]\|_F \text{ za podm. } (A+E)x = b+f.$$

oprava modelu

kompatibilní

$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}|a_{ij}|^2}$ ... Frobeniova norma A

④

pozn: • TLS problém nemusí mít řešení

př: $A=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$

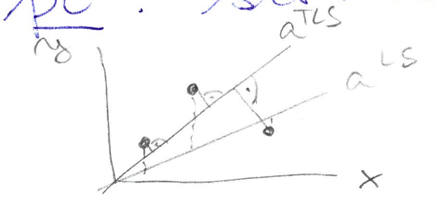
$E:=\begin{bmatrix}0&0\\0&\varepsilon\end{bmatrix} \Rightarrow \underset{\text{kompatibilní}}{(A+E)x=b}$, kde $x_\varepsilon=\begin{bmatrix}1\\\frac{1}{\varepsilon}\end{bmatrix}$, $\underset{\text{velikost opravy}}{\|E\|_F=\varepsilon}$

pokud $\varepsilon\to 0$, pak $\|E\|\to 0$, ale neex. minimum

navíc $\|x_\varepsilon\|\xrightarrow{\varepsilon\to 0}\infty$, tedy x_ε není smysluplná aproximace řešení

• analýza TLS úlohy - přes SVD a aproximací matice $[b|A]$ maticí menší hodnosti

př: srovnání LS a TLS



$[x_i, y_i], i=1,\dots,n$ ... měřené body

? přímka: $ax=y$, kde $a=?$

$\begin{bmatrix}x_1\\\vdots\\x_n\end{bmatrix}a\approx\begin{bmatrix}y_1\\\vdots\\y_n\end{bmatrix}$

LS (lineární regrese): opraví jen y_i

TLS (ortogonální -||-): opraví obě souřadnice

• další zobecnění:

- škálování, constraints, náhodná měření, ...

př: aproximace funkce $f(x)$

máme: přibližné hodnoty $b_i\approx f(x_i)$ v bodech, $i=1,\dots,n$

chceme: $f(x)\approx\sum_{j=1}^{m}c_j\cdot\varphi_j(x)$, kde φ_j jsou LN fce

$x:=x_i \Rightarrow f(x_i)\approx\sum_{j=1}^{m}c_j\cdot\varphi_j(x_i)$, $i=1,\dots,n$

LS: $$\boxed{\min_{c_1,\dots,c_m\in\mathbb{R}}\sum_{i=1}^{n}\left(b_i-\sum c_j\cdot\varphi_j(x_i)\right)^2}$$

ω_i - váhy dle přesnosti b_i

3.1 Metody řešení problému LS

případ rank(A) = m : $\exists!\, x^{LS}$, $A = {}_n\overset{m}{\square}$, $n \geq m$

pozorování: $\|b - Ax\| = \|U^*(b - Ax)\| \;\forall U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ unitární

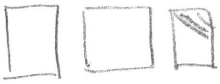
$\Rightarrow$ LS (i TLS) je unitárně invariantní,

$\Rightarrow$ tj. unit. tranformace dat nemění řešení

- řešení pomocí QR rozkladu:

$$A = QR = [\overbrace{Q_m}^{m}, \overbrace{\tilde{Q}_m}^{n-m}] \overbrace{\begin{bmatrix} R_m \\ 0 \end{bmatrix}}^{m} \begin{matrix} \}m \\ \}n-m \end{matrix} = Q_m R_m$$

ekonomický rozklad



platí: 1, $R_m = ◥ \in \mathbb{C}^{m\times m}$ je regulární

D: triv.

2, $Q_m = [q_1, .., q_m]$, $\operatorname{span}\{q_1, .., q_m\} = \operatorname{Im}(A)$

3, $\tilde{Q}_m = [q_{m+1}, .., q_n]$, $\operatorname{span}\{q_{m+1}, .., q_n\} = \operatorname{Ker}(A^*)$

$$Ax \approx b \;/\, Q^* \cdot \iff Rx \approx Q^* b$$

$$\begin{matrix} m\{ \\ n-m\{ \end{matrix} \begin{bmatrix} R_m \\ \hline 0 \end{bmatrix} x \approx \begin{bmatrix} Q_m^* b \\ \hline \tilde{Q}_m^* b \end{bmatrix} \begin{matrix} \}m \\ \}n-m \end{matrix}$$

koeficienty b v Im(A)

koef. b v Ker(A*)

$\Rightarrow \boxed{R_m x^{LS} = Q_m^* b}$ … zpětnou substitucí

$\|b - Ax^{LS}\| = \|\tilde{Q}_m^* b\|$ … velikost residua

implicitní postup výpočtu: Q nekonstruuji!

$$n\Big\{ [\overbrace{A}^{m} | \overbrace{b}^{1}] \quad \xrightarrow[\text{NEBO Giv. rotace}]{\text{Hous. reflexe}} \quad \underbrace{H_{m+1} \cdots H_2 H_1}_{\equiv Q^*} \cdot [A|b] = \left[\begin{array}{c|c} \overbrace{R_m}^{m} & \overbrace{Q_m^* b}^{1} \\ \hline 0 & \tilde{Q}_m^* b \end{array}\right] \begin{matrix} \}m \\ \}n-m \end{matrix}$$

postup výpočtu přes CGS (MGS): ⑥

→ GS počítá ekon. rozklad $A = Q_m R_m$

→ pustíme GS na matici $[A|b]$

$$[A|b] = [\overbrace{Q_m}^{m} | \overbrace{q}^{1}] \cdot \left[\begin{array}{c|c} R_m & b_1 \\ \hline \underbrace{0}_{m} & \underbrace{b_2}_{1} \end{array}\right] \begin{array}{l} \}m \\ \}1 \end{array}$$

OG koef. b proti $q_1, \dots, q_m$

... co je b_1, b_2?

CGS (krok $m+1$): $\tilde{q} := b - \overbrace{Q_m Q_m^* b}^{b/\mathrm{Im}(A)} \in b/\mathrm{Im}(A^*)$

$q = \tilde{q} / \|\tilde{q}\|$

$\Rightarrow b_1 \equiv Q_m^* b = \begin{bmatrix} q_1^* b \\ \vdots \\ q_m^* b \end{bmatrix}$, $b_2 \equiv \|\tilde{q}\| = \|b/\mathrm{Im}(A^*)\| =$
$= \|b - Ax^{LS}\|$

shrnutí: $[A|b] \xrightarrow[MGS]{CGS} [Q_m | q] \cdot \left[\begin{array}{c|c} R_m & Q_m^* b \\ \hline 0 & \|b - Ax^{LS}\| \end{array}\right]$

+ zpětná substituce $R_m x^{LS} \equiv Q_m^* b$

vlastnosti: $\mathcal{K}(A) \equiv \frac{\sigma_1}{\sigma_m} = \mathcal{K}(R_m)$ ⇒ je-li singulární čísla A

$\mathcal{K}(A) << \frac{1}{\varepsilon_{mach}}$, pak R_m je numericky regulární a výpočet x^{LS} přes QR je spolehlivý.

- normální rovnice:

$Ax \approx b \quad / A^* \cdot$

$\underbrace{A^*A}_{\text{HPD, regulární}} x = A^* b$ .. normální rovnice

platí: Je-li $\mathrm{rank}(A) = m$, pak x^{LS} je řešení normální rovnice $A^*Ax = A^*b$.

D: $A^*Ax = A^*b \overset{A=QR}{\iff} R^* \overbrace{Q^* Q}^{\neq 0} R x = R^* Q^* b \iff$
$R_m^* R_m x = R_m^* Q_m^* b \quad / R_m^{-*} \cdot \iff R_m x = Q_m^* b$ $\square$

řešení norm. rce:

- sestavení (A^*A) je pro $n \gg m$ a m-malé, neboť dostanu malou soustavu rovnic
- iterační metody - používám jen násobení $(A^*A)z = A^*.(A.z)$
  - ex. speciální it. metody pro HPD matic
- přímé metody - Choleského rozklad ≡ ≡ spec. varianta GE pro HPD matice

vlastnosti: norm. rce mají mnohem větší podmíněnost

$$\varkappa(A^*A) = \frac{\sigma_1(A^*A)}{\sigma_m(A^*A)} = \frac{\sigma_1^2(A)}{\sigma_m^2(A)} = \varkappa^2(A)$$

$\Rightarrow$ spolehlivé, je-li $\varkappa^2(A) \ll \frac{1}{\varepsilon_{mach}}$

- rozšířená matice:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} I & A \\ A^* & 0 \end{bmatrix}}_{\text{sedlobodová matice: regul., herm., indefinitní}} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} \overset{(*)}{=} \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}, \quad r = b - Ax$$

platí: Je-li $\operatorname{rank}(A) = m$, pak x^{LS} je řešení sedlobodové soustavy výše.

D: $(*) \iff \begin{matrix} r + Ax = b \\ A^*r = 0 \end{matrix} \iff \begin{matrix} r = b - Ax \\ A^*r = 0 \end{matrix} \iff$

$\iff A^*(b - Ax) = 0 \iff A^*Ax = A^*b$ □

případ $\operatorname{rank}(A) < m$: $\exists!\, x^{LS}_{min}$

$r := \operatorname{rank}(A)$

- **řešení pomocí SVD:**

$$\| A = U\Sigma V^* = U_r \Sigma_r V_r^*, \quad U, V \text{ - unitární}$$

ekonomický SVD

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ & & & 0 \end{bmatrix}, \ \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$$

víme: U_r má ve sloupcích bázi $Im(A)$

V_r — || — bázi $Im(A^*)$

odvození: ozn: x^{LS} – lib. LS řešení

$$Ax^{LS} = b|_{Im(A)}$$

$$U_r \Sigma_r V_r^* x^{LS} = \overbrace{U_r U_r^*}^{\text{OG projektor na } Im(A)} b \quad | U_r^* \cdot$$

$$\Sigma_r V_r^* x^{LS} = U_r^* b$$

$$\| V_r^* x^{LS} \overset{(x)}{=} \Sigma_r^{-1} \cdot U_r^* b \ \dots \text{koef. } x^{LS} \text{ v } Im(A^*)$$

x^{LS} je min. v normě $\Leftrightarrow x^{LS} \in Im(A^*)$

$\Leftrightarrow \exists y \in \mathbb{C}^r: \ x^{LS} = V_r \cdot y$ … dosadím do (x)

určení y: $\overbrace{V_r^* V_r}^{=I} y = \Sigma_r^{-1} U_r^* b \Rightarrow$

$\Rightarrow \| x^{LS}_{min} = V_r \cdot \Sigma_r^{-1} U_r^* b$ … je LS řešení s min. normou

def: Matici $A^+ = V_r \Sigma_r^{-1} U_r^*$ nazveme || pseudoinverze matice A (Moore-Penroseova)

spec: A - regul. $\Rightarrow A^+ = A^{-1} = V\Sigma^{-1}U^*$

vlastnosti: výpočet přes SVD je zpětně stabilní (OG transf.), ale drahý $O(n^3)$

- **řešení pomocí QR rozkladu** : (čtení navíc)

(obecný postup)

$\exists P \in \mathbb{C}^{n\times n}$ permutační : $AP = {}_{m}\{\big[\,\overbrace{\hat{A}}^{r}\,\big|\,\overbrace{\hat{\hat{A}}}^{n-r}\,\big]$,

rank$(\hat{A}) = r$ .. plný

$\Rightarrow AP = {}_{m}\{\big[\,\overbrace{Q_1}^{r}\,\big|\,\overbrace{Q_2}^{n-r}\,\big] \cdot \begin{bmatrix} \overbrace{R_1}^{r} & \overbrace{R_2}^{n-r} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \}r \\ \}m-r \end{matrix} = Q_1 \cdot [R_1 \,|\, R_2]$

ekonom. QR

... počítá se QR rozklad se sloupcovou pivotací (např. přes MGS s pivotací)

potom : $Ax \approx b \iff (AP)\underbrace{(P^T x)}_{=:\hat{x}} \approx b$

$$[AP\,|\,b] \xrightarrow{MGS} [Q_1\,|\,Q_2]^*[AP\,|\,b] = \left[\begin{array}{cc||c} R_1 & R_2 & Q_1^* b \\ \hline 0 & 0 & Q_2^* b \end{array}\right] \begin{matrix} \}r \\ \}m-r \end{matrix}$$

$\iff \begin{bmatrix} \overbrace{R_1}^{r} & \overbrace{R_2}^{n-r} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{bmatrix} \begin{matrix} \}r \\ \}n-r \end{matrix} = \begin{bmatrix} Q_1^* b \\ Q_2^* b \end{bmatrix} \iff \hat{x}$ [illegible] a

splňuje $R_1\hat{x}_1 + R_2\hat{x}_2 = Q_1^* b \iff \hat{x} = \begin{bmatrix} R_1^{-1}(Q_1^* b - R_2 w) \\ w \end{bmatrix}$

lze volit ⇒ vol. 0

shrnutí : $\boxed{x^{LS}_{min} = P \cdot \begin{bmatrix} R_1^{-1} Q_1^* b \\ 0 \end{bmatrix}}$ je LS řeš. s nejmenší normou

$\boxed{\|r\| = \|b - Ax^{LS}\| = \|Q_2^* b\|}$ .. residuum

vlastnosti: - jako QR pro rank$(A) = n$

- pivotujeme za běhu (jako u GE s pivotací)