Linearni problem najmanjših kvadratov

Uvod

Primer

Hitrost v je linearno odvisna od časa t, torej $v(t) = \alpha\, t + \beta$. Hitrost smo izmerili ob več časih t_j, $j = 1, 2, \ldots, N$. Torej imamo na voljo približke $v_j \approx v(t_j)$, $j = 1, 2, \ldots, N$. Kako na podlagi meritev "najbolje" določiti koeficienta α in β?

Normalni sistem

- V splošnem je problem naslednji: dana je matrika $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m > n$ in vektor $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$, iščemo vektor $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, da bo napaka $\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$ minimalna (lahko uporabimo tudi druge norme, a je problem tedaj ponavadi težji). Takemu vektorju $\boldsymbol{x}$ rečemo rešitev po metodi najmanjših kvadratov.
- Če A ni polnega ranga, rešitev ni enolična.
- Privzamemo, da je A polnega ranga, torej $\operatorname{rang}(A) = n$.
- Normalni sistem enačb je

$$A^\top A\boldsymbol{x} = A^\top \boldsymbol{b}.$$

Lema

Rešitev normalnega sistema je rešitev po metodi najmanjših kvadratov.

- Normalni sistem rešujemo z razcepom Choleskega.
- Metoda je preprosta, vendar ni stabilna (težave, ko so stolpci matrike A skoraj linearno odvisni).

QR razcep

- Denimo, da poznamo razcep $A = QR$, $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ z ortonormiranimi stolpci in $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zgornja trikotna (razcepu pravimo QR razcep).
- Potem je
$$\boldsymbol{x} = (A^\top A)^{-1} A^\top \boldsymbol{b} = \cdots = R^{-1} Q^\top \boldsymbol{b}.$$
- Rešiti moramo torej samo zgornji trikotni sistem
$$R\boldsymbol{x} = Q^\top \boldsymbol{b}.$$
- Reševanje preko QR razcepa je stabilnejše od reševanja normalnega sistema.

Gram-Schmidtova ortogonalizacija

Izrek

Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\operatorname{rang}(A) = n$. Potem obstaja enolični QR razcep, kjer je $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrika z ortonormiranimi stolpci, $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pa zgornja trikotna matrika s pozitivnimi diagonalnimi elementi.

- Poznamo več postopkov za QR razcep.
- Klasični Gram-Schmidtov postopek (CGS) (ortogonaliziramo vseskozi glede na originalno matriko).
- Modificirani Gram-Schmidtov postopek (MGS) (ortogonaliziramo glede na že izračunano matriko).
- Izkaže se, da je MGS stabilnejši od GS.

```
function [Q,R]=gram_schmidt(A,tip)
%GRAM_SCHMIDT je Gram-Schmidtova ortogonalizacija
%[Q,R]=GRAM_SCHMIDT(A,tip)
%Q je ortogonalna, R zgornja trikotna
%A je matrika mxn, m>=n, rang(A)=n
%tip='gs' za klasicni Gram-Schmidt
%tip='mgs' za modificirani Gram-Schmidt

[m,n]=size(A);
Q=zeros(m,n);
R=zeros(n);
```

```
switch tip
  case 'gs'
    for k=1:n
      Q(:,k)=A(:,k);
      for i=1:k-1
        R(i,k)=Q(:,i)'*A(:,k);
        Q(:,k)=Q(:,k)-R(i,k)*Q(:,i);
      end
      R(k,k)=norm(Q(:,k),2);
      Q(:,k)=Q(:,k)/R(k,k);
    end
```

```
 case 'mgs'
   for k=1:n
     Q(:,k)=A(:,k);
     for i=1:k-1
       R(i,k)=Q(:,i)'*Q(:,k);
       Q(:,k)=Q(:,k)-R(i,k)*Q(:,i);
     end
     R(k,k)=norm(Q(:,k),2);
     Q(:,k)=Q(:,k)/R(k,k);
   end
end
```

- Pri reševanju predoločenega sistema z GMS moramo paziti, da ne izračunamo najprej QR razcepa in potem rešujemo trikotni sistem.
- Namesto tega razcepimo razširjeno matriko $[A\ \boldsymbol{b}]$, torej

$$[A\ \boldsymbol{b}] = [Q\ \boldsymbol{q}_{n+1}] \begin{bmatrix} R & \boldsymbol{z} \\ & \rho \end{bmatrix}$$

in rešujemo $R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$.

Givensove rotacije

- Rotacija vektorja $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$ za kot φ v negativni smeri je dana z matriko
$$R^\top = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix},$$
kjer je $c = \cos\varphi$ in $s = \sin\varphi$.
- To posplošimo na rotacijo v ravnini (i, k) prostora $\mathbb{R}^n$
$$R_{ik}([i,k],[i,k])^\top = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}.$$

- Če je $\boldsymbol{y} = R_{ik}^{\top}\boldsymbol{x}$, je

$$
\begin{aligned}
y_j &= x_j, \quad j \neq i,k \\
y_i &= c\,x_i + s\,x_k \\
y_k &= -s\,x_i + c\,x_k
\end{aligned}
$$

  in c ter s lahko izberemo tako, da bo $y_k = 0$:

$$
\begin{aligned}
r &= \sqrt{x_i^2 + x_k^2} \\
c &= x_i/r \\
s &= x_k/r.
\end{aligned}
$$

- Matriko R_{ik} imenujemo Givensova rotacija.
- Z ustreznim vrstnim redom rotacij lahko izračunamo QR razcep matrike A.

- Za QR razcep z Givensovimi rotacijami potrebujemo približno

$$3\,m\,n^2 - n^3$$

operacij.
- Če potrebujemo še Q, je še dodatnih

$$6\,m\,n^2 - 3\,m\,n^2$$

operacij.

```
function [Q,R]=qr_givens(A)
%QR_GIVENS izvede QR razcep z Givensovimi rotacijami
%[Q,R]=QR_GIVENS(A)
%A je mxn matrika
%Q je mxm ortogonalna
%R je 'zgornje' trikotna

[m,n]=size(A);
korakov=min([n,m-1]);
Q=eye(m);
```

```
for j=1:korakov
    for i=j+1:m
        if A(i,j)~=0
            r=sqrt(A(j,j)^2+A(i,j)^2);
            c=A(j,j)/r;
            s=A(i,j)/r;
            rot=[c s;-s c];
            A([j,i],j:end)=rot*A([j,i],j:end);
            Q([j,i],:)=rot*Q([j,i],:);
        end
    end
end
R=triu(A);
Q=Q';
```

Householderjeva zrcaljenja

- Za $\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{w} \neq \mathbf{0}$ definiramo matriko

$$P = I - \frac{2}{\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{w}} \boldsymbol{w} \boldsymbol{w}^\top.$$

- Matrika P je smetrična, ortogonalna in velja $P^2 = I$.
- P je zrcaljenje preko hiperravnine, ki je pravokotna na $\boldsymbol{w}$.
- Osnovna naloga: poiskati tak P, da v danem vektorju $\boldsymbol{x}$ uniči vse komponente, razen prve, torej

$$P\boldsymbol{x} = \pm k\, \boldsymbol{e}_1.$$

- Velati mora $|k| = \|\boldsymbol{x}\|_2$ in $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{x} \pm k\,\boldsymbol{e}_1$.
- Zaradi numeričnih razlogov je najbolje izbrati

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} x_1 + \operatorname{sign}(x_1)\|\boldsymbol{x}\|_2 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix},$$

pri čemer je

$$\operatorname{sign}(x) = \begin{cases} 1; & x \geq 0, \\ -1; & x < 0. \end{cases}$$

- Podobno kot pri Givensovih rotacijah sedaj uporabimo Householderjeva zrcaljenja za QR razcep.
- Postopoma "uničujemo" elemente pod diagonalo v posameznem stolpcu.
- Pri tem pazimo, da ne "pokvarimo" prej pridobljenih ničel.
- Na posameznem koraku torej množimo z matriko

$$\widetilde{P}_i = \begin{bmatrix} I_i & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & P_i \end{bmatrix},$$

  kjer je I_i identiteta dimenzije i in P_i Householderjevo zrcaljenje, ki v i-tem stolpcu "uniči" elemente na mestih $i+1, i+2, \ldots, n$.
- Zaporedje takih množenj producira matriko R, torej

$$\widetilde{P}_n \widetilde{P}_{n-1} \cdots \widetilde{P}_1 \, A = R.$$

- Ker so $\widetilde{P}_i$ simetrične ortogonalne, je

$$Q = \widetilde{P}_1 \cdots \widetilde{P}_n.$$

- Ponavadi namesto računanja Q shranimo vektorje $\boldsymbol{w}_i$.
- Števil operacij za reševanje predoločenega sistema s Householderjevimi zrcaljenji je približno

$$2\,m\,n^2 - \frac{2}{3}n^3.$$

- Seveda lahko QR uporabimo tudi za reševanje nesingularnega kvadratnega sistema $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

Primerjava metod za reševanje predoločenega in kvadratnega sistema $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

- Reševanje predoločenega sistema $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $m \gg n$:
  - normalni: $m\,n^2$,
  - MGS: $2\,m\,n^2$,
  - Givens: $3\,m\,n^2 - n^3$
  - Householder: $2\,m\,n^2 - \frac{2}{3}n^3$.
- Reševanje kvadratnega sistema $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $m = n$:
  - LU razcep: $\frac{2}{3}n^3$,
  - Givens: $2n^3$
  - Householder: $\frac{4}{3}n^3$.
- Sta pa Givensova in Householderjeva metoda stabilnejši od LU razcepa z delnim ali kompletnim pivotiranjem.

Singuarni razcep

Izrek

Za vsako matriko $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, obstaja singularni razcep

$$A = U\,\Sigma\,V^\top,$$

kjer sta $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ in $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonalni matriki in $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ "kvazidiagonalna" matrika z elementi $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$. Elementom σ_j rečemo tudi singularne vrednosti, stolpci matrike U so levi singularni vektorji, stolpci matrike V pa desni singularni vektorji.

Lema

Če je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *in* $\mathrm{rang}(A) = n$, *je minimum* $\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$ *dosežen pri vektorju*

$$\boldsymbol{x} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\boldsymbol{u}_j^\top \boldsymbol{b}}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j.$$

Izrek

Naj bo $A = U\Sigma V^\top$ *singularni razcep matrike* $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, *in* $\operatorname{rang}(A) > k$. *Naj bo*

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \, \boldsymbol{u}_i \, \boldsymbol{v}_i^\top .$$

Potem je

$$\min_{\operatorname{rang}(B)=k} \|B - A\|_2 = \|A_k - A\|_2 = \sigma_{k+1}$$

in

$$\min_{\operatorname{rang}(B)=k} \|B - A\|_F = \|A_k - A\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2}.$$

- Prejšnji izrek lahko uporabimo pri stiskanju slik. Sliko, ki je predstavljena z matriko, aproksimiramo z matriko nizkega ranga.
- Metoda je relativno preprosta, vendar se dandanes uporabljajo boljše metode (kosinusna transformacija (JPEG) ali valčki (JPEG2000)).
- Singularni razcep je uporaben še na mnogih drugih področjih in je eden najpomembnejših razcepov v linearni algebri.
- Poznamo dobre algoritme za izračun singularnega razcepa, ki pa so seveda relativno zapleteni.