Optimalizace

5. Metoda nejmenších čtverců

Tomáš Kroupa Tomáš Werner

2021 LS

Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

Řešitelnost lineárních soustav

Při řešení soustavy

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

pro $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ mohou nastat tyto možnosti.

Soustava nemá řešení

Platí $\mathbf{b} \notin \operatorname{rng} \mathbf{A}$. Hledáme alespoň přibližné řešení.

Soustava má jediné řešení

Platí $\mathbf{b} \in \operatorname{rng} \mathbf{A}$ a matice $\mathbf{A}$ má lineárně nezávislé sloupce.

Soustava má nekonečně mnoho řešení

Platí $\mathbf{b} \in \operatorname{rng} \mathbf{A}$ a matice $\mathbf{A}$ má lineárně závislé sloupce.

Metoda nejmenších čtverců

Definice

Řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ metodou nejmenších čtverců je řešení úlohy

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$$

Příklad (přeurčená soustava)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

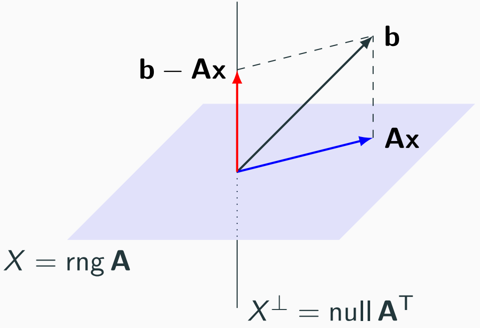
$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2} (x_1 + 2x_2 - 6)^2 + (-x_1 + x_1 - 3)^2 + (x_1 + x_2 - 4)^2$$

Soustava normálních rovnic

Tvrzení

Množina řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ metodou nejmenších čtverců je neprázdná a je rovna množině řešení soustavy normálních rovnic

$$\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}.$$



O matici soustavy normálních rovnic $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$

Gramova matice je čtvercová matice $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}$.

Tvrzení

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ platí:

$$\operatorname{null}(\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}) = \operatorname{null}\mathbf{A}$$
$$\operatorname{rng}(\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}) = \operatorname{rng}\mathbf{A}^\mathsf{T}$$

Pokud má $\mathbf{A}$ LN sloupce, je matice $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}$ regulární.

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^n \arrow[r, "\mathbf{A}"] \arrow[rr, bend right, "\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}"'] & \mathbb{R}^m \arrow[r, "\mathbf{A}^\mathsf{T}"] & \mathbb{R}^n \end{tikzcd}$$

Řešení soustavy normálních rovnic pro matici s LN sloupci

Věta

Nechť má matice $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé sloupce. Pak je $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}$ regulární matice a jediné řešení soustavy $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$ je

$$\mathbf{x} = \underbrace{(\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\mathsf{T}}_{\mathbf{A}^+}\mathbf{b}.$$

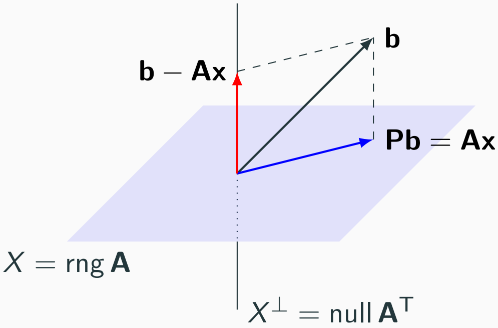
- Matice $\mathbf{A}^+$ je pseudoinverze matice $\mathbf{A}$ s LN sloupci
- Má-li matice $\mathbf{A}$ *lineárně závislé* sloupce, pak má soustava normálních rovnic nekonečně mnoho řešení

Ortogonální projekce na podprostor zadaný obecnou bází

Tvrzení

Nechť má matice $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé sloupce. Ortogonální projektor na podprostor $X = \operatorname{rng} \mathbf{A}$ je matice

$$\mathbf{A}(\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\mathsf{T}.$$



Řešení soustavy normálních rovnic pomocí QR rozkladu

- Použijeme redukovaný QR rozklad matice $\mathbf{A}$ s LN sloupci,

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR},$$

  $\mathbf{Q}$ má ortonormální sloupce, $\mathbf{R}$ je regulární horní trojúhelníková
- Chceme se vyhnout *explicitnímu* výpočtu matice $\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}$:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} &= \mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b} &(1)\\
(\mathbf{QR})^\mathsf{T}\mathbf{QR}\mathbf{x} &= (\mathbf{QR})^\mathsf{T}\mathbf{b} &(2)\\
\mathbf{R}^\mathsf{T}\mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{QR}\mathbf{x} &= \mathbf{R}^\mathsf{T}\mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} &(3)\\
\mathbf{R}^\mathsf{T}\mathbf{R}\mathbf{x} &= \mathbf{R}^\mathsf{T}\mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} &(4)\\
\mathbf{R}\mathbf{x} &= \mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} &(5)
\end{aligned}$$

Řešení s nejmenší normou

Definice

Nechť má soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ alespoň jedno řešení. Jejím řešením s nejmenší normou je řešení úlohy

$$\min \|\mathbf{x}\|^2 \qquad \text{za podmínky } \mathbf{Ax} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Příklad (nedourčená soustava)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

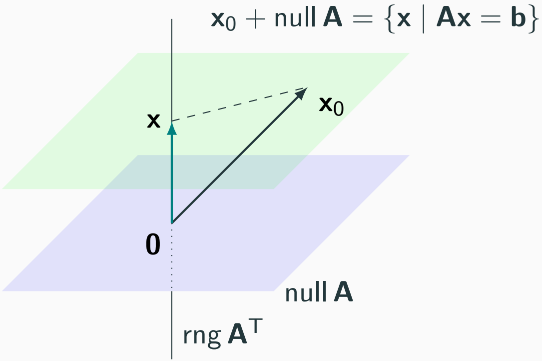
$$\min\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \qquad \text{za podmínky } \mathbf{Ax} = \mathbf{b},\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

Řešení s nejmenší normou nedourčené soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

Tvrzení

Existuje právě jedno řešení s nejmenší normou. Má-li matice $\mathbf{A}$ LN řádky, je to řešení tvaru $\mathbf{x} = \mathbf{A}^\top(\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$.

Matice $\mathbf{A}^+$ je pseudoinverze matice $\mathbf{A}$ s LN řádky.



Řešení s nejmenší normou soustavy $\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\top\mathbf{b}$

Sjednocující formulace

$$\min \|\mathbf{x}\|^2 \qquad \text{za podmínky } \mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\top\mathbf{b},\ \ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Úloha má jediné optimální řešení $\mathbf{x}^*$.

1. Pokud soustava $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *nemá řešení*, jejím řešením ve smyslu nejmenších čtverců s nejmenší normou je $\mathbf{x}^*$
2. Má-li soustava $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *jediné řešení*, pak je to $\mathbf{x}^*$
3. Má-li soustava $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *nekonečně mnoho řešení*, pak jejím řešením s nejmenší normou je $\mathbf{x}^*$

Dokonce i pro matici $\mathbf{A}$ bez plné sloupcové/řádkové hodnosti lze definovat pseudoinverzi $\mathbf{A}^+$ a platí $\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$.

Jak na to v MATLABu?

Soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ umožňuje MATLAB vyřešit příkazem

$$\texttt{A}\backslash\texttt{b}$$

v následujícím smyslu:

- Nemá-li soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ řešení, pak příkaz $\texttt{A}\backslash\texttt{b}$ spočte její řešení $\mathbf{A}^{+}\mathbf{b}$ ve smyslu nejmenších čtverců s nejmenší normou
- Má-li soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ řešení, příkaz $\texttt{A}\backslash\texttt{b}$ najde její řešení, které má nejvýše m nulových souřadnic, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$

Vícekriteriální nejmenší čtverce

Pro $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n}$, $\mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^{m_i}$ a $\mu_i \geq 0$ minimalizujeme vážený součet

$$f(\mathbf{x}) = \mu_1 \|\mathbf{A}_1\mathbf{x} - \mathbf{b}_1\|^2 + \cdots + \mu_k \|\mathbf{A}_k\mathbf{x} - \mathbf{b}_k\|^2, \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n .$$

Převod na úlohu nejmenších čtverců

Platí $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}'\mathbf{x} - \mathbf{b}'\|^2$, kde $\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_1}\mathbf{A}_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\mu_k}\mathbf{A}_k \end{bmatrix}$, $\mathbf{b}' = \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_1}\mathbf{b}_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\mu_k}\mathbf{b}_k \end{bmatrix}$.

Má-li $\mathbf{A}'$ LN sloupce, existuje jediné optimální řešení

$$\mathbf{x} = (\mu_1 \mathbf{A}_1^\mathsf{T}\mathbf{A}_1 + \cdots + \mu_k \mathbf{A}_k^\mathsf{T}\mathbf{A}_k)^{-1}(\mu_1 \mathbf{A}_1^\mathsf{T}\mathbf{b}_1 + \cdots + \mu_k \mathbf{A}_k^\mathsf{T}\mathbf{b}_k).$$

Tichonovova regularizace úlohy nejmenších čtverců

Pro zvolenou váhu $\mu > 0$ minimalizujeme vážený součet

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 + \mu\|\mathbf{x}\|^2, \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n .$$

Převod na úlohu nejmenších čtverců

Platí $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}'\mathbf{x} - \mathbf{b}'\|^2$, kde $\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\mu}\mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathbf{b}' = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}.$

Matice $\mathbf{A}'$ má *vždy* LN sloupce a proto má optimální řešení tvar

$$\mathbf{x} = (\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A} + \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$$

Jiné odvození řešení ve smyslu nejmenších čtverců

- Účelová funkce v metodě nejmenších čtverců je

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2, \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

- Funkce f je kvadratická a tudíž spojitě diferencovatelná
- Minimum tak lze nalézt pomocí podmínek optimality známých z matematické analýzy

Reference

T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 5). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2020.