Přednáška 22 – lineární LS

<u>opáčko</u>: • problém lineárních nejmenších čtverců: $A\vec{\theta} = \vec{b}$

$$\begin{bmatrix} \ \\ \ \\ \ \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ \\ \ \\ \ \end{bmatrix}$$

• příklad – interpolace:

→ máme výrazně více měření (x_i, f_i) než # koeficientů polynomu. Např. chci co nejlépe proložit danými body přímku nebo parabolu. Pak

$$\vec{\theta}_{\text{přímka}} = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \end{bmatrix}, \quad A_{\text{přímka}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}, \quad \vec{b}_{\text{přímka}} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix}$$

$$\vec{\theta}_{\text{parabola}} = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix}, \quad A_{\text{parabola}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 \end{bmatrix}, \quad \vec{b}_{\text{parabola}} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{bmatrix}$$

→ víme, že pokud zvýšíme stupeň aprox. polynomu, pak sloupce začnou být lineárně závislé

V praxi máme velmi často mnoho sloupců A „skoro lineárně závislých"

→ může odpovídat „příliš mnoha parametrům pro vysvětlení dat" nebo „nevhodně zvolené parametrizaci/modelu".

$\Rightarrow$ často $\kappa(A) \gg 1$ $\Rightarrow$ náš problém je citlivý na perturbace dat

Stejné jako u $[A\vec{x} = b$ & $A \in \mathbb{R}^{n\times n}]$ → nemůžeme očekávat lepší přesnost než $\boxed{C \cdot \kappa(A) \cdot \varepsilon_{mach}}$ bez ohledu na volbu algoritmu!

Ale chceme algoritmus, který sám tuto chybu nezvětší.

Tedy klasicky volíme řešiče založené na unitárních transformacích —> my známe pouze „QR-faktorizace"
(ale existují i iterační alternativy)

Pozorování: naposledy jsme si odvodily „problém normálových rovnic"

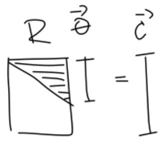
tj. $\left[A^T A \vec{\theta} \overset{(*)}{=} A^T \vec{b}\right]$, jako přirozený $\left(\equiv \left[\nabla_{\vec{\theta}}\left(\|b - A\vec{\theta}\|^2\right) = 0\right]\right)$.

Protože $\|A^T A\| = \|A\|^2$ (to samé pro inverz) $\Rightarrow \varkappa(A^T A) = \varkappa(A)^2 \Rightarrow$ nejenom, že je výpočetně náročné (*) sestavit $\rightsquigarrow$ navíc nám výrazně zhorší přesnost řešení.

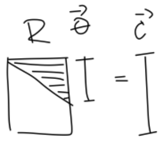
Výpočet tedy provádíme řešením $A\vec{\theta} = \vec{b}$ pomocí QR-faktorizace

- předpočítané (pokud budeme řešit mnoho takových problémů $A\vec{\theta}_i = \vec{b}_i$)
- aplikované (pokud máme jen tento jeden problém)

QR-faktorizace předpočítaná

1. Spočítáme QR-faktorizaci $A = QR$ & uložíme si faktory Q, R
2. Spočítáme $\vec{c} = Q^T \vec{b}$
3. „Vyřešíme" $R\vec{\theta} = \vec{c}$ ⟶ 

QR-faktorizace aplikovaná

1. Počítáme QR-faktorizaci A & všechny transformační matice aplikované na sloupce A aplikujeme i na $\vec{b}$.
   (To odpovídá výpočtu QR-faktorizace prvních $\underline{n}$ sloupců matice $\underset{n \quad 1}{[A \mid \vec{b}]}^{m}$)
   $\rightsquigarrow$ dostaneme R a $\vec{c}$
2. „Vyřešíme" $R\vec{\theta} = \vec{c}$ ⟶ 

Proč uvozovky „vyřešíme": Pokud $\vec{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix}$ pak $\left[\exists \text{ řešení} \iff \begin{matrix} c_{n+1} = \dots \\ \dots = c_m = 0 \end{matrix}\right]$

$\rightsquigarrow$ ne vždy $\exists$ řešení! (... ve smyslu $A\vec{\theta} = \vec{b}$ nebo-li $R\vec{\theta} = \vec{c}$)

Existence & jednoznačnost

Lingebra 1: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $m > n$, $\vec{b} \in \mathbb{R}^m$.

- $\mathrm{Im}(A) = \mathrm{span}\{\vec{A}_{:,1}, \dots, \vec{A}_{:,n}\}$ • $\mathrm{Ker}(A^T) = \{\vec{v} \mid A^T \vec{v} = \vec{0}\}$
- $\mathbb{R}^m = \mathrm{Im}(A) \oplus \mathrm{Ker}(A^T)$ & $\mathrm{Im}(A) \perp \mathrm{Ker}(A^T)$

⇝ jinými slovy $\forall \vec{b}$ $\exists!$ $\vec{v} \in \mathrm{Im}(A)$, $\vec{w} \in \mathrm{Ker}(A^T)$: $\vec{b} = \vec{v} + \vec{w}$ (& nutně tedy $\|\vec{b}\|^2 = \|\vec{v}\|^2 + \|\vec{w}\|^2$)

Pozorování 1: $\exists \vec{\theta} : A\vec{\theta} = \vec{b} \iff \vec{b} \in \mathrm{Im}(A)$

Pokud $\vec{b} \notin \mathrm{Im}(A) \Rightarrow \exists!\, \vec{v}, \vec{w}$: $\vec{b} = \vec{v} + \vec{w}$ & $\vec{v} \in \mathrm{Im}(A)$

$\Rightarrow$ LS problém $\min_{\vec{\theta}} \|\vec{b} - A\vec{\theta}\|^2$ se dá napsat jako:

$$\min_{\vec{\theta}} \|\underbrace{\vec{w}}_{\in \mathrm{Ker}(A^T)} + \underbrace{(\vec{v} - A\vec{\theta})}_{\in \mathrm{Im}(A)}\|^2 = \min_{\vec{\theta}} \|w\|^2 + \|\vec{v} - A\vec{\theta}\|^2 = \|w\|^2 + \min_{\vec{\theta}} \|\vec{v} - A\vec{\theta}\|^2$$

$\Rightarrow$ pokud $\nexists \vec{\theta} : A\vec{\theta} = \vec{b}$ pak řešení LS problému odpovídá řešení rovnice $A\vec{\theta} = \vec{v}$ — $\vec{v}$ = projekce $\vec{b}$ na $\mathrm{Im}(A)$

⇝ to je přesně to, co jsme psali výše → Q je báze $\mathrm{Im}(A)$ & $\vec{c} = Q^T \vec{b} = \vec{v}$

Pozorování 2: $\vec{\xi} \in \mathrm{Ker}(A)$: $\left[A\vec{\theta} = \vec{b} \iff A(\vec{\theta} + \vec{\xi}) = \vec{b} \right]$

řešení je jednoznačné $\iff \{\vec{A}_{:,1}, \dots, \vec{A}_{:,n}\}$ jsou LN $\iff \mathrm{rank}(A) = n$

Pokud $\mathrm{rank}(A) < n$ & $\vec{b} \in \mathrm{Im}(A)$, pak $\exists$ ∞-mnoho $\vec{\theta}$: $A\vec{\theta} = \vec{b}$.

Ovšem analogicky postupu výše: $\vec{\theta} \in \mathbb{R}^n \Rightarrow \exists!$ $\vec{p} \in \mathrm{Ker}(A)$, $\vec{q} \in \mathrm{Im}(A^T)$: $\vec{\theta} = \vec{p} + \vec{q}$ & $\|\vec{\theta}\|^2 = \|\vec{p}\|^2 + \|\vec{q}\|^2$

$\Rightarrow \exists!\, \vec{\theta}$ s minimální normou (tj. $\vec{\theta} \in \mathrm{Im}(A^T) \perp \mathrm{Ker}(A)$)

které bychom chtěli spočítat

Pokud $\operatorname{rank}(A) =: r < n \implies \exists$ permutační matice $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$

t.ž. $A\cdot P = \left[A_r \,\middle|\, \tilde{A} \right]$ kde $A_r \in \mathbb{R}^{m\times r}$ má lineárně nezávislé sloupce & každý sloupec $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{m\times(n-r)}$ lze zapsat jako lineární kombinaci sloupců A_r.

Pak QR-faktorizace $A\cdot P$ nám dá

$$A\cdot P = \Big[\underbrace{A_r}_{r} \,\Big|\, \underbrace{\tilde{A}}_{n-r} \Big] = \Big[\underbrace{Q_r}_{r} \Big] \cdot \begin{bmatrix} R_r & \tilde{R} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Pak $A\vec{\theta} = \vec{b}$

$$\Updownarrow$$

$$APP^T\vec{\theta} = \vec{b} \iff Q_r \cdot \left[R_r \,\middle|\, \tilde{R} \right] \vec{\vartheta} = \vec{b} \quad \& \quad \vec{\theta} = P\vec{\vartheta}$$

$$\iff \left[R_r \,\middle|\, \tilde{R} \right] \begin{bmatrix} \vec{\vartheta} \\ \vec{\tilde{\vartheta}} \end{bmatrix} = Q_r^T \vec{b}$$

→ Lze ukázat:

- tu permutační matici sloupců P lze počítat za pochodu → zcela analogické pivotaci u G.E./LU-faktorizace
- řešení $\vec{\theta} = P\vec{\vartheta}_r$ je to hledané (s minimální $\|\cdot\|$)