Minsta-kvadrat problem, Ax≈b

Modellanpassning
QR

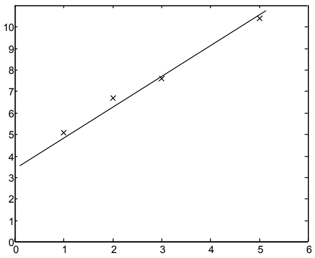
Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Överbestämda system

Exempel :

- För ett fysikaliskt förlopp har följande mätningar gjorts

x_i	y_i
1	5.1
2	6.7
3	7.6
5	10.4



- Rimligt att de ligger på en rät linje

2

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Exempel...

- Utan problemet med mätfel kunde linjen beräknas $f(x) = c_1 + c_2x$
- Men nu får vi

$$\begin{aligned} c_1 + 1c_2 &\approx 5.1 \\ c_1 + 2c_2 &\approx 6.7 \\ c_1 + 3c_2 &\approx 7.6 \\ c_1 + 5c_2 &\approx 10.4 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.1000 \\ 6.7000 \\ 7.6000 \\ 10.4000 \end{bmatrix}$$

- Problem på formen
  $Ac \approx y$

3

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

…exempel…

A har fler rader än kolumner

- A's kolumner spänner inte upp hela $\mathbb{R}^4$ där högerledet finns
- c behöver ej vara unikt

Vi vill hitta det x som "bäst" bestämmer linjen jämfört med mätdata

- minimera $Ac - y$

4

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Bäst bestämmer…

- Vi söker c så att avståndet mellan Ac och y är så litet som möjligt
- detta avstånd kallas residualen $r = Ac - y$
- bestäm c så att $\|r\|_2$ är så liten som möjligt
- Detta inträffar när r är ortogonal mot $\mathcal{R}(A)$ dvs. när r ortogonal mot A's kolumner

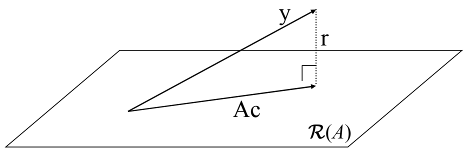
$$A^T r = 0$$

5

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

r ortogonal mot $\mathcal{R}(A)$



6

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Alternativ 1: Normalekvationer

- Om matrisen har full rang, dvs kolumnerna är linjärt oberoende så är A^TA ickesingulär och *minsta kvadratproblemet*

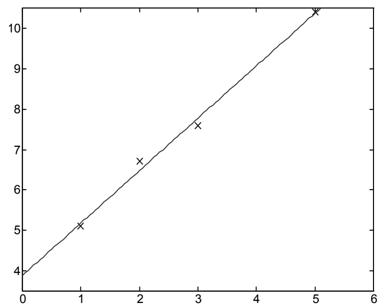
$$\min_c \|Ac - y\|_2$$

har en entydig lösning, som fås ur *normalekvationerna*

$$A^T Ac = A^T y$$

7 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University

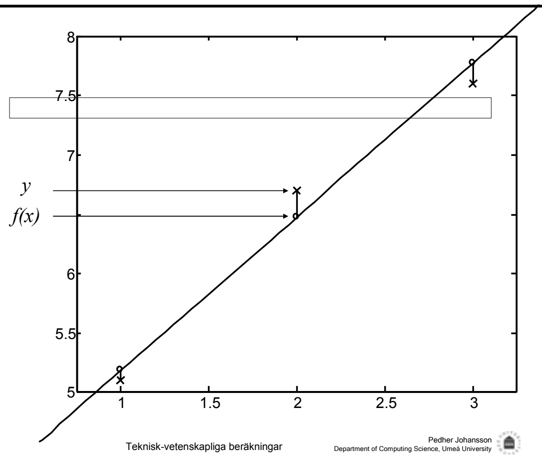
Nu löser vi vårt problem




```
>> c=A'*A\(A'*y)
c =
    3.8829
    1.2971
```

$f(x) = 3.8929 + 1.2971x$

8 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University



9 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University

Kurvanpassning

- Polynom $f(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2 + \dots c_nx^{n-1}$ koefficienterna ingår linjärt
- Bestäm de koefficienter som ger den önskade funktionen som "minst" avviker från mätvärdena (x_i, y_i)
- $\min\|r\|_2$ där $r = y - f(x)$

10 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University

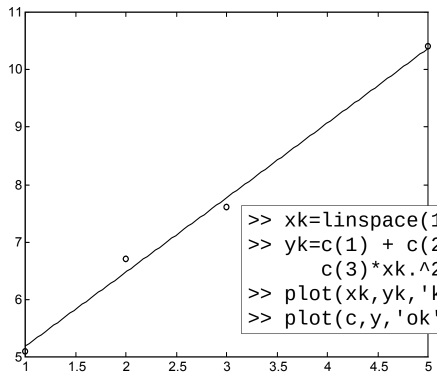
$f(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2$

```
>> A =
     1     1     1
     1     2     4
     1     3     9
     1     5    25
>> y =
    5.1000
    6.7000
    7.6000
   10.4000
>> c=(A'*A)\(A'*y) =
    3.8991
    1.2832
    0.0023
```

Mycket liten; talar för rät linje

$f(x) = 3.8991 + 1.2832x + 0.0023x^2$

11 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University

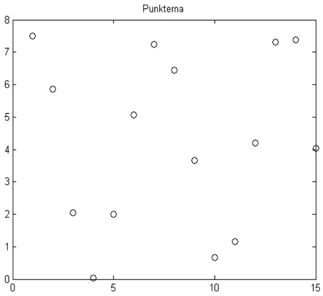



```
>> xk=linspace(1,5);
>> yk=c(1) + c(2).*xk +
       c(3)*xk.^2;
>> plot(xk,yk,'k')
>> plot(c,y,'ok')
```

12 Teknisk-vetenskapliga beräkningar — Pedher Johansson, Department of Computing Science, Umeå University

Ett exempel till

x_i	y_i
1	7.50
2	5.86
3	2.04
4	0.04
5	1.99
6	5.07
7	7.24
8	6.45
9	3.67
10	0.67
11	1.16
12	4.20
13	7.30
14	7.37
15	4.03



$$y = c_1 + c_2 \sin(x) + c_3 \cos(x)$$

13

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

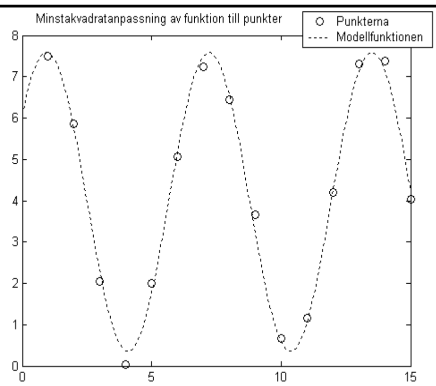
$c_1 + c_2 \sin(x) + c_3 \cos(x) = y$

$$\begin{bmatrix} 1 & \sin 1 & \cos 1 \\ 1 & \sin 2 & \cos 2 \\ 1 & \sin 3 & \cos 3 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \sin 15 & \cos 15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 7.50 \\ 5.85 \\ 2.04 \\ \vdots \\ 4.03 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.9695 \\ 2.9208 \\ 2.1303 \end{bmatrix}$$

14

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University



$$\|r\|_2 = \|Ac - y\|_2 = 0.8075$$

15

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Sammanfattnig normalekvationer

Fördelar
- Reduceras till ett linjärt ekvationssystem.
- Markant dimensionsreducering om n << m

Nackdelar
- Avrundningsfel kan leda till att A^TA blir rangdefekt.
- $\text{cond}(A^TA) = \text{cond}^2(A)$
- Tappad noggrannhet
- I slow convergence of iterative methods.

Normalekvationerna undviks oftast.

16

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Alternativ 2: Systemmatrisen

Nackdelar :
- Ej positivt definit
- Större system

Fördelar :
- Bättre kondition
- Symetrisk

$$\begin{aligned} r + Ac &= y \\ A^T r &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix}$$

17

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Jakten på det tredje alternativet

- Behöver en mer robust transformation
- triangulära system fortfarande bra ur beräkningssynpunkt

$$\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} x \approx \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \qquad R \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

18

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Jakten på det tredje alternativet

- För att bevara längder och vinklar krävs "vinkelräta" transformationer
- Q sägs vara ortogonal om dess kol. är ortonormala

$$Q^T Q = I$$

- Nu fås

$$\|Qx\|_2^2 = (Qx)^T Qx = x^T Q^T Qx = x^T x = \|x\|_2^2$$

Lösningen till ett transformerat problem löser ursprungsproblemet

Alternativ 3: QR-faktorisering

- A med full kolumnrang kan alltid reduceras till en övertriangulär matris

$$A = QR = Q\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

vilket ger

$$Ax = b \Leftrightarrow Q\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}x = b \Leftrightarrow \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}x = Q^T b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

där $x = R_1^{-1} b_1$ och därmed

$$\|r\| = \|Ax - b\| = \|Q\| \cdot \left\| \begin{bmatrix} R_1 x - b_1 \\ 0x - b_2 \end{bmatrix} \right\| = \|b_2\|$$

Får vi minsta residualen?

- Notera att vare sig vi löser $Ax=b$ eller $Q^T Ax = Q^T b$ är det samma x som ger lösningen.
- Alltså är

$$\min\|Ax - b\| = \min\|Q^T Ax - Q^T b\|$$

$$= \min\left\| \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}x - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\| = \min\left\| \begin{bmatrix} 0 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|$$

dvs

$$\min_x \|Ax - b\| = \|b_2\|$$

Hur skapas Q?

Vi vill introducera nollor under h.d.

- Householdertransformationer
- Givensrotationer

Ortogonala transformationer

$$A = Q\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R$$

- Q_1 ortonormal bas för $\mathcal{R}(A)$
- Q_2 ortonormal bas för $\mathcal{N}(A^T)$

Givensrotationer

- Rotera en vektor $x \in \mathbb{R}^2$ vinkeln θ motsols.

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

- Transformationsmatris

$$R(\theta) \cdot x = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Householdertransformationer

$$H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$$

- Matris på formen

$$H^T = \left(I - 2\frac{vv^T}{v^T v}\right)^T = I - \frac{2}{v^T v}\left(vv^T\right)^T = I - \frac{2}{v^T v}vv^T = H$$

H symmetrisk

- På samma sätt kan visas att

$$H^T H = I$$

H ortogonal

Hur väljs v?

- Vi vill att $Hx = \alpha e_1$
- Välj $v = \|x\|_2 e_1$

$$Hx = \left(I - 2\frac{vv^T}{v^T v}\right)x = \left(I - 2e_1 e_1^T\right)x = \alpha e_1$$

25 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Algoritm

Set $R = A$
for i = 1, 2, . . . , n
Set $x = A(i : m, i)$
Construct H_i such that $H_i x = \alpha_i e_1$

$$R \leftarrow \begin{bmatrix} I_{i-1} & \\ & H_i \end{bmatrix} R$$

end for

$$Q = H_1 \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_2 \end{bmatrix} \dots \begin{bmatrix} I_{n-1} & \\ & H_n \end{bmatrix}$$

26 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Singulära värdesuppdelningen

- Låt $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, då finns det ortogonala matriser U $(m\times m)$ och V $(n\times n)$ så att

$$U^T AV = \begin{bmatrix} \Sigma & \\ & 0 \end{bmatrix} \text{ där } \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix}$$

- σ_i kallas *singulära värden* och

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$$

27 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Egenskaper hos SVD

Normer

$\|A\|_2 = \sigma_1$

$\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \ldots \sigma_r^2}$

Om A är kvadratisk och inverterbar : $\|A^{-1}\|_2 = \dfrac{1}{\sigma_n}$, cond$(A) = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n}$

Om A är rektangulär och $r = \min\{m,n\}$: cond$(A) = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_r}$

28 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Egenskaper hos SVD

Rang, värde- och nollrum

$\mathrm{rank}(A) = r$

$\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}([u_1, \ldots, u_r])$

$\mathcal{N}(A) = \mathcal{R}([v_{r+1}, \ldots, v_n])$

$\mathcal{R}(A^T) = \mathcal{R}([v_1, \ldots, v_r])$

$\mathcal{N}(A^T) = \mathcal{R}([u_{r+1}, \ldots, u_n])$

29 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Minsta-kvadrat med SVD

- Lösning ges av

$$x = V \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} & \\ & 0 \end{bmatrix} U^T b$$

- Matrisen

$$A^+ = V \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} & \\ & 0 \end{bmatrix} U^T$$

kallas *pseudoinvers*

30 Teknisk-vetenskapliga beräkningar Pedher Johansson Department of Computing Science, Umeå University

Kurvanpassning

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \Rightarrow A^+ = \begin{bmatrix} 0.8000 & 0.4857 & 0.1714 & -0.4571 \\ -0.2000 & -0.0857 & 0.0286 & 0.2571 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 5.1000 \\ 6.7000 \\ 7.6000 \\ 10.4000 \end{bmatrix}$$

$$x = A^+ b = \begin{bmatrix} 3.8829 \\ 1.2971 \end{bmatrix}$$

31

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Linjära ekv.sys. - A har full rang

Kvadratiskt $(m = n)$
- Unik lösning
- kol. i A spänner upp hela $\mathcal{R}(A)$
- $x = A^{-1}b$
  - LU-uppdelning

Överbestämt $(m > n)$
- $b \in \mathcal{R}(A)$
  $\Rightarrow$ exakt lösning
- $b \in \mathcal{R}(A)$
  $\Rightarrow$ sök den lösning som minimerar $\|b - Ax\|_2$
  - QR-uppdelning

Underbestämt $(m < n)$
- oändligt antal lösningar
  $b \in \mathcal{R}(A)$ ty $\text{rang}(A)=m$
- Sök min.norm-lösning

$$\boxed{A \in \mathbb{R}^{m \times n}}$$

32

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

A rangdefekt

- A $m \times n$ och $\text{rang}(A) < n$
- QR-faktoriseringen existerar, men $\text{rang}(R)=\text{rang}(A) < \text{n}$, dvs ej inverterbar
  $\Rightarrow$
  många vektorer x ger min-residual, min.kva. problemet saknar lösning
- Det vanliga är då att välja “minsta norm”-lösningen. Denna kan beräknas med SVD eller QR (se labb 2)

33

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Linjära ekv.sys. - A är rangdefekt

Kvadratiskt $(m = n)$
- Normalt $b \notin \mathcal{R}(A)$
- Noll eller oändligt antal lösningar
- Sök min.-normlösning

Överbestämt $(m > n)$
- minimeras för många x.
- Sök min.-normlösning

Underbestämt $(m < n)$
- Noll eller oändligt antal lösningar
- Sök min.-normlösning

$$\boxed{A \in \mathbb{R}^{m \times n}}$$

34

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University