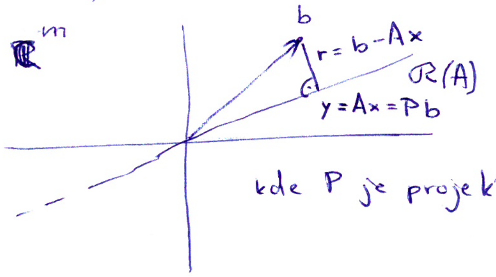
Řešení přeurčeného systému $Ax=b$ - metoda nejmenších čtverců

• úloha - hledáme takové x, aby $\|Ax-b\|_2$ byla nejmenší

tj. geometricky $\mathbb{C}^m$



$$\begin{array}{c} \quad n \\ m\,[A]\,[x] = [b] \end{array}$$

kde P je projektor na $\mathcal{R}(A)$

Př. lineární či polynomiální regrese, obecně

- proložení dat lin. kombinací určitých fcí $f(x) = c_1\phi_1(x) + \dots + c_n\phi_n(x)$

přičemž máme zadány (x_i, f_i) pro $i = 1, \dots, m$, pokud $m > n$ dostáváme přeurčenou soustavu a hledáme $c_1, \dots c_n$ takové, aby $\sum_{i=1}^{m} |f(x_i) - f_i|^2$ bylo nejmenší

• 3 základní metody hledání x:

1) řešení normálních rovnic
2) pomocí QR rozkladu
3) pomocí SVD rozkladu

Věta: $x \in \mathbb{C}^n$ minimalizuje $\|r\|_2 = \|b - Ax\|_2$ pro $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, $b \in \mathbb{C}^m$ právě když

$$A^+ r = 0 \iff A^+Ax = A^+b \iff Pb = Ax$$

vyjádření kolmosti r na $\mathcal{R}(A)$ | plyne z A^+r dosazením | zřejmé z Pythagorase

1) Normální rovnice $A^+Ax = A^+b$

pokud A má plnou hodnost n, pak také A^+A a lze invertovat $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ jednoznačné řešení $x = \underbrace{(A^+A)^{-1}A^+}_{\text{pseudoinverse } A^+ \text{ matice } A} b$

jde o matici $n \times m$

Projektor P lze vyjádřit z $A \cdot| \quad x = (A^+A)^{-1}A^+b$

$\Rightarrow \quad P = A(A^+A)^{-1}A^+$ pokud A má hodnost n

A^+A je symetrická, pozitivně definitní matice $\Rightarrow$ Choleského faktorizace

náročnost: A^+A ... mn^2 flops (díky symetričnosti jinak 2x tolik), A^+b ... $2mn$ a Choleského řešení $A^+Ax = c$ ... $\frac{1}{3}n^3$

celkem $\sim mn^2 + \frac{1}{3}n^3$ flops

2) QR rozklad A - redukovaný $A = \hat{Q}\hat{R}$

vektory v Q jsou bází v $\mathcal{R}(A)$ $\Rightarrow$ projektor $P = \hat{Q}\hat{Q}^+$ a tedy

$\hat{Q}\hat{R}x = Ax = Pb = \hat{Q}\hat{Q}^+b$ neboli $\hat{R}x = \hat{Q}^+b$

horní trojúhelníková matice - zpětná substituce pokud A je nesingulární

náročnost: pro QR faktorizaci pomocí Householderových reflexí

$\sim 2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$ flops

pro $m \gg n$ 2x více než 1)

pro $m \sim n$ srovnatelné

3) ~~U~~ Umíme-li redukovaný SVD rozklad $A = \hat{U}\hat{\Sigma}\hat{V}^+$

pak $P = \hat{U}\hat{U}^+$ a tedy $\hat{U}\hat{\Sigma}V^+x = Ax = Pb = \hat{U}\hat{U}^+b$

neboli $\hat{\Sigma}V^+x = \hat{U}^+b \Rightarrow x = \hat{V}\hat{\Sigma}^{-1}\hat{U}^+b$

pokud všechny $\sigma_i \neq 0$

náročnost: typicky $\sim 2mn^2 + 11n^3$

obecně nejpomalejší

<u>Porovnání:</u> 1) je obecně nejrychlejší, avšak ne vždy stabilní

$\Rightarrow$ doporučený algoritmus je 2) s QR rozkladem

ovšem pokud jsou některé singulární hodnoty σ_i blízké nule, tj. matice A je téměř singulární, pak je nejstabilnější 3)

<u>Pozn:</u> Pokud A nemá hodnost n, pak je nutné specifikovat dodatečnou podmínku, aby x bylo jednoznačné, např. požadovat, aby $\|x\|_2$ byla nejmenší – v těchto případech je obecně stabilní pouze SVD rozklad