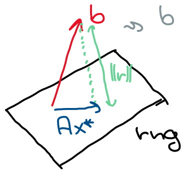
Úloha nejmenších čtverců

Co když soustava $Ax=b$ nemá řešení?

→ b neleží v rng A, nelze tedy nalézt x takové, aby platilo $Ax=b$



rng A

Potom můžeme hledat x, které minimalizuje velikost rezidua

$$r = Ax - b \Rightarrow \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|r\|^2 \rightarrow \text{nejmenší čtverce}$$

Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ je řešením $\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|^2$ právě tehdy, když

$$A^TAx = A^Tb$$

↳ pokud má A lineárně nezávislé sloupce, pak lze nalézt řešení pomocí tzv. pseudoinverze A:

$$x^* = (A^TA)^{-1}A^Tb = A^+b$$

5.2) Vyřešte soustavu

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & -3 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

přibližně ve smyslu nejmenších čtverců pomocí (a) pseudoinverze, (b) QR rozkladu

Hledáme x, které splňuje $x \in \arg\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|^2$.

Lze dokázat, že takové x splňuje normální rovnici $A^TAx = A^Tb$

a) pseudoinverze

A má lin. nezávislé sloupce (rank $A = 3$), matice A^TA bude regulární a řešení můžeme nalézt pomocí pseudoinverze

$$A^TAx = A^Tb \quad / (A^TA)^{-1}\cdot$$
$$x = (A^TA)^{-1}A^Tb$$

b) QR rozklad

A má lin. nezávislé sloupce, matice R z redukovaného QR

$$\underset{(4\times3)}{A} = \underset{(4\times3)}{Q} \cdot \underset{(3\times3)}{R}$$

bude regulární

$$A^TAx = A^Tb$$
$$R^T\underbrace{Q^TQ}_{I}Rx = R^TQ^Tb$$
$$R^TRx = R^TQ^Tb \quad / R^{-T}\cdot \quad \text{(ekvivalentní, } R \text{ je regulární)}$$
$$Rx = Q^Tb \Rightarrow \text{lze vyřešit zpětnou substitucí}$$

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}$$

$$x_3 = \frac{c_3}{r_{33}} \Rightarrow x_2 = \frac{1}{r_{22}}(c_2 - r_{23}x_3) \Rightarrow x_1 = \frac{1}{r_{11}}(c_1 - r_{12}x_2 - r_{13}x_3)$$

5.3) Formulujte jako přibližné řešení soustavy $Pu=q$ ve smyslu nejmenších čtverců, tj.

$$\min_{u\in\mathbb{R}^n} \|Pu-q\|^2$$

Napište matice P, q, u a pokud existuje jednoduchý vzorec pro řešení, napište jej

a) Jsou dány body $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_m \in \mathbb{R}^n$, hledáme $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$, který minimalizuje

$$f(\vec{x}) = \sum_i \|\vec{x} - a_i\|^2$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \Big\| \underbrace{\begin{bmatrix} I \\ I \\ \vdots \\ I \end{bmatrix}}_{P} \underbrace{\vec{x}}_{u} - \underbrace{\begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vdots \\ \vec{a}_m \end{bmatrix}}_{q} \Big\|^2 \Rightarrow$$

$$\vec{u} = P^+\vec{q} = (P^TP)^{-1}P^T\vec{q} = \left([I\ I \cdots I] \begin{bmatrix} I \\ I \\ \vdots \\ I \end{bmatrix} \right)^{-1} P^T\vec{q} = \begin{bmatrix} m & & \\ & m & \\ & & \ddots & \\ & & & m \end{bmatrix}^{-1} P^T\vec{q}$$

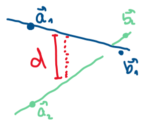
$$= \frac{1}{m} P^T\vec{q} = \frac{1}{m}[I\ I \cdots I] \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vdots \\ \vec{a}_m \end{bmatrix} = \frac{1}{m} \begin{bmatrix} a_{1,1} + a_{2,1} + \dots \\ a_{2,1} + a_{22} + \dots \\ \vdots \\ a_{m,1} + a_{m,2} + \dots \end{bmatrix}$$

$$x_i = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} a_{i,j} \Rightarrow \text{aritmetický průměr (po složkách)}$$

$\hat{x}$ je těžiště bodů $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_m$

c) Najděte vzdálenost dvou přímek

$$\min_{\alpha_1,\alpha_2} \left\| [\vec a_1 + \alpha_1(\vec b_1 - \vec a_1)] - [\vec a_2 + \alpha_2(\vec b_2 - \vec a_2)] \right\|^2$$



$$\min \left\| \underbrace{\begin{bmatrix} \vec b_1 - \vec a_1 & \vec a_2 - \vec b_2 \end{bmatrix}}_{P} \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}}_{\mu} - \underbrace{\begin{bmatrix} \vec a_2 - \vec a_1 \end{bmatrix}}_{q} \right\|^2$$

g) $\hat P(G,S) = G(a_1 + a_2 S + a_3 10^{G\cdot S} + a_4 10^{-S})$

$$\min \left\| \underbrace{\begin{bmatrix} G_1 & G_1 S_1 & G_1 10^{G_1 S_1} & G_1 10^{-S_1} \\ G_2 & G_2 S_2 & G_2 10^{G_2 S_2} & G_2 10^{-S_2} \\ & & \vdots & \\ G_n & G_n S_n & G_n 10^{G_n S_n} & G_n 10^{-S_n} \end{bmatrix}}_{P} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix}}_{\mu} - \underbrace{\begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_n \end{bmatrix}}_{q} \right\|^2 \Rightarrow \mu = P^+ q \quad (\mu = P\backslash q \text{ v Matlabu})$$

h) Autoregresivní funkce $\hat p_{t+1} = \beta_1 + \beta_2 p_t + \beta_3 p_{t-1}$

$t=2$: $\hat p_3 = \beta_1 + \beta_2 p_2 + \beta_3 p_1$

$t=3$: $\hat p_4 = \beta_1 + \beta_2 p_3 + \beta_3 p_2$

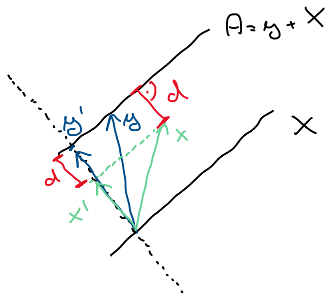
$\vdots$

$\Downarrow$

$$\min \left\| \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & p_2 & p_1 \\ 1 & p_3 & p_2 \\ 1 & p_4 & p_3 \\ & \vdots & \\ 1 & p_{n-1} & p_{n-2} \end{bmatrix}}_{P} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix}}_{\mu} - \underbrace{\begin{bmatrix} p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}}_{q} \right\|^2 \Rightarrow \mu = P^+ q \quad (\mu = P\backslash q \text{ v Matlabu})$$

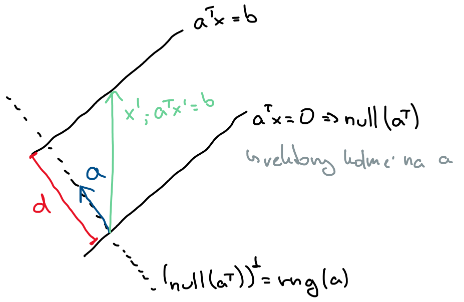
5.16) Najděte (co možná nejjednodušší) vzorec pro

a) Vzdálenost bodu $\vec x$ od afinního podprostoru $A = \vec y + X$, známe-li ortogonální projektor na X



$$d = \| \underbrace{(I - P_X)}_{\text{projektor na ortogonální doplněk } X} (x - y) \|$$

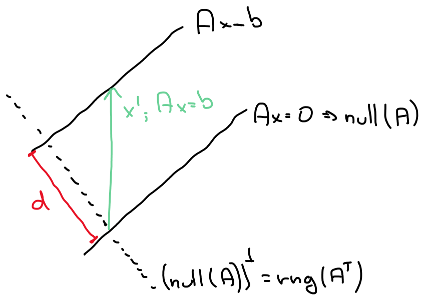
b) Vzdálenost počátku $\vec 0$ od nadroviny $\{\vec x \mid \vec a^T \vec x = b\}$



$$d = \left\| \underbrace{\frac{a a^T}{\|a\|^2}}_{\text{projektor na span}\{\vec a\}} x' \right\| = \left\| \frac{a}{\|a\|^2} \overbrace{a^T x'}^{a^T x' = b} \right\|$$

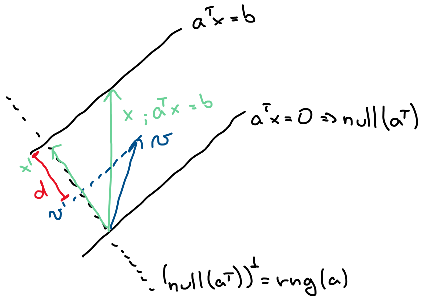
$$= \left\| \frac{a}{\|a\|} \cdot \frac{b}{\|a\|} \right\| = \frac{|b|}{\|a\|} \cdot \overbrace{\left\| \frac{a}{\|a\|} \right\|}^{1} = \frac{|b|}{\|a\|}$$

c) Vzdálenost počátku $\vec 0$ od afinního podprostoru $\{x \mid Ax = b\}$, kde A má lin. nezávislé řádky



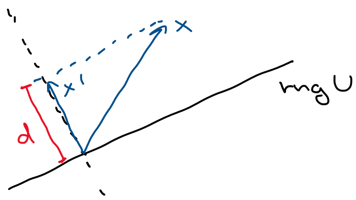
$$d = \| \underbrace{A^T (AA^T)^{-1} A}_{\text{projektor na } A^T} \overbrace{x'}^{b} \| = \| A^T (AA^T)^{-1} b \|$$

d) Vzdálenost bodu $\vec{v}$ od nadroviny $\{\vec{x} \mid \vec{a}^T\vec{x} = b\}$



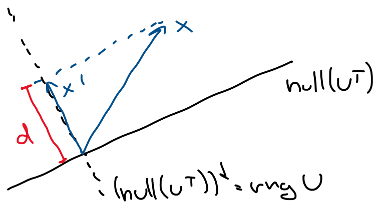
$$d = \left\|\frac{aa^T}{\|a\|^2}(x - v)\right\| = \frac{1}{\|a\|}\left\|a^T(x - v)\right\| = \frac{1}{\|a\|}\left|b - a^T v\right|$$

e) Vzdálenost bodu $\vec{x}$ od $rng\, U$ $(U^TU = I)$



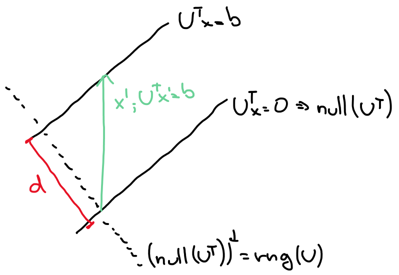
$$d = \|(I - UU^T)\,x\|$$

f) Vzdálenost bodu $\vec{x}$ od $null(U^T) = \{x \mid U^Tx = 0\}$ $(U^TU = I)$



$$d = \|UU^T x\| = \|U^T x\|$$

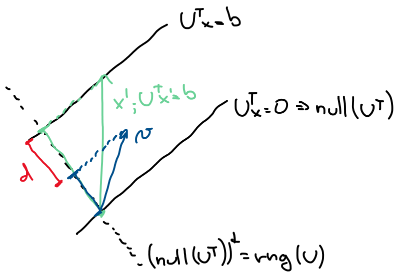
g) Vzdálenost počátku $\vec{0}$ od afinního podprostoru $\{x \mid U^Tx = b\}$ $(U^TU = I)$



$$d = \|\underbrace{U(U^TU)^{-1}U^T}_{\text{projektor na } rng\, U} x'\| = \|U\underbrace{(U^TU)}_{I}{}^{-1}b\| = \|Ub\| = \|b\|$$

(where $\overbrace{U^Tx'}^{b}$)

h) Vzdálenost bodu $\vec{v}$ od afinního podprostoru $\{x \mid U^Tx = b\}$ $(U^TU = I)$



$$d = \|\underbrace{U(U^TU)^{-1}U^T}_{\text{projektor na } rng\, U}(x' - v)\| = \|UU^T(x' - v)\| = \|U^T(x' - v)\| = \|b - U^T v\|$$