Core problem v úlohách nejmenších čtverců

$$Ax \approx b$$

ÚI AV ČR, Doktorandský den 2005 – Martin Plešinger

Obsah

Úvod

V řadě aplikací se řeší aproximační problémy jako jsou:

- Lineární regrese, Ortogonální regrese,
- Identifikace parametrů systémů (Linear Parameter Estimation),
- Modelování chyb obsažených v datech (Modeling of Errors in Variables, EIV).

Jazykem výpočetní numerické lineární algebry, jde o lineární problém nejmenších čtverců, zejména:

- (Ordinary) Least Squares, LS,
- Data Least Squares, DLS,
- (Scaled) Total Least Squares, TLS (STLS).

I. Problém nejmenších čtverců, LS

I.1 Skromný úvod do LS

Řešíme lineární aproximační úlohu

$$Ax \approx b, \quad A \in \mathcal{R}^{n\times m}, \quad b \in \mathcal{R}^{n},$$

předpokládáme $b \neq \emptyset$, respektive $A^T b \neq \emptyset$ (v opačném případě je řešení triviální).

Symbolem $\approx$ zde značíme minimální modifikaci pravé strany b tak, abychom dostali kompatibilní systém.

Velká variabilita úloh:

$$r \;\equiv\; \mathrm{rank}(A) \;\leq\; \min\{m,n\}, \qquad m \;\begin{matrix}<\\=\\>\end{matrix}\; n$$

přičemž platí buď

$$\begin{aligned} & b \notin \mathcal{R}(A) \quad && \text{– nekompatibilní systém,} \\ \text{nebo} \quad & b \in \mathcal{R}(A) \quad && \text{– kompatibilní systém.} \end{aligned}$$

I.2 Klasické metody řešení úloh LS

Řešení pomocí soustavy normálních rovnic

$$A^T A x \;=\; A^T b,$$

– **výhoda**: $A^T A$ je symetrická, pozitivně (semi)definitní,

– **nevýhoda**: matice soustavy může být špatně podmíněná.

Řešení pomocí rozšířené soustavy rovnic

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & \emptyset \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -g \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ \emptyset \end{bmatrix},$$

– **výhoda**: podmíněnost matice soustavy se téměř nemění, navíc jsme získali residuum $g = Ax - b$,

– **nevýhoda**: soustava je symetrická, ale obecně indefinitní.

I.3 Analýza řešení úloh LS pomocí SVD

Nechť matice A má singulární rozklad $A = U_r \Sigma_r V_r^T$, platí $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(U_r)$, dále platí $(U_r U_r^T)\, b \in \mathcal{R}(A)$. Dostáváme kompatibilní systém

$$Ax \;=\; U_r U_r^T b.$$

Řešíme diagonální soustavu

$$\Sigma_r y \;=\; U_r^T b, \quad \text{kde} \quad y \;=\; V_r^T x,$$

přičemž

$$x \;=\; V_r y \;\in\; \mathcal{R}(A^T), \quad x \perp \mathcal{N}(A),$$

je x **řešení ve smyslu nejmenších čtverců minimální v normě**.

II. Obecný problém nejmenších čtverců,

LS, DLS, TLS

II.1 Motivace

Aproximační problém pomocí LS řešíme tak, že původní pravou stranu b nahradíme její ortogonální projekcí do oboru hodnot matice A,

$$b \quad \text{nahradím} \quad U_r U_r^T b,$$

$$\text{platí} \quad g \;=\; Ax - b \;=\; U_r U_r^T b - b \;=\; (U_r U_r^T - I)\, b.$$

Jinými slovy: připouštíme, že vektor pravé strany b obsahuje chyby, matici A považujeme za přesnou.

Co když chyby obsahuje nejenom vektor b, ale i matice A?

II.2 Formulace jednotlivých problémů

Hledáme matici E a vektor g tak, že

$$A + E \sim A, \quad \text{a} \quad b + g \sim b,$$

a $[b + g|\ A + E]$ je kompatibilní systém, tedy

$$\exists\, x \in \mathcal{R}^m \quad \text{takové, že} \quad (A + E)\, x \;=\; b + g.$$

- Vektor x je řešení původního aproximačního problému $Ax \approx b$ ve smyslu daném typem úlohy (LS, DLS, TLS, STLS).
- Vzdálenost nového kompatibilního systému od původního problému měříme normou peturbace $[g|E]$ závislé na typu úlohy.

Jednotlivé typy úloh:

- modifikujeme vektor b (pravou stranu, vektor pozorování, naměřená data, odezvu systému), A neobsahuje chyby $\rightarrow$ **LS**

$$Ax = b + g, \quad \min_{g,x} \|g\|,$$

- modifikujeme matici A (model), b neobsahuje chyby $\rightarrow$ **DLS**

$$(A + E)\, x = b, \quad \min_{E,x} \|E\|_F,$$

- modifikujeme matici A i vektor b $\rightarrow$ **TLS**

$$(A + E)\, x = b + g, \quad \min_{g,E,x} \|[g|E]\|_F.$$

II.3 STLS, jeden problém navíc...

Klasická formulace **STLS** (Scaled TLS) problému je

$$(A+E)\,x \;=\; b+g, \qquad \min_{g,E,x} \|[g\gamma|E]\|_F,$$

kde kladné reálné číslo $\gamma \in (0,\infty)$ je **škálovací parametr**.

Jiná, ekvivalentní formulace STLS problému je

$$(A+\hat{E})\,x\gamma \;=\; b\gamma+\hat{g}, \qquad \min_{\hat{g},\hat{E},x} \|[\hat{g}|\hat{E}]\|_F,$$

kde $\hat{E} \equiv E$, $\hat{g} \equiv g\gamma$. Tato formulace je pro nás výhodnější.

Mezi jednotlivými úlohami platí následující vztahy:

$\gamma = 1$, STLS problém $=$ TLS problém,

$\gamma \to 0$, STLS problém $\to$ LS problém,

$$x_{\text{STLS}} \to x_{\text{LS}}, \quad \frac{\text{STLS distance}}{\gamma} \to \text{LS distance},$$

$\gamma \to \infty$, STLS problém $\to$ DLS problém,

$$x_{\text{STLS}} \to x_{\text{DLS}}, \quad \text{STLS distance} \to \text{DLS distance}.$$

Řešení STLS problému $x = x(\gamma)$ je funkcí parametru γ,
pro $\gamma \to 0, 1, \infty$ je řešením odpovídajícího LS, TLS, DLS problému.

Druhá formulace STLS problému

$$(A+\hat{E})\,x\gamma \;=\; b\gamma+\tilde{g}, \qquad \min_{\hat{g},\hat{E},x} \|[\hat{g},\tilde{E}]\|_F,$$

umožňuje nahlížet na STLS problém pro dané γ jako na TLS problém jehož řešení je

$$x\gamma \;=\; x(\gamma)\,\gamma.$$

Důsledek: na libovolnou výše popsanou úlohu můžeme nahlížet jako na TLS problém či jeho limitní případ.

Je velmi důležité správně porozumět řešení TLS problému.

II.4 Analýza Goluba & van Loana

Předpoklad: matice A i $[b|A]$ mají plný sloupcový rank

$$r \equiv \operatorname{rank}(A) = m, \quad q \equiv \operatorname{rank}([b|A]) = m+1,$$

tedy platí $m < n$, $b \notin \mathcal{R}(A)$, systém je nekompatibilní.

TLS problém lze za jisté podmínky přeformulovat

$$\left[\begin{array}{c|c} b+g & A+E \end{array}\right] \begin{bmatrix} -1 \\ x \end{bmatrix} = \left\{ [b|A] + [g|E] \right\} \begin{bmatrix} -1 \\ x \end{bmatrix} = \emptyset,$$

přičemž matice $\{[b|A]+[g|E]\}$ nemá plný sloupcový rank a v jejím jádru leží vektor s nenulovou první komponentou.

II.4.1 Singulární rozklad matice (vsuvka)

Nechť

$$A \in \mathcal{R}^{n \times m}, \quad r = \operatorname{rank}(A) \leq \min\{n, m\},$$

pak singulární rozklad matice A je

$$A = U \Sigma V^T,$$

přičemž

$$U^{-1} = U^T \in \mathcal{R}^{n \times n}, \quad V^{-1} = V^T \in \mathcal{R}^{m \times m},$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & \emptyset \\ \emptyset & \emptyset \end{bmatrix} \in \mathcal{R}^{n \times m}, \quad \Sigma_r = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r) \in \mathcal{R}^{r \times r},$$

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

Označme

$$U \equiv [U_r|U_{n-r}], \quad U_r \equiv [u_1, \ldots, u_r],$$
$$V \equiv [V_r|V_{m-r}], \quad V_r \equiv [v_1, \ldots, v_r],$$

můžeme psát

$$A = U\Sigma V^T = U_r\Sigma_r V_r^T = \sum_{i=1}^{r} u_i\sigma_i v_i^T.$$

Dále označme

$$A_i \equiv u_i\sigma_i v_i^T \in \mathcal{R}^{n\times m},$$

tedy

$$A = \sum_{i=1}^{r} A_i.$$

Platí

$$\operatorname{rank}(A_i) \;=\; 1, \quad \|A_i\|_F \;=\; \sigma_i, \quad i = 1, \ldots, r,$$

posloupnost norem

$$\|A_1\|_F \geq \|A_2\|_F \geq \ldots \geq \|A_r\|_F > 0$$

je nerostoucí.

Poznámka: Platí $A_k A_l^T = \emptyset$ pro $k \neq l$, proto

$$\operatorname{rank}(A) \;=\; \operatorname{rank}\left(\sum_{i=1}^{r} A_i\right) \;=\; \sum_{i=1}^{r} \operatorname{rank}(A_i).$$

II.4 Analýza Goluba & van Loana (pokračování)

Úlohy TLS obvykle řešíme pomocí SVD. Nechť tedy

$$[b|A] \;=\; U_q \Sigma_q V_q^T, \quad \mathrm{rank}([b|A]) \;=\; q \;=\; m+1.$$

Nejmenší perturbace $[g|E]$ snižující hodnost matice $[b|A]$ je

$$[g|E] \;\equiv\; -u_q \sigma_q v_q^T, \quad \text{neboť} \quad \|[g|E]\|_F \;=\; \sigma_q \;=\; \min\{\sigma_i([b|A])\}$$

Vektor ležící v jádru matice je $v_q = (\nu_1, \ldots, \nu_{m+1})^T = (\nu_1, w^T)^T$, za předpokladu $\nu_1 \neq 0$ platí

$$\begin{bmatrix} -1 \\ x \end{bmatrix} \;\equiv\; -\frac{1}{\nu_1} v_q \quad \text{a} \quad x \;\equiv\; -\frac{1}{\nu_1} w \;=\; -\left(\frac{\nu_2}{\nu_1}, \frac{\nu_3}{\nu_1}, \ldots, \frac{\nu_{m+1}}{\nu_1}\right)^T.$$

Poznámka: V praxi hledáme řešení minimální v normě.

Předpokládejme, že $\sigma_s > \sigma_{s+1} = \ldots = \sigma_q$ a že z odpovídajících pravých singulárních vektorů $v_{s+1}, \ldots, v_q$ má alespoň jeden nenulovou první složku.

Ortogonální transformací (Householderův odraz) získáme nový soubor vektorů $\hat{v}_{s+1}, \ldots, \hat{v}_q$ takový, že pouze $\hat{v}_{s+1}$ má nenulovou první složku.

Platí tedy $\hat{v}_{s+1} = (\nu_1, w^T)^T$, $\nu_1 \neq 0$ a hledané řešení

$$x \equiv -\frac{1}{\nu_1} w$$

je minimální v normě.

Výše popsaný postup a řešení se nazývají:

Algoritmus Goluba a van Loana, budeme ho značit **AGVL** a **řešení ve smyslu TLS**, respektive **generické řešení**.

V případě $\nu_1 = 0$ AGVL nelze použít. Obtíž je v tom, že generické řešení a minimální perturbace odpovídající řešení v uvedeném smyslu neexistují.

Jinými slovy: formulace TLS problému

$$(A + E)\,x \;=\; b + g, \qquad \min_{g,E,x} \|[g|E]\|_F$$

pro některá A, b **zcela ztrácí smysl**, minimum vůbec neexistuje, (existuje pouze infimum).

Postačující, nikoliv však nutná (!) podmínka existence generického řešení (řešitelnosti pomocí AGVL) je

$$\sigma_r \equiv \sigma_{\min}(A) > \sigma_{\min}([b|A]) \equiv \sigma_q.$$

Úkol: nalezení vhodné formulace takové minimalizační úlohy, aby soustava rovnic $Ax \approx b$ byla smysluplně řešitelná pro libovolná A, b a aby její řešení bylo, za předpokladu $\sigma_r > \sigma_q$ identické s řešením generickým.

II.4.2 Příklad defektního ranku

Uvažujme TLS problém

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Hledáme nejmenší perturbaci takovou, abychom dostali kompatibilní systém, zřejmě platí

$$[g|E] = \left[\begin{array}{c||c|c} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \theta^{-1} \end{array}\right] \quad \text{a} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ \theta \end{bmatrix}.$$

Pokud $\theta \to +\infty$ pak

$$\| [g|E] \|_F \to 0 \quad \text{a} \quad \|x\| \to +\infty.$$

II.5 Negenerické řešení

Nechť $Ax \approx b$, $b \neq \emptyset$ je aproximační problém a

$$[b|A] \;=\; \sum_{i=1}^{q} u_i \sigma_i v_i^T, \qquad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_s > \sigma_{s+1} = \ldots = \sigma_q > 0.$$

je singulární rozklad matice $[b|A]$.

Opakování: Pokud

$$e_1^T \, [v_{s+1}, \ldots, v_q] \;=\; \emptyset,$$

pak neexistuje generické řešení problému a AGVL nelze použít.

Předpokládejme, že existuje takové t, že platí

$$\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_t > \sigma_{t+1} \geq \ldots \geq \sigma_q, \quad e_1^T v_t \neq 0, \quad e_1^T [v_{t+1}, \ldots, v_q] = \emptyset.$$

Singulární rozklad rozdělíme

$$[b|A] = \sum_{i=1}^{t} u_i \sigma_i v_i^T + \sum_{i=t+1}^{q} u_i \sigma_i v_i^T$$

a budeme se zabývat pouze jeho první částí.

Perturbační matice, vektor ležící v jádru perturbované matice a vektor řešení jsou

$$[g|E] \equiv -u_t \sigma_t v_t^T, \quad v_t = \begin{bmatrix} \nu_1 \\ w \end{bmatrix}, \quad x \equiv -\frac{1}{\nu_1} w.$$

Jinými slovy: Hledáme řešení TLS problému rozšířeného o podmínku

$$(A+E)\,x \;=\; b+g, \qquad \min_{g,E,x} \|\,[g|E]\,\|_F \;\;\wedge\;\; [g|E]\,[v_{t+1},\ldots,v_q] = \emptyset.$$

Poznámka: V praxi hledáme opět řešení minimální v normě.

Předpokládejme, že $\sigma_p > \sigma_{p+1} = \ldots = \sigma_t > \sigma_{t+1}$. Ortogonální transformací získáme takový soubor pravých singulárních vektorů $\hat{v}_{p+1},\ldots,\hat{v}_t$, že pouze $\hat{v}_{p+1}$ má nenulovou první složku.

Platí tedy $\hat{v}_{p+1} = (\nu_1, w^T)^T$, $\nu_1 \neq 0$ a hledané řešení

$$x \;\equiv\; -\frac{1}{\nu_1}\,w$$

je minimální v normě.

Tento postup a řešení se nazývají:

Extension of Van Huffel and Vandewalle značíme **EVHV** a **negenerické řešení**.

Negenerické řešení vždy existuje, navíc pokud $\sigma_r > \sigma_q$, pak je shodné s řešením generickým.

EVHV v podstatě ignoruje data související se singulárními čísly $\sigma_i([b|A])$, $i > t$. Tato data nejsou vzhledem k řešení relevantní (b má nulové projekce do odpovídajících levých singulárních podprostorů).

Úkol: Vhodné by bylo odstranit všechna data, která nejsou relevantní vzhledem k řešení.

II.6 Odlišný úhel pohledu, „co se děje uvnitř“

Nechť $Ax \approx b$, $b \neq \emptyset$ je aproximační problém a $P^{-1} = P^T$ a $Q^{-1} = Q^T$ jsou ortogonální matice. Transformovaný problém

$$\tilde{A}\tilde{x} \;\equiv\; \left[P^T A Q\right]\left[Q^T x\right] \;\approx\; \left[P^T b\right] \;\equiv\; \tilde{b}$$

má, až na ortogonální tranformaci $x = Q\tilde{x}$, stejné generické, resp. negenerické řešení jako problém původní.

Předpoklad: Transformovaný problém má následující strukturu

$$P^T[b|AQ] = [\tilde{b}|\tilde{A}] = \left[\begin{array}{c||c|c} b_1 & A_{11} & \emptyset \\ \hline \emptyset & \emptyset & A_{22} \end{array}\right].$$

Původní problém se rozpadá na dva zcela nezávislé podproblémy:

- Podproblém $A_{11}x_1 \approx b_1$, který řešíme například pomocí AGVL, předpokládejme, že to lze a že platí $\sigma_{\min}([b_1|A_{11}]) < \sigma_{\min}(A_{11})$.

- Podproblém $A_{22}x_2 \approx \emptyset$, který má zřejmě jediné smysluplné řešení $x_2 = \emptyset$.

Intuitivní řešení původního problému $Ax \approx b$ je

$$x = Q\tilde{x} = Q \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} x_1 \\ \emptyset \end{bmatrix}.$$

Co nastane, budeme-li řešit problém jako celek pomocí AGVL?

II.6.1 Singulární rozklad matice (vsuvka #2)

Množina singulárních čísel matice je ortogonálně invariantní. Nechť $A = U\Sigma V^T$, $P^{-1} = P^T$, $Q^{-1} = Q^T$, pak platí

$$\hat{A} \equiv P^T A Q = \hat{U}\Sigma\hat{V}^T, \quad \text{kde} \quad \hat{U} = P^T U, \quad \hat{V} = Q^T V.$$

Množina singulárních čísel blokově diagonální matice je sjednocením množin singulárních čísel jednotlivých bloků

$$U\Sigma V^T = A = \begin{bmatrix} A_{11} & \emptyset \\ \emptyset & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11}\Sigma_1 V_{11}^T & \emptyset \\ \emptyset & U_{22}\Sigma_2 V_{22}^T \end{bmatrix},$$

$$\{\sigma_i(A)\} = \{\sigma_j(A_{11})\} \cup \{\sigma_k(A_{22})\}.$$

II.6 Odlišný úhel pohledu... (pokračování)

Připusťme, že

$$\sigma_q \;=\; \sigma_{\min}(A_{22}) \;<\; \sigma_{\min}([b_1|A_{11}]), \quad \text{tedy} \quad \sigma_r \;=\; \sigma_q \in \{\sigma_i(A_{22})\},$$

$u_q,\ v_q$ – odpovídající singulární vektory z rozkladu bloku A_{22},
z – **libovolně zvolený vektor** a $r_1 \equiv A_{11}z - b_1$ residuum,
$\theta > 0$ – **libovolné kladné reálné číslo**.

Zřejmě platí rovnost

$$\left[\begin{array}{c||c|c} b_1 & A_{11} & -r_1\theta^{-1}v_q^T \\ \hline \emptyset & \emptyset & A_{22} - u_q\sigma_q v_q^T \end{array}\right] \begin{bmatrix} -1 \\ \tilde{x} \end{bmatrix} \;=\; \emptyset \quad \text{pro} \quad \tilde{x} \;=\; \begin{bmatrix} z \\ v_q\theta \end{bmatrix},$$

a tedy

$$x = Q\tilde{x} = Q \begin{bmatrix} z \\ v_q\theta \end{bmatrix}.$$

Perturbace původního problému a její norma jsou

$$[g|E] = P \left[\begin{array}{c||c|c} \emptyset & \emptyset & -r_1\theta^{-1}v_q^T \\ \hline \emptyset & \emptyset & -u_q\sigma_q v_q^T \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & \emptyset \\ \hline \emptyset & Q^T \end{array} \right],$$

$$\|\,[g|E]\,\|_F = \sqrt{\|r_1\|^2\theta^{-2} + \sigma_q^2}\,.$$

Řešení

$$x = Q\tilde{x} = Q \begin{bmatrix} z \\ v_q\theta \end{bmatrix}$$

ovšem není generické řešení, je neoptimální ve smyslu normy perturbace.

Generické řešení je charakterizováno minimální petrubací.

Zřejmě pro $\theta \to +\infty$ dostaneme minimální perturbaci

$$\|[g|E]\|_F \;\to\; \sigma_q \;<\; \sigma_{\min}([b_1|A_{11}]),$$

ale zároveň

$$\|x\| \;=\; \|\tilde{x}\| \;=\; \left\| \begin{bmatrix} z \\ v_q \theta \end{bmatrix} \right\| \;\to\; +\infty.$$

Minimální peturbace snižující hodnost matice existuje, ovšem neodpovídá jí žádný vektor řešení x. Tento problém tedy nemá generické řešení, má pouze **neoptimální řešení**.

Shrnutí – intuitivní řešení problému:

– vektor řešení je zcela určen řešením podproblému $[b_1|A_{11}]$,

– perturbace je zcela určna perturbací podproblému $[b_1|A_{11}]$,

$$x = Q \begin{bmatrix} x_1 \\ \emptyset \end{bmatrix}, \quad \|x\| = \|x_1\|, \quad \|[g|E]\|_F = \|[g_1|E_{11}]\|_F = \sigma_{\min}([b_1|A_{11}]).$$

Shrnutí – neoptimální (AGVL) řešení problému:

– řešení tvoří singulární vektor bloku A_{22} a libovolně volené komponenty, norma řešení neomezeně roste,

– norma perturbace se limitně blíží k σ_q,

$$x = Q \begin{bmatrix} z \\ v_q \theta \end{bmatrix}, \quad \|x\| \to \infty, \quad \|[g|E]\|_F \to \sigma_q = \sigma_{\min}(A_{22}) < \sigma_{\min}([b_1|A_{11}]).$$

Formulace TLS problému postrádá smyslu, neboť hledané **minimum neexistuje, existuje pouze infimum**.

Intuitivní postup zcela zanedbává blok A_{22}, přitom nutně **musí vést k jedinému správnému a smysluplnému řešení problému** – oba podproblémy $[b_1|A_{11}]$, $[\emptyset|A_{22}]$ jsou zcela nezávislé, přičemž

– prvý má generické řešení a
– druhý dokážeme řešit přesně $x_2 = \emptyset$.

Snadno nahlédneme, že v tomto příkladu platí

$$\sigma_{\min}(A) = \sigma_{\min}([b|A]) = \sigma_q = \sigma_{\min}(A_{22}).$$

Intuitivní řešení je shodné s řešením negenerickým.

II.7 TLS problém, shrnutí

Generické (AGVL, klasické) řešení je (ne nutně) podmíněné

$$\sigma_{\min}(A) > \sigma_{\min}([b|A]).$$

Negenerické (EVHV) řešení vždy existuje, je-li splněna podmínka výše, je shodné s generickým řešením. Při řešení jsme **ignorovali data odpovídající** $\sigma_i([b|A])$, $i > t$.

Intuitivní řešení je shodné s negenerickým řešením, je-li splněna podmínka výše, je shodné s generickým řešením. Při řešení jsme **zanedbali blok** A_{22}, tedy **data odpovídající** $\sigma_j(A_{22})$. Předpokládali jsme ovšem existenci generického řešení podproblému $A_{11}x_1 \approx b_1$.

III. Core problem

III.1 Motivace, úvod

Úkol: Vhodné by bylo k řešení problému $Ax \approx b$ využít pouze data k tomu nutná a postačující.

Naší snahou bude odstranit z problému všechny nežádoucí informace, zanedbat všechny redundance a (z hlediska řešení) nerelevantní komponenty matice $[b|A]$.

Nechť $Ax \approx b$, $b \neq \emptyset$ je aproximační problém. Hledáme ortogonální matice $P^{-1} = P^T$, $Q^{-1} = Q^T$ takové, že

$$P^T[b|AQ] \;=\; [\tilde{b}|\tilde{A}] \;=\; \left[\begin{array}{c||c|c} b_1 & A_{11} & \emptyset \\ \hline \emptyset & \emptyset & A_{22} \end{array}\right]$$

je blokově diagonální systém, s blokem A_{22} maximální možné dimenze, intuitivně řešitelný ($A_{11}x_1 \approx b_1$ má generické řešení).

Věta:

Existují ortogonální matice $P^{-1} = P^T$, $Q^{-1} = Q^T$ vedoucí na výše uvedenou blokovou strukturu takové, že

– blok A_{11} má minimální a blok A_{22} maximální možnou dimenzi přes všechny ortogonální transformace vedoucí na danou strukturu,

– blok A_{11} nemá žádné opakující se a ani nulové singulární číslo,

– podproblém $A_{11}x_1 \approx b_1$ má generické řešení (je řešitelný pomocí AGVL) a zároveň platí

$$\sigma_{\min}([b_1|A_{11}]) \; < \; \sigma_{\min}(A_{11}),$$

- blok A_{22}, obsahuje všechna opakování singulárních čísel (redundance), všechna nerelevantní data (data, která mají nulové projekce do vektoru b), všechna nulová singulární čísla,

- podproblém $A_{22}x_2 \approx \emptyset$ má jediné smysluplné řešení $x_2 = \emptyset$.

Řešení původního problému je

$$x = Q \begin{bmatrix} x_1 \\ \emptyset \end{bmatrix},$$

a je shodné s řešením negenerickým, pokud platí $\sigma_r > \sigma_q$, pak je shodné s řešením generickým.

Definice:

Podproblém $A_{11}x_1 \approx b_1$ z předchozí věty, nazveme

core problem

v aproximačním problému $Ax \approx b$.

Otázkou je, jak nalézt matice P, Q z předchozí věty, tedy, jak nalézt core problem?

III.2 Bidiagonalizace

Matici $[b|A]$ transformujeme na horní bidiagonální tvar

$$P^T[b|AQ] \; = \; [\tilde{b}|\tilde{A}] \; = \; \left[\begin{array}{c|cccc} \beta_1 & \alpha_1 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_2 & & \\ & & \beta_3 & \alpha_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \end{array}\right],$$

matice P, Q jsou hledané matice z předchozí věty.

K oddělení obou podproblémů dojde tehdy a jen tehdy, když se $\alpha_i = 0$ nebo $\beta_j = 0$.

Poznámka: Technikou jsou Householderovy odrazy, resp. Lanczos-Golub-Kahanova bidiagonalizace.

Matice $[b_1|A_{11}]$ je horní bidiagonální, všechny bidiagonální prvky má nenulové a má tvar buď

$$[b_1|A_{11}] = \left[\begin{array}{c|cccc} \beta_1 & \alpha_1 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_p & \alpha_p \end{array}\right] \in \mathcal{R}^{p\times p+1}, \quad \alpha_i\beta_i \neq 0, \ \ i = 1\ldots p,$$

pokud $\beta_{p+1} = 0$ nebo $p = n$, core problem $A_{11}x_1 = b_1$ je kompatibilní, nebo

$$[b_1|A_{11}] = \left[\begin{array}{c|ccc} \beta_1 & \alpha_1 & & \\ & \beta_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_p \\ & & & \beta_{p+1} \end{array}\right] \in \mathcal{R}^{p+1\times p+1}, \quad \begin{array}{l} \alpha_i\beta_i \neq 0, \ \ i = 1\ldots p, \\ \beta_{p+1} \neq 0. \end{array}$$

pokud $\alpha_{p+1} = 0$ nebo $p = m$, core problem $A_{11}x_1 \approx b_1$ je nekompatibilní.

V obou případech má

– matice A_{11} **plný sloupcový rank** a
– matice $[b_1|A_{11}]$ má **plný řádkový rank**.

Core problém $A_{11}x_1 \approx b_1$ je kompatibilní, resp. nekompatiblíní tehdy a jen tehdy, je-li kompatibilní, resp. nekompatibilní původní problém $Ax \approx b$.

Závěr, výhody, otevřené otázky ...

– Jasnější vhled do problematiky (oproti AGVL a EVHV).
– Core problém vždy řešitelný pomocí AGVL.
– Teorie je konzistentní – řešení je shodné s řešením EVHV, AGVL.
– K řešení využíváme právě nutné a postačující informace.

– Bidiagonalizace je prvním krokem výpočtu SVD.
– Blok A_{22} nemusí být bidiagonalizován.

– Analogická teorie pro více pravých stran?
– Numerické vlastnosti core problému?
– Implementace software, numericky stabilní řešič.
– Ill-posed problémy a regularizace – ne vždy lze položit $x_2 = \emptyset$.

Reference

- G. H. Golub, C. F. Van Loan: **An analysis of the total least squares problem**, 1980.

- S. Van Huffel, J. Vandewalle: **The total least squares problem: computational aspects and analysis**, 1991.

- C. C. Paige, Z. Strakoš: **Scaled total least squares fundamentals**, 2002.

- C. C. Paige, Z. Strakoš: **Unifying least squares, total least squares and data least squares**, 2002.

- C. C. Paige, Z. Strakoš: **Core problem in linear algebraic systems**, 2004.

Děkuji za pozornost.