



národní
úložiště
šedé
literatury

Úplný problém nejmenších čtverců v úlohách s násobnou pravou stranou

Plešinger, Martin

2007

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-37422>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 07.08.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní nusl.cz .

Úplný problém nejmenších čtverců v úlohách s násobnou pravou stranou

doktorand:

ING. MARTIN PLEŠINGER

Fakulta mechatroniky
Technická univerzita Liberec
Hájkova 6
461 17 Liberec 1

martin.plesinger@tul.cz

školitel:

PROF. ING. ZDENĚK STRAKOŠ, DRSc.

Ústav informatiky AV ČR, v. v. i.
Pod Vodárenskou věží 2
182 07 Praha 8

strakos@cs.cas.cz

obor studia:
Přírodovědné inženýrství

Tato práce byla podpořena grantem národního programu výzkumu "Informační společnost" č. 1ET400300415.

Abstrakt

V tomto příspěvku se budeme zabývat klasifikací lineárních aproximačních úloh s ohledem na jejich řešitelnost ve smyslu formulace tzv. úplného problému nejmenších čtverců.

1. Úvod

Uvažujme lineární aproximační úlohu

$$AX \approx B, \quad (1)$$

kde $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $B \in \mathbb{R}^{m \times d}$ jsou matice systému a d -násobná pravá strana, $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ je matice neznámých. (Pokud $d = 1$ značíme pravou stranu b a vektor neznámých x .) Úloha (1) lze ekvivalentně přeformulovat

$$[B | A] \begin{bmatrix} -I_d \\ X \end{bmatrix} \approx 0.$$

Způsob aproximace upřesní následující definice.

Definice 1 Minimalizační úlohu

$$\min_{G, E, X} \|[G | E]\|_F, \quad (A + E)X = (B + G), \quad (2)$$

nazveme úplným problémem nejmenších čtverců (total least squares problem, TLS). Řešením úplného problému nejmenších čtverců nazveme libovolné X splňující (2).

Bez újmy na obecnosti budeme předpokládat $m \geq n + d$ (v opačném případě matici $[B | A]$ doplníme nulovými řádky). Dále předpokládejme $A^T B \neq 0$ (v opačném případě, tedy jsou-li obory hodnot matic A a B vzájemně ortogonální, snaha aproximovat B pomocí sloupců matice A postrádá smysl a lze ukázat, že problém (2) má triviální řešení).

2. Úlohy s jednou pravou stranou

Úplný problém nejmenších čtverců pro $d = 1$ (úlohu s jednou pravou stranou) prvně analyzovali Gene Golub a Charles Van Loan [1], 1980. Ukázali, že úloha (2) nemá obecně řešení. Za předpokladu, že řešení existuje, nemusí být jednoznačné; zavádí se řešení minimální v normě.

Sabine Van Huffel a Joos Vandewalle [5], 1991, nazývají problém (2) s $d = 1$ jež nemá řešení *negenerickým*. Zavádějí pro něj tzv. *negenerické řešení*, které vždy existuje a lze definovat tak, že je jednoznačné. Význam negenerického řešení ovšem není příliš zřejmý.

Analýzu problému s jednou pravou stranou uzavírá článek Christophera Paige a Zdeňka Strakoše [6], 2006. Za předpokladu ortogonální invariance úlohy (1) lze ukázat, že existují matice $P \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $P^{-1} = P^T$ a $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $Q^{-1} = Q^T$ takové, že

$$P^T [b | A Q] = \left[\begin{array}{c|c|c} b_1 & A_{11} & 0 \\ \hline 0 & 0 & A_{22} \end{array} \right] \quad (3)$$

přičemž matice $[b_1 | A_{11}]$ má minimální dimenzi přes všechny ortogonální transformace vedoucí na blokově diagonální strukturu (3). Původní úloha (1) se tak rozpadne na dva nezávislé podproblémy

$$A_{11} x_1 \approx b_1, \quad A_{22} x_2 \approx 0.$$

Lze ukázat [6, 1], že první z obou podproblémů je vždy řešitelný ve smyslu Definice 1 a navíc jeho řešení x_1 je jednoznačné. Podproblém $A_{11} x_1 \approx b_1$ nazýváme *core*

problémem. Dále lze ukázat, že vektor

$$x \equiv Q \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

je identický s řešením minimálním v normě, dle Goluba a Van Loana [1], existuje-li, respektive s řešením negenerickým [5] v případě, že (2) řešení nemá. Teorie core problému tak dává konceptu negenerického řešení dobře interpretovatelný význam. Pro podrobnější výklad viz [6, 2, 3] případně [7].

2.1. Klasická analýza úloh s jednou pravou stranou

O tom, zda problém (2) s jednou pravou stranou má nebo nemá řešení, případně o tom, zda řešení, existuje-li, je jednoznačné či nikoliv, lze rozhodnout na základě pravých singulárních vektorů a distribuce singulárních čísel rozšířené matice $[b | A]$. Uvažujme tedy singulární rozklad

$$[b | A] = U \Sigma V^T \quad (4)$$

a

$$\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_p > \sigma_{p+1} = \dots = \sigma_{n+1} \geq 0 \quad (5)$$

singulární čísla matice $[b | A]$. Dále uvažujme následující dělení matice pravých singulárních vektorů

$$V = \left[\begin{array}{c|c} V_{11} & V_{12} \\ \hline V_{21} & V_{22} \end{array} \right], \quad (6)$$

kde $V_{11} \in \mathbb{R}^{1 \times p}$, $V_{12} \in \mathbb{R}^{1 \times (n-p+1)}$, $V_{21} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $V_{22} \in \mathbb{R}^{n \times (n-p+1)}$. (Pokud $\sigma_1 = \sigma_{n+1}$, pak $p = 0$ a σ_p , V_{11} a V_{21} neexistují. V [5] mají bloky matice (6) jiné pořadí.) Platí následující věta.

Věta 1 *Necht' je dána lineární aproximační úloha (1) a $d = 1$. Uvažujme singulární rozklad (4), se značením zavedeným v (5)–(6).*

Úplný problém nejmenších čtverců (2) má řešení tehdy a jen tehdy, když $V_{12} \neq 0$.

Navíc pokud $p = n$, pak je toto řešení jednoznačné, pokud $p > n$ pak lze zkonstruovat řešení minimální v normě.

Důkaz viz [1, 5]. (V opačném případě $V_{12} = 0$ lze vždy, jak již bylo řečeno, zkonstruovat jednoznačné negenerické řešení, viz [4, 5], které však není řešením úlohy (2) ve smyslu Definice 1.)

3. Úlohy s násobnou pravou stranou

V článku [6] je pro úlohy s jednou pravou stranou využito klasické analýzy, zde shrnuté ve Větě 1, k důkazu

jednoznačné řešitelnosti core problému ve smyslu Definice 1. Naší snahou je rozšířit tuto teorii, zejména ideu redukce úlohy na core problém, na úlohy s násobnou pravou stranou, tedy pro $d > 1$. Je tedy nutné vědět, kdy je daný úplný problém nejmenších čtverců (2) řešitelný.

Analýzou existence a jednoznačnosti řešení pro úlohy s násobnou pravou stranou se zabývali Sabine Van Huffel a Joos Vandewalle, [5]. Analyzovali však jen některé *speciální případy*, obecná analýza chybí, viz [5, poznámka na str. 66]. Navzdory tomu algoritmus pro řešení úplného problému nejmenších čtverců, tzv. *TLS algoritmus*, viz [4], [5, Algoritmus 3.1, str. 87–88], vrátí „řešení“ pro libovolnou úlohu (1). Jedním z kroků vedoucích k rozšíření teorie core problému na úlohy s násobnou pravou stranou tak je zúplnění analýzy řešitelnosti problému (2).

3.1. Klasická analýza úloh s více pravými stranami

Speciální případy analyzované v [5] budeme opět identifikovat pomocí pravých singulárních vektorů a distribuce singulárních čísel rozšířené matice $[B | A]$. Uvažujme tedy singulární rozklad

$$[B | A] = U \Sigma V^T \quad (7)$$

a

$$\begin{aligned} \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_p > \sigma_{p+1} = \dots = \sigma_{n+1} = \dots \\ = \sigma_{n+e} > \sigma_{n+e+1} \geq \dots \geq \sigma_{n+d} \geq 0 \end{aligned} \quad (8)$$

singulární čísla matice $[B | A]$. Dále uvažujme následující dělení matice pravých singulárních vektorů

$$V = \left[\begin{array}{c|c|c} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ \hline V_{21} & V_{22} & V_{23} \end{array} \right], \quad (9)$$

kde $V_{11} \in \mathbb{R}^{d \times p}$, $V_{12} \in \mathbb{R}^{d \times (n-p+e)}$, $V_{13} \in \mathbb{R}^{d \times (d-e)}$, $V_{21} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $V_{22} \in \mathbb{R}^{n \times (n-p+e)}$, $V_{23} \in \mathbb{R}^{n \times (d-e)}$. (Pokud $\sigma_1 = \sigma_{n+1}$, pak $p = 0$ a σ_p , V_{11} a V_{21} neexistují, obdobně pokud $\sigma_{n+1} = \sigma_{n+d}$, pak $e = d$ a σ_{n+e+1} , V_{13} a V_{23} neexistují. V [5] je dělení matice (9) zavedeno jinak, bloky mají navíc jiné pořadí.) Platí následující věta.

Věta 2 *Necht' je dána lineární aproximační úloha (1). Uvažujme singulární rozklad (7), se značením zavedeným v (8)–(9).*

Necht' $\text{rank}([V_{12} | V_{13}]) = d$ a zároveň $p = n$ (tedy $[V_{12} | V_{13}]$ je čtvercová nesingulární matice). Pak úplný problém nejmenších čtverců (2) má řešení a toto řešení je jednoznačné.

Necht' $\text{rank}([V_{12} | V_{13}]) = d$ a zároveň $e = d$ (tedy všechna singulární čísla počínaje σ_{p+1} jsou si rovna).

Pak úplný problém nejmenších čtverců (2) má nekonečně mnoho řešení, lze zkonstruovat řešení minimální v normě (spektrální i Frobeniově).

Necht' $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) < d$. Pak úplný problém nejmenších čtverců (2) nemá řešení.

Důkaz viz [5]. V případě, že $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) < d$, lze vždy zkonstruovat jednoznačné negenerické řešení, viz [4, 5].

Všimněme si, že zatímco Věta 1 říká, že existence řešení je ekvivalentní s nenulovostí jistého bloku matice V , Věta 2 pouze implikuje existenci řešení ve dvou speciálních případech.

3.2. Revize analýzy úloh s více pravými stranami

Případ

$$\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d, \quad p < n, \quad e < d \quad (10)$$

není z hlediska řešitelnosti ve smyslu Definice 1 v nám známé literatuře vůbec analyzován. Obvykle je tento případ interpretován následujícím způsobem: Protože aproximační úloha (1) je chápána jako *perturbace* původně *kompatibilního systému*, jsou všechna singulární čísla, tedy i $\sigma_{n+e+1}, \dots, \sigma_{n+d}$, zatížena chybou. Nahradíme-li tato singulární čísla čísla $\tilde{\sigma}_{n+e+1}, \dots, \tilde{\sigma}_{n+d}$ rovnými σ_{n+1} , zredukujeme obecný případ (10) vždy na druhý speciální případ popsaný Větou 2, tzv. *truncated TLS* koncept, viz např. [5, poslední odstavec na str. 77]. Tím může být diskuze o existenci řešení uzavřena. S touto myšlenkou pak přirozeně koresponduje fakt, že klasický přístup, prezentovaný např. v [5], pracuje téměř výhradně s celým blokem $[V_{12}|V_{13}]$. Chceme-li ovšem diskutovat řešitelnost problému (2) obecně, bez uvažování dalších perturbací úlohy, musíme provést jemnější analýzu úlohy s více pravými stranami. Pro potřeby této analýzy navrhujeme pracovat s bloky V_{12} a V_{13} odděleně.

Analýzu provedeme pro nejobecnější případ úlohy (1) splňující podmínku $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d$. Speciální případy úloh popsaných Větou 1 (úlohy s jednou pravou stranou) a Větou 2 přirozeně vyplnou jako případy se speciálními hodnotami d , p a nebo e . Snadno nahlédneme, že matice $V_{13} \in \mathbb{R}^{d \times (d-e)}$ nemůže mít za předpokladu $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d$ rank větší než $d - e$, z čehož vyplývá, že matice $V_{12} \in \mathbb{R}^{d \times (n-p+e)}$ nemůže mít rank menší než e . Plný (řádkový) rank matice $[V_{12}|V_{13}]$ je tak možno mezi bloky V_{12} a V_{13} „rozdělit“ třemi různými způsoby. Když $\text{rank}(V_{12}) = e$, pak nutně V_{13} musí mít plný (sloupcový) rank, tedy $\text{rank}(V_{13}) = d - e$, opačná implikace ovšem neplatí. Může se tedy stát, že $\text{rank}(V_{13}) = d - e$ a a zá-

roveň $\text{rank}(V_{12}) > e$. Třetí a poslední možností je, že matice V_{13} nebude mít plný (sloupcový) rank, tedy $\text{rank}(V_{13}) < d - e$, pak ale nutně $\text{rank}(V_{12}) > e$. Klasifikaci úloh zpřehlední následující definice.

Definice 2 *Uvažujme značení zavedené v (7)–(9). Množinu všech úloh (1), které splňují podmínku $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d$, označíme \mathcal{F} . Množinu všech úloh (1), které podmínku $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d$ nesplňují, označíme \mathcal{S} . Dále*

- množinu všech úloh z \mathcal{F} , pro něž $\text{rank}(V_{12}) = e$ (a tedy $\text{rank}(V_{13}) = d - e$), označíme \mathcal{F}_1 .
- Množinu všech úloh z \mathcal{F} , pro něž $\text{rank}(V_{13}) = d - e$ a zároveň $\text{rank}(V_{12}) > e$, označíme \mathcal{F}_2 .
- Množinu všech úloh z \mathcal{F} , pro něž $\text{rank}(V_{13}) < d - e$ (a tedy $\text{rank}(V_{12}) > e$), označíme \mathcal{F}_3 .

Množiny \mathcal{F}_1 , \mathcal{F}_2 , \mathcal{F}_3 a \mathcal{S} jsou zřejmě disjunktní a zřejmě platí $\bigcup_{j=1}^3 \mathcal{F}_j = \mathcal{F}$. Úlohy mající řešení ve smyslu Definice 1 popsané Větou 1 (případ $d = 1$) a Větou 2 (případy $p = n$ nebo $e = d$) vždy splňují podmínku $\text{rank}(V_{12}) = e$, patří tedy do množiny \mathcal{F}_1 . V [8] bylo ukázáno, že platí následující věta zobecňující toto pozorování.

Věta 3 *Necht' je dána lineární aproximační úloha (1). Uvažujme singulární rozklad (7), se značením zavedeným v (8)–(9). Předpokládejme $\text{rank}([V_{12}|V_{13}]) = d$.*

Je-li daná úloha z množiny \mathcal{F}_1 (tedy pokud $\text{rank}(V_{12}) = e$), pak úplný problém nejmenších čtverců (2) má řešení. Má-li úloha více než jedno řešení, pak lze zkonstruovat řešení minimální v normě (spektrální i Frobeniově).

Je-li daná úloha z množiny \mathcal{F}_2 (tedy pokud $\text{rank}(V_{13}) = d - e$ a zároveň $\text{rank}(V_{12}) > e$), pak úplný problém nejmenších čtverců (2) má řešení.

Je-li daná úloha z množiny \mathcal{F}_3 (tedy pokud $\text{rank}(V_{13}) < d - e$), pak úplný problém nejmenších čtverců (2) nemá řešení.

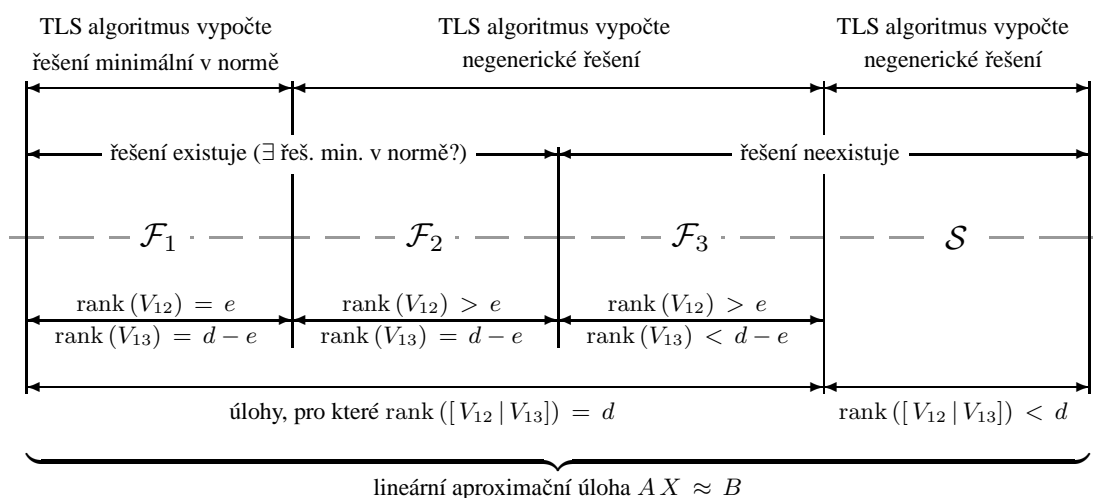
Naznačíme pouze základní myšlenku důkazu, úplný důkaz viz [8]. Lze ukázat, že existence řešení úplného problému nejmenších čtverců je ekvivalentní s existencí ortogonální matice $W \in \mathbb{R}^{(n-p+e) \times (n-p+e)}$ takové, že $V_{12}W = [\Delta|\Gamma_1]$, $\Gamma_1 \in \mathbb{R}^{d \times e}$, kde čtvercová matice $\Gamma \equiv [\Gamma_1|V_{13}]$ je *nesingulární*. Pro úlohy z množiny $\mathcal{F}_1 \cup \mathcal{F}_2$ vždy taková matice W existuje. Navíc pro úlohy z množiny \mathcal{F}_1 vždy existuje $W = W_0$ taková,

že $\Delta = 0$; jejím užitím konstruujeme řešení minimální v normě, které je jednoznačné (nezávislé na volbě W_0). Pro úlohy z množiny \mathcal{F}_2 je $\Delta \neq 0$ pro libovolné W ; existence a případná jednoznačnost řešení minimálního v normě zatím *není jasná*. Pro úlohy z množiny \mathcal{F}_3 zřejmě žádná matice W dávající nesingulární Γ neexistuje.

Oproti tomu řešení úlohy z množiny \mathcal{F} spočtené TLS algoritmem je jednoznačně určeno libovolnou ortogonální maticí $\bar{W} \in \mathbb{R}^{(n-p+d) \times (n-p+d)}$ takovou, že $[V_{12} | V_{13}] \bar{W} = [0 | \bar{\Gamma}]$, kde čtvercová matice $\bar{\Gamma}$ je nesingulární. Taková matice \bar{W} existuje pro libovolnou úlohu z množiny \mathcal{F} . Pro úlohy z množiny \mathcal{F}_1 TLS algoritmus spočte právě řešení problému (2) minimální

v normě (např. $\bar{W} = \text{diag}(W_0, I_{d-e})$). Dále lze ukázat, že řešení libovolné úlohy z množiny $\mathcal{F}_2 \cup \mathcal{F}_3$ vypočtené TLS algoritmem není řešením odpovídajícího problému (2); má charakter negenerického řešení, které TLS algoritmus vrací i pro úlohy z množiny \mathcal{S} . (Zde je třeba dát pozor na užitou terminologii, např. v [5] se termínu negenerické řešení používá výhradně v kontextu úloh z množiny \mathcal{S} , v [8] a také zde se o negenerickém řešení hovoří navíc i v kontextu úloh z množiny $\mathcal{F}_2 \cup \mathcal{F}_3$). Negenerické řešení není řešením úlohy (2) ve smyslu Definice 1.

Vzájemný vztah mezi vlastnostmi dané úlohy a existencí řešení problému (2) a řešením spočteným TLS algoritmem shrnuje následující schema.



4. Závěr

Zda je pro úlohy z množiny \mathcal{F}_2 smysluplnější preferovat skutečné řešení problému (2), které vždy existuje, či řešení negenerické vypočtené pomocí TLS algoritmu, není zatím jasné. Obdobně význam samotného negenerického řešení pro $d > 1$ není příliš zřejmý.

Užitím datové redukce, která zobecňuje pojem core problému pro úlohy s $d \geq 1$, viz [8], lze v jistých typických případech (analogických s úlohami s jednou pravou stranou) smysluplnost negenerického řešení interpretovat obdobně jako v případě $d = 1$. Zda mezi tyto případy mohou patřit i úlohy z množiny \mathcal{F}_2 zatím není jasné.

Na druhou stranu je v [8] ukázáno, že existuje celá třída problémů, pro něž vykazuje koncept negenerického řešení ne zcela uspokojivé chování. Ilustrujme tento jev na příkladu.

Příklad 1 Uvažujme dvě (nezávislé) úlohy (1) s jednou

pravou stranou, které jsou dány ve formě core problémů

$$A_{11}^I x_1^I \approx b_1^I, \quad A_{11}^{II} x_1^{II} \approx b_1^{II}$$

a mají tedy dle [6] jednoznačné řešení. Předpokládejme, že

$$\sigma_{\min}([b_1^I | A_{11}^I]) > \sigma_{\max}([b_1^{II} | A_{11}^{II}]).$$

Jinak řečeno, všechna singulární čísla prvního core problému jsou ostře větší než největší singulární číslo druhého core problému. V [8] je ukázáno, že rozšířená matice aproximačního problému

$$\left[\begin{array}{c|c} A_{11}^I & 0 \\ \hline 0 & A_{11}^{II} \end{array} \right] X \approx \left[\begin{array}{c|c} b_1^I & 0 \\ \hline 0 & b_1^{II} \end{array} \right], \quad (11)$$

má minimální dimenzi a představuje tak analogii core problému v dané úloze se dvěma pravými stranami. Dále je v [8] ukázáno, že TLS algoritmus aplikován na (11) vrátí negenerické řešení

$$X = \left[\begin{array}{c|c} x_1^I & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right],$$

namísto intuitivně očekávaného

$$X = \left[\begin{array}{c|c} x_1^I & 0 \\ \hline 0 & x_1^{II} \end{array} \right].$$

Zde prezentovaná analýza a dosavadní výsledky naznačují, že zdánlivě elementární formulace úplného problému nejmenších čtverců (2) pro úlohy s více pravými stranami je mnohem komplikovanější a komplexnější než je tomu u úloh s jednou pravou stranou. Vzhledem k tomu, že existuje reálná potřeba řešit aproximační úlohy s více pravými stranami (např. multi-input multi-output dynamické systémy v teorii řízení), bude třeba dalšího studia dané problematiky.

Literatura

- [1] G. H. Golub, C. F. Van Loan, “An analysis of the total least squares problem”, *Numer. Anal.* vol. 17, pp. 883–893, 1980.
- [2] I. Hnětynková, Z. Strakoš, “Lanczos tridiagonalization and core problems”, *Linear Algebra Appl.*, vol. 421, pp. 243–251, 2007.
- [3] I. Hnětynková, M. Plešinger, Z. Strakoš, “Lanczos tridiagonalization, Golub-Kahan bidiagonalization and core problem”, *PAMM, Proc. Appl. Math. Mech.* 6, pp. 717–718, 2006.
- [4] S. Van Huffel, “Documented Fortran 77 programs of the extended classical total least squares algorithm, the partial singular value decomposition algorithm and the partial total least squares algorithm”, *Internal. Report ESAT-KUL 88/1*, ESAT Lab., Dept. of Electrical Engrg., Katholieke Universiteit Leuven, 1988.
- [5] S. Van Huffel, J. Vandewalle, “The Total Least Squares Problem, Computational Aspects and Analysis”, *SIAM Publications*, 1991.
- [6] C. C. Paige, Z. Strakoš, “Core problem in linear algebraic systems”, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* vol. 27, pp. 861–875, 2006.
- [7] M. Plešinger, Z. Strakoš, “Core problém v úlohách nejmenších čtverců”, *Sborník konference: Doktorandský den '05, ÚI AV ČR*, pp. 102–108, 2005.
- [8] M. Plešinger, I. Hnětynková, D. M. Sima, Z. Strakoš, S. Van Huffel, “The total least squares problem and reduction of data in $AX \approx B$ ”, *work in progress*.