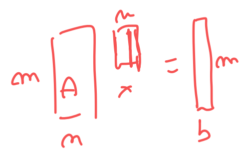
The linear least squares problems
(Minimi quadrati lineari)

Elena Loli Piccolomini
elena.loli@unibo.it

Academic Year 2020/2021
Last updated: September 2020

1 Introduzione



Si consideri il seguente sistema

$$Ax = b \qquad\qquad A \in \mathbb{R}^{m\times n} \quad b \in \mathbb{R}^m \quad x \in \mathbb{R}^n$$

se $m > n$ risulta essere sovradeterminato, cioè il numero di equazioni è strettamente superiore al numero di incognite, e in tal caso il sistema non ammette soluzioni.

Si definisce allora il ***problema ai minimi quadrati (LSQ)***, che consiste nel determinare il vettore $x \in \mathbb{R}^n$ che minimizzi il ***vettore dei residui*** $r = Ax - b$:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} ||r||_2^2 \tag{1}$$

dove $r = (r_1, r_2, \dots, r_n) = (Ax_1 - b_1, \dots, Ax_n - b_n)$.

$\exists!$ soluzione?

Proposition 1.1. *Sia A una matrice $m \times n$, con $m > n$ e $rg(A) = k \leq n$. Allora il problema*

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2$$

$\| \ \|_p$

$k = rg(A)$

ammette sempre almeno una soluzione.
Inoltre:

- 1 Se $k = n$ il problema ha una ed una sola soluzione;
- 2 Se $k < n$ il problema ha infinite soluzioni ;
  (tali soluzioni formano un sottospazio di $\mathbb{R}^n$ di dimensione $n - k$)

2 Calcolo delle soluzioni

$(u - v)^T = u^T - v^T$

2.1 $\boxed{\text{Caso } k = n}$ Equazioni Normali

$(A \cdot B)^T = B^T \cdot A^T$

$b^T y = y^T b$

$$\begin{aligned}
||Ax - b||_2^2 &= (Ax - b)^T (Ax - b) \\
&= (-b^T + x^T A^T)(Ax - b) \\
&= -b^T Ax + b^T b + x^T A^T Ax - x^T A^T b \\
&\quad (\text{sommando i termini simili } b^T Ax = x^T A^T b) \\
&= x^T A^T Ax - 2x^T A^T b + b^T b
\end{aligned}$$

Si pone:

$$f(x) = x^T A^T Ax - 2x^T Ab + b^T b \quad : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+ \tag{2}$$

Per minimizzare la norma bisogna imporre che la derivata prima sia nulla, in questo caso non avendo una sola un'incognita bisogna usare il gradiente, che per una generica funzione è diefinito come segue:

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \qquad \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Nel caso di (2) si ha:

- $\nabla(x^T A^T Ax) = 2A^T Ax$
- $\nabla(2x^T Ab) = A^T b$
- $\nabla(b^T b) = 0$

Allora:

$$\boxed{\nabla f(x) = 2A^T Ax - A^T b} = 0 \tag{3}$$

$\nabla f(x) = 0$

$A^T A x - A^T b = 0$

Imponendo che il gradiente sia nullo si ottiene:

$$\boxed{A^T A x = A^T b} \qquad \textbf{Sistema delle equazioni normali} \tag{4}$$

$A^T A$ è simm. semidefinite positiva – se $rg(A) = \max$

$\Rightarrow$ def. positiva

Se $A^T A$ è simmetrica e definita positiva allora ~~A ha rango massimo:~~ è possibile risolvere il sistema con un opportuno metodo adatto alla matrice $A^T A$. Ad esempio utilizzando la fattorizzazione di Cholesky, si ottiene una matrice L t.c. $A^T A = LL^T$ e si risolvono nell'ordine i due sistemi:

$$Ly = A^T b \qquad L^T x = y$$

È possibilie utilizzare anche altri metodi come il metodo dei Gradienti coniugati.

Il calcolo di $A^T A$ può rendere il problema eccessivamente mal condizionato poiché:

$$\boxed{K(A^T A) = K(A)^2}$$

2.2 Caso $k < n$ Decomposizione in valori singolari (SVD)

In questo caso vi sono infinite soluzioni, ma ne esiste una sola $\tilde{x}$ di norma minima tale che:

$$\cancel{\tilde{x} \in \mathcal{N}(A)^\perp}$$

~~Dove $\mathcal{N}(A)^\perp = \{y \in \mathbb{R}^n | A^T y = 0\}$ è lo spazio nullo.~~

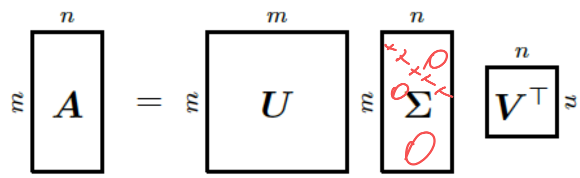
Tale soluzione è ottenuta tramite SVD:

Theorem 2.1. *Sia $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, con $m \geq n$ e $rg(A) = k \leq n$. Allora esistono:*

- $U = [u_1, u_2, \ldots, u_m] \in \mathbb{R}^{m\times m}$ *ortogonale;*
- $V = [v_1, v_2, \ldots, v_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *ortogonale;*
- $\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)$ *con* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \cdots \geq \sigma_n \geq 0$ *detti* ***valori singolari;***

tali che:

$$\boxed{A = U\Sigma V^T} \tag{5}$$



Theorem 2.2. *Sia $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, con $rg(A) = k \leq n$ e sia $A = U\Sigma V^T$ la sua decomposizione in valori singolari, allora il vettore:*

$$\mathbb{R}^n \ni \boxed{x^* = \sum_{i=1}^{k} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i} \tag{6}$$

$u_i^T \in \mathbb{R}^m$
$b \in \mathbb{R}^m$
$v_i \in \mathbb{R}^n$

è la soluzione di minima norma del problema:

$$\boxed{\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2}$$

in corrispondenza di tale soluzione si ottiene:

$$\boxed{||r^*||_2^2 = ||Ax^* - b||_2^2 = \sum_{i=k+1}^{n} (u_i^T b)^2} \tag{7}$$

$r^* = Ax^* - b \neq 0$

Infatti moltiplicando per U^T a sinistra:

$$\begin{aligned} \min ||Ax - b||_2^2 &= ||U^T Ax - U^T b||_2^2 \\ \min &= ||\underbrace{U^T AV}_{\Sigma}\underbrace{V^T x}_{y} - \underbrace{U^T b}_{g}||_2^2 \end{aligned}$$

Posto $y = V^T x \in \mathbb{R}^n$ e $g = U^T b \in \mathbb{R}^m$
Se $A = U\Sigma V^T \Rightarrow U^T AV = \Sigma$
Allora:

$\sigma_1 \geq \sigma_2 \dots \geq \sigma_n \geq 0$
$\sigma_1 \geq \sigma_2 \dots \geq \sigma_k > 0$
$\sigma_{k+1} \dots \sigma_n = 0$

$$\begin{aligned} \min ||Ax - b||_2^2 &= ||\underbrace{\Sigma y}_{\sigma_i y_i} - g||_2^2 \\ \min_{x\in\mathbb{R}^n} &= \sum_{i=1}^{k} (\sigma_i y_i - g_i)^2 + \sum_{i=k+1}^{n} g_i^2 \end{aligned}$$

Per minimizzare tale quantità è sufficiente scegliere:

$\sigma_i y_i - g_i = 0$
$\forall i$

$$\longrightarrow y_i = \frac{g_i}{\sigma_i} = \frac{U^T b}{\sigma_i} \qquad i = 1, \dots, k$$

$y = V^T x \implies x = (V^T)^{-1} y = (V^T)^T y = Vy$

Poichè $x^* = Vy$ risulta:

$$x^* = V \left(\frac{u^T b}{\sigma_i} \right) = \boxed{x^* = \sum_{i=1}^{k} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i}$$

$Ax = b$

$x = A^{-1} b$

Allora in corrispondenza di tale soluzione, la norma del residuo è:

$$||r||_2^2 = \sum_{i=k+1}^{n} (g_i)^2 = \sum_{i=k+1}^{n} (u_i^T b)^2$$

3 Definizione di pseudoinversa

Sia $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, con $rg(A) = k \leq min(m, n)$ e $A = U\Sigma V^T$ la sua decomposizione in valori singolari. Si definisce **pseudoinversa** la matrice:

$$\boxed{\underbrace{A^+}_{n \times m} = \overset{n \times n}{V} \underbrace{\Sigma^+}_{n \times m} \overset{m \times m}{U^T}} \quad dove \quad (\Sigma^+)_{ij} = \begin{cases} \dfrac{1}{\sigma_i} & se \ i = j \ e \ i \leq k \\ 0 & altrimenti \end{cases}$$

$\Sigma^+ = \begin{bmatrix} \times & & & \\ & \times & & 0 \\ 0 & & \times & \end{bmatrix}$

$m = n$

Proprietà

1. $AA^+A = A$
2. $A^+AA^+ = A^+$
3. $(AA^+)^T = AA^+$
4. $(A^+A)^T = A^+A$

La pseudoinversa di una matrice rettangolare A permette di scrivere la soluzione del problema dei minimi quadrati (1) in modo simile alla soluzione $x = A^{-1}b$ di un sistema lineare quadrato, cioè (6) è equivalente a:

$$x^* = \underbrace{V\Sigma^+U^T}_{A^+} b \implies \boxed{x^* = A^+b}$$

Si osservi però che la pseudoinversa è uno strumento molto utile per analizzare toericamente il problema LSQ e le proprietà delle sue soluzioni, ma NON è uno strumento adeguato per calcolarle poiché computazionalmente costoso.

$k = rg(A)$ $\quad$ A $m \times n$ $\quad$ $A^+ = V \Sigma^+ U^T$

$n \times m$

Si può inoltre definisce il numero di condizionamento di $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in termini della pseudoinversa:

$$\boxed{K(A) = ||A|| ||A^+||}$$

e il numero di condizionamento spettrale (o in norma-2):

$$\boxed{K(A)_2 = ||A||_2 ||A^+||_2 = \cancel{\frac{\sigma_1}{\sigma_n}} \longrightarrow \frac{\sigma_1}{\sigma_k}}$$

4 Condizionamento del problema dei minimi quadrati

Il numero di condizionamento della matrice del LSQ permette di stimare l'errore ottenuto nella soluzione quando viene utilizzato l'approccio della SVD.

Theorem 4.1. *Sia $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ con $m > n$ una matrice di rango $rg(A) = k \leq n$ e sia $\Delta A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ una sua perturbazione. Sia $b \in \mathbb{R}^m$ il termine noto e $\delta b \in \mathbb{R}^m$ una sua perturbazione.*
Tali che:

- $rg(A + \Delta A) = k$
- $||A^+|| ||\Delta A|| < 1$

se $x + \delta x$ è la soluzione del problema dei minimi quadrati perturbato:

$$\min_{y \in \mathbb{R}^m} ||(A + \Delta A)y - (b + \delta b)||_2^2$$

allora risulta:

$$\frac{||\delta x||_2}{||x||_2} \leq \frac{K_2(A)}{1 - \epsilon_A K_2(A)} [c_1 \epsilon_A + c_2 \epsilon_b]$$

dove:

- $\epsilon_A = \dfrac{||\Delta A||}{||A||} \qquad \epsilon_B = \dfrac{||\delta b||}{||b||}$
- c_1 è una funzione di $K_2(A),\ r,\ ||A||_2,\ ||r||_2)$
- c_2 è una funzione di $||b||,\ ||A||_2,\ ||x||_2$

SVD

I valori singolari hanno le seguenti proprietà: $K = rg(A)$

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_k > \sigma_{k+1} = \sigma_{k+2} = \ldots = \sigma_n = 0$$

dove $k = \text{rank(A)}$. La matrice Σ è unica mentre le matrici U and V non lo sono.

$$\Sigma = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_n \\ 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 \end{bmatrix} & m \\ n & \end{array}.$$

$\Sigma^T \rightarrow n \times m$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \sigma_2 \ddots & \\ 0 & & \sigma_n \end{pmatrix}$$

$\Sigma^T \Sigma \rightarrow n \times n$

Results

– Poichè:

$$Av_i = \lambda_i v_i$$

v_i sono chiamati *vettori singolari destriu* and u_i sono chiamati *vettori singolari sinistri*.

– Abbiamo la seguente relazione fra i valori singolari di A e gli autovalori di $A^T A$

$$A^T A = (U\Sigma V^T)^T (U\Sigma V^T) = V\Sigma^T U^T U \Sigma V^T$$

$$A^\top A = \boldsymbol{V}\underbrace{\boldsymbol{\Sigma}^\top \boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{V}^\top = \boldsymbol{V} \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_n^2 \end{bmatrix}}_{\Sigma^T \Sigma} \boldsymbol{V}^\top.$$

V^{-1}

Quindi $\boxed{\sigma_i^2 = \lambda_i(A^T A)}$

e

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i(\mathrm{A}^T A)},\ i = \ldots, n$$

In particolareç

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_{max}(\mathrm{A}^T A)} = \sqrt{\rho(\mathrm{A}^T A} = ||A||_2$$

A $m \times n$ non singolare

A rango max $\Rightarrow$ A^TA def. positiva

$||A^{-1}||_2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{min}(A^TA)}}$

$$\sigma_n = \sqrt{\lambda_{min}(A^T A)} \implies ||A^{-1}||_2 = \frac{1}{\sigma_n}$$

Thus,

$K(A) = ||A|| \, ||A^{-1}||$

$$\boxed{K(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_2}} \; n \quad \geq 1$$

$\sigma_1 \quad \sigma_n$

– I ~~valori~~ vettori singolari sinistri di A are the eigenvectors of $A^T A$ (colonne di V)

– I vettori singolari destri di A sono gli ~~autovalori~~ autovettori di AA^T (colonne di U)

4.1 Approssimazione di matrici usando la SVD

Data la SVD di una matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$,

$$A = \mathrm{U}\Sigma\mathrm{V}^T = \sum_{i=1}^{m} \sigma_i \underbrace{u_i v_i^T} = \sum_{i=1}^{m} \sigma_i A_i = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i A_i$$

, possiamo usarla per rappresentare (o approssimare) la matrice A come somma di matrici $A_i \in \mathbb{R}^{m \times n}$ con $\mathrm{rank}(A_i) = 1$ tali che:

$\mathrm{rg}(A_i) = 1$ $\quad m \times n$

$$\boxed{A_i = u_i \mathrm{v_i}^T}$$

$u_i \to m \times 1$

$v_i^T \to 1 \times n$

La matrice A of rank(A) $= k$ può essere scritta começ

$$A = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i A_i = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i \mathrm{v_i}^T$$

diade = matrice rango 1

Pder ottenere una approssimazione di rango p A_p $(p < k)$ di A possiamo trinacre la somma all' indice $i = p$. L' errore introdotto con questa approssimazione può essere calcolato começ

$$\boxed{||A - A_p||_2 = \left|\left| \sum_{i=p+1}^{k} \sigma_i A_i \right|\right|_2 = \sigma_{p+1}}$$

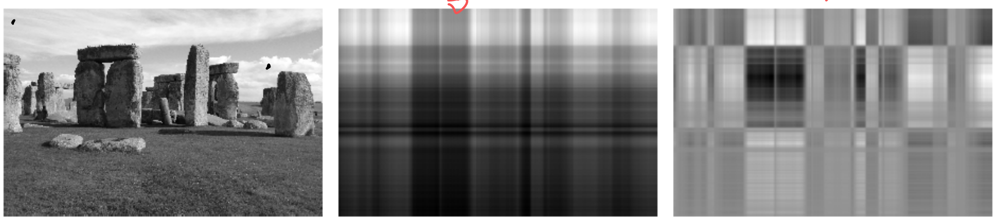
Questo significa che se σ_{p+1} è piccolo si ha una buona approssimazione della matrice originale A.

Theorem 4.2. *Data $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, rank(A) $= k$, let $A = \mathrm{U}\Sigma\mathrm{V}^T$ sia la sua decomposizione in valori singolari. Sia $A_p = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i u_i \mathrm{v_i}^T$ la approssimazione di rango p di A. Allora*

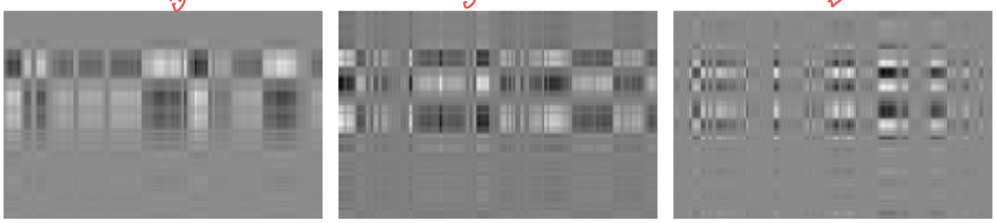
$$\forall B \in \mathbb{R}^{m \times n}, \ \mathrm{rank(B)} = p, \ ||A - A_p||_2 \leq ||A - B||_2$$

Quindi possiamo dire che A_p è la migliore approssimazione di rango p di A.

Esempio. *Approssimazione di rango p di una matrice che rappresenta un' immagine.*



(a) Original image $\boldsymbol{A}$. (b) $\boldsymbol{A}_1,\ \sigma_1 \approx 228,052$. (c) $\boldsymbol{A}_2,\ \sigma_2 \approx 40,647$.



(d) $\boldsymbol{A}_3,\ \sigma_3 \approx 26,125$. (e) $\boldsymbol{A}_4,\ \sigma_4 \approx 20,232$. (f) $\boldsymbol{A}_5,\ \sigma_5 \approx 15,436$.

$\sigma_1 \cdot A_1$ $\sigma_2 \cdot A_2 + \sigma_1 A_1$

(a) Original image $\boldsymbol{A}$. (b) Rank-1 approximation $\widehat{\boldsymbol{A}}(1)$. (c) Rank-2 approximation $\widehat{\boldsymbol{A}}(2)$.

$\sigma_1 A_1 + \sigma_2 A_2 + \sigma_3 A_3$ $\sum_{i=1}^{4} \sigma_i A_i$ $\sum_{i=1}^{5} \sigma_i A_i$

(d) Rank-3 approximation $\widehat{\boldsymbol{A}}(3)$. (e) Rank-4 approximation $\widehat{\boldsymbol{A}}(4)$. (f) Rank-5 approximation $\widehat{\boldsymbol{A}}(5)$.

La matrice associata all' immagine originale ha dimensione $m \times n = 1432 \times 1910$, quindi richiede 2735120 dati. Se consideriamo la approssimazione di rango p, richiede $(m+n+1) \times p$ dati. Per esempio, la approssimazione di rango 5 richiede $5 \times (1432 + 1910 + 1) = 16715$ dati, che corrispondono a circa 0.6% del numero di dati originali. Quindi possiamo interpretare la approssimazione di rango p di una matrice come una compressione. Questa approssimazione si trova in diverse applicazioni per esempio di machine learning, di image processing, filtraggio di segnali e nella analisi delle componenti principali (PCA).