Переопределенные системы линейных уравнений

Метод наименьших квадратов

Цыбулин Иван (tsybulin@crec.mipt.ru (mailto:tsybulin@crec.mipt.ru))

Задача регрессии

Пусть дано множество измерений (x_i, y_i), которые должны описываться зависимостью

$$y = ax + b$$

при некоторых фиксированных параметрах a, b. Требуется определить эти параметры.

Составим систему из n уравнений.

$$y_i = ax_i + b, \qquad i = 1, \dots, n$$

Что является неизвестными в ней? Сколько всего здесь неизвестных?

Переопределенные системы

Запишем систему уравнений в матричном виде

$$\begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

В общем случае данная система не имеет решений. Задача требует *регуляризации*.

Регуляризация

Пусть дана система

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{f},$$

которая не имеет решения. Найдем такой вектор $\mathbf{x}$, при котором система имеет минимальную невязку:

$$\|\mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{x}\| \to \min_{\mathbf{x}}.$$

Решение этой задачи уже существует всегда. Если исходная система была разрешима, очевидно, что решения обеих задач совпадут.

Метод наименьших квадратов

Рассмотрим евклидову норму невязки

$$\|\mathbf{f}-\mathbf{A}\mathbf{x}\|_E^2 = (\mathbf{f}-\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{f}-\mathbf{A}\mathbf{x}) = \|\mathbf{f}\|^2 - 2(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{f}) + \mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} \to \min_{\mathbf{x}}.$$

Минимум достигается на решении системы

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\top\mathbf{f} \qquad \Leftrightarrow \qquad \mathbf{A}^\top(\mathbf{f}-\mathbf{A}\mathbf{x}) = 0$$

Исходная система была умножена слева на $\mathbf{A}^\top$. При этом матрица системы стала квадратной, симметричной и положительно определенной.

Обобщенный МНК

Разные компоненты вектора невязки могут иметь различный *вес*. Например, какие-то измерения были проведены точнее других. В этом случае можно Вместо Евклидовой нормы $||\mathbf{r}||_E$ минимизировать норму

$$||\mathbf{r}||_{\mathbf{B}} \equiv \sqrt{\mathbf{r}^\top\mathbf{B}\mathbf{r}},$$

где симметричная положительно определенная матрица $\mathbf{B}$ задает веса отдельных уравнений (диагональные элементы) и связи между различными уравнениями (внедиагональные элементы)

Применяя обобщенный метод наименьших квадратов к переопределенной системе

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{f}$$

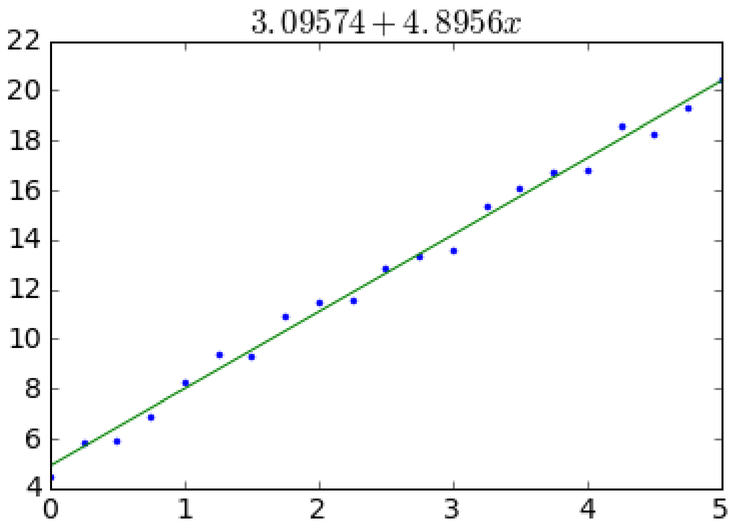
и аналогичным образом минимизируя $\|\mathbf{r}\|_{\mathbf{B}}$, сводим задачу к решению системы

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^\top\mathbf{B}\mathbf{f}$$

In [1]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
plt.rc('font', **{'size' : 14})

x = np.linspace(0, 5, 21)
y = 3*x+5 + 0.5*np.random.randn(len(x))
A = np.zeros((len(x), 2))
A[:, 0] = x
A[:, 1] = 1
f = y
a,b = np.linalg.solve(A.T.dot(A), A.T.dot(f))
plt.plot(x, y, '.')
plt.plot(x, a*x+b, '-')
plt.title('$%g + %g x$' % (a,b))
plt.show()
```



Более сложная регрессия

Пусть данные описываются более сложной зависимостью. Например,

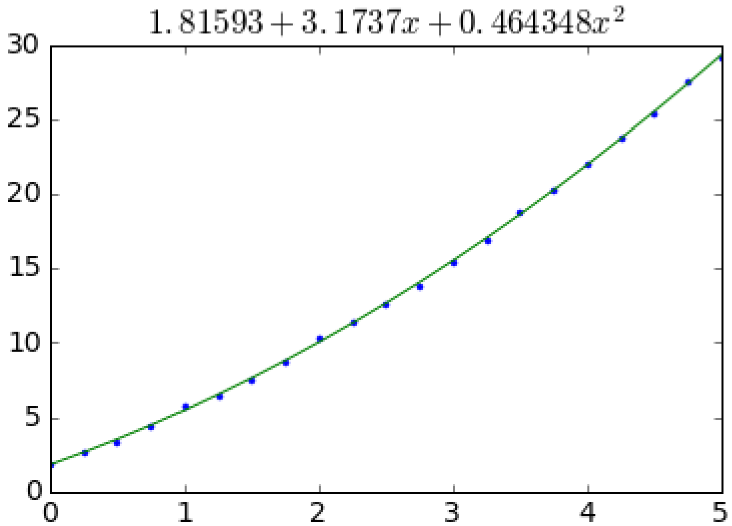
$$y = a + bx + cx^2.$$

Здесь имеется 3 неизвестных параметра a, b, c. Составим матрицу системы

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

И найдем решение методом наименьших квадратов

In [2]:
```
n = 21
x = np.linspace(0, 5, n)
y = 2 + 3 * x + 0.5 * x**2 + 0.2 * np.random.randn(len(x))
A = np.zeros((n, 3))
A[:, 0] = 1
A[:, 1] = x
A[:, 2] = x**2
f = y
a,b,c = np.linalg.solve(A.T.dot(A), A.T.dot(f))
plt.plot(x, y, '.')
plt.plot(x, a+b*x+c*x**2, '-')
plt.title('$%g + %g x + %g x^2$' % (a,b,c))
plt.show()
```



Приближение функций в смысле МНК

Пусть задана функция $f(x)$ и требуется построить ее наилучшее приближение вида

$$P_n(x) = c_0 + c_1 x + \dots + c_n x^n.$$

Неизвестными являются $c_0, \dots, c_n$. В каком смысле понимается наилучшее приближение? Например, по норме L_2:

$$\int_a^b |f(x) - P_n(x)|^2 dx \to \min_{c_0,\dots,c_n}$$

Найдем минимум по c_0, c_n, продифференцировав

$$\epsilon = \int_a^b |f(x) - P_n(x)|^2 dx = \int_a^b \left(f(x) - \sum_k c_k x^k\right)^2 dx$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial c_i} = 2\int_a^b \left(f(x) - \sum_k c_k x^k\right) x^i dx = 2\left[(f, x^i) - \sum_k c_k (x^k, x^i)\right] = 0$$

Таким образом, задача сводится к решению системы

$$\mathbf{\Gamma c} = \mathbf{g},$$

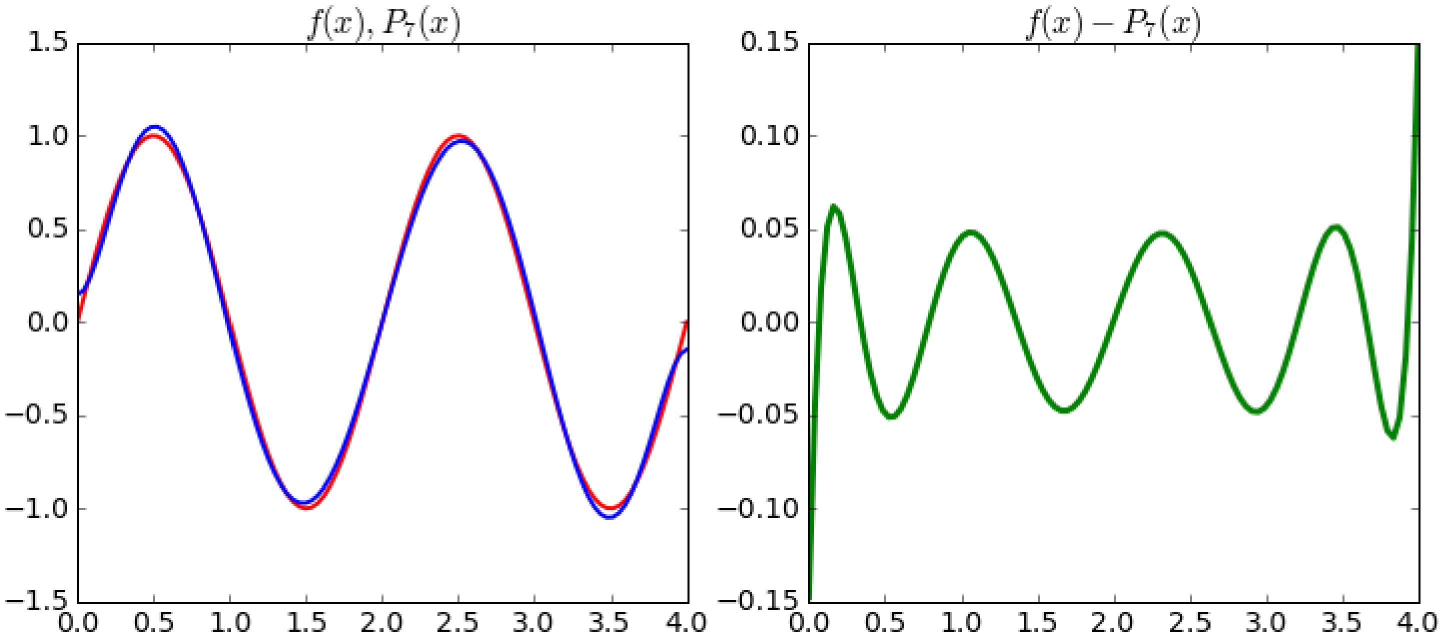
где

$$\Gamma_{ik} = (x^k, x^i) = \int_a^b x^k x^i dx = \int_a^b x^{i+k} dx$$

$$g_i = (f, x^i) = \int_a^b f(x) x^i dx$$

In [3]:
```
from scipy.integrate import quad
a = 0; b = 4; n = 8
def func(x): return np.sin(np.pi * x)
G = np.zeros((n, n))
g = np.zeros(n)
for i in range(n):
    for k in range(n):
        G[i, k], _ = quad(lambda x: x**(i+k), a, b)
    g[i], _ = quad(lambda x: x**i * func(x), a, b)

c = np.linalg.solve(G, g)
X = np.linspace(a, b, 100)
fig = plt.figure(figsize=(12, 5))
ax = fig.add_subplot(121)
ax.plot(X, func(X), 'r', lw=2)
ax.plot(X, np.array([c[i]*X**i for i in range(n)]).sum(axis=0), 'b', lw=2)
ax.set_title('$f(x), P_{%d}(x)$' % (n-1))
ax = fig.add_subplot(122)
ax.plot(X, func(X) - np.array([c[i]*X**i for i in range(n)]).sum(axis=0), 'g', lw=3)
ax.set_title('$f(x) - P_{%d}(x)$' % (n-1))
plt.show()
```



Выбор базиса

С точки зрения линейной алгебры нет разницы, по каким функциям раскладывать многочлен $P(x)$. Это могут быть $1, x, x^2, \dots$ или же любое семейство многочленов. Однако, выбор базиса влияет на полученную линейную систему для определения коэффициентов разложения. Для определенности возьмем $[a, b] = [0, 1]$.

$$\Gamma_{ik} = \int_0^1 x^{i+k} dx = \frac{1}{i+k+1}.$$

Эта матрица называется матрицей Гильберта и является классическим примером плохо обусловленной матрицы

In [4]:
```
from scipy.linalg import hilbert, svdvals
def cond2(A):
    s = svdvals(A);
    return s[0] / s[-1]
for n in range(5, 31, 5):
    H = hilbert(n)
    print('n = %d, mu_2(H_n) = %e' % (n, cond2(H)))
```

```
n = 5, mu_2(H_n) = 4.766073e+05
n = 10, mu_2(H_n) = 1.602447e+13
n = 15, mu_2(H_n) = 2.777622e+17
n = 20, mu_2(H_n) = 1.495701e+18
n = 25, mu_2(H_n) = 2.805899e+18
n = 30, mu_2(H_n) = 2.430912e+19
```

Ортогональные многочлены

Оказывается, можно выбрать такой базис из многочленов, что матрица $\mathbf{\Gamma}$ будет диагональной! Для этого требуется построить такое семейство многочленов $\{P_k(x)\}_{k=1}^n$, что

$$(P_k, P_m) = \int_a^b P_k(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0, & k \neq m \\ \star, & k = m \end{cases}$$

Такое семейство многочленов называется ортогональным.

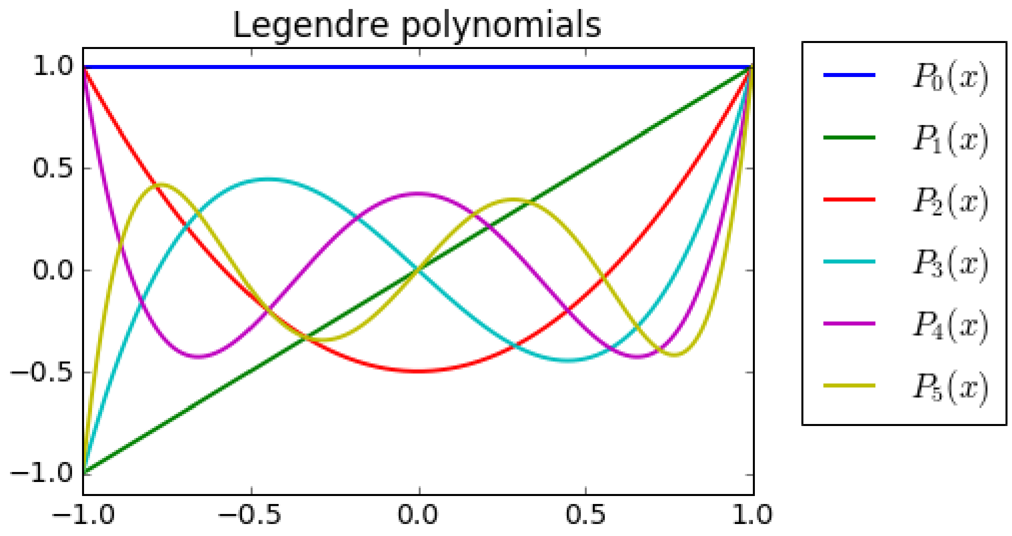
Для отрезка $[a, b] = [-1, 1]$ ортогональными многочленами будут многочлены Лежандра

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2}, \dots$$

$$P_{k+1} = \frac{2k+1}{k+1} x P_k(x) - \frac{k}{k+1} P_{k-1}(x)$$

$$(P_k, P_m) = \int_{-1}^1 P_k(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0, & k \neq m \\ \frac{2}{2k+1}, & k = m \end{cases}$$

In [5]:
```
from scipy.special import legendre
x = np.linspace(-1, 1, 1000)
for k in range(6):
    plt.plot(x, legendre(k)(x), label='$P_{%d}(x)$' % k, lw=2)
plt.title('Legendre polynomials')
plt.ylim(-1.1, 1.1)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.4, 1.05))
plt.show()
```



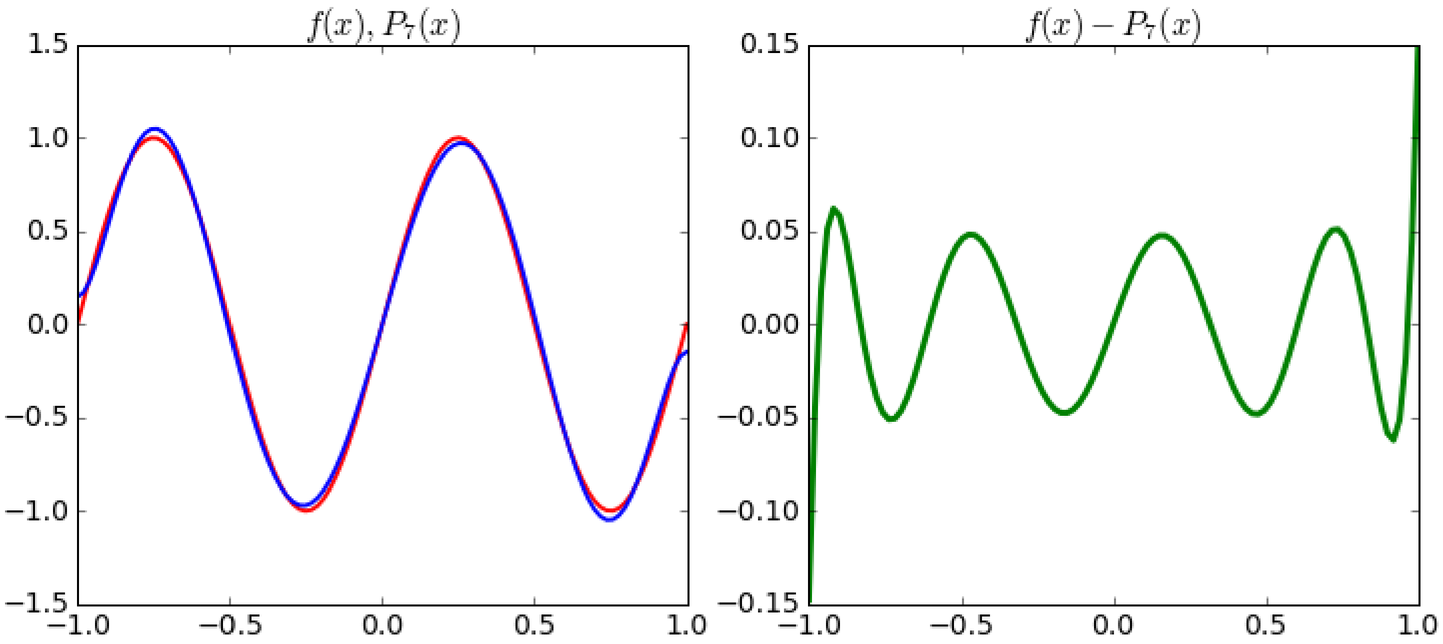
Ортогональные мнгочлены существенно упрощают приближение функции в смысле МНК. В этом случае коэффициенты разложения находятся явно

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^{n} c_k P_k(x)$$

$$\Gamma_{ik} = \int_a^b P_k(x) P_m(x) dx = \begin{cases} 0, & k \neq m \\ \int_a^b P_k(x)^2 dx, & k = m \end{cases}$$

$$c_k = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{1}{\int_a^b P_k(x)^2 dx} \int_a^b f(x) P_k(x) dx$$

In [6]:
```python
a = -1; b = 1; n = 8
def func(x): return np.sin(2 * np.pi * x)
g = np.zeros(n)
A = np.zeros(n)
for k in range(n):
    g[k], _ = quad(lambda x: legendre(k)(x) * func(x), a, b)
    A[k] = 2 / (2*k+1)
c = g / A
X = np.linspace(a, b, 100)
fig = plt.figure(figsize=(12, 5))
ax = fig.add_subplot(121)
ax.plot(X, func(X), 'r', lw=2)
ax.plot(X, np.array([c[i]*legendre(i)(X) for i in range(n)]).sum(axis=0), 'b', lw=2)
ax.set_title('$f(x), P_{%d}(x)$' % (n-1))
ax = fig.add_subplot(122)
ax.plot(X, func(X) - np.array([c[i]*legendre(i)(X) for i in range(n)]).sum(axis=0), 'g', lw=3)
ax.set_title('$f(x) - P_{%d}(x)$' % (n-1))
plt.show()
```



Наилушее приближение в других нормах

Минимизация ошибки в норме L_2 имеет существенный недостаток — максимальное отклонение сосредоточено у краев отрезка, а не рассредоточено равномерно по отрезку.

Данного недостатка лишено приближение в норме

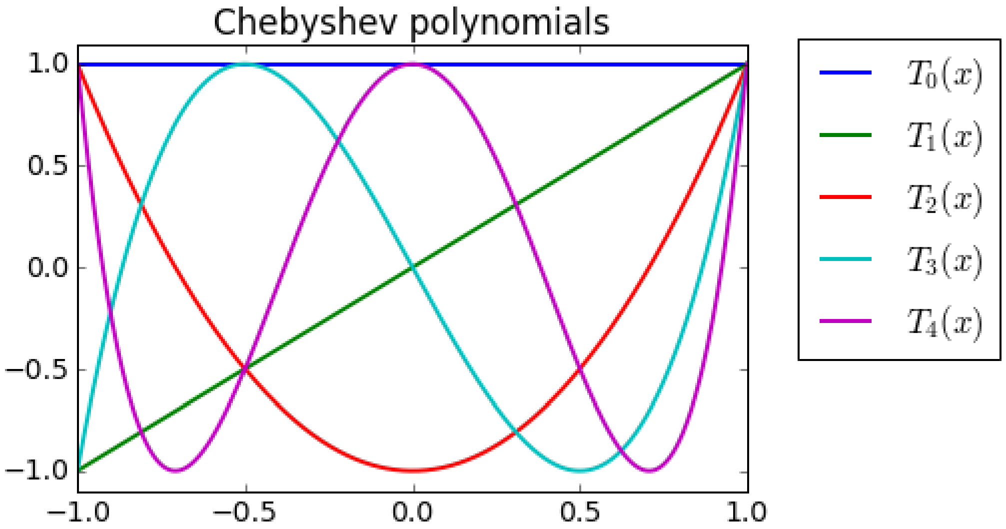
$$(f,g)=\int_a^b \frac{f(x)g(x)}{\sqrt{(x-a)(b-x)}}dx$$

Для данной нормы соответствующим ортогональным семейством будут многочлены Чебышева $T_n(x)$:

$$T_0(x)=1,;\ T_1(x)=x,;\ T_2(x)=2x^2-1,\dots$$
$$T_n(x)=\cos n\arccos x$$
$$\int_{-1}^{1}\frac{T_k(x)T_m(x)dx}{\sqrt{1-x^2}}=\begin{cases}0, & m\neq k\\ \pi, & m=k=0\\ \pi/2, & m=k\neq 0\end{cases}$$

In [7]:

```
from scipy.special import chebyt
x = np.linspace(-1, 1, 1000)
for k in range(5):
    plt.plot(x, chebyt(k)(x), label='$T_{%d}(x)$' % k, lw=2)
plt.title('Chebyshev polynomials')
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.4, 1.05))
plt.ylim(-1.1, 1.1)
plt.show()
```



В этом случае коэффициенты разложения вычисляются по той же формуле

$$c_k = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)},$$

то есть

$$c_0 = \frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)T_0(x)}{1-x^2}dx = \frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{1-x^2}dx$$
$$c_k = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)T_k(x)}{1-x^2}dx = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)\cos k \arccos x}{1-x^2}dx$$

In [8]:

```
a = -1; b = 1; n = 8
def func(x): return np.sin(2 * np.pi * x)
g = np.zeros(n)
A = np.zeros(n)
for k in range(n):
    g[k], _ = quad(lambda x: chebyt(k)(x) * func(x) / np.sqrt(1 - x**2), a, b)
    A[k] = np.pi / 2 if k > 0 else np.pi
c = g / A
X = np.linspace(a, b, 100)
fig = plt.figure(figsize=(12, 5))
ax = fig.add_subplot(121)
ax.plot(X, func(X), 'r', lw=2)
ax.plot(X, np.array([c[i]*chebyt(i)(X) for i in range(n)]).sum(axis=0), 'b', lw=2)
ax.set_title('$f(x), P_{%d}(x)$' % (n-1))
ax = fig.add_subplot(122)
ax.plot(X, func(X) - np.array([c[i]*chebyt(i)(X) for i in range(n)]).sum(axis=0), 'g', lw=3)
ax.set_title('$f(x) - P_{%d}(x)$' % (n-1))
plt.show()
```