En Küçük Kareler

T.C. Trakya Üniversitesi
Mühendislik Fakültesi
Elektrik - Elektronik Mühendisliği Bölümü
Kontrol Anabilim Dalı

Dr. Öğr. Üyesi Işık İlber Sırmatel
sirmatel.github.io

Kaynak (source)

Lecture Slides for Introduction to Applied Linear Algebra: Vectors, Matrices, and Least Squares.

Stephen Boyd, Lieven Vandenberghe

Konu listesi

1. Doğrusal denklemlerin geometrisi
2. En küçük kareler problemi
3. En küçük kareler probleminin çözümü
4. Uygulama örnekleri
5. En küçük norm çözümü

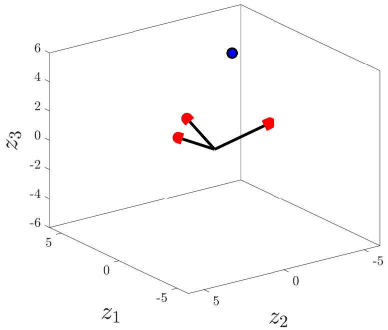
Bölüm 1

Doğrusal denklemlerin geometrisi

Doğrusal denklemlerin geometrisi, örnek 1

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -2 \\ 1 & 3 & -2 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$x = A^{-1}b = \begin{bmatrix} 0.417 & -0.083 & 0.333 \\ -0.25 & 0.25 & 0 \\ -0.167 & -0.167 & 0.167 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.333 \\ -2 \\ 0.667 \end{bmatrix}$$

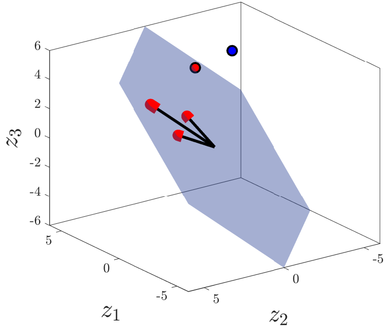


- kare denklem takımı (3 denklem, 3 bilinmeyen)
- A^{-1} mevcut
- $b \in \mathcal{R}(A)$
- $Ax = b$'nin eşsiz bir çözümü mevcut

Doğrusal denklemlerin geometrisi, örnek 2

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & 4 \\ 2 & 2 & 4 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{x}_{\mathsf{LS}} = A^\dagger b = \begin{bmatrix} 0.36 & -0.14 & 0.22 \\ -0.31 & 0.19 & -0.11 \\ 0.06 & 0.06 & 0.11 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.889 \\ -2.444 \\ 0.444 \end{bmatrix}$$

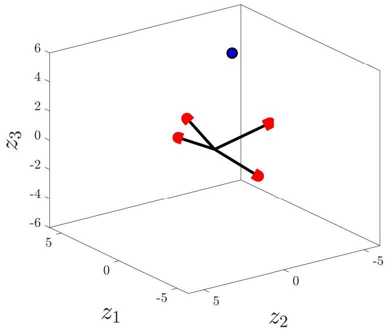


- kare denklem takımı (3 denklem, 3 bilinmeyen)
- A^{-1} mevcut değil
- $b \notin \mathcal{R}(A)$
- $Ax = b$'nin çözümü mevcut değil

Doğrusal denklemlerin geometrisi, örnek 3

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -2 & -1 \\ 1 & 3 & -2 & -2 \\ 2 & 2 & 2 & -2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{x}_{\mathsf{LN}} = A^{\dagger} b = \begin{bmatrix} 0.25 & -0.09 & 0.2 \\ -0.29 & 0.25 & -0.04 \\ -0.14 & -0.17 & 0.19 \\ -0.18 & -0.01 & -0.14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.17 \\ -2.32 \\ 0.88 \\ -1.27 \end{bmatrix}$$

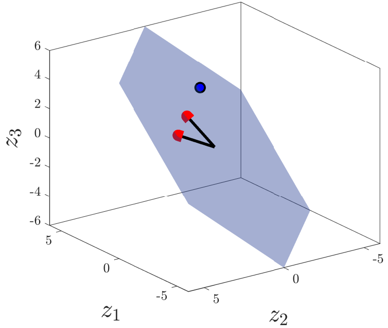


- eksik-belirli denklem takımı (3 denklem, 4 bilinmeyen)
- A^{-1} mevcut değil
- $b \in \mathcal{R}(A)$
- $Ax = b$'nin sonsuz adet çözümü mevcut

Doğrusal denklemlerin geometrisi, örnek 4

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$x = A^{\dagger}b = \begin{bmatrix} 0.417 & -0.083 & 0.333 \\ -0.25 & 0.25 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ -1.5 \end{bmatrix}$$

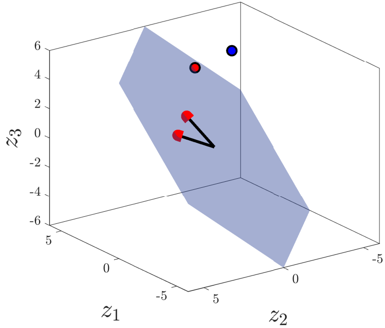


- aşırı-belirli denklem takımı (3 denklem, 2 bilinmeyen)
- A^{-1} mevcut değil
- $b \in \mathcal{R}(A)$
- $Ax = b$'nin eşsiz bir çözümü mevcut

Doğrusal denklemlerin geometrisi, örnek 5

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{x}_{\mathsf{LS}} = A^{\dagger} b = \begin{bmatrix} 0.417 & -0.083 & 0.333 \\ -0.25 & 0.25 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.333 \\ -2 \end{bmatrix}$$



- aşırı-belirli denklem takımı (3 denklem, 2 bilinmeyen)
- A^{-1} mevcut değil
- $b \notin \mathcal{R}(A)$
- $Ax = b$'nin çözümü mevcut değil

Bölüm 2

En küçük kareler problemi

En küçük kareler problemi

- $m \times n$ A matrisi uzun matris olsun, bu durumda $Ax = b$ denklemi aşırı-belirli olur
- çoğu b için $Ax = b$'yı sağlayan x yoktur
- en küçük kareler (*least squares*, LS) problemi: $\|Ax - b\|$'yi minimize eden x'i seç
- en küçük kareler problemi

  $$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|^2$$

  formunda bir optimizasyon problemidir
- $Ax - b$ terimine kalıntı (*residual*) denir ve r ile gösterilir: $r = Ax - b$

En küçük kareler problemi

- $\|Ax - b\|^2$ terimine amaç fonksiyonu (*objective function*) denir
- herhangi bir n-vektör x için

$$\|A\hat{x} - b\|^2 \leq \|Ax - b\|^2$$

  ise $\hat{x}$ en küçük kareler probleminin bir çözümüdür
- fikir: $\hat{x}$ kalıntının (0 olmasa da) mümkün olan en küçük değeri almasını sağlar
- en küçük kareler (veri uydurmada) bağlanım (*regression*) da denir

En küçük kareler problemi

- $\hat{x}$'e $Ax = b$'nin en küçük kareler yaklaşık çözümü (*least squares approximate solution*) denir
- $\hat{x}$'e bazen en küçük kareler anlamında $Ax = b$'nin çözümü denir ancak bu yanlıştır çünkü $\hat{x}$ $Ax = b$'nin çözümü değildir
- $\hat{x}$'nin $A\hat{x} = b$'i sağlaması gerekmez, ve genellikle de sağlamaz
- ancak $\hat{x}$ $A\hat{x} = b$'i sağlarsa en küçük kareler probleminin çözümüdür

Sütun yorumu

- $a_1, a_2, \ldots, a_n$ A'nın sütunları olsun
- en küçük kareler amaç fonksiyonu

$$\|Ax - b\|^2 = \|(x_1 a_1 + x_2 a_2 + \cdots + x_n a_n) - b\|^2$$

  şeklindedir
- dolayısıyla, en küçük kareler problemi, A'nın sütunlarının b'ye en yakın doğrusal bileşimini bulma problemidir
- $\hat{x}$ en küçük kareler probleminin bir çözümü ise

$$A\hat{x} = \hat{x}_1 a_1 + \hat{x}_2 a_2 + \cdots + \hat{x}_n a_n$$

  olarak verilen m-vektör, A'nın sütunlarının bütün doğrusal bileşimleri arasında b'ye en yakın olandır

Satır yorumu

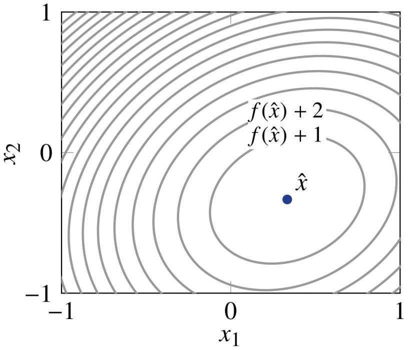
- $\tilde{a}_1^T, \tilde{a}_2^T, \ldots, \tilde{a}_n^T$ A'nın satırları olsun
- kalıntı bileşenleri (yani, kalıntı vektörü r'nin elemanları, kısaca: kalıntılar) $r_i = \tilde{a}_i^T x - b_i$ olarak yazılır
- en küçük kareler amaç fonksiyonu

$$\|Ax - b\|^2 = \sum_{i=1}^{m} r_i^2 = (\tilde{a}_1^T x - b_1)^2 + \cdots + (\tilde{a}_m^T x - b_m)^2$$

  (yani, kalıntıların karelerinin toplamı) şeklindedir
- dolayısıyla, en küçük kareler problemi, kalıntıların karelerinin toplamını minimize etme problemidir
  - $Ax = b$'yi çözmek bütün kalıntıları 0 yapmaktır
  - aşırı belirli olduğu için $Ax = b$'yi çözmek mümkün olmadığında en küçük kareler ile kalıntıların hepsinin küçük olmasına çalışılır

Örnek

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$



- $Ax = b$'nin çözümü yok

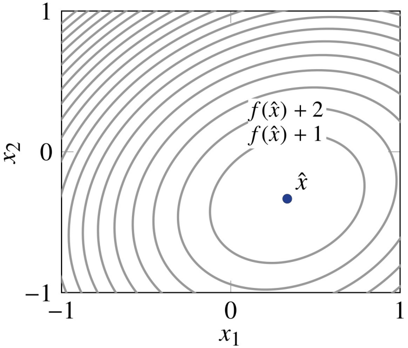
  - en küçük kareler problemi

$$\|Ax - b\|^2 = (2x_1 - 1)^2 + (-x_1 + x_2)^2 + (2x_2 + 1)^2$$

ifadesini minimize edecek x'i seçme problemidir

Örnek

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$



- en küçük kareler yaklaşık çözüm $\hat{x} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \end{bmatrix}^T$ şeklindedir (burada çözüm diferansiyel hesap (*calculus*) ile (yani, $\nabla \|Ax - b\|^2 = 0$'i çözerek) bulunabilir)
- $\|A\hat{x} - b\|^2 = \frac{2}{3}$, $\|Ax - b\|^2$'nin mümkün olan en küçük değeridir
- $A\hat{x} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{bmatrix}^T$ A'nın sütunlarının bütün doğrusal bileşimleri arasında b'ye en yakın olandır

Bölüm 3

En küçük kareler probleminin çözümü

En küçük kareler probleminin çözümü

- bir varsayımda bulunuyoruz: A'nın sütunları doğrusal bağımsız
- dolayısıyla, A'nın Gram matrisi $A^T A$ tersi alınabilirdir
- en küçük kareler probleminin eşsiz çözümü

$$\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b = A^\dagger b$$

- karşılaştırın: $x = A^{-1} b$ (tersi alınabilir A için $Ax = b$'nin çözümü)

Diferansiyel hesap ile türetme

en küçük kareler probleminin çözümünü diferansiyel hesap (gradyanı alıp 0'a eşitleme) kullanarak türetelim

- amaç fonksiyonunu $f(x)$ olarak tanımlayalım:

$$f(x) = \|Ax - b\|^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j - b_i \right)^2$$

- çözüm $\hat{x}$, $\nabla f(\hat{x}) = 0$'ı sağlar
- $f(x) = \|Ax - b\|^2 = (Ax - b)^T (Ax - b)$
- $f(x) = x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b$
- $\nabla f(\hat{x}) = 2A^T (A\hat{x} - b) = 0$
- $\hat{x}$, $(A^T A)\hat{x} = A^T b$'yi sağlar (buna, normal denklem (*normal equation*) denir)
- dolayısıyla: $\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$

Doğrudan teyit etme

- $\hat{x}$ en küçük kareler probleminin çözümü olsun: $\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$
- $\hat{x}$ çözüm olduğundan normal denklemi sağlar: $A^T(A\hat{x} - b) = 0$
- herhangi bir n-vektör x için:

$$
\begin{aligned}
\|Ax - b\|^2 &= \|(Ax - A\hat{x}) + (A\hat{x} - b)\|^2 \\
&= \|A(x - \hat{x})\|^2 + \|A\hat{x} - b\| + 2(A(x - \hat{x}))^T (A\hat{x} - b) \\
&= \|A(x - \hat{x})\|^2 + \|A\hat{x} - b\| + 2(x - \hat{x})^T \underbrace{A^T(A\hat{x} - b)}_{=0} \\
&= \|A(x - \hat{x})\|^2 + \|A\hat{x} - b\|^2
\end{aligned}
$$

- dolayısıyla, herhangi bir x için: $\|Ax - b\|^2 \geq \|A\hat{x} - b\|^2$
- $\|Ax - b\|^2 = \|A\hat{x} - b\|^2$ olursa $A(x - \hat{x}) = 0$ olur, bu da $x = \hat{x}$'i gerektirir (A'nın sütunları doğrusal bağımsız olduğundan, sadece $z = 0$ için $Az = 0$ olur)

LS yaklaşık çözümlerinin hesaplanması

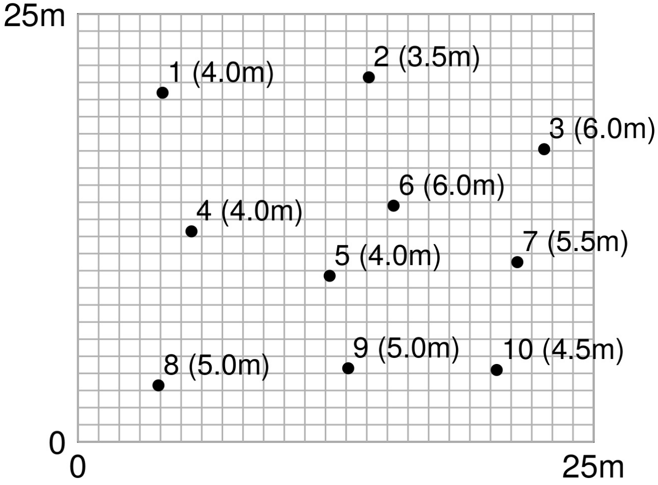
- A'nın QR ayrıştırmasını hesapla: $A = QR$ ($2mn^2$ flop)
- A'nın sütunları doğrusal bağımsız olduğundan QR ayrıştırması mevcuttur
- $\hat{x} = A^\dagger b = R^{-1}Q^T b$'yi hesaplamak için:
  - $Q^T b$'yi oluştur ($2mn$ flop)
  - geri yönde yerine koyma ile $\hat{x} = R^{-1}(Q^T b)$'yi hesapla (n^2 flop)
- toplam maliyet: yaklaşık $2mn^2$ flop
- bu, tersi alınabilir A için $Ax = b$'nin çözümünde kullanılan algoritmayla aynıdır
- ancak, A uzun matris olduğunda, algoritma en küçük kareler yaklaşık çözümü verir

Bölüm 4

Uygulama örnekleri

Aydınlatma

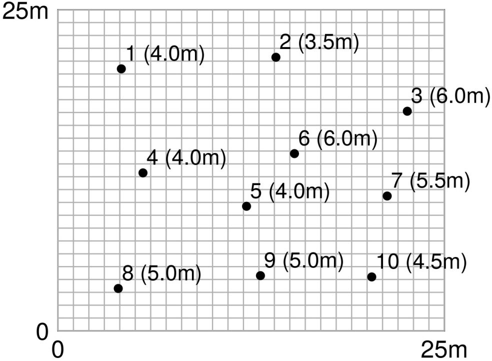
amaç: m bölgeye ayrılmış bir alanı istenen şekilde aydınlatmak için, konumları sabit n adet lambanın güçlerinin belirlenmesi



Aydınlatma

- sadece lamba j açık olduğunda (gücü 1, diğer lambalar kapalı) bölge i'deki aydınlatmayı A_{ij} ile gösterelim
- lamba j'nin gücünü x_j ile gösterelim
- bölge i'deki toplam aydınlatma $(Ax)_i$ olur
- bölge i için aydınlatma hedefini b_i ile gösterelim

Aydınlatma

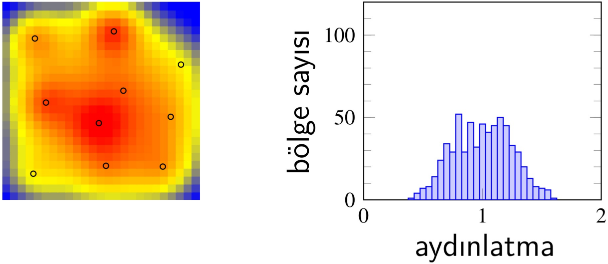


örnekteki alan için:
$m = 25^2 = 625$, $n = 10$
(dolayısıyla $Ax = b$'de 625 denklem ve 10 bilinmeyen var)

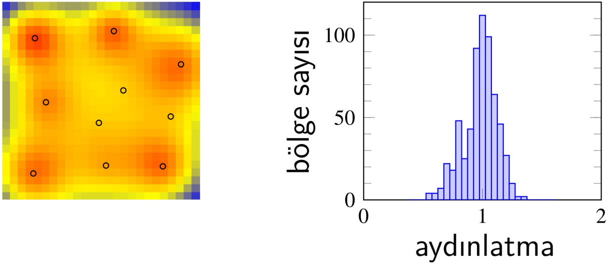
yandaki şekildeki noktalar lambaların konumlarını göstermektedir

Aydınlatma

- lambalar eşit güçte ($x = \mathbf{1}$)

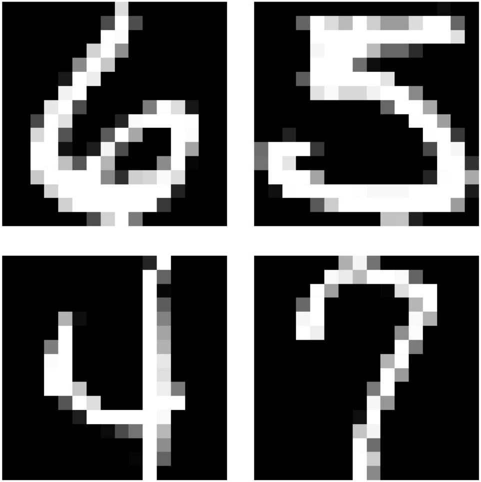


- en küçük kareler çözümü $\hat{x}$ ($b = \mathbf{1}$ için)



El yazısı rakam sınıflandırma

amaç: el yazısı rakam içeren bir görüntünün hangi rakamı gösterdiğini otomatik olarak belirlemek



El yazısı rakam sınıflandırma

- görüntüler (*image*) 16×16 piksel, 256-vektörler olarak temsil ediliyorlar
- değerler $[0, 1]$ aralığında (0 siyah, 1 beyaz)
- örneğin, "görüntüdeki rakam 0 mı?" diye sınıflandırma (*classification*) yapalım
- etiketler (*label*): görüntü 0 ise $y_i = 1$, değilse $y_i = -1$
- benzer bir veritabanı: MNIST database, ilgili bir yayın: LeCun, Yann, Léon Bottou, Yoshua Bengio, and Patrick Haffner. "Gradient-based learning applied to document recognition." Proceedings of the IEEE 86, no. 11 (1998): 2278-2324.

El yazısı rakam sınıflandırma

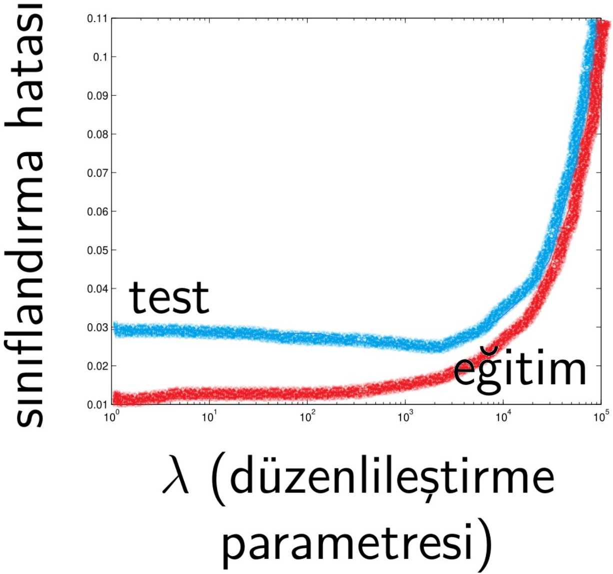
- Boole sınıflandırıcı (*Boolean classifier*):
  $\hat{y} = \mathrm{sign}(w^T x + v)$
- 256-vektör w ağırlık (*weight*), v kayma (*offset*)
- $y_i \approx \hat{y}_i = \mathrm{sign}(w^T x_i + v)$'yi sağlayan w ve v'yi bulmak istiyoruz
- eğitim veri kümesi (*training set*): (x_i, y_i) çiftleri (N adet)
- bu veri kümesi ile en küçük kareler problemi çözülerek

  $$\sum_{i=1}^{N} (w^T x_i + v - y_i)^2 + \lambda \|w\|^2$$

  ifadesini minimize eden w ve v seçilir
- test veri kümesi (*test set*) üzerinde sınıflandırıcı test edilir
- buradaki λ düzenlileştirme (*regularization*) parametresidir

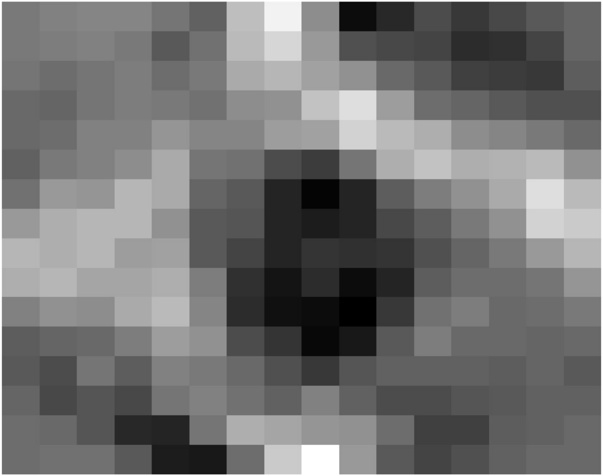
El yazısı rakam sınıflandırma

el yazısı rakam 0'ı tahmin ederken yapılan sınıflandırma hatası



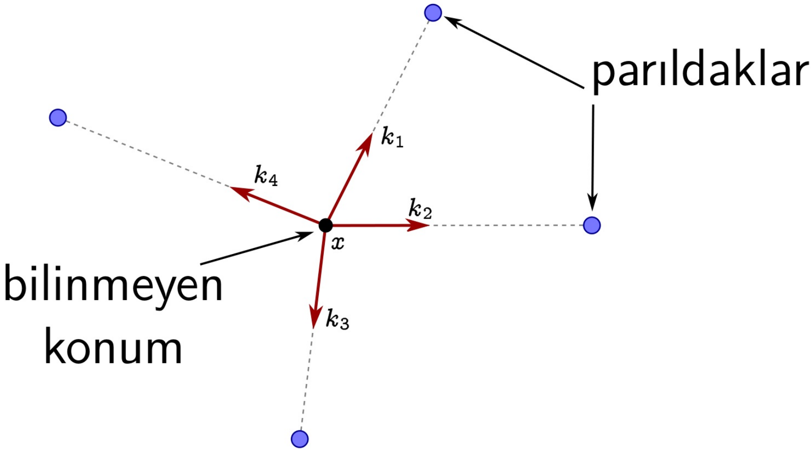
El yazısı rakam sınıflandırma

ağırlık vektörü w (en küçük kareler probleminin çözümü)



Erim ölçümleriyle yöngüdüm

amaç: m adet parıldaktan (*beacon*) gelen erim ölçümleri (*range measurements*) ile bilinmeyen bir n boyutlu konumun kestirilmesi (yöngüdüm (*navigation*))



Erim ölçümleriyle yöngüdüm

- erim ölçümleri $y \in \mathbb{R}^4$, ölçüm gürültüsü v

$$\underbrace{x_d = \begin{bmatrix} 5.59 \\ 10.58 \end{bmatrix}}_{\text{doğru konum}} \qquad \underbrace{y = \begin{bmatrix} -11.95 \\ -2.84 \\ -9.81 \\ 2.81 \end{bmatrix}}_{\text{ölçüm}} \qquad \underbrace{y = \begin{bmatrix} k_1^T \\ k_2^T \\ k_3^T \\ k_4^T \end{bmatrix} x + v}_{\text{model}}$$

- k_i: 0'dan parıldak i'ye doğru olan birim vektör
- yöngüdüm problemi: $y \in \mathbb{R}^4$ verilsin. $x \in \mathbb{R}^2$'yi kestirmek (*estimate*) istiyoruz
- en küçük kareler yöntemi ile kestirim $\hat{x}$'i hesaplayabiliriz:

$$\hat{x} = A^\dagger y = \begin{bmatrix} -0.23 & -0.48 & 0.04 & 0.44 \\ -0.47 & -0.02 & -0.51 & -0.18 \end{bmatrix} y = \begin{bmatrix} 4.95 \\ 10.26 \end{bmatrix}$$

Bölüm 5

En küçük norm çözümü

En küçük norm problemi

- $m \times n$ A matrisi geniş matris olsun, bu durumda $Ax = b$ denklemi eksik-belirli olur
- $Ax = b$'yı sağlayan sonsuz adet x vardır
- en küçük norm (*least norm*, LN) problemi: $Ax = b$'i sağlayan sonsuz x arasından $\|x\|$'yi minimize edeni seç
- en küçük norm problemi

$$\begin{aligned} \underset{x}{\text{minimize}} \quad & \|x\|^2 \\ \text{bağlı} \quad & Ax = b \end{aligned}$$

formunda bir optimizasyon problemidir

En küçük norm çözümü

- bir varsayımda bulunuyoruz: A'nın satırları doğrusal bağımsız
- dolayısıyla, AA^T tersi alınabilirdir
- en küçük norm probleminin eşsiz çözümü

$$\hat{x} = A^T(AA^T)^{-1}b = A^\dagger b$$

- karşılaştırın: $x = A^{-1}b$ (tersi alınabilir A için $Ax = b$'nin çözümü)

En küçük kareler ile karşılaştırma

en küçük norm:

- A **geniş** matris, **satır**ları doğrusal bağımsız
- A'nın sözde tersi: $A^\dagger = A^T(AA^T)^{-1}$ (A'nın bir **sağ** tersi)
- en küçük **norm** problemi (optimizasyon problemi)

$$\begin{array}{ll} \underset{x}{\text{minimize}} & \|x\|^2 \\ \text{bağlı} & Ax = b \end{array}$$

problemin çözümü: $\hat{x}_{\mathsf{LN}} = A^T(AA^T)^{-1}b = A^\dagger b$

en küçük kareler:

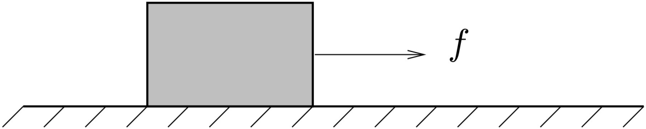
- A **uzun** matris, **sütun**ları doğrusal bağımsız
- A'nın sözde tersi: $A^\dagger = (A^TA)^{-1}A^T$ (A'nın bir **sol** tersi)
- en küçük **kareler** problemi (optimizasyon problemi)

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \|Ax - b\|^2$$

problemin çözümü: $\hat{x}_{\mathsf{LS}} = (A^TA)^{-1}A^Tb = A^\dagger b$

Örnek: Hareket planlama

amaç: cismin istenen hareketi yapmasını sağlayacak kuvvet yörüngeleri arasından en küçük normlu olanın bulunması



- cismin başlangıç konumu ve hızı: $y_1(0) = 0$, $y_2(0) = 0$
- cisme x_i kuvveti uygulanıyor $(i = 1, 2, \ldots, 10)$
- $t = 10$ anında istenen: $y_1(10) = 1$, $y_2(10) = 0$
- cismin hareketi: $y = Ax$, $A \in \mathbb{R}^{2\times 10}$
- cismin $t = 10$ anında istenen konum ve hıza ulaşmasını sağlayacak kuvvet yörüngeleri ($x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \ldots & x_{10} \end{bmatrix}^T$) arasından en küçük normlu olanı bulmak istiyoruz

Örnek: Hareket planlama