NMB - Oefenzitting 2: Conditie van kleinste kwadratenprobleem en stabiliteit van kleinste kwadratenalgoritmes

Hendrik Speleers

1 Pen en papier

Opgave 1. In het handboek wordt bij het onderzoeken van de conditie gebruik gemaakt van de parameter $\eta = \frac{\|A\|\|x\|}{\|y\|} = \frac{\|A\|\|x\|}{\|Ax\|}$. Men stelt daar $1 \leq \eta \leq \kappa(A)$. Toon dit aan. Voor welke x wordt de ondergrens (bovengrens) bereikt?

Oplossing.

$$\eta = \frac{\|A\|\|x\|}{\|Ax\|} \geq 1$$

volgt uit de definitie van de geïnduceerde matrixnorm $\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|$. *We kunnen deze definitie nogmaals gebruiken om te vinden dat*

$$\|x\| = \|A^+ Ax\| \leq \|A^+\|\|Ax\|$$

met A^+ *de veralgemeende inverse, en dus*

$$\eta = \frac{\|A\|\|x\|}{\|Ax\|} \leq \frac{\|A\|\|A^+\|\|Ax\|}{\|Ax\|} = \kappa(A)$$

Hierbij maakten we gebruik van de eigenschap $\kappa(A) = \|A^+\|\|A\|$.

De ondergrens *wordt bereikt als*

$$\begin{aligned}
\frac{\|A\|\|x\|}{\|Ax\|} &= 1 \\
&\Updownarrow \\
\|A\|\|x\| &= \|Ax\| \\
&\Updownarrow \\
\sigma_1\|x\| &= \|Ax\| \\
&\Updownarrow \quad A = U\Sigma V^T \\
\|U\Sigma V^T x\| &= \sigma_1\|x\| \\
&\Updownarrow \quad \textit{orthogonale transformatie bewaart norm} \\
\|\Sigma V^T x\| &= \sigma_1\|x\|
\end{aligned}$$

Oplossing (vervolg). *We weten dat de kolommen van V een basis vormen voor $\mathbb{R}^n$. We kunnen x dus voorstellen als*

$$x = Vz$$

Dit geeft

$$\begin{aligned}
&\Updownarrow \quad \textit{eigenschap 2-norm matrix}\\
\|\Sigma V^T V z\| &= \sigma_1 \|Vz\|\\
&\Updownarrow\\
\|\Sigma z\| &= \sigma_1 \|z\|\\
&\Updownarrow\\
(\sigma_1 z_1)^2 + \cdots + (\sigma_n z_n)^2 &= \sigma_1^2 (z_1^2 + \cdots + z_n^2)\\
&\Updownarrow\\
(\sigma_1^2 - \sigma_1^2) z_1^2 + \cdots + (\sigma_n^2 - \sigma_1^2) z_n^2 &= 0\\
&\Updownarrow\\
z_1 &\in \mathbb{R}\\
z_2 = \ldots = z_n &= 0
\end{aligned}$$

De ondergrens geldt dus als x een veelvoud is van de rechter singuliere vector horende bij de grootste singuliere waarde.

De bovengrens *wordt bereikt als*

$$\begin{aligned}
\frac{\|A\|\|x\|}{\|Ax\|} &= \kappa(A)\\
&\Updownarrow \quad \textit{definitie } \kappa\\
\|A\|\|x\| &= \|A\|\|A^+\|\|Ax\|\\
&\Updownarrow \quad \textit{eigenschap 2-norm matrix}\\
\sigma_1 \|x\| &= \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \|Ax\|\\
&\Updownarrow\\
\sigma_n \|x\| &= \|Ax\|
\end{aligned}$$

Op dezelfde manier als hierboven kunnen we afleiden dat dit impliceert dat x een veelvoud is van de rechter singuliere vector horende bij de kleinste singuliere waarde.

Opgave 2. Zij $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ met $m > n$ en rang n. De matrix A heeft een singuliere waardenontbinding $A = U\Sigma V^T$. De matrix U_1 bevat de eerste n kolommen van U, de matrix U_2 de volgende $m-n$. Bewijs dat range$(A) = $ range(U_1).

Oplossing.

$$A = \left[\begin{array}{c|c} U_1 & U_2 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] V^T$$

$$\text{range}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax, \forall x \in \mathbb{R}^n\}$$

$$\text{range}(U_1) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = U_1 z_1, \forall z_1 \in \mathbb{R}^n\}$$

Oplossing (vervolg). *We weten dat de kolommen van U een basis vormen voor $\mathbb{R}^m$. We kunnen dus elke vector $y \in \mathbb{R}^m$ ontbinden als*

$$y = Uz = U_1 z_1 + U_2 z_2$$

Het volstaat nu aan te tonen dat

$$y = Ax \Rightarrow z_2 = 0$$

Gebruik makend van de orthogonaliteit van de kolommen van U vinden we

$$\begin{aligned}
z_1 &= U_1^T y = U_1^T A x \\
&= U_1^T \left[\begin{array}{c|c} U_1 & U_2 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] V^T x \\
&= \left[\begin{array}{c|c} I & 0 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] V^T x \\
&= \Sigma_1 V^T x
\end{aligned}$$

Op analoge wijze vinden we

$$\begin{aligned}
z_2 &= U_2^T y = U_2^T A x \\
&= U_2^T \left[\begin{array}{c|c} U_1 & U_2 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] V^T x \\
&= \left[\begin{array}{c|c} 0 & I \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] V^T x \\
&= 0
\end{aligned}$$

Opgave 3. In de cursus komen verschillende algoritmen aan bod om een kleinste kwadratenbenadering te berekenen. De keuze van een bepaald algoritme voor een bepaald probleem is niet altijd even eenvoudig. Zoek met behulp van de resultaten van les 10, 18 en 19 (Trefethen & Bau) een antwoord op volgende vraagjes. (Hou ook rekening met de rekencomplexiteit van elk van de algoritmen.)

a) Wat veroorzaakt het verschil in complexiteit tussen Householder triangularisatie en gewijzigde Gram-Schmidt?

Oplossing. *Beide algoritmen hebben n stappen. Gram-Schmidt werkt in elke stap met vectoren van lengte m. Bij Householder wordt in de eerste stap gewerkt met vectoren van lengte m. Bij de volgende stap wordt dat $m - 1$, enz.*

b) Zou je eerder Householder triangularisatie of gewijzigde Gram-Schmidt orthogonalisatie gebruiken om een QR-factorisatie te bepalen van de coëfficiëntenmatrix A?

Oplossing. *Householder. Gram-Schmidt produceert een matrix $\tilde{Q}$ waarvan de kolommen niet nauwkeurig orthogonaal zijn.*

c) Zou je van mening veranderen indien je zou werken met de uitgebreide matrix $\begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix}$?

Oplossing. *De matrix Q wordt in dit geval niet opgesteld. Householder en GGS produceren even nauwkeurige oplossingen. GGS is iets duurder. Voor $m \gg n$ hebben de algoritmen asymptotisch dezelfde complexiteit. GGS is eenvoudiger te paralleliseren.*

d) Welke algoritmes zou je wel of niet gebruiken in de volgende gevallen en waarom?

- de matrix A is goed geconditioneerd, bv. $\kappa(A) \approx 1$
- de oplossingsvector b ligt dicht bij de kolomruimte van A en A is slecht geconditioneerd
- de oplossingsvector ligt niet dicht bij de kolomruimte en bovendien is je matrix slecht geconditioneerd

Oplossing.

- *Zowel normaalvergelijkingen, gewijzigde Gram-Schmidt als Householder kunnen gebruikt worden. Oplossen van de NVn vraagt maar ongeveer de helft van het rekenwerk van GGS of H.*
- *De NVn hebben conditie $\kappa(A^TA)$. In de conditie van het kleinste-kwadratenprobleem komt die term niet voor omdat θ klein is. Met NVn krijgen we dus resultaten die veel slechter zijn dan GGS of H, die een oplossing kunnen berekenen die overeenkomt met de conditie van het kleinste-kwadratenprobleem.*
- *In dit geval is de conditie van het kleinste-kwadratenprobleem bijzonder slecht en zullen alle algoritmen een even slecht resultaat opleveren.*

2 Op de computer

2.1 Conditie

We gaan het theoretische resultaat

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa_{b\to x}\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \quad \text{met} \quad \kappa_{b\to x} = \frac{\kappa(A)}{\eta\cos(\theta)}$$

verifiëren aan de hand van experimenten.

We werken met een overgedetermineerd stelsel waarvan we de oplossing goed kennen. Hiervoor gaan we als volgt te werk. Kies een diagonaalmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{10\times 7}$ en een vector $c \in \mathbb{R}^{10}$. Het overgedetermineerde stelsel

$$\Sigma z = c \qquad \text{met} \qquad z \in \mathbb{R}^7$$

kan opgelost worden met een relatieve fout van de grootte-orde van de machine-nauwkeurigheid. Kies $U \in \mathbb{R}^{10\times 10}$ en $V \in \mathbb{R}^{7\times 7}$ twee willekeurige orthogonale matrices en stel

$$A = U\Sigma V^T, \qquad b = Uc, \qquad x = Vz.$$

Uiteraard maakt men afrondingsfouten bij de numerieke berekening van A, b en x, maar doordat vermenigvuldigen met een orthogonale matrix goed geconditioneerd is, worden deze afrondingsfouten niet opgeblazen en mag men zeggen dat A, b en x berekend zijn met een relatieve fout van de grootte-orde van de machine-nauwkeurigheid.

Opgave 4. Schrijf een functie die als argumenten een vector van singuliere waarden, een rechterlid c en twee willekeurige orthogonale matrices U en V neemt. De resultaten zijn A, b, x en de theoretische waarde voor $\kappa_{b\to x}$.

Enkele MATLAB commando's die van pas kunnen komen: `help`, `diag`, `rand`, `randn`, `orth`.

Oplossing. *Zie* `opgave4.m`.

Opgave 5. Gebruik de functie die je gemaakt hebt om achtereenvolgens problemen op te stellen met $\kappa(A) = 1, 10^3, 10^6$. Maak gebruik van het feit dat het conditiegetal van een matrix het quotiënt van de grootste en de kleinste singuliere waarde is. Bereken voor elk probleem de relatieve perturbaties $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}$, $\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$ en de experimentele waarde $\kappa_{\text{exp}} = \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} / \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$. Beschouw telkens drie verschillende perturbaties van b:

1. Een willekeurige b en δb.
2. De vector b gelijk aan de linker singuliere vector horend bij de *grootste* singuliere waarde en de perturbatie δb gelijk aan de linker singuliere vector horend bij de *kleinste* singuliere waarde.
3. De vector b gelijk aan de linker singuliere vector horend bij de *kleinste* singuliere waarde en de perturbatie δb gelijk aan de linker singuliere vector horend bij de *grootste* singuliere waarde.

Je kan een probleem opstellen met de functie uit de vorige opgave, het rechterlid perturberen en dan het stelsel oplossen met Matlab. Een andere mogelijkheid is om zowel het oorspronkelijke als het geperturbeerde probleem op te stellen met je functie.

Je schrijft best een Matlab bestand dat je dan kan veranderen wanneer je een nieuwe Σ, b of δb wil gebruiken. Je kan ook een Matlab functie schrijven die gegeven een vector van singuliere waarden de overeenkomstige drie rijen uit de tabel hieronder genereert.

$\kappa(A)$	η	$\kappa_{b\to x}$	$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$	κ_{exp}
1					
10^3					
10^6					

Oplossing.

1. *De experimentele waarde κ_{exp} is kleiner dan de theoretische.*
2. *Dit is het slechtst mogelijke geval. De fout op x zal groot zijn. De experimentele waarde κ_{exp} zal gelijk zijn aan de theoretische.*
3. *Dit is een gunstig geval. De fout op x zal erg klein zijn. De experimentele waarde κ_{exp} zal veel kleiner zijn dan de theoretische.*

Zie `opgave5.m`, `start_opgave5.m`.

Opgave 6. Kies δb ook eens respectievelijk loodrecht en evenwijdig op de kolomruimte van A. Wat zie je dan? Waarom is dit zo?

Oplossing. *Perturbaties loodrecht op het bereik van A hebben geen invloed. De perturbatie op x zal nul zijn en dus ook de experimentele waarde κ_{exp}.*
Zie `opgave5.m`, `start_opgave5.m`.

2.2 Conditiegetal van de coëfficiëntenmatrix

Opgave 7. Uit de formules voor de conditie van kleinste kwadratenbenaderingen blijkt dat het belangrijk is om slecht geconditioneerde coëficiëntenmatrices te vermijden. Dit is iets waar jij controle over hebt! Stel: je wil een functie benaderen door een eerstegraadsveelterm. Je beschikt over punten met als abscissen

t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7
1.01	1.02	1.03	1.04	1.05	1.06	1.07

De voor de hand liggende keuze van basis voor de lineaire veelterm is $\phi_1(t) = 1$ en $\phi_2(t) = t$. Vergelijk het gedrag van deze basis met een meer zorgvuldig geconstrueerde basis $\tilde{\phi_1}(t) = 1$ en $\tilde{\phi_2}(t) = 30(t - 1.04)$. Deze twee basissen geven aanleiding tot coëfficiëntenmatrices

$$A = \begin{bmatrix} \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \end{bmatrix} \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix} \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \\ \underline{\hspace{1cm}} & \underline{\hspace{1cm}} \end{bmatrix}$$

Wat zijn de conditiegetallen? Waarom is de ene matrix beter dan de andere?

Oplossing. $\kappa(A) \approx 104$, $\kappa(\tilde{A}) \approx 1.67$. *Het conditiegetal van A is dus veel groter dan dat van $\tilde{A}$. De kolommen van A zijn bijna afhankelijk. Bij $\tilde{A}$ wordt dit vermeden door basisfuncties te kiezen die gecentreerd zijn op het interval en goed gescaleerd.*