Çok Amaçlı En Küçük Kareler

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

Dr. Öğr. Üyesi İşık 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. Çok amaçlı en küçük kareler problemi

2. Örnek: Kontrol

3. Örnek: Kestirme ve evirme

4. Örnek: Düzenlileştirilmiş veri uydurma

Bölüm 1

Çok amaçlı en küçük kareler problemi

Çok amaçlı en küçük kareler problemi

lacktriangle norm kare formunda k adet amaç fonksiyonu

$$J_1 = ||A_1x - b_1||^2, \dots, J_k = ||A_kx - b_k||^2$$

şeklinde verilsin. bunların hepsinin küçük değerler almasını sağlayacak şekilde n-vektör x'i seçmek istiyoruz

- $ightharpoonup A_i \ m_i \times n \ \text{matris,} \ b_i \ m_i\text{-vekt\"or} \ (i=1,\ 2,\ \ldots,\ k)$
- ▶ bu probleme çok amaçlı (multi-objective) en küçük kareler problemi denir
- ▶ bu problem

$$\underset{x}{\mathsf{minimize}} \quad \sum_{i=1}^{k} \|A_i x - b_i\|^2$$

formunda bir çok amaçlı optimizasyon problemidir

Çok amaçlı en küçük kareler problemi

- ▶ bu tip problemlere çok ölçütlü (multi-criterion) problem de denir
- $ightharpoonup J_i$ terimleri çok amaçlı optimizasyon problemindeki amaçlardır (*objectives*)
- ightharpoonup x'i herhangi bir J_i 'yi minimize edecek şekilde seçebiliriz, ancak biz hepsinin küçük değerler almasını sağlayacak bir x bulmak istiyoruz

Ağırlıklı toplam amaç fonksiyonu

ightharpoonup pozitif ağırlıklar $(\lambda_1, \ldots, \lambda_k)$ seçelim ve

$$J = \lambda_1 J_1 + \ldots + \lambda_k J_k$$

= $\lambda_1 ||A_1 x - b_1||^2 + \ldots + \lambda_k ||A_k x - b_k||^2$

şeklinde bir "ağırlıklı toplam amaç" (weighted sum objective) fonksiyonu oluşturalım

- ightharpoonup J'yi minimize edecek x'i seçmek istiyoruz
- $ightharpoonup \lambda_1 = 1$ olarak alıp J_1 'e "birincil amaç" (primary objective) diyebiliriz
- $lacktriangleq \lambda_i$ 'lerin yorumlanması: J_i 'nin küçük değerler almasını birincil amaca oranla ne kadar önemsiyorsak λ_i 'yı o kadar büyük seçmeliyiz
- ▶ iki ölçütlü bir problem için amaç fonksiyonu:

$$J_1 + \lambda J_2 = ||A_1 x - b_1||^2 + \lambda ||A_2 x - b_2||^2$$

İstiflemeyle ağırlıklı toplam minimizasyonu

ağırlıklı toplam amaç fonksiyonunu şu şekilde yazalım

$$J = \left\| \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} (A_1 x - b_1) \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_k} (A_k x - b_k) \end{bmatrix} \right\|^2$$

buradan, amaç fonksiyonu

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} A_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_k} A_k \end{bmatrix}, \qquad \tilde{b} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} b_1 \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_k} b_k \end{bmatrix}$$

tanımlarıyla $J = \|\tilde{A}x - \tilde{b}\|$ formunda oluşur

► dolayısıyla *J*'yi minimize etmek için standart (tek ölçütlü) en küçük kareler yöntemini kullanabiliriz

Ağırlıklı toplam çözümü

- $lackbox{$\widehat{A}'$}$ nın sütunlarının doğrusal bağımsız olduğunu varsayalım
- ► $J = \|\tilde{A}x \tilde{b}\|$ için en küçük kareler çözümü:

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

$$= (\lambda_1 A_1^T A_1 + \dots + \lambda_k A_k^T A_k)^{-1} (\lambda_1 A_1^T b_1 + \dots + \lambda_k A_k^T b_k)$$

- $ightharpoonup \hat{x}'$ i \tilde{A}' nın QR ayrıştırmasıyla hesaplayabiliriz
- $lackbox{ }A_i$ matrisleri geniş olabilir, veya sütunları doğrusal bağımlı olabilir

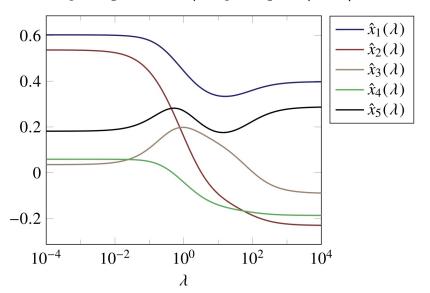
Optimal ödünleşim eğrisi

- lacktriangle amaçları J_1 ve J_2 olan iki ölçütlü probleme bakalım
- $ightharpoonup \hat{x}(\lambda) \ J_1 + \lambda J_2$ 'nin minimize eden x değeri olsun
- ▶ $J_1(z) < J_1(\hat{x}(\lambda))$ ve $J_2(z) < J_2(\hat{x}(\lambda))$ eşitsizliklerini sağlayan bir z noktası mevcut değilse $\hat{x}(\lambda)$ 'ya "Pareto optimal" denir
- Farklı şekilde söylersek: her iki amaç için de $\hat{x}(\lambda)$ 'ten daha iyi bir x noktası yoktur
- ▶ optimal ödünleşim eğrisi (optimal trade-off curve):

$$(J_1(\hat{x}(\lambda)), J_2(\hat{x}(\lambda))) \quad (\lambda > 0 \text{ için})$$

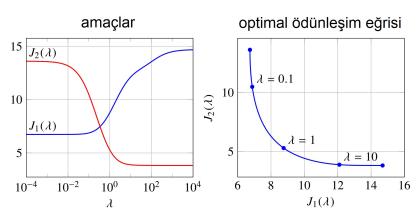
Optimal ödünleşim eğrisi - örnek

 $10 \times 5 \ A_1$ ve A_2 matrisleri için $J_1 + \lambda J_2$ amaçlı bir problem



Optimal ödünleşim eğrisi - örnek

 10×5 A_1 ve A_2 matrisleri için $J_1 + \lambda J_2$ amaçlı bir problem



Çok amaçlı en küçük kareleri kullanmak

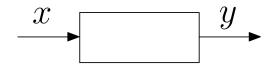
aşağıdaki prosedürü uygulayarak elimizdeki problemi bir çok amaçlı en küçük kareler problemi olarak formüle edebiliriz

- ► birincil amacı belirleyelim
 - birincil amaç, minimize etmek istediğimiz temel büyüklüktür
- ▶ bir veya daha fazla ikincil (secondary) amaç seçelim
 - bunlar mümkünse küçük olmasını istediğimiz büyüklüklerdir
 - örneğin: x'in uzunluğu, pürüzlülüğü, verilen bir noktaya uzaklığı
- ▶ beğendiğimiz (veya hoş görebildiğimiz) bir $\hat{x}(\lambda)$ bulana kadar ağırlıkları (λ_i) ayarlayalım. örneğin, $J_1 + \lambda J_2$ amaçlı iki ölçütlü bir problem için:
 - J_2 fazla büyükse λ 'yı arttır
 - J_1 fazla büyükse λ 'yı azalt

Örnek: Kontrol

Bölüm 2

Kontrol



- ightharpoonup n-vektör x: girişler (inputs) veya eylemler (actions)
- ightharpoonup m-vektör y: çıkışlar (outputs) veya sonuçlar (results)
- ▶ giriş ve çıkışlar arası ilişkiyi

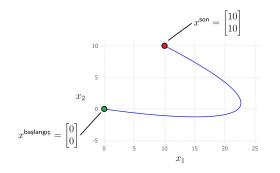
$$y = Ax + b$$

formundaki afin giriş-çıkış modeli ile ifade ediyoruz

- ▶ bu model, gerçek bir sistemin bir matematik modeli
- ▶ sistem: uygulanan girişlere çıkışlar ile tepki veren "şey"
- ightharpoonup A ve b biliniyor (analitik modellerden, uydurmadan vb.)
- ► kontrol problemi (optimizasyon bakış açısıyla): x'in ve y'nin fonksiyonu olan birden fazla amaç fonksiyonunu optimize edecek şekilde (y'yi belirleyen) x'i seçmek

Örnek: Minimum enerjili durum geçişi

standart (tek ölçütlü) problem formülasyonu



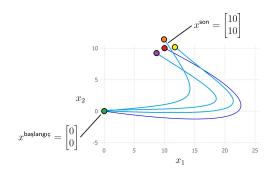
minimize
$$\|u\|^2$$
 bağlı $x_{t+1} = Ax_t + Bu_t$, $t=1,\,2,\,\ldots,\,T-1$ $x_0 = x^{\text{başlangıç}}$ $x_T = x^{\text{son}}$

Çok amaçlı kontrol

- ▶ tipik birincil amaç: $J_1 = \|y y^{\text{des}}\|^2$ (burada y^{des} verilen bir hedef çıkış)
- ► tipik ikincil amaçlar:
 - x küçük olsun: $J_2 = ||x||^2$
 - x bir nominal girişten uzak olmasın: $J_2 = ||x x^{\mathsf{nom}}||^2$

Örnek: Minimum enerjili durum geçişi

çok amaçlı (iki ölçütlü) problem formülasyonu



minimize
$$\|x_T - x^{\mathsf{son}}\|^2 + \lambda \|u\|^2$$
 bağlı $x_{t+1} = Ax_t + Bu_t, \quad t = 1, 2, \ldots, T-1$ $x_0 = x^{\mathsf{başlangiç}}$

Dayanıklı kontrol

- dayanıklı (robust) kontrol: kontrol yöntemlerini belirsizliklere (uncertainties) dayanıklı hale getirmek amacıyla belirsizlik modellerinin kontrol yöntemi formülasyonuna eklenmesini içeren kontrol dalı
- (genel olarak) dayanıklı XYZ: XYZ yöntemlerini belirsizliklere dayanıklı hale getirmek amacıyla belirsizlik modellerinin yöntem formülasyonuna eklenmesini içeren XYZ dalı (örnekler: dayanıklı optimizasyon, dayanıklı istatistik, dayanıklı bağlanım)

Dayanıklı kontrol

- not: dayanıklı kontrolde birçok yöntem vardır, burada en küçük kareler formunda çok sade bir yöntemi inceliyoruz
- ► K adet farklı giriş-çıkış modelimiz (veya, senaryomuz) var:

$$y^{(k)} = A^{(k)}x + b^{(k)}, \qquad k = 1, 2, \dots, K$$

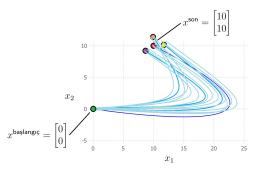
- ▶ bu modeller sistemdeki belirsizliği temsil eder
- ightharpoonup k. model doğru ise $y^{(k)}$ giriş x için olan çıkıştır
- bütün modeller üzerinden ortalama birincil amaç:

$$\frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \|y^{(k)} - y^{\mathsf{des}}\|^2$$

- ightharpoonup x için de terimler ekleyebiliriz, örneğin $\lambda ||x||^2$
- ▶ bu problem formülasyonu bütün senaryolarda iyi başarım gösteren bir x değeri seçmemizi sağlar

Örnek: Minimum enerjili durum geçişi

dayanıklı, çok amaçlı (iki ölçütlü) problem formülasyonu

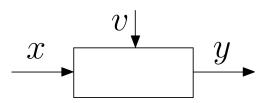


$$\begin{split} & \underset{u}{\text{minimize}} & \quad \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \|x_{T}^{(k)} - x^{\text{son}}\|^{2} + \lambda \|u\|^{2} \\ & \text{bağlı} \quad k = 1, \, 2, \, \dots, \, K \text{ için:} \\ & \quad x_{t+1}^{(k)} = A x_{t}^{(k)} + B u_{t}, \quad t = 1, \, 2, \, \dots, \, T-1 \\ & \quad x_{0}^{(k)} = x^{\text{başlangıç}} \end{split}$$

Bölüm 3

Örnek: Kestirme ve evirme

Kestirme (estimation)



- ► *n*-vektör *x* kestirmek istediğimiz parametreleri içerir
- ightharpoonup m-vektör y ölçümleri (measurements) içerir
- ► m-vektör v (bilinmeyen) gürültü (noise) veya ölçüm hataları terimlerini içerir
- ▶ ölçüm modeli:

$$y = Ax + v$$

- ightharpoonup n imes n matris A parametrelerle ölçümleri ilişkilendirir
- temel en küçük kareler kestirme problemi: v'nin küçük olduğunu (ve A'nın sütunlarının bağımsız olduğunu) varsayalım. $J_1 = ||Ax y||^2$ 'yi minimize eden x'i bularak kestirme (x'i tahmin etme) yapabiliriz

Düzenlileştirilmiş evirme (inversion)

- ➤ x ile ilgili önsel bilgiyi (prior information) kestirme problemine dahil ederek çok daha iyi sonuçlar elde edebiliriz. x ile ilgili önsel bilgiye örnekler:
 - -x çok büyük olmamalı (||x|| küçük olmalı) -x pürüzsüz olmalı (||Dx|| küçük olmalı)
- bunları ikincil amaçlar olarak ifade edelim:
 - $-J_2 = ||x||^2$ (Tikhonov düzenlileştirmesi (*regularization*)) $-J_2 = ||Dx||^2$ ($||Dx||^2$: Dirichlet enerjisi)
- ▶ problem: $J_1 + \lambda J_2$ amacını minimize etmek
- ightharpoonup beğendiğimiz sonuçları elde edinceye kadar λ 'yı değiştirebiliriz
- \blacktriangleright λ 'nın fonksiyonu olarak $\hat{x}(\lambda)$ eğrisine düzenlileştirme yolu (regularization path) denir
- lacktriangle Tikhonov düzenlileştirmesi ile, A matrisinin sütunları doğrusal bağımlı (örneğin, A geniş matris) olduğunda bile çözüm bulunabilir

- ► x: bir görüntüyü
- ► A matrisi: bulanıklaştırma (blurring) operatörü
- ightharpoonup y = Ax + v; y: bulanıklaştırılmış, gürültülü bir görüntü
- ► en küçük kareler netleştirme (de-blurring) problemi:

$$||Ax - y||^2 + \lambda(||D_{\mathsf{v}}x||^2 + ||D_{\mathsf{h}}x||^2)$$

amacını minimize edecek x'i seçmek (burada D_v ve D_h dikey ve yatay fark alma (differencing) operatörleri)

lacktriangle λ netleştirilen görüntünün pürüzsüzleştirme ayarıdır

bulanıklaştırılmış, gürültülü görüntü



 $\lambda = 0.007$ ile düzenlileştirilmiş evirme ile netleştirilmiş görüntü



kaynak (source): NASA

düzenlileştirme yolu (örnekler)

$$\lambda = 10^{-6}$$



$$\lambda = 10^{-4}$$



kaynak (source): NASA

düzenlileştirme yolu (örnekler)

$$\lambda = 10^{-2} \qquad \qquad \lambda = 1$$



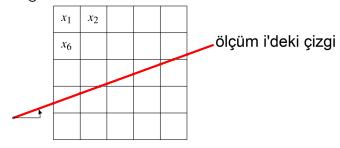


kaynak (source): NASA

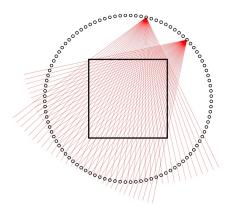
- ➤ x: n adet vokselden (veya pikselden) oluşan, ilgi bölgesindeki (region of interest) büyüklüklerin değerleri
- ightharpoonup y = Ax + v; y: bölge içinden geçen çizgiler üzerindeki integrallerin ölçümleri

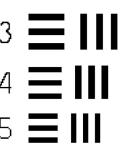
$$y_i = \sum_{i=1}^n A_{ij} x_j + v_i$$

 $lackbox{$\blacktriangleright$} A_{ij}$: ölçüm i'deki çizgiyle voksel j'nin kesişiminin uzunluğu



- ► en küçük kareler yöntemini kullanarak tomografik geriçatma (reconstruction) yapmak istiyoruz
- ightharpoonup birincil amaç: $||Ax y||^2$
- ▶ düzenlileştirme terimleri, *x* ile ilgili önsel bilgileri içerir ve bunları problem formülasyonuna eklememizi sağlar
- örneğin, eğer x bölge üzerinde pürüzsüz şekilde değişiyorsa, her vokseli kendi komşularına bağlayan çizge için Dirichlet enerjisini düzenlileştirme terimi olarak kullanırız





- ▶ sol tarafta: 4000 çizgi (100 nokta, nokta başına 40 çizgi)
- ► sağ tarafta: soldaki kare bölgeye yerleştirilen obje
- ▶ ilgi bölgesi 10000 piksele ayrılmış durumda

$$\lambda = 10^{-2}$$
3 = 111
4 = 111
5 = 111

$$\lambda = 10^{-1}$$

$$= 10^{-1}$$

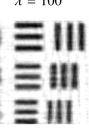
$$\lambda = 1$$



$$\lambda = 5$$

$$\lambda = 10$$

$$\lambda = 100$$



Bölüm 4

Örnek: Düzenlileştirilmiş veri uydurma

Düzenlileştirme ihtiyacının nedeni

• $f_1(x) = 1$ ile $(y \approx f(x) \text{ bağıntısı için})$

$$\hat{f}(x) = \theta_1 f_1(x) + \dots + \theta_p f_p(x)$$

modeli için veri uydurma problemini ele alalım

- \bullet θ_i , $\hat{f}(x)$ 'in $f_i(x)$ 'e duyarlılığıdır (duyarlılık)
- lacktriangle dolayısıyla, $heta_i$ 'in büyük olması modelin $f_i(x)$ 'e çok duyarlı olması anlamına gelir
- (θ_1 istisna çünkü $f_1(x) = 1$ sabit)
- ightharpoonup sonuç olarak, $\theta_2,\,\theta_3,\,\dots\theta_p$ değerlerinin çok büyük olmasını istemeyiz

Düzenlileştirilmiş veri uydurma

- Pelimizde $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(N)}, y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{(N)}$ şeklinde bir eğitim veri kümesi olsun
- \blacktriangleright veri kümesi üzerinde uydurma hatasını $A\theta-y$ ile ifade edelim
- düzenlileştirilmiş veri uydurma problemi:

$$||A\theta - y||^2 + \lambda ||\theta_{2:p}||^2$$

amacını minimize edecek şekilde θ 'yı seçmek

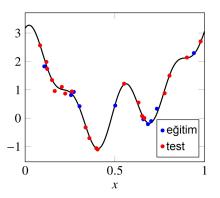
- \blacktriangleright λ ($\lambda > 0$): düzenlileştirme parametresi
- $ightharpoonup \hat{y} = X^T \beta + \nu \mathbf{1}$ formundaki bağlanım modeli için

$$||X^T\beta + \nu \mathbf{1} - y||^2 + \lambda ||\beta||^2$$

amacı minimize edilir

 \blacktriangleright λ bir test veri kümesi üzerinde geçerleme ile seçilir

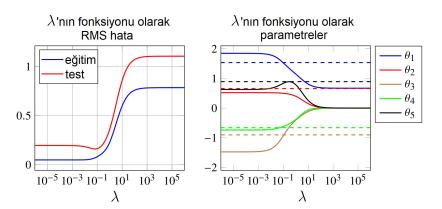
Düzenlileştirilmiş veri uydurma - Örnek



- ► siyah çizgi: yapay veri oluşturmak için kullanılan eğri
- ▶ 10 mavi nokta: eğitim, 20 kırmızı nokta: test
- ▶ 5 parametreli bir model uyduruyoruz (ω_k ve ϕ_k veriliyor):

$$\hat{f}(x) = \theta_1 + \sum_{k=1}^{4} \theta_{k+1} \cos(\omega_k x + \phi_k)$$

Düzenlileştirilmiş veri uydurma - Örnek



- \blacktriangleright minimum test RMS hata değeri $\lambda=0.08$ ile elde ediliyor
- lacktriangle λ 'yı arttırınca parametrelerin $(heta_2, \ldots heta_5)$ değerleri azalıyor
- ► kesikli çizgiler gerçek parametre değerleri
- ightharpoonup 0.08'e yakın λ için kestirilen parametreler gerçeğe yakın