

Lineær algebra  
Kursusgang 5

## Mindste kvadraters metode og Cholesky dekomposition

Vi ønsker at finde en mindste kvadraters løsning til det (inkonsistente) ligningssystem

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

hvor  $A$  er en  $m \times n$  matrix.

Vi betragter derfor normalligningen

$$A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}.$$

Matricen  $A^T A$  er en symmetrisk  $n \times n$  matrix som er altså er diagonaliserbar med egenværdier  $\geq 0$ .

Hvis normalligningen ikke har frie variable så er alle  $A^T A$ 's egenværdier  $> 0$ .

Vi betragter derfor en matrix  $A$  (matricen  $A^T A$  på forrige side) som er

- kvadratisk ( $n \times n$ ),
- symmetrisk ( $A^T = A$ ) og
- positiv definit (egenværdierne er  $> 0$ ).

## Cholesky dekomposition

Vi ønsker nu at skrive matricen

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

som et produkt

$$A = U^T U,$$

hvor

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} .$$

MATLAB:

`chol(A)`

beregner Cholesky dekomposition  $U$

Betragt først  $3 \times 3$  matricer.

$$\text{Lad } A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \text{og } U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix},$$

og antag at  $A = U^T U$ .

Så er

$$a_{11} = u_{11}^2$$

$$a_{12} = u_{11}u_{12}$$

$$a_{13} = u_{11}u_{13}$$

$$a_{22} = u_{12}^2 + u_{22}^2$$

$$a_{23} = u_{12}u_{13} + u_{22}u_{23}$$

$$a_{33} = u_{13}^2 + u_{23}^2 + u_{33}^2.$$

Da vi ønsker at  $u_{11}, u_{22}, u_{33}$  skal være positive får vi

$$\begin{aligned} u_{11} &= \sqrt{a_{11}} & u_{12} &= \frac{a_{12}}{u_{11}} & u_{13} &= \frac{a_{13}}{u_{11}} \\ u_{22} &= \sqrt{a_{22} - u_{12}^2} & u_{23} &= \frac{a_{23} - u_{12}u_{13}}{u_{22}} \\ u_{33} &= \sqrt{a_{33} - u_{13}^2 - u_{23}^2} \end{aligned}$$

Man kan bevise at når  $A$  er positiv definit så er alle udtryk, der tages kvadratrod af, positive.

Hvis  $A$  er en  $4 \times 4$  positiv definit matrix så beregnes  $U$  ved:

$$\begin{aligned} u_{11} &= \sqrt{a_{11}} & u_{12} &= \frac{a_{12}}{u_{11}} & u_{13} &= \frac{a_{13}}{u_{11}} & u_{14} &= \frac{a_{14}}{u_{11}} \\ u_{22} &= \sqrt{a_{22} - u_{12}^2} & u_{23} &= \frac{a_{23} - u_{12}u_{13}}{u_{22}} & u_{24} &= \frac{a_{24} - u_{12}u_{14}}{u_{22}} \\ u_{33} &= \sqrt{a_{33} - u_{13}^2 - u_{23}^2} & u_{34} &= \frac{a_{34} - u_{13}u_{14} - u_{23}u_{24}}{u_{33}} \\ u_{44} &= \sqrt{a_{44} - u_{14}^2 - u_{24}^2 - u_{34}^2} \end{aligned}$$



For en generel  $n \times n$  matrix  $A$  beregnes  $U$  på følgende måde:  
Vi beregner én række ad gangen: række 1, række 2, ....

I første række er  $u_{11} = \sqrt{a_{11}}$  og  $u_{1\ell} = \frac{a_{1\ell}}{u_{11}}$ , for  $\ell \geq 2$ .

I anden række er  $u_{22} = \sqrt{a_{22} - u_{12}^2}$  og  $u_{2\ell} = \frac{a_{2\ell} - u_{12}u_{1\ell}}{u_{22}}$ , for  $\ell \geq 3$ .

Når rækkerne  $1, \dots, k-1$  så beregnes række  $k$  på følgende måde:

$$u_{kk} = \sqrt{a_{kk} - u_{1k}^2 - u_{2k}^2 - \dots - u_{k-1,k}^2}$$

og

$$u_{k\ell} = \frac{a_{k\ell} - u_{1k}u_{1\ell} - \dots - u_{k-1,k}u_{k-1,\ell}}{u_{kk}},$$

for  $\ell \geq k + 1$ .

## Cholesky dekomposition og mindste kvadraters metode

Vi vender tilbage til normalligningen

$$A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}.$$

Vi finder en Cholesky dekomposition

$$A^T A = U^T U,$$

hvor  $U$  er en øvre triangulær matrix og kan dermed skrive normalligningen som

$$U^T U \mathbf{x} = \mathbf{y},$$

hvor  $\mathbf{y} = A^T \mathbf{b}$ .

Vi kan løse ligningen

$$U^T(U\mathbf{x}) = \mathbf{y}$$

ved at sætte  $\mathbf{z} = U\mathbf{x}$  og løse  
først

$$U^T\mathbf{z} = \mathbf{y}$$

og derefter

$$U\mathbf{x} = \mathbf{z}.$$

Disse ligninger kan let løses uden brug af rækkeoperationer, da  $U$  er triangulær.

Lad  $\hat{\mathbf{x}}$  være en mindste kvadraters løsning til ligningssystemet  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  og lad

$$\hat{\mathbf{r}} = A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}$$

være residual vektoren.

Vi beregner kvadratsummen af residualerne (det er denne størrelse der minimeres ved mindste kvadraters metode):

$$\varphi = \hat{\mathbf{r}}^T \hat{\mathbf{r}} = (A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b})^T (A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \hat{\mathbf{x}}^T (A^T A\hat{\mathbf{x}} - A^T \mathbf{b}) - \mathbf{b}^T A\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}^T \mathbf{b}.$$

Da  $\hat{\mathbf{x}}$  er løsning til normalligningen  $A^T A\hat{\mathbf{x}} - A^T \mathbf{b} = \mathbf{0}$  er

$$\varphi = \hat{\mathbf{r}}^T \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{b}^T \mathbf{b} - \mathbf{b}^T A\hat{\mathbf{x}}.$$

Dette tal er positivt. Sæt

$$s = \sqrt{\varphi}.$$

(Dette er længden af vektoren  $\hat{\mathbf{r}}$ .)

Lad nu den øvre triangulær matrix  $U$  og vektoren  $\mathbf{z}$  opfylde

$$A^T A = U^T U \quad \text{og} \quad U^T \mathbf{z} = A^T \mathbf{b}.$$

Sæt

$$U_2 = \begin{bmatrix} U & \mathbf{z} \\ \mathbf{0} & s \end{bmatrix}.$$

Så er

$$U_2^T U_2 = \begin{bmatrix} U^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{z}^T & s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & \mathbf{z} \\ \mathbf{0} & s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^T U & U^T \mathbf{z} \\ (U^T \mathbf{z})^T & \mathbf{z}^T \mathbf{z} + s^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^T A & A^T \mathbf{b} \\ (A^T \mathbf{b})^T & \mathbf{b}^T \mathbf{b} \end{bmatrix}.$$

Da  $\mathbf{z} = (U^T)^{-1} A^T \mathbf{b}$  er

$$\mathbf{z}^T \mathbf{z} = \mathbf{b}^T A U^{-1} (U^T)^{-1} A^T \mathbf{b} = \mathbf{b}^T A (U^T U)^{-1} A^T \mathbf{b} =$$

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

ifølge normalligningen.

Dermed er

$$\mathbf{z}^T \mathbf{z} + s^2 = \mathbf{b}^T A \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} - \mathbf{b}^T A \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b}^T \mathbf{b}.$$

$U_2^T U_2$  er altså Cholesky dekomposition af

$$\begin{bmatrix} A^T A & A^T \mathbf{b} \\ (A^T \mathbf{b})^T & \mathbf{b}^T \mathbf{b} \end{bmatrix}$$

og  $U_2$  kan derfor bestemmes ved hjælp af algoritmen til beregning af Cholesky dekomposition.

Tallet  $s$  på den sidste diagonalplads i  $U_2$  opfylder altså at  $s^2$  er kvadratsummen af residualerne.

## Eksempel

Mellem fem punkter A, B, C, D, E er der målt følgende højdeforskelle:

Fra punkt	Til punkt	Højdeforskel
B	A	8
B	C	2
B	E	5
C	A	7
C	D	1
D	A	6
D	E	4
E	A	3

Sæt

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 8 \\ 2 \\ 5 \\ 7 \\ 1 \\ 6 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix},$$

og find mindste kvadraters løsning til

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$



Vi skal bruge

$$A^T A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 3 \end{bmatrix},$$

$$A^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 24 \\ -15 \\ -6 \\ -9 \\ 6 \end{bmatrix}$$

og

$$\mathbf{b}^T \mathbf{b} = 204$$

Vi udregner Cholesky dekomposition af  $A^T A$

$$U = \begin{bmatrix} 2.0 & -0.500 & -0.500 & -0.500 & -0.500 \\ 0.0 & 1.66 & -0.754 & -0.151 & -0.754 \\ 0.0 & 0.0 & 1.48 & -0.926 & -0.554 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.37 & -1.37 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \end{bmatrix}.$$

**Problem:** Matricen  $A^T A$  er ikke positiv definit.

Men udregning af Cholesky dekompositionen går godt fordi det kun er det sidste diagonalelement der er 0.

Hvis der ikke er frie variable i løsningen så er  $A^T A$  er positiv definit.

Vi ser også på følgende matrix

$$\begin{bmatrix} A^T A & A^T \mathbf{b} \\ (A^T \mathbf{b})^T & \mathbf{b}^T \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 24 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & -15 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 & -6 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 & -9 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 3 & 6 \\ 24 & -15 & -6 & -9 & 6 & 204 \end{bmatrix}.$$

**Stort problem:** Forsøg på at udregne Cholesky dekomposition af denne matrix fører til division med 0, idet  $u_{55} = 0$ .

Vi får nu oplyst at E er et fikspunkt med højde 10.

Vi sætter så

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 8 \\ 2 \\ -5 \\ 7 \\ 1 \\ 6 \\ -6 \\ 13 \end{bmatrix},$$

og betragter ligningen

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

Vi udregner

$$\begin{bmatrix} A^T A & A^T \mathbf{b} \\ (A^T \mathbf{b})^T & \mathbf{b}^T \mathbf{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & 34 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -5 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & -6 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & 1 \\ 34 & -5 & -6 & 1 & 384 \end{bmatrix}.$$

Vi finder Cholesky decomposition af denne matrix

$$U_2 = \begin{bmatrix} 2.0 & -0.500 & -0.500 & -0.500 & 17.0 \\ 0.0 & 1.66 & -0.754 & -0.151 & 2.11 \\ 0.0 & 0.0 & 1.48 & -0.926 & 2.77 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.37 & 9.04 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.10 \end{bmatrix}.$$

Vi ser at Cholesky dekompositionen af  $A^T A$  er

$$U = \begin{bmatrix} 2.0 & -0.500 & -0.500 & -0.500 \\ 0.0 & 1.66 & -0.754 & -0.151 \\ 0.0 & 0.0 & 1.48 & -0.926 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.37 \end{bmatrix},$$

og at

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} 17.0 \\ 2.11 \\ 2.77 \\ 9.04 \end{bmatrix},$$

er løsningen til ligningen  $U^T \mathbf{z} = A^T \mathbf{b}$ .

Den mindste kvadraters løsning til  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  er løsning  $\hat{\mathbf{x}}$  til ligningen  $U\mathbf{x} = \mathbf{z}$ .

Vi får

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 12.80 \\ 4.60 \\ 6.00 \\ 6.60 \end{bmatrix} .$$

Desuden ser vi at kvadratsummen af residualerne er  $1.10^2 = 1.20$ .

## Vægtet mindste kvadraters metode

Find vægtet mindste kvadraters løsning til

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

med vægtmatrix  $C$ .

Normalligning

$$A^T C A \mathbf{x} = A^T C \mathbf{b}.$$

Vi ser på matricen

$$\begin{bmatrix} A^T C A & A^T C \mathbf{b} \\ (A^T C \mathbf{b})^T & \mathbf{b}^T C \mathbf{b} \end{bmatrix}$$

og dennes Cholesky dekomposition

$$U_2 = \begin{bmatrix} U & \mathbf{z} \\ \mathbf{0} & s \end{bmatrix}.$$



$\hat{\mathbf{x}}$  er løsning til  $U\mathbf{x} = \mathbf{z}$

og  $s^2$  er den vægtede kvadratsum af residualer.