



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Tomáš Cepko

Porovnanie priamych regularizačných metód založených na najmenších štvorcoch pre úlohy zatažené šumom

Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Iveta Hnětynková,
Ph.D.

Studijní program: Obecná matematika

Praha 2023

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Predovšetkým dakujem pani doc. RNDr. Ivete Hnětynkovej, Ph.D. za užitočné rady a pripomienky, ktorými ma sprevádzala počas písania bakalárskej práce. Veľká vďaka taktiež za ochotu, čas a trpezlivosť pri konzultáciách.

Ďalej by som sa chcel na tomto mieste poďakovať rodine a priateľom za podporu pri doterajšom štúdiu.

Název práce: Porovnanie priamych regularizačných metód založených na najmenších štvorcach pre úlohy zaťažené šumom

Autor: Tomáš Cepko

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí bakalárske práce: doc. RNDr. Iveta Hnětynková, Ph.D., Katedra numerické matematiky

Abstrakt: V práci sa budeme zaoberať inverznou lineárnou aproximačnou úlohou $\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}$, kde je naším cieľom nájsť čo najlepšiu aproximáciu \mathbf{x} neznámeho presného riešenia. Špeciálne sa sústredíme na tzv. rank-deficient a ill-posed úlohy, ktoré sú veľmi zle podmienené a citlivé na možný náhodný šum prítomný v \mathbf{b} . K riešeniu takýchto úloh potom musíme použiť regularizačné metódy, ktoré túto citlivosť potlačia. Hlavným cieľom práce bude získať ucelený prehľad o priamych metódach T-SVD, T-TLS a Tichonovskej regularizácii, a analyzovať ich úzku spätosť s klasickými metódami najmenších štvorcov. Jeden z možných prístupov je formulovať tieto regularizačné metódy ako tzv. filtračné. Takýmto spôsobom si ich budeme implementovať pre numerické experimenty. Súčasťou práce bude numerické porovnanie týchto metód na vybraných úlohách z Regularizačného Toolboxu a v aplikačnej úlohe rekonštrukcie obrazu.

Klíčová slova: ill-posed problém, šum, regularizácia, najmenšie štvorce, svd

Title: Comparison of direct regularization methods based on least squares for problems corrupted by noise

Author: Tomáš Cepko

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: doc. RNDr. Iveta Hnětynková, Ph.D., Department of Numerical Mathematics

Abstract: In this thesis we are going to deal with the inverse linear approximation problem $\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}$, where our goal is to find the best approximation \mathbf{x} of the unknown exact solution. We are going to especially focus on the so-called rank-deficient and ill-posed problems, which are very ill-conditioned and sensitive to possible random noise present in \mathbf{b} . To solve these problems, we must use regularization methods, which suppress this sensitivity. The main goal of this thesis is to get a comprehensive overview of direct methods T-SVD, T-TLS and Tikhonov regularization, and analyse their close connection with classical least squares methods. One possible approach is to formulate these regularization methods as so-called filtering. In this way we implement them for numerical experiments. This thesis will also include a numerical comparison of these methods for selected problems from the Regularization Toolbox and in the application problem of image reconstruction.

Keywords: ill-posed problem, noise, regularization, least squares, svd

Obsah

Úvod	2
Použité značenie a skratky	4
1 Lineárne ill-posed úlohy	5
1.1 Základné pojmy a nástroje	5
1.2 Inverzné úlohy, šum	7
1.3 Naivné riešenie	9
2 Metódy najmenších štvorcov	15
2.1 Metóda LS	15
2.2 Metóda TLS	16
2.3 Scaled TLS	18
3 Regularizačné metódy	19
3.1 Filtračné regularizačné metódy	19
3.1.1 Truncated-SVD	20
3.1.2 Truncated-TLS	21
3.1.3 Tichonovská regularizácia	25
3.2 Iteračné regularizačné metódy	27
3.3 Výber regularizačného parametra	28
3.4 Numerické porovnanie skúmaných metód	28
3.4.1 Implementácia metód	30
3.4.2 Numerické experimenty	32
4 Rekonštrukcia obrazu	36
Záver	43
Zoznam použitej literatúry	44

Úvod

Uvažujme lineárnu aproximačnú úlohu

$$\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}, \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m,$$

kde \mathbf{A} , alebo \mathbf{x} sú neznáme. K potrebe skúmania takýchto úloh sme motivovaní mnohými aplikáciami v rôznych odvetviach reálneho života, napríklad v medicíne, geológii, astronómii, pozri (Hansen, 1998, str. 4–6), (Hansen, 2010, str. 1–7, kap. 7), (Van Huffel a Vandewalle, 1991, str. 5–18), (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 1, 11), (Hansen, Nagy a O’Leary, 2006, kap. 1), a referencie v nich.

Tieto úlohy nie je možné všeobecne riešiť ako klasické sústavy lineárnych algebraických rovníc, nakoľko ich riešenie nemusí existovať. Preto využívame metódy najmenších štvorcov, kedy opravujeme maticu alebo (v nevylučujúcom význame) vektor pravej strany, o ktorých predpokladáme, že sú zatažené chybami. Pomocou týchto metód potom aproximujeme riešenie danej úlohy, pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 2–7), (Björck, 1996), (Golub a Van Loan, 1980), (Van Huffel a Vandewalle, 1991).

Špeciálne sa v našej práci budeme zaoberať inverznou úlohou, kedy sú dané matica \mathbf{A} reprezentujúca model závislosti vstupných a výstupných dát, a vektor \mathbf{b} reprezentujúci výstupné dáta, ktorý môže byť navyše zatažený náhodným šumom. Potom hľadáme neznámy vektor \mathbf{x} , ktorý reprezentuje pôvodné dáta. Tieto úlohy často vznikajú diskretizáciou tzv. Fredholmových integrálnych rovníc a klasické metódy najmenších štvorcov nám nedávajú dobrú aproximáciu ich riešenia, pozri (Hansen, 2010, kap. 2–3). Je to z toho dôvodu, že matica modelu týchto úloh je zvyčajne veľmi zle podmienená a tieto tzv. ill-posed úlohy sú veľmi citlivé na prítomný šum, ktorého vplyv je potrebné potláčať. Vtedy hovoríme o regularizácii úlohy a riešime ju špeciálnymi regularizačnými metódami, pozri (Hansen, 1998, kap. 3–6), (Fierro, Golub, Hansen a O’Leary, 1997), (Hansen, 2010, kap. 4–6), a referencie v nich.

Budeme postupovať nasledujúcim spôsobom.

V Kapitole 1 pripomenieme najdôležitejšie pojmy a nástroje z lineárnej algebry a numerickej maticovej analýzy, ktoré budeme ďalej využívať. Vyzdvihneme najmä singulárny rozklad a vetu o aproximácii matice maticou nižšej hodnosti. Ďalej si na základe naštudovanej literatúry predstavíme problematiku inverzných rank-deficient a ill-posed úloh zatažených šumom. Na príklade naivného riešenia si vysvetlíme, aké problémy s týmito úlohami spojené budeme musieť riešiť. Doplňme aj odhad aproximácie riešenia z perturbačnej teórie a všetky zavedené pojmy si ilustrujeme v krátkom experimente.

V Kapitole 2 si zadefinujeme problémy najmenších štvorcov (LS) a úplných najmenších štvorcov (TLS). Na základe naštudovanej literatúry zhrnieme analýzu existencie a jednoznačnosti ich riešenia, a možnosti numerického výpočtu. Potom si stručne priblížime zovšeobecnenie známe ako škálované úplné najmenšie štvorce.

V Kapitole 3, ktorá bude nosnou časťou našej práce, budeme skúmať priame regularizačné metódy, konkrétne T-SVD, T-TLS a Tichonovskú regularizáciu.

Zameriame sa na ich súvislosť s metódami najmenších štvorcov. S využitím znalostí z predchádzajúcich kapitol si budeme toto úzke prepojenie podrobne pre jednotlivé metódy analyzovať. Potom si tieto metódy zapíšeme ako tzv. filtračné metódy. Regularizované riešenie úlohy vyjadríme s využitím filtračných faktorov. Tie si pre metódu Tichonovskej regularizácie aj podrobne odvodíme a doplníme príslušné odhady.

Z teoretickej analýzy týchto metód budeme môcť vidieť aj to, ako môžeme aproximáciu riešenia hľadať iteračným spôsobom. Taktiež stručne zhrnieme v čom je ich limitácia a kedy bude nutné použiť striktné iteračné metódy. Uvedieme si aj príklady voľby regularizačného parametra a odlišnosti jeho výberu pri rank-deficient a ill-posed úlohách. Tejto rozsiahlej problematike sa však v našej práci podrobne venovať nebudeme. V závere Kapitoly 3 si skúmané metódy pomocou odvodených filtračných faktorov naimplementujeme a ilustračne otestujeme v numerických experimentoch. Budeme využívať testovacie úlohy Shaw a Phillips z Regularizačného Toolboxu, ktoré reprezentujú oba typy skúmaných úloh.

V Kapitole 4 sa potom budeme zaoberať konkrétnou aplikáciou, a to rekonštrukciou obrazu. Tá je riešením spomínanej inverznej aproximačnej úlohy, zovšeobecnenej pre maticovú pravú stranu. Na základe naštudovanej literatúry zhrnieme ako je k tejto problematike možné pristupovať, a znovu si všetko ilustrujeme a porovnáme v numerických experimentoch.

V celej práci budeme uvažovať len reálne matice, hoci príslušný teoretický aparát je možné formulovať všeobecne pre komplexné matice. V teoretickej časti práce budeme všetko zavádzať a analyzovať pre matice všeobecnej hodnosti. Na regulárne matice sa pre jednoduchosť obmedzíme len v Sekcii 1.3 pri naivnom riešení. V experimentoch zase budeme testovať úlohy so štvorcovými maticami.

Pri experimentoch budeme využívať prostredie Matlab R2020b a ďalej Regularizačný Toolbox (Hansen, 2007), z ktorého využijeme konkrétne testovacie úlohy Shaw a Phillips, a funkciu *picard* na vykreslenie Picardových grafov. Kódy funkcií regularizačných metód T-SVD, T-TLS a Tichonovskej regularizácie, ktoré si naimplementujeme a budeme v experimentoch používať, sú zahrnuté priamo v texte práce, pozri Sekcia 3.4.1.

Špeciálne v Kapitole 4, budeme pri rekonštrukcii obrazu využívať niektoré funkcie, ktoré sú doplnkom ku knihe (Hansen, Nagy a O’Leary, 2006), a funkcie obsiahnuté v Matlabovskom Image Processing Toolboxe, čo vždy bližšie špecifikujeme.

Použité značenie a skratky

\mathbb{N}, \mathbb{R}	množina prirodzených/reálnych čísel
$\dim(\mathbf{V})$	dimenzia vektorového priestoru \mathbf{V}
\mathbf{x}	stĺpcový vektor
\mathbf{x}^\top	transponovaný vektor k vektoru \mathbf{x}
$\ \mathbf{x}\ $	euklidovská norma vektoru \mathbf{x}
$\mathbf{0}$	nulový vektor alebo matica (rozmer z kontextu)
\mathbf{I}_n	jednotková matica $n \times n$
\mathbf{A}	matica
\mathbf{A}^\top	transponovaná matica k matici \mathbf{A}
\mathbf{A}^{-1}	inverzná matica k regulárnej matici \mathbf{A}
\mathbf{A}^\dagger	Moore-Penroseova pseudoinverzia matice \mathbf{A}
\mathbf{a}_i	i -tý stĺpec matice \mathbf{A}
$\text{Ker}(\mathbf{A})$	jadro matice \mathbf{A}
$R(\mathbf{A})$	obor hodnôt matice \mathbf{A}
$\text{rank}(\mathbf{A})$	hodnosť matice \mathbf{A}
$\kappa(\mathbf{A})$	zovšeobecnené číslo podmienenosti matice \mathbf{A}
$\ \mathbf{A}\ , \ \mathbf{A}\ _F$	spektrálna/Frobeniova norma matice \mathbf{A}
$\text{diag}(d_1, \dots, d_n)$	štvorcová diagonálna matica s prvkami d_1, \dots, d_n na diagonále
σ_i	i -té singulárne číslo matice
ε	strojová presnosť
$\epsilon_{abs}, \epsilon_{rel}$	absolútna/relatívna chyba aproximácie
\mathbf{b}_{exact}	presná pravá strana
\mathbf{x}_{exact}	presné riešenie
\mathbf{x}_{naive}	naïvné riešenie
\mathbf{x}_{noise}	invertovaný šum
\mathbf{x}_{reg}	regularizované riešenie
\mathbf{r}	reziduum
\mathbf{e}	vektor šumu
ν	hladina šumu
$\varphi_i^{[\tau]}$	i -tý filtračný faktor pre metódu s regularizačným parametrom τ
$\Phi^{[\tau]}$	matica filtračných faktorov pre metódu s regularizačným parametrom τ
$\mathbb{1}_M$	indikátorová funkcia množiny M
\otimes	Kroneckerov súčin
DPC	diskrétna Picardova podmienka
SVD	singulárny rozklad
LS	najmenšie štvorce
TLS	úplné najmenšie štvorce
T-SVD	orezaný SVD
T-TLS	orezané TLS
Tichonov, Tich	Tichonovská regularizácia

Poznámka. Špeciálne označenie vektorov a matíc, ktoré bude špecifické len pre určité časti práce, bude zavedené priamo v texte.

1. Lineárne ill-posed úlohy

Najskôr si zdefinujeme singulárny rozklad a základné pojmy numerickej maticovej analýzy, ktoré budeme využívať pri skúmaní daných úloh. Potom, vychádzajúc z publikácií (Hansen, 2010, kap. 1–3, 4.9) a (Hansen, 1998, kap. 1–2), zavedieme pojem inverznej úlohy a zhrnieme problémy, ktoré sa môžu objaviť pri jej riešení.

1.1 Základné pojmy a nástroje

Zobrazenie reprezentované maticou $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, ktoré vektoru $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ priradí vektor $\mathbf{y} := \mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$, zrejme splňuje definíciu lineárneho zobrazenia z \mathbb{R}^n do \mathbb{R}^m . Je to špeciálny prípad homomorfizmu definovaného v (Bečvář, 2019, str. 101). Potom teda môžeme definovať jadro, obor hodnôt a hodnosť matice \mathbf{A} , porov. (Bečvář, 2019, str. 101, 133).

Definícia 1. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica. Potom definujeme*

- *jadro matice \mathbf{A} ako množinu $\text{Ker}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\}$,*
- *obor hodnôt matice \mathbf{A} ako množinu $R(\mathbf{A}) = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}\}$,*
- *hodnosť matice \mathbf{A} ako číslo $\text{rank}(\mathbf{A}) = \dim(R(\mathbf{A}))$.*

Poznámka. Jadro, resp. obor hodnôt matice \mathbf{A} tvoria vektorové podpriestory vektorových priestorov \mathbb{R}^n , resp. \mathbb{R}^m , porov. (Bečvář, 2019, str. 104). Preto má $\dim(R(\mathbf{A}))$ v predchádzajúcej definícii zmysel.

Singulárny rozklad (SVD), ktorý je silným a univerzálnym nástrojom, si zavedieme pre všeobecnú obdĺžnikovú maticu, nakoľko ho v tomto tvare budeme potrebovať v ďalších kapitolách. Motiváciou je spektrálny rozklad matice a skúmanie vzťahov medzi spektrálnymi rozkladmi matíc $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$ a $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$. Viac podrobností v knihe (Tebbens a kol., 2012, kap. 5). Odtiaľ sme čerpali aj rôzne verzie singulárneho rozkladu, ktoré uvádzame v nasledujúcej vete.

Veta 1 (O singulárnom rozklade). *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$.*

- **maticová verzia:**

Potom existujú čísla $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ a ortogonálne matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tak, že platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top,$$

kde

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \mathbf{\Sigma}_r := \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r \times r}.$$

- **ekonomický tvar:**

Potom platí, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r \mathbf{V}_r^\top,$$

kde $\mathbf{U}_r := [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r] \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $\mathbf{V}_r := [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r] \in \mathbb{R}^{n \times r}$ a $\mathbf{\Sigma}_r$ definované vyššie.

- **dyadický rozvoj:**

Potom môžeme maticu \mathbf{A} vyjadriť v tvare

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^r \mathbf{A}_i = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top, \quad (1.1)$$

kde $\mathbf{A}_i := \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $i = 1, \dots, r$, je tzv. i -tý vonkajší súčin a je to matica hodnosti jedna.

Poznámka. Čísla σ_i , $i = 1, \dots, r$, nazývame singulárne čísla matice \mathbf{A} a vektory \mathbf{v}_i , $i = 1, \dots, m$, resp. \mathbf{u}_i , $i = 1, \dots, n$, nazývame pravými, resp. ľavými singulárnymi vektormi matice \mathbf{A} .

Ako sa uvádza v (Tebbens a kol., 2012, str. 128), singulárny rozklad je okrem iného dobrým pomocníkom pri odhaľovaní komplikácií súvisiacich s prítomnosťou veľmi malých singulárnych čísel matice \mathbf{A} . To uvidíme bližšie pri skúmaní inverzných úloh v ďalších častiach práce.

So znalosťou tohoto rozkladu si zovšeobecníme inverziu regulárnej matice. Definíciu preberáme z (Tebbens a kol., 2012, str. 130).

Definícia 2 (Moore-Penroseova pseudoinverzia). *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$ a $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top = \mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r \mathbf{V}_r^\top$ je jej singulárny rozklad. Potom maticu*

$$\mathbf{A}^\dagger := \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\dagger \mathbf{U}^\top = \mathbf{V}_r \mathbf{\Sigma}_r^{-1} \mathbf{U}_r^\top, \quad (1.2)$$

kde

$$\mathbf{\Sigma}^\dagger := \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}_r^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m},$$

nazveme Moore-Penroseovou pseudoinverziou matice \mathbf{A} .

Využitím dyadického rozvoja (1.1) potom môžeme pseudoinverziu matice \mathbf{A} zapísať v tvare

$$\mathbf{A}^\dagger = \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top}{\sigma_i}. \quad (1.3)$$

Pomocou singulárnych čísel si ďalej zadefinujeme spektrálnu a Frobeniovu normu matice (Golub a Van Loan, 1996, str. 71). Základné definície týchto noriem sú uvedené v (Golub a Van Loan, 1996, str. 55). Taktiež si zadefinujeme zovšeobecnené číslo podmienenosti matice (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, str. 55), ktoré bude význačným ukazovateľom citlivosti riešenia daných úloh. Používame tento názov, nakoľko sa číslo podmienenosti primárne definuje pre regulárnu štvorcovú maticu, pozri (Tebbens a kol., 2012, str. 23).

Definícia 3. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$ a $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ sú singulárne čísla matice \mathbf{A} .*

- Spektrálnu normu matice \mathbf{A} potom definujeme ako $\|\mathbf{A}\| := \sigma_1$.
- Frobeniovu normu matice \mathbf{A} potom definujeme ako $\|\mathbf{A}\|_F := (\sum_{i=1}^r \sigma_i^2)^{1/2}$.
- Zovšeobecnené číslo podmienenosti matice \mathbf{A} potom definujeme ako

$$\kappa(\mathbf{A}) := \frac{\sigma_1}{\sigma_r} = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^\dagger\|, \quad (1.4)$$

kde \mathbf{A}^\dagger je definované vzťahom (1.2).

Poznámka. Z Definície 3 môžeme vidieť, že platí odhad: $\|\mathbf{A}\| \leq \|\mathbf{A}\|_F \leq \sqrt{r}\|\mathbf{A}\|$.

Na záver si uvedieme dôležitú vetu, z ktorej budeme vychádzať či už pri metódach najmenších štvorcov v Kapitole 2, ale aj pri priamych regularizačných metódach v Kapitole 3. Táto veta hovorí o aproximácii matice maticou nižšej hodnosti. Jej znenie preberáme z (Golub a Van Loan, 1996, str. 72–73), kde je možné nájsť aj dôkaz. Uvádzame ju v tvare pre spektrálnu normu matice, ale obdobne je možné použiť aj formuláciu s Frobeniovou normou, pozri (Van Huffel a Vandewalle, 1991, str. 31). V plnom tvare je potom táto veta známa aj pod názvom Eckart-Young-Mirsky.

Veta 2. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$ a uvažujme singulárny rozklad matice \mathbf{A} v tvare dyadického rozvoja (1.1). Pokiaľ je $l \in \mathbb{N}$, $l < r$ a definujeme maticu*

$$\mathbf{A}_l := \sum_{i=1}^l \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top, \quad (1.5)$$

potom

$$\min_{\substack{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n} \\ \text{rank}(\mathbf{X})=l}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\| = \|\mathbf{A} - \mathbf{A}_l\| = \sigma_{l+1}.$$

Poznámka. Ako sa uvádza v (Tebbens a kol., 2012, str. 132), aproximácia matice \mathbf{A} definovaná vzťahom (1.5) je potom najlepšou aproximáciou matice \mathbf{A} v zmysle, že

$$\text{rank}(\mathbf{A}_l) = l < r \quad a \quad \|\mathbf{A} - \mathbf{A}_l\| = \min_{\substack{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n} \\ \text{rank}(\mathbf{X})=l}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|.$$

1.2 Inverzné úlohy, šum

V tejto práci sa budeme zaoberať inverznými úlohami, ktoré vznikajú vtedy, keď sa snažíme získať pôvodné dáta z vonkajších meraní (často zafažených chybami) a zároveň má príslušný matematický model špeciálne vlastnosti, ktoré si teraz vysvetlíme. Lineárnu inverznú úlohu môžeme zvyčajne symbolicky zapísať vo všeobecnom tvare (Hansen, 1998, str. 5)

$$\int_{\Omega} \text{vstup} \times \text{system} d\Omega = \text{výstup},$$

kde máme k dispozícii výstup (merania), systém (model závislosti vstupu a výstupu) a hľadáme príslušné vstupné dáta; Ω je oblasť. Tieto úlohy sú teda vyjadrené ako integrálne rovnice, t. j. ako spojité úlohy. Pokiaľ chceme takúto úlohu riešiť numericky na počítači, musíme ju najskôr diskretizovať. Rozlišujeme dva základné prístupy k diskretizácii, a to kvadratúrne a expanzné metódy (napríklad Galerkinova). Pre viac informácií pozri (Hansen, 2010, kap. 3.1).

Po diskretizácii získame približnú inverznú úlohu v tvare maticového problému. Uvažujme teda inverznú úlohu nájsť vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, splňujúci lineárnu aproximačnú úlohu

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \approx \mathbf{b}, \quad (1.6)$$

kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je matica reprezentujúca diskretizovaný model a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ je vektor pravej strany reprezentujúci namerané hodnoty. Bez ujmy na všeobecnosti budeme túto úlohu v celej práci uvažovať s predpokladom, že $m \geq n$. V prípade

ostrej nerovnosti hovoríme o tzv. preurčenej úlohe (Golub a Van Loan, 1996, str. 236). Danú úlohu riešime iba približne, resp. hľadáme aproximáciu riešenia, nakoľko všeobecne nemusí existovať presné riešenie. Dôvodom sú chyby v modeli, diskretizačné chyby, atď. Konkrétne príklady toho v akom zmysle riešime aproximačnú úlohu (1.6), budeme môcť vidieť v ďalších kapitolách.

Pri riešení reálnych problémov navyše namerané dáta obsahujú šum. Hovoríme, že pravá strana je perturbovaná. Môžeme ju zapísať v tvare,

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e},$$

kde \mathbf{e} je neznámy vektor reprezentujúci šum v dátach a predpokladáme, že existuje vektor $\mathbf{b}_{exact} = \mathbf{A} \mathbf{x}_{exact}$, kde \mathbf{x}_{exact} je neznáme presné riešenie úlohy. Porov. (Hansen, 2010, str. 40). Hladinu prítomného šumu si môžeme v relatívnom zmysle zadefinovať nasledujúcim spôsobom.

Definícia 4. *Hladinu šumu v nenulovom vektore $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e}$, definujeme ako konštantu*

$$\nu := \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

Šum spôsobujú rôzne chyby pri meraní, ukladanie dát, atď. Rozoznávame niekoľko typov šumov. Základné delenie je na biely šum (napríklad Gaussovský alebo rovnomerne rozdelený), a šum, ktorý nie je biely (napríklad Poissonov šum). Pre viac podrobností pozri (Hansen, 2010, kap. 3.5–3.6). Pokiaľ neuvedieme inak, v práci budeme uvažovať, že vektor \mathbf{e} reprezentuje Gaussovský biely šum, teda každá jeho zložka pochádza z pravdepodobnostného rozdelenia $N(0, \sigma^2)$ s rovnakým σ . Pre úplnosť si pripomeňme všeobecnú definíciu a základné charakteristiky tohoto absolútne spojitého pravdepodobnostného rozdelenia. Čerpáme z (Dupač a Hušková, 2013, str. 34).

Definícia 5. *Normálne rozdelenie s parametrami $\mu \in \mathbb{R}$ a $\sigma^2 > 0$, $N(\mu, \sigma^2)$, náhodnej veličiny X , je pravdepodobnostné rozdelenie s hustotou*

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad -\infty < x < \infty.$$

Pokiaľ má náhodná veličina X rozdelenie $N(\mu, \sigma^2)$, tak stredná hodnota $\mathbb{E}X = \mu$ a rozptyl $\text{var}(X) = \sigma^2$.

Ďalší problém s ktorým sa pri riešení inverzných úloh stretávame je, že tieto úlohy sú zle podmienené (ill-conditioned), teda majú veľké číslo podmienenosti matice modelu, $\kappa(\mathbf{A}) \gg 1$. To nám implikuje, že niektoré stĺpce matice \mathbf{A} môžu byť lineárne závislé, a tak malé zmeny pravej strany môžu spôsobiť veľké zmeny v riešení (Hansen, 2010, str. 3). Veľké číslo podmienenosti matice \mathbf{A} môže byť dôsledkom nesprávneho matematického modelu, ktorý je ale často možné modifikovať a následne úlohu riešiť klasickými metódami. Avšak v niektorých prípadoch je zlá podmienenosť súčasťou formulácie problému a riešenie musíme stabilizovať pomocou numerických regularizačných metód, ktorými sa budeme zaoberať v Kapitole 3.

Dva základné typy takýchto úloh sú tzv. rank-deficient a ill-posed úlohy, pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, str. 191–192). Rank-deficient úlohy majú zreteľnú medzeru medzi veľkými singulárnymi číslami a skupinou malých singulárných čísel. Matematicky to môžeme vyjadriť tak, že $\exists h \in \mathbb{N}$, $h < \text{rank}(\mathbf{A})$ tak, že $\sigma_h \gg \sigma_{h+1}$. Singulárne čísla pri ill-posed úlohách zase bez výrazného skoku klesajú postupne k nule. Tieto úlohy vznikajú napríklad diskretizáciou Fredholmových integrálnych rovníc 1. druhu, čo sú rovnice v tvare

$$\int_0^1 K(s,t) f(t) dt = g(s), \quad 0 \leq s \leq 1,$$

kde K reprezentujúce model a g reprezentujúce pozorovania sú známe funkcie, a funkcia f reprezentujúca vstupné dáta je neznáma (Hansen, 2010, str. 7). Pre podrobnú analýzu problému v tomto spojitom tvare pozri (Hansen, 2010, kap. 2).

Francúzsky matematik J. Hadamard definoval v minulom storočí podmienky, ktoré by mala splňovať úloha popisujúca reálny problém (Hansen, 2010, str. 2).

Definícia 6 (Korektnosť úlohy podľa Hadamarda). *Úloha je well - posed (dobře postavená), pokiaľ splňuje nasledujúce podmienky:*

1. *Riešenie úlohy existuje.*
2. *Riešenie úlohy je jednoznačné.*
3. *Riešenie úlohy závisí spojitاً na dátach úlohy.*

Hoci posledná podmienka v tejto definícii nemá presný matematický význam, spojitú závislosť riešenia na dátach úlohy môžeme chápať tak, že malá zmena v dátach spôsobí iba malú zmenu v riešení. Úloha sa nazýva ill-posed (zle postavená), pokiaľ nesplňuje niektorú z podmienok uvedených v Definícii 6. Vyvstáva otázka, či takúto úlohu môžeme nejakým spôsobom preformulovať tak, aby danú podmienku splňovala a bola well-posed. V prípade podmienky existencie a jednoznačnosti riešenia to nie je veľmi problematické. Jedným z príkladov preformulácie v tomto prípade je, že hľadáme riešenie v zmysle najmenších štvorcov minimálne v norme. Viac sa touto problematikou budeme zaoberať v Kapitole 2. Ostatnej podmienke sa budeme detailne venovať v nasledujúcej podkapitole.

Poznámka. V práci budeme rozlišovať rank-deficient a ill-posed úlohy podľa rozloženia singulárných čísel, ako sme spomenuli vyššie. V zmysle Definície 6 sú ale oba tieto typy úloh ill-posed, t. j. citlivé na perturbácie dát, a hľadáme aproximáciu ich riešenia, nakoľko riešenie nemusí existovať, ani byť jednoznačné.

1.3 Naivné riešenie

Zamerajme sa teraz na tretiu podmienku z Definície 6. Preformulovaním by sme mohli získať problém, ktorý je menej citlivý na zmeny, čo nás vedie k pojmu regularizácie úlohy. Tomu sa budeme venovať v Kapitole 3.

V tejto podkapitole pre jednoduchosť výkladu predpokladajme, že $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulárna matica, t. j. $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$ (Bečvář, 2019, str. 133). Sformulujeme známy poznatok z lineárnej algebry o existencii a jednoznačnosti riešenia sústavy lineárnych algebraických rovníc s regulárnou maticou, porov. (Bečvář, 2019, str. 156). Potom budeme mať zaručenú existenciu a jednoznačnosť riešenia inverznej úlohy s takouto maticou a budeme skúmať jej citlivosť.

Lemma 3. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulárna matica a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ je vektor. Potom $\exists! \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, ktoré rieši sústavu lineárnych rovníc $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.*

Ako je známe, z regularity matice \mathbf{A} nám taktiež vyplýva existencia inverznej matice \mathbf{A}^{-1} . Potom teda označme $\mathbf{x}_{naive} := \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ tzv. naivné riešenie. S využitím dyadického tvaru singulárneho rozkladu (1.1), môžeme naivné riešenie úlohy (1.6) s regulárnou maticou \mathbf{A} vyjadriť vzťahom

$$\mathbf{x}_{naive} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}_{exact} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{e} = \underbrace{\sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}_{exact}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i}_{\mathbf{x}_{exact}} + \underbrace{\sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{e}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i}_{\mathbf{x}_{noise}}. \quad (1.7)$$

Naivné riešenie danej úlohy je teda súčtom presného riešenia $\mathbf{x}_{exact} := \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}_{exact}$ a tzv. invertovaného šumu $\mathbf{x}_{noise} := \mathbf{A}^{-1}\mathbf{e}$.

Poznámka. Využitím pseudoinverzie (1.3) môžeme presné riešenie, naivné riešenie a invertovaný šum zovšeobecniť pre všeobecnú obdĺžnikovú maticu. Potom $\mathbf{x}_{exact} := \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b}_{exact}$, $\mathbf{x}_{naive} := \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b}$ a $\mathbf{x}_{noise} := \mathbf{A}^\dagger \mathbf{e}$.

Zaujímá nás, ako dobre aproximuje naivné riešenie \mathbf{x}_{naive} presné riešenie \mathbf{x}_{exact} . Zdefinujme si relatívnu chybu aproximácie riešenia, porov. (Golub a Van Loan, 1996, str. 53).

Definícia 7 (relatívna chyba aproximácie riešenia). *Nech vektor $\tilde{\mathbf{x}}$ je aproximáciou nenulového presného riešenia \mathbf{x} nejakej úlohy. Potom relatívnu chybu aproximácie riešenia tejto úlohy definujeme vzťahom*

$$\epsilon_{rel} := \frac{\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|}.$$

Vychádzajúc z klasickej perturbačnej teórie odvodíme odhad relatívnej chyby naivného riešenia úlohy (1.6) s regulárnou maticou a perturbovanou pravou stranou, porov. (Drkošová a Strakoš, 1997, str. 61).

Veta 4. *Uvažujme úlohu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulárna matica a $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e} \in \mathbb{R}^n$ je vektor, $\mathbf{b}_{exact} \neq 0$. Potom pre relatívnu chybu ϵ_{rel} aproximácie \mathbf{x}_{naive} , definovanej v (1.7), presného nenulového riešenia \mathbf{x}_{exact} tejto úlohy platí odhad*

$$\epsilon_{rel} = \frac{\|\mathbf{x}_{exact} - \mathbf{x}_{naive}\|}{\|\mathbf{x}_{exact}\|} \leq \kappa(\mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{b}_{exact}\|}. \quad (1.8)$$

Dôkaz. Z rovnosti (1.7) máme, že $\mathbf{x}_{naive} = \mathbf{x}_{exact} + \mathbf{x}_{noise}$. Ďalej zrejme platia

$$\mathbf{Ax}_{exact} = \mathbf{b}_{exact} \quad (1.9)$$

$$\mathbf{Ax}_{naive} = \mathbf{Ax}_{exact} + \mathbf{Ax}_{noise} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e}. \quad (1.10)$$

Z rovnosti (1.9) plynie s využitím trojuholníkovej nerovnosti pre normu, resp. s využitím compatibility spektrálnej maticovej normy s Euklidovskou normou vektoru, ako uvádza (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, str. 268), odhad

$$\|\mathbf{b}_{exact}\| = \|\mathbf{Ax}_{exact}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}_{exact}\|. \quad (1.11)$$

Dosadením vzťahu (1.9) do rovnosti (1.10) a využitím predpokladu regularity matice \mathbf{A} dostávame

$$\mathbf{x}_{noise} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{e}. \quad (1.12)$$

Z rovnosti (1.12) obdobne získame odhad

$$\|\mathbf{x}_{noise}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{e}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{e}\|. \quad (1.13)$$

So znalosťou definície čísla podmienenosti matice (1.4) a spojením odhadov (1.11) a (1.13), dostávame požadovaný odhad (1.8). □

Poznámka. Obdobné odhady je možné odvodiť aj v prípade, že máme perturbovanú iba maticu \mathbf{A} , alebo \mathbf{b} aj \mathbf{A} zároveň, pozri (Drkošová a Strakoš, 1997, kap. 4).

Z odhadu (1.8) v predchádzajúcej vete vidíme, že hoci môže byť pravá strana málo perturbovaná, t. j. $\|\mathbf{e}\| \ll \|\mathbf{b}_{exact}\|$, nezaručuje nám to dobrú aproximáciu presného riešenia \mathbf{x}_{exact} naivným riešením \mathbf{x}_{naive} , nakoľko číslo $\kappa(\mathbf{A})$ môže byť veľké.

S číslom podmienenosti matice $\kappa(\mathbf{A})$ sa nám spája ešte jedna dôležitá charakteristika, a to vzdialenosť regulárnej matice od najbližšej singularnej matice, ktorú môžeme definovať so znalosťou Vety 2, (Tebbens a kol., 2012, str. 134).

Definícia 8. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulárna matica, t. j. $rank(\mathbf{A}) = n$, a $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je singularná matica, t. j. $rank(\mathbf{X}) < n$. Potom výraz*

$$\min_{\substack{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ rank(\mathbf{X}) < n}} \frac{\|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|}{\|\mathbf{A}\|} = \min_{\substack{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ rank(\mathbf{X}) = n-1}} \frac{\|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|}{\|\mathbf{A}\|} = \frac{\sigma_n}{\sigma_1} = \frac{1}{\kappa(\mathbf{A})}$$

definuje relatívnu vzdialenosť matice \mathbf{A} od najbližšej singularnej matice.

Z Definície 8 potom ľahko môžeme vidieť, že pokiaľ je matica \mathbf{A} blízka singularnej matici, tak je zle podmienená, a naopak.

Sformulujme si ešte diskretnú Picardovu podmienku, ktorá nám bude nápomocná pri skúmaní citlivosti úlohy na prítomný šum. V knihe (Hansen, 2010, str. 37) autor uvažuje konečnú aritmetiku a túto podmienku formuluje pre presnú pravú stranu v závislosti na hladine, kde sa ustália spočítané singularne čísla v dôsledku zaokrúhľovacích chýb. My pre teoretickú analýzu problému uvažujme presnú aritmetiku a definujeme si túto podmienku pre všeobecnú pravú stranu. V experimentoch potom samozrejme budeme pracovať v konečnej aritmetike a brať do úvahy zaokrúhľovacie chyby.

Definícia 9 (Diskretná Picardova podmienka). *Nech σ_i , $i = 1, \dots, n$, sú singularne čísla matice \mathbf{A} . Diskretná Picardova podmienka (DPC) je splnená pre pravú stranu \mathbf{b} , pokiaľ koeficienty $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}|$ v priemere klesajú rýchlejšie ako odpovedajúce singularne čísla σ_i , $i = 1, \dots, n$.*

Teraz sa vrátime k analýze vlastností naivného riešenia (1.7). Predpokladáme, že \mathbf{b}_{exact} splňuje DPC. Pokiaľ ale máme $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e}$, $\mathbf{e} \neq 0$, projekcie vektoru

šumu \mathbf{e} do bázy ľavých singulárnych vektorov \mathbf{u}_i pre $i = 1, \dots, n$, zväčša neklešajú k nule. V prípade, že \mathbf{e} je biely šum, zostávajú $|\mathbf{u}_i^T \mathbf{e}|$ rádovo porovnateľne veľké, pozri (Hansen, 2010, str. 42). Delenie veľmi malými singulárnymi číslami v člene pre \mathbf{e} v (1.7) potom spôsobí nárast šumovej zložky naivného riešenia. Invertovaný šum \mathbf{x}_{noise} sa teda stáva dominantným nad presným riešením \mathbf{x}_{exact} , a naivné riešenie \mathbf{x}_{naive} nedáva dobrú aproximáciu presného riešenia.

Doposiaľ zavedené pojmy a nastolené problémy si lepšie ozrejníme v nasledujúcom experimente. Čiastočne vychádzame zo zadání úloh v (Hansen, 2010, str. 49–50), ktoré vlastným spôsobom spracujeme.

Experiment 1. Budeme skúmať úlohu Shaw z Regularizačného Toolboxu (Hansen, 2007), pre $n = 24$. Táto úloha predstavuje jednodimenzionálnu rekonštrukciu obrazu, a je daná kvadrátúrnou diskretizáciou Fredholmovej integrálnej rovnice 1. druhu. Číslo podmienenosti matice úlohy je $\kappa(\mathbf{A}) = 3.8407e + 16$, teda úloha je veľmi zle podmienená. Matica \mathbf{A} je regulárna v matematickom zmysle ale je veľmi blízko singulárnej matici v dôsledku obrovského čísla podmienenosti, pozri Definícia 8. V numerickom zmysle je singulárna, nakoľko keď spočítame funkciou *rank* hodnotu tejto matice dostávame hodnotu 19, čo je menej ako n .

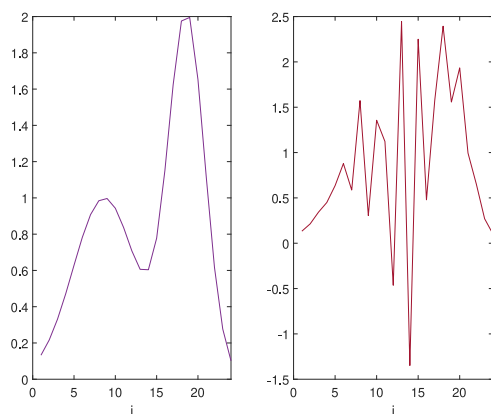
Najskôr si vykreslíme presné a naivné riešenie tejto úlohy. Naivné riešenie sme získali použitím operátora *backslash* (`\`). Toto riešenie ani zďaleka nezodpovedá presnému riešeniu, ako môžeme vidieť na Obrázku 1.1(a). Ďalej si vykreslíme niekoľko ľavých a pravých singulárnych vektorov, Obrázok 1.1(b). Môžeme si všimnúť, že ľavé a pravé singulárne vektory sa vzhľadom k zvolenej báze až na znamienko rovnajú. To je v dôsledku toho, že matica \mathbf{A} je symetrická. Už pri piatom singulárnom vektore môžeme pozorovať značné oscilácie, ktoré nám vo výsledku rozkmitajú naivné riešenie, pozri sčítance v (1.7).

Pre vykreslenie Picardových grafov budeme využívať funkciu *picard* z (Hansen, 2007). Z Picardovho grafu pre úlohu bez pridaného šumu vo vektore \mathbf{b} , Obrázok 1.1(c), môžeme vidieť, že singulárne čísla postupne klesajú k nule, a tie najmenšie oscilujú na hranici strojovej presnosti ε . DPC je splnená pre singulárne čísla až do $i = 20$, teda pre všetky okrem tých, ktoré oscilujú na hranici strojovej presnosti. Riešenie je v tomto prípade nepresné v dôsledku zaokrúhľovacích chýb, ktoré vznikli pri výpočte riešenia. Vektor šumu \mathbf{e} v tomto prípade obsahuje zaokrúhľovacie chyby a hladina šumu je rovná strojovej presnosti, $\nu = \varepsilon = 2.2204e-16$. Poznamenajme, že strojová presnosť ε je tiež uvažovaná v relatívnom zmysle, čiže máme konzistenciu s Definíciou 4.

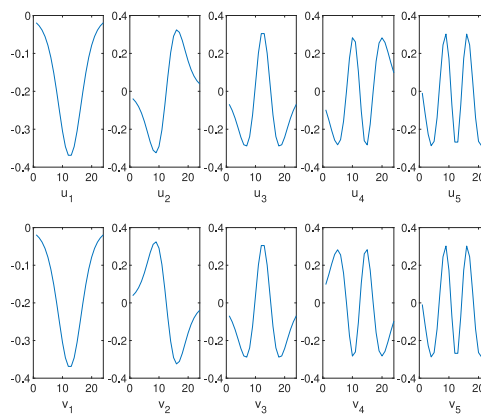
Nakoniec si do vektoru pravej strany \mathbf{b} pridajme malé množstvo náhodného šumu pochádzajúceho z normálneho rozdelenia. To urobíme tak, že si pomocou príkazu *randn* vytvoríme náhodný vektor dĺžky $n = 24$, ktorý znormujeme a následne prenásobíme normou presnej pravej strany a požadovanou hladinou šumu. Tento vektor potom pripočítame k vektoru presnej pravej strany a dostávame pravú stranu s pridaným náhodným bielym šumom. Pre túto pravú stranu si potom opäť vykreslíme Picardov graf. Najskôr sme zvolili hladinu šumu $\nu = 1e - 10$ a príslušný Picardov graf môžeme vidieť na Obrázku 1.1(d). Pozorujeme, že DPC je splnená pre menej singulárnych čísel, iba do $i = 15$. Ďalej sme zvolili väčší šum, $\nu = 1e - 6$, a príslušný Picardov graf môžeme vidieť na Obrázku 1.1(e). Tentokrát pozorujeme, že DPC je splnená pre ešte menej singulárnych čísel, iba do $i = 11$. V týchto dvoch prípadoch zohrávajú úlohu nielen zaokrúhľovacie chyby, ale aj

komponenty zatažené pridaným náhodným šumom. Vektor šumu môžeme teda v tomto prípade pomyselne vyjadriť ako súčet $\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2$, kde \mathbf{e}_1 reprezentuje zaokrúhľovacie chyby a \mathbf{e}_2 pridaný náhodný šum. Mohli sme vidieť, že to do akej miery je DPC splnená, závisí od veľkosti pridaného šumu.

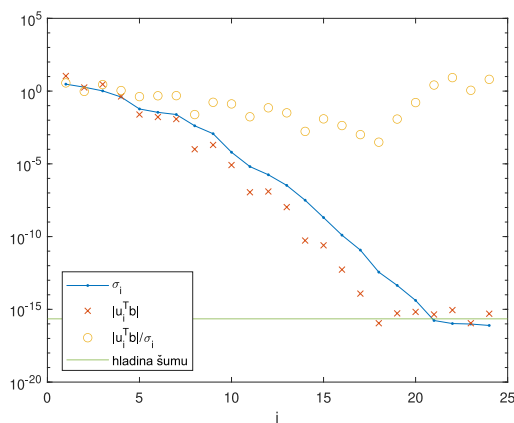
Záverom môžeme usúdiť, že daná úloha patrí medzi ill-conditioned úlohy. Špeciálne, môžeme ju zaradiť medzi rank-deficient úlohy, čo sme videli z vykreslenia singulárnych čísel. Ďalej sme pozorovali, že jej riešenie je veľmi citlivé na prítomný šum a nemôžeme ju riešiť klasickým spôsobom.



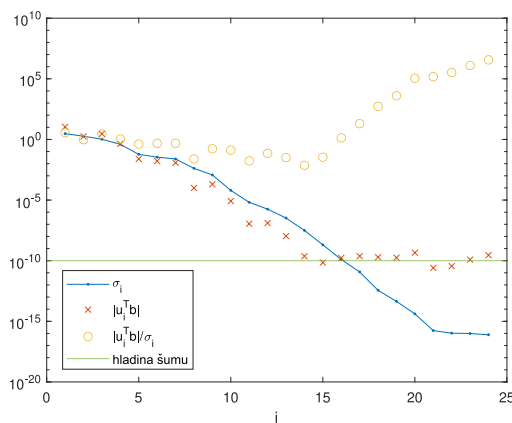
(a) Vykreslenie presného a naivného riešenia



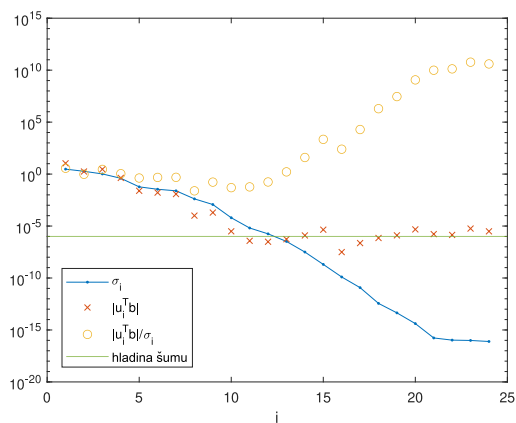
(b) Vykreslenie niekoľko ľavých a pravých singulárnych vektorov



(c) Picardov graf pre úlohu Shaw(24) bez pridaného šumu, $\nu = \varepsilon$



(d) Picardov graf pre úlohu Shaw(24) s pridaným náhodným šumom s veľkosťou $\nu = 1e - 10$



(e) Picardov graf pre úlohu Shaw(24) s pridaným náhodným šumom s veľkosťou $\nu = 1e - 6$

Obr. 1.1: Experiment 1 - Úloha SHAW(24)

2. Metódy najmenších štvorcov

Uvažujme lineárnu aproximačnú úlohu (1.6) a pripomeňme, že predpokladáme $m \geq n$. Ďalej budeme predpokladať, že $\mathbf{b} \notin R(\mathbf{A})$. V opačnom prípade môžeme úlohu (1.6) uvažovať ako riešenie sústavy lineárnych rovníc a máme zaručenú existenciu riešenia, pozri Rouchéova-Fontenéova veta (Hájková a kol., 2012, str. 206). Pre úlohu s $\mathbf{b} \notin R(\mathbf{A})$ potom hľadáme aproximáciu riešenia metódami najmenších štvorcov. Poznáme viacero druhov týchto metód v závislosti na tom, či je chybami zafaržený vektor pravej strany \mathbf{b} alebo (v nevylučujúcom význame) matica modelu \mathbf{A} .

Budeme sa zaoberať najmä metódami LS a TLS, ktoré sa v štatistických disciplínach zvyknú nazývať aj lineárna a ortogonálna regresia. Zadefinujeme si dané metódy, a stručne zhrnieme analýzu existencie a jednoznačnosti ich riešenia. Na tom budeme stavať v Kapitole 3 pri regularizačných metódach.

Čerpáme z publikácií (Golub a Van Loan, 1996, kap. 5.3, 5.5, 12.3), (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 2–3, 7.3), (Van Huffel a Vandewalle, 1991, kap. 2–3), (Tebbens a kol., 2012, kap. 6) a článku (Golub a Van Loan, 1980).

2.1 Metóda LS

Najskôr predpokladajme, že chybami je zafaržený iba vektor \mathbf{b} , zatiaľ čo matica \mathbf{A} je daná presne. Potom hľadáme minimálnu opravu \mathbf{d} vektoru \mathbf{b} tak, aby $\mathbf{b} + \mathbf{d} \in R(\mathbf{A})$, ako hovorí nasledujúca definícia, ktorú preberáme z (Tebbens a kol., 2012, str. 152).

Definícia 10 (Problém najmenších štvorcov). *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Problémom najmenších štvorcov (LS) budeme nazývať úlohu určenia $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tak, aby platilo*

$$\min_{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^m} \|\mathbf{d}\| \quad \text{za podmienky} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b} + \mathbf{d}. \quad (2.1)$$

Toto \mathbf{x} potom označujeme \mathbf{x}_{LS} .

Označme $\mathbf{r} := \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ reziduum. Z podmienky v (2.1) potom vidíme, že $\mathbf{d} = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} = -\mathbf{r}$, a $\|\mathbf{d}\| = \|-\mathbf{r}\| = \|\mathbf{r}\|$ v dôsledku vlastností normy (Hájková a kol., 2012, str. 330). Problém LS teda môžeme poľahky preformulovať ako úlohu minimalizácie normy rezidua, a riešenie úlohy (1.6) v zmysle LS tak vyjadriť ako riešenie tejto optimalizačnej úlohy,

$$\mathbf{x}_{LS} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|. \quad (2.2)$$

Analýzu existencie a jednoznačnosti riešenia problému LS zo študovaných zdrojov citovaných v úvode tejto kapitoly zhrnieme v nasledujúcej vete.

Veta 5. *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$, a $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Rozlíšime dva prípady:*

1. *Nech $r = n$. Potom $\exists!$ \mathbf{x}_{LS} a môžeme ho vyjadriť ako riešenie sústavy normálnych rovníc*

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}, \quad (2.3)$$

v tvare

$$\mathbf{x}_{LS} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b},$$

$$\text{kde } \mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top.$$

2. Nech $r < n$. Potom \exists nekonečne veľa riešení \mathbf{x}_{LS} , ale $\exists!$ \mathbf{x}_{LS} minimálne v norme a môžeme ho vyjadriť v tvare

$$\mathbf{x}_{LS} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b},$$

kde \mathbf{A}^\dagger je definované vzťahom (1.2).

Môžeme teda vidieť, že riešenie úlohy (1.6) v zmysle LS existuje vždy a jeho jednoznačnosť sa odvíja od hodnoty matice \mathbf{A} . Dôkazy tvrdení z predchádzajúcej vety môžeme nájsť napríklad v (Tebbens a kol., 2012, kap. 6.1, 6.3).

Úlohy s plnou stĺpcovou hodnotou je možné numericky riešiť priamo. Buď ako sústavu normálnych rovníc s využitím Choleského rozkladu, pomocou rozšírenej sústavy rovníc s využitím LU rozkladu, alebo v neposlednom rade pomocou QR rozkladu, ktorý môžeme prípadne iteračne zjemniť. Pre viac podrobností pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 4), (Tebbens a kol., 2012, kap. 6.2).

Pre úlohy ktoré nemajú plnú stĺpcovú hodnotu, môžeme použiť rôzne modifikácie predchádzajúcich metód, napr. Peters-Wilkinsonov LU rozklad, QR rozklad s permutáciou stĺpcov, bidiagonalizáciu a nemôžeme zabudnúť na singulárny rozklad. Pre viac podrobností pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 5), (Tebbens a kol., 2012, kap. 6.3–6.4).

Pokiaľ musíme riešiť úlohy s obrovskými maticami, tzv. large-scale úlohy, tak priame metódy nemusia byť vhodné. Či už v dôsledku obmedzenej pamäte, vysokých nákladov na výpočet alebo nedostatočnej presnosti. Pre tieto úlohy využijeme iteračné stacionárne alebo nestacionárne (najmä Krylovovské) metódy. Pre viac podrobností pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 6), (Björck, 1996, kap. 7).

2.2 Metóda TLS

Teraz predpokladajme, že chybami je zafarbená ako matica \mathbf{A} , tak aj vektor \mathbf{b} . Potom hľadáme minimálne opravy \mathbf{d} , resp. \mathbf{C} vektoru \mathbf{b} , resp. matice \mathbf{A} tak, aby $\mathbf{b} + \mathbf{d} \in R(\mathbf{A} + \mathbf{C})$. Nasledujúcu definíciu preberáme z (Tebbens a kol., 2012, str. 152).

Definícia 11 (Úplný problém najmenších štvorcov). Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Úplným problémom najmenších štvorcov (TLS) budeme nazývať úlohu určenia $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tak, aby platilo

$$\min_{\substack{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^m, \\ \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{m \times n}}} \|\mathbf{d}, \mathbf{C}\|_F \quad \text{za podmienky} \quad (\mathbf{A} + \mathbf{C})\mathbf{x} = \mathbf{b} + \mathbf{d}. \quad (2.4)$$

Toto \mathbf{x} potom označujeme \mathbf{x}_{TLS} .

Úlohu (1.6) môžeme využitím blokového maticového násobenia ekvivalentne zapísať v tvare

$$[\mathbf{b}, \mathbf{A}] \begin{bmatrix} -1 \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} \approx \mathbf{0}.$$

Analogicky preformulujeme podmienku z (2.4). Ekvivalentne platí

$$[\mathbf{b} + \mathbf{d}, \mathbf{A} + \mathbf{C}] \begin{bmatrix} -1 \\ \mathbf{x} \end{bmatrix} = \mathbf{0}.$$

Hľadáme teda

$$\mathbf{w} \in \text{Ker}([\mathbf{b} + \mathbf{d}, \mathbf{A} + \mathbf{C}]), \quad \mathbf{w} = (w_1, \dots, w_{n+1})^\top : w_1 \neq 0.$$

Potom riešenie úlohy (1.6) v zmysle TLS môžeme vyjadriť v tvare

$$\mathbf{x}_{TLS} = -\frac{1}{w_1}(w_2, \dots, w_{n+1})^\top. \quad (2.5)$$

Na základe prameňov citovaných v úvode tejto kapitoly predstavíme stručný prehľad analýzy existencie a jednoznačnosti riešenia problému TLS. Uvažujme $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$. Podobne ako pri analýze riešenia problému LS aj teraz rozlíšime dva prípady:

1. Nech $r = n$. Potom $\text{rank}([\mathbf{b}, \mathbf{A}]) = n + 1$, vďaka predpokladu $\mathbf{b} \notin R(\mathbf{A})$. Singulárny rozklad pre túto rozšírenú maticu môžeme podľa Vety 1 (dyadický rozvoj) vyjadriť v tvare

$$[\mathbf{b}, \mathbf{A}] = \sum_{i=1}^{n+1} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top. \quad (2.6)$$

- (a) Najjednoduchší prípad nastáva, pokiaľ je σ_{n+1} , t. j. najmenšie singulárne číslo matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$, jednonásobné. Potom z Vety 2 máme, že minimálna oprava ktorá znižuje hodnotu rozšírenej matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ je v tvare $[\mathbf{d}, \mathbf{C}] = -\sigma_{n+1} \mathbf{u}_{n+1} \mathbf{v}_{n+1}^\top$, a má veľkosť $\|[\mathbf{d}, \mathbf{C}]\|_F = \sigma_{n+1}$. Položme teda $\mathbf{w} = \mathbf{v}_{n+1}$, a v prípade, že je prvá zložka vektoru \mathbf{v}_{n+1} nenulová, môžeme riešenie \mathbf{x}_{TLS} vyjadriť jednoznačne, obdobne ako v (2.5). Inak riešenie \mathbf{x}_{TLS} neexistuje.

Poznamenajme, že v knihe (Van Huffel a Vandewalle, 1991, kap. 2.3.2) je toto jednoznačné riešenie označované ako tzv. základné riešenie \mathbf{x}_{TLS} .

- (b) Zložitejší prípad riešime, pokiaľ je σ_{n+1} viacnásobné. Uvažujme podpriestor generovaný pravými singulárnymi vektormi prislúchajúcimi k tomuto viacnásobnému singulárnemu číslu. V prípade, že má aspoň jeden z týchto vektorov nenulovú prvú zložku, tak za \mathbf{w} volíme ľubovoľný vektor, ktorý je lineárnou kombináciou týchto vektorov. Riešenie \mathbf{x}_{TLS} potom získame obdobne ako v (2.5). Existuje teda nekonečne veľa riešení \mathbf{x}_{TLS} a hľadáme riešenie \mathbf{x}_{TLS} minimálne v norme. Poznamenajme, že aj v tomto prípade je veľkosť minimálnej opravy σ_{n+1} . Pokiaľ má každý z vektorov v tomto singulárnom priestore nulovú prvú zložku, tak riešenie \mathbf{x}_{TLS} neexistuje.

2. Nech $r < n$. Potom teda $\text{rank}([\mathbf{b}, \mathbf{A}]) < n + 1$ a v singulárnom rozklade rozšírenej matice (2.6) je prinajmenšom $\sigma_{n+1} = 0$. Riešenie \mathbf{x}_{TLS} v tomto prípade neexistuje.

Pre dôkazy týchto tvrdení o existencii a jednoznačnosti riešenia v zmysle TLS, podrobnejšiu analýzu a geometrický pohľad pozri (Golub a Van Loan, 1980) a (Van Huffel a Vandewalle, 1991, kap. 2-3). My sa k tejto analýze ešte vrátíme v rámci Kapitoly 3, v súvislosti s metódou tzv. orezaných TLS.

Poznámka. Postačujúcou podmienkou pre existenciu jednoznačného riešenia \mathbf{x}_{TLS} je tzv. Golub-Van Loanova podmienka (Golub a Van Loan, 1996, str. 596).

V prípade neexistencie riešenia \mathbf{x}_{TLS} môžeme nájsť tzv. negenerické riešenie. Tu rovnaký postup aplikujeme na najbližšie ostro väčšie singulárne číslo k najmenšiemu singulárnemu číslu matice (2.6) a k nemu príslušný priestor pravých singulárnych vektorov. Pre viac podrobností pozri (Van Huffel a Vandewalle, 1991, kap. 3.4). Algoritmus ktorý nám dáva riešenie \mathbf{x}_{TLS} , prípadne negenerické riešenie, môžeme nájsť v (Van Huffel a Vandewalle, 1991, kap. 3.6.1).

2.3 Scaled TLS

Ch. C. Paige a Z. Strakoš v článkoch (Paige a Strakoš, 2002a), (Paige a Strakoš, 2002b) preformulovali problém tzv. vážených TLS, ktorým sa zaoberal B. D. Rao v práci (Rao, 1997), ako problém tzv. škálovaných TLS. Uvedme si teraz jeho definíciu, konzistentne s predchádzajúcimi definíciami v tejto kapitole.

Definícia 12 (Škálovaný problém TLS). *Nech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Problémom škálovaných úplných najmenších štvorcov (Scaled TLS) budeme nazývať úlohu určenia $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tak, aby platilo*

$$\min_{\substack{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^m, \\ \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{m \times n}}} \|\mathbf{d}, \mathbf{C}\|_F \quad \text{za podmienky} \quad (\mathbf{A} + \mathbf{C})\mathbf{x}\gamma = \mathbf{b}\gamma + \mathbf{d},$$

kde $\gamma \in (0, \infty)$ je dané.

Poznámka. Pokiaľ predpokladáme, že chybami je zatažená iba matica \mathbf{A} , zatiaľ čo vektor \mathbf{b} je daný presne, hovoríme o probléme Data LS (DLS) (Paige a Strakoš, 2002b, str. 118).

Z Definície 12 vidíme, že pokiaľ γ zmeňujeme smerom k nule, môžeme opravu \mathbf{C} matice \mathbf{A} zanedbať a musíme zvyšovať hlavne opravu \mathbf{d} vektoru \mathbf{b} , teda chyby sú najmä v \mathbf{b} . Naopak, pokiaľ γ zväčšujeme do nekonečna, môžeme opravu \mathbf{d} vektoru \mathbf{b} zanedbať a musíme zvyšovať hlavne opravu \mathbf{C} matice \mathbf{A} , teda chyby sú najmä v \mathbf{A} . Parameter γ teda určuje veľkosti opráv \mathbf{d} a \mathbf{C} umožňuje nám škálovať množstvo chýb v \mathbf{b} a \mathbf{A} . Potom pre $\gamma \rightarrow 0$ dostávame problém LS, pre $\gamma = 1$ problém TLS a pre $\gamma \rightarrow \infty$ problém DLS, pozri (Paige a Strakoš, 2002a), (Paige a Strakoš, 2002b). Tu je možné nájsť aj podrobnú analýzu existencie a jednoznačnosti riešenia škálovaného problému TLS, ktorá je zovšeobecnením analýzy problému TLS, ale je oveľa komplikovanejšia.

Poznámka. V tejto kapitole sme sa zaoberali iba metódami najmenších štvorcov pre lineárne úlohy, pre nelineárne úlohy pozri (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, kap. 8-9, 12), (Björck, 1996, kap. 9).

3. Regularizačné metódy

Ako sme mohli vidieť už v Kapitole 1, pri riešení ill-posed úloh chceme potlačiť citlivosť riešenia na prítomný šum a získať tak stabilnejšie riešenie. Tento proces nazývame regularizácia. K tomu využijeme nástroje aproximácie matice maticou nižšej hodnoty zavedené v Kapitole 1 a metódy najmenších štvorcov zhrnuté v Kapitole 2. Budeme vychádzať z publikácií (Hansen, 2010, kap. 4–5), (Hansen, 1998, kap. 3–5) a článkov (Fierro a kol., 1997), (Hnětynková a kol., 2017).

Na úvod si ešte priblížme dôležitý koncept numerickej hodnoty matice, pozri (Tebbens a kol., 2012, kap. 5.6) a (Hansen, Pereyra a Scherer, 2013, str. 92–93). Tú budeme ďalej využívať pri regularizačných metódach. Bez ujmy na všeobecnosti uvažujme maticu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$. Pokiaľ $\exists h \in \mathbb{N}$, $1 \leq h < r$ tak, že

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_h \gg \sigma_{h+1} \approx \dots \approx \sigma_r \approx \varepsilon, \quad (3.1)$$

hovoríme, že matica \mathbf{A} má numericke hodnoty h . Ak uvažujeme, že $m = n$, t. j. \mathbf{A} je štvorcová matica s numericke hodnotou $h < r$, tak z numerickeho hľadiska je singularna, hoci z matematickeho hľadiska môže byť regularna pokiaľ $r = n$ (to sme mohli pozorovať v Experimente 1). Ak také h neexistuje a matica \mathbf{A} je regularna, hovoríme, že matica \mathbf{A} je aj z numerickeho hľadiska regularna. Aproximácia \approx v (3.1) však nie je matematicky presne kvantifikovaná. Numericke hodnoty matice teda môžeme pre rank-deficient úlohy stotožniť so skokom v singularných číslach príslušnej matice, ako sme uvažovali v Sekcii 1.2.

3.1 Filtračné regularizačné metódy

Všetky regularizačné metódy, ktoré budeme skúmať, majú spoločný znak. Môžeme ich definovať ako tzv. filtračné metódy. Regularizované riešenie úlohy (1.6) pre maticu \mathbf{A} s hodnotou r je potom možné zapísať v tvare

$$\mathbf{x}_{reg} := \sum_{i=1}^r \varphi_i^{[\tau]} \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i, \quad (3.2)$$

kde $\varphi_i^{[\tau]} \geq 0$, $i = 1, \dots, r$, sú tzv. filtračné faktory prislúchajúce danej regularizačnej metóde s regularizačným parametrom $\tau > 0$, porov. (Hansen, 2010, str. 53). Jednotlivé filtračné faktory $\varphi_i^{[\tau]}$, $i = 1, \dots, r$, teda môžeme chápať ako hodnoty funkcie, ktorá dvojici (τ, i) priradí nezáporné číslo $\varphi_i^{[\tau]}$.

Metóda	Filtračný faktor
Truncated-SVD	$\varphi_i^{[k]} = \mathbb{1}_{\{1, \dots, k\}}(i)$
Truncated-TLS	$\varphi_i^{[t]} = \sum_{l=t+1}^{r+1} \frac{\hat{v}_{1,l}^2}{\ \hat{\mathbf{V}}_{12}\ ^2} \cdot \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 - \hat{\sigma}_i^2}$
Tichonovská regularizácia	$\varphi_i^{[\lambda]} = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}$

Pozn: k, t, λ sú regularizačné parametre.

Tabuľka 3.1: Filtračné faktory pre vybrané priame regularizačné metódy.

Ich zhrnutie uvádzame pre prehľadnosť v Tabulke 3.1, podrobne si ich však odvodíme v nasledujúcich podkapitolách, kde bude zavedené aj potrebné značenie.

3.1.1 Truncated-SVD

Metóda Truncated-SVD (T-SVD) spočíva v orezaní tých komponent singulárneho rozkladu matice \mathbf{A} , $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$, ktoré zodpovedajú veľmi malým singulárnym číslam, pozri (Hansen, 2010, kap. 4.2). Je to z toho dôvodu, že komponenty riešenia úlohy (1.6) klasickými metódami pre tieto singulárne čísla obsahujú veľké množstvo invertovaného šumu, ako sme mohli vidieť pri naivnom riešení v Sekcii 1.3.

Regularizačný parameter označme k ; $k \in \mathbb{N}$, $k \leq r$. V hraničnom prípade $k = r$ neorezávame nič a riešime neregularizovanú úlohu (1.6) v zmysle LS. Ďalej teda budeme uvažovať $k < r$. Môžeme ho určiť napríklad z Picardovho grafu, resp. numerickej hodnoty matice \mathbf{A} v prípade rank-deficient úloh. To si bližšie vysvetlíme v Sekcii 3.3 a pri numerických experimentoch.

Analogicky ako v (1.5) definujeme maticu nižšej hodnoty,

$$\mathbf{A}_k := \sum_{i=1}^k \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top.$$

V zmysle Vety 2 je potom matica \mathbf{A}_k najlepšou aproximáciou matice \mathbf{A} . Ďalej zrejme pri vhodnej volbe parametra k platí, že

$$\kappa(\mathbf{A}_k) = \frac{\sigma_1}{\sigma_k} \ll \kappa(\mathbf{A}) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}.$$

Matica \mathbf{A}_k je teda lepšie podmienená ako matica \mathbf{A} .

Ekvivalentne potom riešime regularizovanú lineárnu aproximačnú úlohu

$$\mathbf{A}_k \mathbf{x} \approx \mathbf{b} \tag{3.3}$$

v zmysle LS. Ako sme videli v Kapitole 2, využitím pseudoinverzie matice (1.3) môžeme súhrnne zapísať riešenie úlohy (3.3) v zmysle LS v tvare

$$\mathbf{x}_{T-SVD(k)} := \sum_{i=1}^k \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i, \tag{3.4}$$

ktorým definujeme riešenie úlohy (1.6) metódou T-SVD pre regularizačný parameter k , porov. (Hansen, 2010, str. 56). Z analýzy problému LS vieme, že sa jedná o riešenie minimálne v norme, ktoré je v prípade plnej stĺpcovej hodnoty jediné možné riešenie. Preto sa metóda Truncated-SVD zvykne nazývať aj Truncated-LS.

Filtračné faktory pre metódu T-SVD teda majú veľmi jednoduchý tvar,

$$\varphi_i^{[k]} := \mathbb{1}_{\{1, \dots, k\}}(i) = \begin{cases} 1, & i = 1, \dots, k \\ 0, & i = k + 1, \dots, r. \end{cases} \tag{3.5}$$

V nasledujúcej vete si zapíšeme tvar regularizovaného riešenia pre túto metódu pomocou filtračných faktorov $\varphi_i^{[k]}$.

Veta 6 (T-SVD riešenie). *Uvažujme úlohu (1.6), $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$, a jej riešenie metódou Truncated-SVD s parametrom k , definované v (3.4). Potom toto regularizované riešenie môžeme pomocou filtračných faktorov definovaných v (3.5) ekvivalentne vyjadriť v tvare*

$$\mathbf{x}_{T-SVD(k)} := \sum_{i=1}^r \mathbb{1}_{\{1, \dots, k\}}(i) \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i.$$

Dôkaz. Priamym dosadením filtračných faktorov (3.5) do vzťahu (3.2) dostávame požadovaný tvar riešenia. □

3.1.2 Truncated-TLS

Metóda Truncated-TLS (T-TLS) spočíva obdobne ako metóda T-SVD v orezaní komponent singulárneho rozkladu, ktoré pri riešení úlohy (1.6) zosilňujú prítomný šum. Tentokrát ale musíme uvažovať singulárny rozklad rozšírenej matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$, ako sme mali pri metóde TLS. (Fierro a kol., 1997, str. 1224)

Podobne ako v Kapitole 2 predpokladajme, že $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$ a $\mathbf{b} \notin R(\mathbf{A})$. Potom $\text{rank}([\mathbf{b}, \mathbf{A}]) = r + 1$. Pre väčšiu prehľadnosť, ktorá sa nám bude hodiť neskôr, použijeme nasledujúce značenie pre singulárny rozklad matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$,

$$[\mathbf{b}, \mathbf{A}] = \hat{\mathbf{U}}_{r+1} \hat{\mathbf{\Sigma}}_{r+1} \hat{\mathbf{V}}_{r+1}^\top = \sum_{i=1}^{r+1} \hat{\sigma}_i \hat{\mathbf{u}}_i \hat{\mathbf{v}}_i^\top. \quad (3.6)$$

Využili sme ekonomický tvar SVD, resp. SVD v tvare dyadického rozvoja, pozri Veta 1.

Regularizačný parameter označme t ; $t \in \mathbb{N}$, $t \leq r + 1$. Tento parameter udáva počet sčítancov singulárneho rozkladu matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ v tvare dyadického rozvoja (3.6), ktoré chceme v plnej miere ponechať a zvyšné určitým spôsobom filtrovať. V prípade, že $t = r + 1$, nám daná metóda splýva s metódou TLS pre neregularizovanú úlohu. Ďalej teda uvažujme $t < r + 1$.

Najskôr skúsme intuitívne postupovať analogicky ako pri metóde T-SVD. Uvažujme singulárne čísla z (3.6) a nahradme $\hat{\sigma}_{t+1} = \dots = \hat{\sigma}_{r+1} = 0$. Sčítance v (3.6) pre $\hat{\sigma}_{t+1}, \dots, \hat{\sigma}_{r+1}$ teda budú nulové, a dostávame tak maticu

$$[\mathbf{b}_t, \mathbf{A}_t] := \sum_{i=1}^t \hat{\sigma}_i \hat{\mathbf{u}}_i \hat{\mathbf{v}}_i^\top, \quad (3.7)$$

ktorá má nižšiu hodnotu ako matica $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$. Navyše je aj lepšie podmienená, obdobne ako sme mali pri T-SVD. V zmysle Vety 2 (pre Frobeniovu normu) je teda matica (3.7) hodnotou t najlepšou aproximáciou matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$, a môžeme ekvivalentne riešiť regularizovanú úlohu

$$\mathbf{A}_t \mathbf{x} \approx \mathbf{b}_t, \quad (3.8)$$

v zmysle TLS. V podstate sa jedná o obdobu hľadania negenerického riešenia úlohy (1.6).

Pre úplnosť zmieňme, že opravu matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ v (3.6), ktorej výsledkom je matica $[\mathbf{b}_t, \mathbf{A}_t]$ v (3.7), môžeme vyjadriť ako maticu

$$[\mathbf{d}_t, \mathbf{C}_t] = - \sum_{i=t+1}^{r+1} \hat{\sigma}_i \hat{\mathbf{v}}_i \hat{\mathbf{u}}_i^\top. \quad (3.9)$$

Z Vety 2 (pre Frobeniovu normu) potom dostávame, že veľkosť tejto opravy je

$$\|[\mathbf{d}_t, \mathbf{C}_t]\|_F = \sqrt{\hat{\sigma}_{t+1}^2 + \dots + \hat{\sigma}_{r+1}^2}. \quad (3.10)$$

Všeobecnejší prístup k danému problému je predstavený v článkoch (Fierro a kol., 1997) a (Hnětynková, Plešinger a Žáková, 2017). Z neho budeme pri implementácii T-TLS vychádzať aj my. Zhrňme si ho teraz na základe citovaných článkov pre maticu \mathbf{A} hodnosti r , a podrobne ho rozanalyzujeme.

Najskôr je vhodné rozčleniť si maticu $\hat{\mathbf{V}}_{r+1} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (r+1)}$ z (3.6) v tvare blokovej schémy

$$\hat{\mathbf{V}}_{r+1} = \left[\underbrace{\hat{\mathbf{V}}_{11} \quad \hat{\mathbf{V}}_{12}}_t \quad \underbrace{\hat{\mathbf{V}}_{21} \quad \hat{\mathbf{V}}_{22}}_{r-t+1} \right] \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ n \end{matrix}. \quad (3.11)$$

Potom formulujeme pre parameter t dve podmienky:

- (i) $\hat{\sigma}_t > \mu > \hat{\sigma}_{t+1}; \quad \mu > 0$,
- (ii) $\hat{\mathbf{V}}_{12} = [\hat{v}_{1,t+1}, \dots, \hat{v}_{1,r+1}] \neq \mathbf{0}$.

Podmienka (i) zaručuje, že ponechané singulárne čísla budú väčšie ako dopredu daná konštanta $\mu > 0$, a singulárne čísla menšie ako táto konštanta budú určitým spôsobom filtrované. Je ju možné určiť napríklad z Picardovho grafu k danej rozšírenej matici, resp. na základe numerickej hodnoty tejto matice. Navyše prirodzene požadujeme, aby $\hat{\sigma}_t > \hat{\sigma}_{t+1}$, teda nedôjde k rozdeleniu vektorov z rovnakého singulárneho podpriestoru medzi bloky $\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_{11} \\ \hat{\mathbf{V}}_{21} \end{bmatrix}$ a $\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_{12} \\ \hat{\mathbf{V}}_{22} \end{bmatrix}$. Podmienka (ii) úzko súvisí s existenciou riešenia problému TLS, čo si ďalej lepšie ozrejníme.

Pokiaľ sú obe podmienky (i) a (ii), splnené pre nejaký regularizačný parameter t , tak môžeme definovať T-TLS riešenie úlohy (1.6) pre tento parameter v tvare

$$\mathbf{x}_{T-TLS(t)} := -\hat{\mathbf{V}}_{22} \hat{\mathbf{V}}_{12}^\dagger = -\hat{\mathbf{V}}_{22} \frac{\hat{\mathbf{V}}_{12}^\top}{\|\hat{\mathbf{V}}_{12}\|^2}, \quad (3.12)$$

pozri (Hnětynková a kol., 2017, str. 110). Druhá rovnosť v (3.12) vyplýva v dôsledku podmienky (ii) z vlastnosti pseudoinverzie (Golub a Van Loan, 1996, str. 257).

Poznámka. Ako sa uvádza v (Fierro a kol., 1997, str. 1226), najmenšiu opravu matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ v zmysle definície problému TLS je možné vyjadriť v rovnakom tvare ako sme predpokladali v intuitívnom postupe (3.9) a má aj rovnakú veľkosť (3.10). Potom (3.12) je riešením problému TLS s takouto opravou. Naproti tomu v intuitívnom postupe riešime úlohu v zmysle TLS s už opravenou maticou $[\mathbf{b}_t, \mathbf{A}_t]$, pre ktorú je nutné hľadať ďalšiu opravu v zmysle definície problému TLS.

T-TLS riešenie (3.12) je potom možné ekvivalentne vyjadriť v tvare (3.2), pre príslušné filtračné faktory. Tvar filtračných faktorov pre metódu T-TLS čerpáme z (Fierro a kol., 1997, str. 1229), resp. (Hnětynková a kol., 2017, str. 111). Myšlienka dôkazu je založená na skúmaní súvislostí medzi SVD matice \mathbf{A} a SVD matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ a obsahuje množstvo pomocných lemmát. Filtračné faktory pre túto metódu teda nebudeme v práci podrobne odvodzovať, ale si ich konzistentne preznačíme. Podrobné dôkazy je možné nájsť v (Fierro a kol., 1997, kap. 3).

Tvar regularizovaného riešenia úlohy (1.6) metódou T-TLS si pomocou filtračných faktorov vyjadríme v nasledujúcej vete. Vo vyššie citovanej práci je pre väčšiu prehľadnosť výkladu uvažovaný technický predpoklad, že singulárne čísla matíc \mathbf{A} a $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ sa nerovnajú pre žiadne indexy. Konkrétne v (Fierro a kol., 1997, kap. 3.1) je ukázané, že pokiaľ by sa σ_i a $\hat{\sigma}_j$ pre nejaké indexy rovnali, tak potom je nutne $\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b} = 0$ a teda $\varphi_i^{[t]}$ nie je potrebné definovať. To potom zaručuje, že sú filtračné faktory v nasledujúcej vete dobre definované.

Veta 7 (T-TLS riešenie). *Uvažujme úlohu (1.6), $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$, a jej riešenie metódou Truncated-TLS s parametrom t , definované v (3.12). Potom toto regularizované riešenie môžeme pomocou filtračných faktorov vyjadriť v tvare*

$$\mathbf{x}_{T-TLS(t)} := \sum_{i=1}^r \varphi_i^{[t]} \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i, \quad (3.13)$$

kde pre $\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b} \neq 0$

$$\varphi_i^{[t]} := \sum_{l=t+1}^{r+1} \frac{\hat{v}_{1,l}^2}{\|\hat{\mathbf{V}}_{12}\|^2} \cdot \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 - \hat{\sigma}_l^2} = \sum_{l=1}^t \frac{\hat{v}_{1,l}^2}{\|\hat{\mathbf{V}}_{12}\|^2} \cdot \frac{\sigma_i^2}{\hat{\sigma}_l^2 - \sigma_i^2}, \quad (3.14)$$

a inak dodefínujeme $\varphi_i^{[t]} := 0$.

Pripomeňme, že $\hat{\mathbf{V}}_{12}$ je podmatica, resp. vektor z matice $\hat{\mathbf{V}}_{r+1}$ zavedenej v (3.11). Potom priamo z definície euklidovskej normy vektoru, pozri (Golub a Van Loan, 1996, str. 52), platí

$$\|\hat{\mathbf{V}}_{12}\|^2 = \sum_{j=1}^{r-t+1} \hat{v}_{1,t+j}^2,$$

kde $\hat{v}_{1,z}$, $z = t+1, \dots, r+1$, sú prvky z $\hat{\mathbf{V}}_{12}$.

Poznámka. Odhady pre filtračné faktory (3.14) môžeme nájsť v (Fierro a kol., 1997, kap. 3.3).

Ako je zmienené v (Hnětynková a kol., 2017, str. 111), existuje modifikovaná úloha, ktorej riešenie v zmysle TLS sa zhoduje s T-TLS riešením definovaným v (3.12). My si túto úlohu teraz podrobne zavedieme, a vychádzajúc z analýzy metódy TLS v Sekcii 2.2 rozoberieme existenciu a jednoznačnosť jej riešenia v zmysle TLS.

Uvažujme, že máme dané $\mu > 0$ tak, aby platila podmienka (i) pre nejaký regularizačný parameter t . Potom pre singulárne čísla matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ v (3.6) platí

$$\hat{\sigma}_1 \geq \dots \geq \hat{\sigma}_t > \mu > \hat{\sigma}_{t+1} \geq \dots \geq \hat{\sigma}_{r+1}.$$

Inakosť tohoto prístupu spočíva v tom, že singulárne čísla, ktoré sú menšie ako konštanta μ nenahradíme nulou ako v intuitívnom prístupe, ale ľubovoľným kladným číslom menším ako μ , ktoré označíme $\hat{\sigma}$. V intuitívnom prístupe sme v podstate uvažovali namiesto $\hat{\sigma}$ nulu.

Uvažujme teda rozšírenú maticu, ktorá má singulárne čísla

$$\hat{\sigma}_1 \geq \dots \geq \hat{\sigma}_t > \underbrace{\hat{\sigma} = \dots = \hat{\sigma}}_{r-t+1} > 0,$$

a singulárne vektory má rovnaké ako matica $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ z (3.6). Singulárne číslo $\hat{\sigma}$ má násobnosť $r - t + 1$. Túto rozšírenú maticu označme

$$[\tilde{\mathbf{b}}, \tilde{\mathbf{A}}] := \sum_{i=1}^t \hat{\sigma}_i \hat{\mathbf{v}}_i \hat{\mathbf{u}}_i^\top + \sum_{i=t+1}^{r+1} \hat{\sigma} \hat{\mathbf{v}}_i \hat{\mathbf{u}}_i^\top. \quad (3.15)$$

Ekvivalentne potom v zmysle TLS riešime úlohu

$$\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} \approx \tilde{\mathbf{b}}. \quad (3.16)$$

Pokiaľ je podmienka (ii) pre parameter t zvolený pri podmienke (i) splnená, tak riešenie regularizovanej úlohy (3.16) v zmysle TLS existuje a môžeme ho vyjadriť v tvare

$$\mathbf{x}_{TLS}^{(t)} = -\hat{\mathbf{V}}_{22} \hat{\mathbf{V}}_{12}^\dagger = -\hat{\mathbf{V}}_{22} \frac{\hat{\mathbf{V}}_{12}^\top}{\|\hat{\mathbf{V}}_{12}\|^2}, \quad (3.17)$$

čo je rovnaké ako (3.12). Toto je najvšeobecnejšie vyjadrenie tvaru TLS riešenia, pokiaľ existuje. V prípade existencie by sme analogicky mohli zapísať aj riešenie problému TLS, ktorým sme sa zaoberali v Sekcii 2.2, pozri (Van Huffel a Vandewalle, 1991, str. 62).

Pokiaľ je $t = r$, tak $\hat{\sigma}$ je jednonásobné singulárne číslo a riešenie (3.17) je jednoznačné, pozri prípad 1.(a) pri metóde TLS. To by ale znamenalo, že filtrujeme iba jedno najmenšie singulárne číslo matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$, čo by bolo v reálnych úlohách nedostatočné. Uvažujme teda, že $t < r$, resp. $r - t + 1 > 1$. Potom $\hat{\sigma}$ je viacnásobné singulárne číslo, takže nemáme jednoznačnosť riešenia. Riešenie (3.17) potom reprezentuje riešenie úlohy (3.16) v zmysle TLS minimálne v norme, pozri prípad 1.(b) pri metóde TLS. V oboch týchto prípadoch je ale veľkosť opravy, ktorá znižuje hodnotu matice $[\tilde{\mathbf{b}}, \tilde{\mathbf{A}}]$, rovná $\hat{\sigma}$. Práve tu najlepšie vidíme, že singulárne čísla menšie ako μ sú v priebehu regularizácie odstránené.

Pokiaľ je ale podmienka (ii) porušená, tak riešenie úlohy (3.16) v zmysle TLS neexistuje, ale je možné nájsť negenerické riešenie, ktoré sme stručne predstavili pri metóde TLS.

Zdôraznime, že pokiaľ $\text{rank}(\mathbf{A}) = r < n$, tak riešenie regularizovanej úlohy (3.16) je v každom prípade obdobou negenerického riešenia úlohy (1.6) v zmysle TLS, pozri prípad 2. pri metóde TLS.

Podobne ako pri prvom prístupe poznamenajme, že matica $[\tilde{\mathbf{b}}, \tilde{\mathbf{A}}]$ v (3.15) je výsledkom opravy matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$ v (3.6). Tentokrát ale neznižujeme hodnotu matice $[\mathbf{b}, \mathbf{A}]$, no dostávame modifikovanú úlohu, ktorú môžeme riešiť v zmysle TLS. Túto opravu môžeme vyjadriť maticou

$$[\tilde{\mathbf{d}}, \tilde{\mathbf{C}}] = - \sum_{i=t+1}^{r+1} (\hat{\sigma} - \hat{\sigma}_i) \hat{\mathbf{v}}_i \hat{\mathbf{u}}_i^\top, \quad (3.18)$$

a jej veľkosť je

$$\|[\tilde{\mathbf{d}}, \tilde{\mathbf{C}}]\|_F = \sqrt{\sum_{i=t+1}^{r+1} (\hat{\sigma} - \hat{\sigma}_i)^2}. \quad (3.19)$$

3.1.3 Tichonovská regularizácia

Riešenie úlohy (1.6) metódou Tichonovskej regularizácie, $\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)}$, dostávame ako riešenie problému

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2 + \lambda^2 \|\mathbf{x}\|^2\}. \quad (3.20)$$

Prvý sčítanec reprezentuje normu rezidua a meria, ako dobre fitujeme vektor \mathbf{b} na model \mathbf{A} . Druhý sčítanec meria regularitu riešenia a je škálovaný regularizačným parametrom $\lambda > 0$. (Hansen, 1998, str. 100)

V nasledujúcej vete si uvedieme tvar filtračných faktorov pre metódu Tichonovskej regularizácie, a teda aj tvar regularizovaného riešenia úlohy (1.6) získaného touto metódou, porov. (Hansen, 2010, kap. 4.4). Následne urobíme podrobný dôkaz, v ktorom si odvodíme príslušné filtračné faktory a budeme môcť opäť vidieť spojitost tejto metódy s metódou LS.

Veta 8 (Tichonovské riešenie). *Uvažujme úlohu (1.6), $\text{rank}(\mathbf{A}) = r$, a jej riešenie metódou Tichonovskej regularizácie (3.20) s parametrom $\lambda > 0$. Potom toto riešenie môžeme pomocou filtračných faktorov vyjadriť v tvare*

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} := \sum_{i=1}^r \varphi_i^{[\lambda]} \frac{\mathbf{u}_i^\top \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i, \quad \varphi_i^{[\lambda]} := \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (3.21)$$

Dôkaz. Problém (3.20) si môžeme ekvivalentne prepísať do tvaru

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \mathbf{x} - \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|, \quad (3.22)$$

a následne túto optimalizačnú úlohu riešiť v zmysle LS, pozri (2.2). Na základe Vety 5 rozlíšime dva prípady:

1. Nech $r = n$. Potom môžeme riešenie úlohy (3.22) vyjadriť ako riešenie sústavy normálnych rovníc

$$(\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \lambda^2 \mathbf{I}_n) \mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b},$$

v tvare

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \lambda^2 \mathbf{I}_n)^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{b}.$$

To ďalej využitím singularného rozkladu matice \mathbf{A} , pozri Veta 1 (maticová verzia), upravíme na tvar

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = ((\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\top)^\top (\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\top) + \lambda^2 \mathbf{I}_n)^{-1} (\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\top)^\top \mathbf{b}.$$

Využitím toho, že platí:

- $(\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\top)^\top = \mathbf{V}\Sigma^\top\mathbf{U}^\top$, z vlastnosti transponovania matíc,
- $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{U}^\top\mathbf{U} = \mathbf{I}_m$, $\mathbf{V}\mathbf{V}^\top = \mathbf{V}^\top\mathbf{V} = \mathbf{I}_n$, z ortogonalít matíc \mathbf{U} , \mathbf{V} ,

ďalej upravujeme

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} &= (\mathbf{V}\Sigma^\top\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top + \lambda^2\mathbf{V}\mathbf{V}^\top)^{-1}\mathbf{V}\Sigma^\top\mathbf{U}^\top\mathbf{b} \\ &= (\mathbf{V}(\Sigma^\top\mathbf{\Sigma} + \lambda^2\mathbf{I}_n)\mathbf{V}^\top)^{-1}\mathbf{V}\Sigma^\top\mathbf{U}^\top\mathbf{b}.\end{aligned}$$

Nakoniec využijeme, že platí vzťah

$$\begin{aligned}(\mathbf{V}(\Sigma^\top\mathbf{\Sigma} + \lambda^2\mathbf{I}_n)\mathbf{V}^\top)^{-1} &= (\mathbf{V}^\top)^{-1}(\Sigma^\top\mathbf{\Sigma} + \lambda^2\mathbf{I}_n)^{-1}\mathbf{V}^{-1} \\ &= \mathbf{V}(\Sigma^\top\mathbf{\Sigma} + \lambda^2\mathbf{I}_n)^{-1}\mathbf{V}^\top,\end{aligned}$$

z vlastnosti invertovania matíc a ortogonalít matice \mathbf{V} .

Dostávame teda výsledný tvar

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = \mathbf{V}(\Sigma^\top\mathbf{\Sigma} + \lambda^2\mathbf{I}_n)^{-1}\Sigma^\top\mathbf{U}^\top\mathbf{b}. \quad (3.23)$$

2. Nech $r < n$. Potom môžeme riešenie úlohy (3.22) vyjadriť v tvare

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = (\mathbf{A}^\top\mathbf{A} + \lambda^2\mathbf{I}_n)^\dagger\mathbf{A}^\top\mathbf{b}.$$

Na základe vzťahu (1.2) pre Moore-Penroseovu pseudoinverziu, Vety 1 (ekonomický tvar) a vzťahov

- $\Sigma_r^\top = \Sigma_r$, z vlastností diagonálnych matíc,
- $(\Sigma_r^2 + \lambda^2\mathbf{I}_r)^\dagger = (\Sigma_r^2 + \lambda^2\mathbf{I}_r)^{-1}$, nakoľko štvorcová diagonálna matica s nenulovými prvkami na diagonále je regulárna,

dostávame (obdobnými úpravami ako v prvom prípade) výsledný tvar

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = \mathbf{V}_r(\Sigma_r^2 + \lambda^2\mathbf{I}_r)^{-1}\Sigma_r\mathbf{U}_r^\top\mathbf{b}. \quad (3.24)$$

Poznamenajme, že vzťahy ktoré sme pri úpravách využívali, sú známe z lineárnej algebry. Využitím Vety 1 (dyadický rozvoj), môžeme vzťahy (3.23) a (3.24) zapísať súhrnne v tvare

$$\mathbf{x}_{Tichonov(\lambda)} = \sum_{i=1}^r \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \frac{\mathbf{u}_i^\top\mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i,$$

odkiaľ už ľahko dostávame riešenie a filtračné faktory v tvare (3.21). □

Z Vety 8 ihneď vidíme, že filtračné faktory $\varphi_i^{[\lambda]}$ definované v (3.21) sú z otvoreného intervalu $(0,1)$. Aby sme mali lepšiu predstavu ako tieto filtračné faktory vyzerajú, odvodíme si ich Taylorov rozvoj, porov. (Hansen, 2010, str. 80). Rozlíšime dva prípady:

1. Nech $\sigma_i \gg \lambda$. Potom upravujeme

$$\begin{aligned}\varphi_i^{[\lambda]} &= \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^2} = \left(1 + \left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^2\right)^{-1} = \\ &= 1 - \left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^4\right) = 1 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^2\right).\end{aligned}$$

2. Nech $\sigma_i \ll \lambda$. Potom upravujeme

$$\begin{aligned}\varphi_i^{[\lambda]} &= \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} = \frac{\left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2}{\left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2 + 1} = \left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2 \left(1 + \left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2\right)^{-1} = \\ &= \left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2 \left(1 - \left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^4\right)\right) = \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^4\right).\end{aligned}$$

V oboch prípadoch sme využili Taylorov rozvoj funkcie

$$(1 + z)^{-1} = 1 - z + \mathcal{O}(z^2), \quad z \rightarrow 0, \quad (3.25)$$

pozri (Hájková a kol., 2012, str. 345–346). Symbol $\mathcal{O}(\cdot)$ nám reprezentuje tzv. chybovú funkciu, pozri (Hájková a kol., 2012, kap. 10.1). V prvom prípade sme (3.25) použili pre $z = \frac{\lambda}{\sigma_i} \rightarrow 0$, pre $\sigma_i \gg \lambda$. Obdobne sme v druhom prípade (3.25) použili pre $z = \frac{\sigma_i}{\lambda} \rightarrow 0$, pre $\sigma_i \ll \lambda$. Dokázali sme tak nasledujúce lemma.

Lemma 9. *Filtračné faktory $\varphi_i^{[\lambda]}$ pre Tichonovskú regularizáciu definované v (3.21), môžeme pomocou Taylorovho rozvoja vyjadriť v tvare*

$$\varphi_i^{[\lambda]} = \begin{cases} 1 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\lambda}{\sigma_i}\right)^2\right), & \sigma_i \gg \lambda \\ \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\sigma_i}{\lambda}\right)^4\right), & \sigma_i \ll \lambda, \end{cases} \quad i = 1, \dots, r.$$

Vo výsledku teda dostávame aproximáciu (pozri (Hansen, 2010, str. 62))

$$\varphi_i^{[\lambda]} \approx \begin{cases} 1, & \sigma_i \gg \lambda \\ \frac{\sigma_i^2}{\lambda^2}, & \sigma_i \ll \lambda, \end{cases} \quad i = 1, \dots, r, \quad (3.26)$$

ktorej význam si upresníme pri numerických experimentoch v závere tejto kapitoly.

Poznámka. Tichonovskú regularizáciu sme uvažovali v zjednodušenom tvare. V literatúre je možné nájsť všeobecnejšiu formuláciu, pozri (Hansen, 1998, kap. 5.1) a referencie v nej. Toto zovšeobecnenie si môžeme predstaviť tak, že by sme v (3.22) uvažovali namiesto jednotkovej matice \mathbf{I}_n maticu $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $p \in \mathbb{N}$, $\mathbf{L} \neq \mathbf{I}_n$, ktorá môže byť napríklad váhová diagonálna matica (Hansen, 1998, str. 12).

3.2 Iteračné regularizačné metódy

Z tvaru (3.4) T-SVD riešenia si môžeme všimnúť, že nepotrebujeme počítat celý singulárny rozklad matice \mathbf{A} , ale iba jeho časť. Špeciálne pre rastúce k , kde k je regularizačný parameter, môžeme počítat postupne dominantné singulárne triplety. To je možné numerickou aproximáciou tripletov aj iteračne, napr. Krylovskými metódami. Prípadne je možné využiť iteračné metódy pre sústavu normálnych rovníc, pre regularizovanú úlohu (3.3). Obdobne je možné postupovať pri T-TLS, alebo využiť algoritmus založený na Lanczosovej bidiagonalizácii, pozri

(Fierro a kol., 1997, kap. 4). V prípade Tichonovskej regularizácie musíme počítať celý (ekonomický) SVD rozklad, resp. všetky singulárne triplety, čo vidíme zo vzťahu (3.21). Avšak iteračné metódy môžeme využiť pri riešení minimalizačného problému (3.20) z Tichonovskej regularizácie.

Reálne úlohy sú ale často reprezentované modelmi s obrovskými maticami, tzv. large-scale úlohy, ktoré so sebou prinášajú veľké časové a pamäťové nároky pri ich riešení. Tieto matice mávajú potom taktiež riedku štruktúru, teda obsahujú veľké množstvo núl. V takomto prípade nie je vhodné počítať aproximácie riešenia pomocou SVD, ale vhodnejšie sú iteračné metódy. Základné delenie je na klasické stacionárne a projekčné iteračné metódy, zahrňujúce metódy založené na Krylovovských podpriestoroch. V neposlednom rade sú využívané aj hybridné metódy, v ktorých sa spája projekcia a následná regularizácia projektovaného problému. Týmto metódam sa však v tejto práci nevenujeme, pre viac podrobností pozri (Hansen, 2010, kap. 6) a (Hansen, 1998, kap. 6).

3.3 Výber regularizačného parametra

Pri voľbe regularizačného parametra musíme nájsť dobrý kompromis. Pri nevhodnej voľbe totiž môže byť naše riešenie podregularizované, prípadne preregularizované. Môžeme si všimnúť rozdiel medzi regularizačnými a perturbačnými chybami a absolútnu chybu regularizovaného riešenia. Ďalej býva používaný princíp diskrepancie, kritérium L-krivky a rôzne iné kritériá založené na štatistickom výbere, napr. Generalized Cross Validation. Pre viac podrobností pozri (Hansen, 2010, kap. 5), (Hansen, 1998, kap. 7.1–7.5). Pri iteračných metódach hrá zase rolu regularizačného parametra počet iterácií.

Poznamenajme, že pre oba typy úloh, rank-deficient a ill-posed, používame rovnaké regularizačné metódy, avšak rozdiel je vo voľbe regularizačného parametra. Pre rank-deficient úlohy využívame s výhodou numerickú hodnotu matice problému, resp. skok v singulárnych číslach. Pre ostatné ill-posed úlohy však musíme využiť sofistikovanejšie metódy, ako už vyššie spomínaná L-krivka, princíp diskrepancie, atď.

3.4 Numerické porovnanie skúmaných metód

Tvar dyadického rozvoja regularizovaného riešenia pomocou filtračných faktorov (3.2), ktorý sme mali predstavený v úvode tejto kapitoly, bol výhodný pre teoretickú analýzu danej problematiky. Pre numerickú aproximáciu riešenia ale nebude najvhodnejší, nakoľko SVD rozklad matice dostávame využitím Matlabovskej funkcie *svd* v maticovom tvare. Preto si ho skôr ako sa pustíme do numerických experimentov upravíme.

Uvažujme maticu

$$\Phi^{[\tau]} = \begin{bmatrix} \Phi_r^{[\tau]} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \Phi_r^{[\tau]} = \text{diag}(\varphi_1^{[\tau]}, \dots, \varphi_r^{[\tau]}) \in \mathbb{R}^{r \times r},$$

kde $\varphi_i^{[\tau]}$, $i = 1, \dots, r$, sú filtračné faktory pre jednotlivé regularizačné metódy s regularizačným parametrom $\tau > 0$. Potom s využitím maticovej verzie, resp.

ekonomického tvaru singulárneho rozkladu (pozri Veta 1), dostávame pre (3.2) ekvivalentný tvar,

$$\mathbf{x}_{reg} = \mathbf{V}\Phi^{[\tau]}\Sigma^\dagger\mathbf{U}^\top\mathbf{b} = \mathbf{V}_r\Phi_r^{[\tau]}\Sigma_r^{-1}\mathbf{U}_r^\top\mathbf{b}.$$

Vráťme sa ešte k citlivosti riešenej úlohy. Ako sa uvádza v (Drkošová a Strakoš, 1997, str. 64–65), relatívnu chybu aproximácie riešenia je možné odhadnúť ešte iným spôsobom ako tým, ktorý sme si predstavili vo Vete 4. V citovanej publikácii je daný odhad modifikovaný pre regulárnu maticu a neperturovanú pravú stranu. My si ho modifikujeme pre všeobecnú obdĺžnikovú maticu, pravú stranu s pridaným šumom a regularizované riešenie.

Uvažujme teda úlohu (1.6) s perturbovanou pravou stranou ako v Sekcii 1.2, t. j. $\mathbf{b} = \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e}$. Ďalej predpokladajme, že existuje nenulové presné riešenie \mathbf{x}_{exact} tejto úlohy, ktoré splňuje $\mathbf{A}\mathbf{x}_{exact} = \mathbf{b}_{exact}$ pre neznámu nenulovú presnú pravú stranu \mathbf{b}_{exact} , a \mathbf{x}_{reg} je regularizované riešenie tejto úlohy vybranou regularizačnou metódou, t. j. aproximácia presného riešenia \mathbf{x}_{exact} . Pre reziduum regularizovaného riešenia potom platí

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_{reg} \\ &= \mathbf{b}_{exact} + \mathbf{e} - \mathbf{A}(\mathbf{x}_{exact} + \mathbf{x}_{reg} - \mathbf{x}_{exact}) \\ &= \mathbf{e} - \mathbf{A}(\mathbf{x}_{reg} - \mathbf{x}_{exact}).\end{aligned}$$

Z toho využitím pseudoinverzie hneď dostávame

$$\mathbf{x}_{exact} - \mathbf{x}_{reg} = \mathbf{A}^\dagger(\mathbf{r} - \mathbf{e}).$$

Pre relatívnu aproximáciu presného riešenia regularizovaným riešením potom platí odhad

$$\frac{\|\mathbf{x}_{exact} - \mathbf{x}_{reg}\|}{\|\mathbf{x}_{exact}\|} \leq \|\mathbf{A}^\dagger\| \frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{e}\|}{\|\mathbf{x}_{exact}\|} = \kappa(\mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{e}\|}{\|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}_{exact}\|} \leq \kappa(\mathbf{A}) \frac{\|\mathbf{r}\| + \|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{b}_{exact}\|}. \quad (3.27)$$

Využili sme vzťah (1.4) pre zovšeobecnené číslo podmienenosti matice a trojuholníkovú nerovnosť pre normu. Z (3.27) teda vidíme, že hoci môžeme mať malé reziduum aj malé perturbácie pravej strany, tak pre zle podmienenú úlohu bude tento odhad v dôsledku veľkého čísla podmienenosti matice nadhodnotený. Špeciálne vidíme, že malá norma rezidua nie je všeobecne vhodným ukazovateľom dobrej aproximácie riešenia.

Nakolko budeme v experimentoch skúmať úlohy pre zle podmienené matice, tak norma rezidua pre nás nebude tým správnym vodítkom pri určovaní chyby riešenia. Definujme si ale tzv. absolútnu chybu (Golub a Van Loan, 1996, str. 53) pre regularizované riešenie, ako číslo

$$\epsilon_{abs} = \|\mathbf{x}_{exact} - \mathbf{x}_{reg}\|, \quad (3.28)$$

kde je \mathbf{x}_{exact} presné a \mathbf{x}_{reg} regularizované riešenie danej úlohy pre vybranú regularizačnú metódu. Zvykne sa nazývať aj skutočná chyba aproximácie riešenia, tzv. true error. Poznamenajme, že v praxi \mathbf{x}_{exact} nepoznáme, preto je tento koncept vhodný najmä pre teoretické skúmanie.

Pri úlohách z Regularizačného Toolboxu (Hansen, 2007), ktoré budeme riešiť v experimentálnej časti tejto práce, budeme mať dané aj \mathbf{x}_{exact} . Veľkosť chyby

(3.28) potom teda budeme využívať v našich numerických experimentoch ako hlavný nástroj pre určenie vhodného regularizačného parametra. Urobíme to tak, že pre danú metódu si spočítame absolútne chyby pre rôzne regularizačné parametre a vyberieme ten parameter, pre ktorý je najmenšia. Vhodným výberom parametra sa totiž snažíme minimalizovať túto chybu a nájsť čo najlepšiu aproximáciu presného riešenia.

3.4.1 Implementácia metód

Na úvod zdôraznime, že cieľom je ilustračné porovnanie metód. Nezameriame sa na najefektívnejšiu implementáciu. Pre efektívne metódy pozri diskusiu v Kapitole 3.2 a príslušné funkcie z Regularizačného Toolboxu (Hansen, 2007). Taktiež z hľadiska funkčnosti kódu neošetrujeme korektnosť voľby regularizačného parametra. Ten volíme v experimentoch adaptívne.

Úlohy, ktoré budeme v numerických experimentoch riešiť, majú štvorcovú maticu. Pripomeňme, že ani v tomto prípade ich z dôvodu prítomnosti šumu nie je možné riešiť priamo, ale musíme ich regularizovať. Uvažujme teda úlohu (1.6) pre maticu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ako prvé si naimplementujeme analyzované metódy pomocou filtračných faktorov. Potom takto vytvorené funkcie budeme používať pri hľadaní numerickej aproximácie riešenia úloh v experimentoch.

Funkcie pre výpočet regularizovaného riešenia pre jednotlivé metódy budú mať rovnaké parametre vstupu aj výstupu. Budú sa odlišovať iba vo výpočte matice filtračných faktorov, čo v príslušných kódoch zvýrazníme červenou farbou.

VSTUP: štvorcová matica úlohy, vektor pravej strany, presné riešenie úlohy, vektor regularizačných parametrov.

VÝSTUP: matica obsahujúca vo svojich stĺpcoch regularizované riešenia pre jednotlivé regularizačné parametre, vektor absolútnych chýb pre jednotlivé regularizačné parametre.

```
function [x_metoda,abschyba_metoda] = metoda(A,b,x_exact,tau)
n = size(A,1);
[U,S,V] = svd(A);
d = length(tau);
x_metoda = zeros(n,d);
abschyba_metoda = zeros(d,1);
for i = 1:d
    j = tau(i);
    : (výpočet matice F)
    x_metoda(:,i) = V*F*pinv(S)*U'*b;
    abschyba_metoda(i) = norm(x_exact - x_metoda(:,i));
end
```

Teraz si uvedieme konkrétne implementácie pre jednotlivé metódy.

- T-SVD

```

1  function [x_TSVD,abschyba_TSVD] = TSVD(A,b,x_exact,k)
2  n = size(A,1);
3  [U,S,V] = svd(A);
4  d = length(k);
5  x_TSVD = zeros(n,d);
6  abschyba_TSVD = zeros(d,1);
7  for i = 1:d
8      j = k(i);
9      F = zeros(n);
10     F(1:j,1:j) = eye(j);
11     x_TSVD(:,i) = V*F*pinv(S)*U'*b;
12     abschyba_TSVD(i) = norm(x_exact - x_TSVD(:,i));
13 end

```

- T-TLS

```

1  function [x_TTLS,abschyba_TTLS] = TTLS(A,b,x_exact,t)
2  n = size(A,1);
3  [U,S,V] = svd(A);
4  d = length(t);
5  x_TTLS = zeros(n,d);
6  abschyba_TTLS = zeros(d,1);
7  for i = 1:d
8      j = t(i);
9      F = zeros(n);
10     [U_t,S_t,V_t] = svd([b,A]);
11     for l = 1:n
12         konst = S(1,1)^2/norm(V_t(1,(j+1):(n+1)))^2;
13         scitance = zeros(j,1);
14         for z = 1:j
15             scitance(z) = konst*V_t(1,z)^2/(S_t(z,z)^2-S(1,1)^2);
16         end
17         F(1,1) = sum(scitance);
18     end
19     x_TTLS(:,i) = V*F*pinv(S)*U'*b;
20     abschyba_TTLS(i) = norm(x_exact - x_TTLS(:,i));
21 end

```

- Tichonovská regularizácia

```

1  function [x_Tich,abschyba_Tich] = Tich(A,b,x_exact,lambda)
2  n = size(A,1);
3  [U,S,V] = svd(A);
4  d = length(lambda);
5  x_Tich = zeros(n,d);
6  abschyba_Tich = zeros(d,1);
7  for i = 1:d
8      j = lambda(i);
9      F = zeros(n);
10     for l = 1:n
11         F(1,1) = S(1,1)^2/(S(1,1)^2+j^2);
12     end
13     x_Tich(:,i) = V*F*pinv(S)*U'*b;
14     abschyba_Tich(i) = norm(x_exact - x_Tich(:,i));
15 end

```

3.4.2 Numerické experimenty

Ako prvé nadviažeme na Experiment 1 a pomocou analyzovaných regularizačných metód budeme hľadať aproximáciu riešenia pre úlohu Shaw(24).

Experiment 2. Uvažujme úlohu Shaw z Regularizačného Toolboxu (Hansen, 2007) pre $n = 24$, a pravú stranu s pridaným náhodným šumom veľkosti $\nu = 1e - 6$ ako v Experimente 1. Najskôr si vykreslíme presné riešenie tejto úlohy a regularizované riešenia metódou T-SVD pre vybrané parametre k , Obrázok 3.1(a). Môžeme vidieť, že pre $k = 10$ máme veľmi dobrú aproximáciu presného riešenia. To odpovedá aj záveru, ktorý sme vyvodili z Picardovho grafu, resp. DPC pre túto hladinu šumu, pozri Experiment 1. Pre $k = 1$ je naše riešenie tzv. preregularizované, pre $k = 20$ zase tzv. podregularizované. V týchto prípadoch teda nedostávame dobrú aproximáciu.

Ďalej si vykreslíme absolútne chyby pre jednotlivé metódy s vybranými regularizačnými parametrami a ich minimálne hodnoty, Obrázky 3.1(b), 3.1(c), 3.1(d). Parametre k a t volíme od 1 do 24. Pre vytvorenie vektora parametrov λ sme použili Matlabovský príkaz `logspace(-5, -4)`, čím dostaneme 50 logaritmicky rovnako rozmiestnených bodov z intervalu $(10^{-5}, 10^{-4})$. Veľkosť tohoto intervalu sme volili pokusne. Minimálne absolútne chyby dostávame pre parametre $k = 10$, $t = 10$ a $\lambda = 2.560e - 05$.

Pre $\lambda = 2.560e - 05$ si ešte vykreslíme filtračné faktory pre Tichonovskú regularizáciu a príslušné singulárne čísla, Obrázok 3.1(e). Môžeme pozorovať, že pre filtračné faktory skutočne platí aproximácia (3.26), ktorú sme si odvodili pri teoretickom skúmaní Tichonovskej regularizácie.

Nakoniec si vykreslíme regularizované riešenia úlohy pre jednotlivé metódy a príslušné parametre, ktoré sme zvolili ako najoptimálnejšie, Obrázok 3.1(f). Môžeme pozorovať, že každá z týchto metód veľmi dobre aproximuje presné riešenie. Taký dobrý výsledok sme dostali zrejme vďaka dobrej voľbe regularizačných parametrov a taktiež malej dimenzii úlohy.

V ďalšom experimente sa bližšie pozrieme na úlohu, ktorú už nezaraďujeme medzi rank-deficient úlohy. Taktiež zvolíme omnoho väčšiu dimenziu.

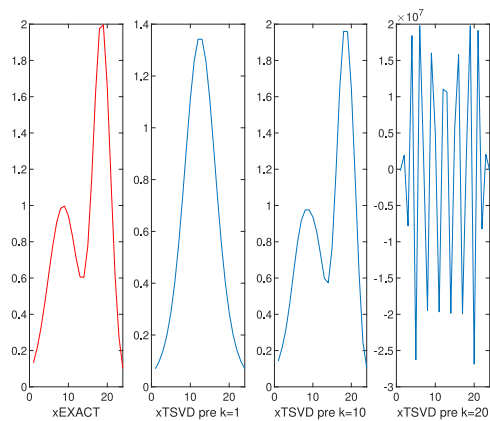
Experiment 3. Uvažujme úlohu Phillips z Regularizačného Toolboxu (Hansen, 2007) pre $n = 800$, a pravú stranu s pridaným náhodným šumom veľkosti $\nu = 1e - 4$. Táto úloha vznikla podobne ako úloha Shaw diskretizáciou Fredholmových integrálnych rovníc. Keď si vykreslíme presné riešenie a naivné riešenie pre pravú stranu s pridaným šumom, Obrázok 3.2(a), ihneď vidíme, že je potrebná regularizácia.

Ďalej si môžeme pre túto úlohu vykresliť Picardov graf, Obrázok 3.2(b). Pozorujeme, že singulárne čísla klesajú bez nejakého výrazného skoku postupne k nule, teda túto úlohu zaraďujeme medzi ill-posed úlohy. Taktiež si všimnime, že DPC je splnená len pre prvých pár singulárnych čísel, čomu bude potom zodpovedať aj voľba regularizačného parametra.

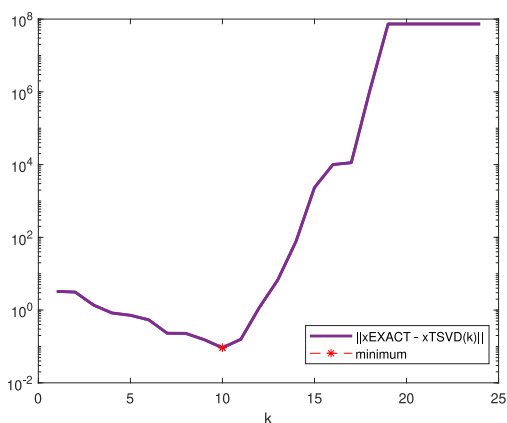
Absolútne chyby regularizovaného riešenia a príslušné minimá, si vykreslíme pre parametre k a t od 0 do 50, Obrázok 3.2(c), a pre $\lambda = \text{logspace}(-2.5, -1.5)$, Obrázok 3.2(d). Ako optimálne parametre volíme $k = 17$, $t = 17$ a $\lambda = 0.015$. Špeciálne z Obrázku 3.2(c) ďalej pozorujeme, že pre menšie hodnoty vybraných regularizačných parametrov má lepšie regularizačné vlastnosti metóda T-TLS,

pre väčšie zase T-SVD. Na okolí parametrov, ktoré sme určili ako optimálne majú však obe metódy rovnako dobré regularizačné vlastnosti.

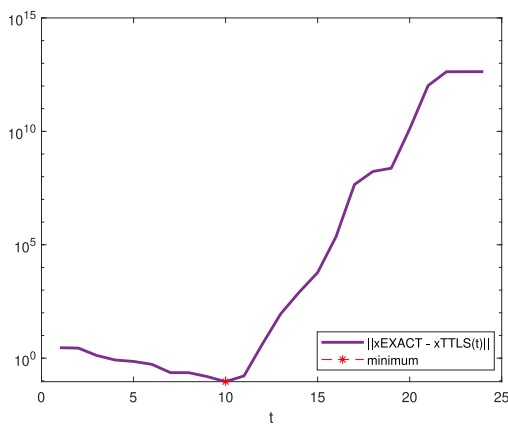
Pre ukážku si ešte vykreslime aproximáciu riešenia metódami T-SVD(50) a T-TLS(50), Obrázok 3.2(e). Oproti naivnému riešeniu pozorujeme celkom dobrú aproximáciu, avšak stále je riešenie podregularizované. Na záver si vykreslime aproximácie riešenia danej úlohy pre najoptimálnejšie regularizačné parametre a jednotlivé metódy, Obrázok 3.2(f). Znovu môžeme vidieť, že každá z týchto metód pri vhodnej voľbe regularizačného parametra veľmi dobre aproximuje presné riešenie, hoci má úloha väčšiu dimenziu a obsahuje viac šumu.



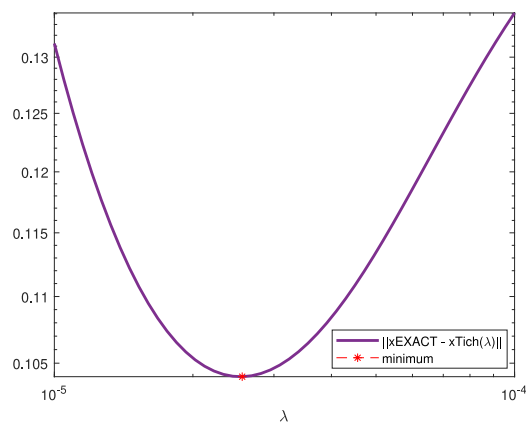
(a) Vykreslenie presného riešenia a vybraných regul. riešení pre T-SVD



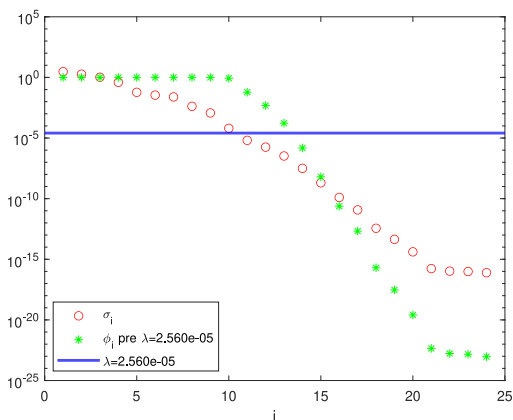
(b) Vykreslenie absolútnej chyby pre metódu T-SVD



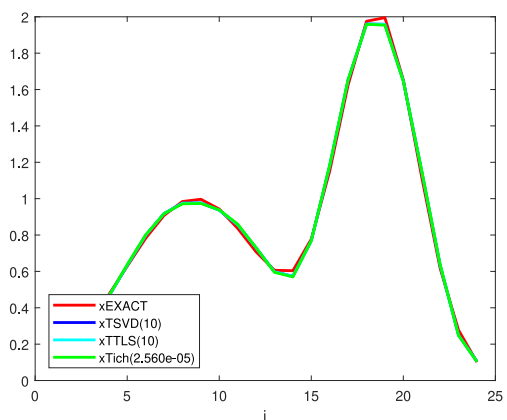
(c) Vykreslenie absolútnej chyby pre metódu T-TLS



(d) Vykreslenie absolútnej chyby pre Tichonovskú regularizáciu

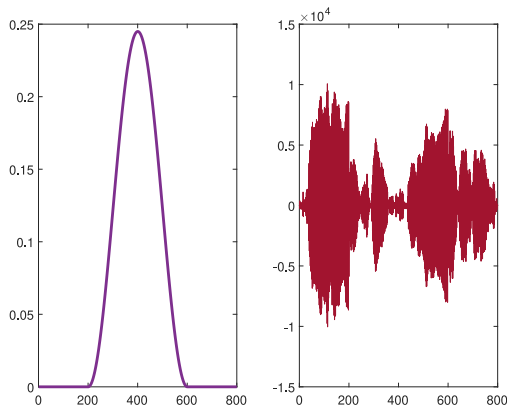


(e) Vykreslenie singulárnych čísel a filtračných faktorov pre zvolené λ ; pre Tichonovskú regularizáciu

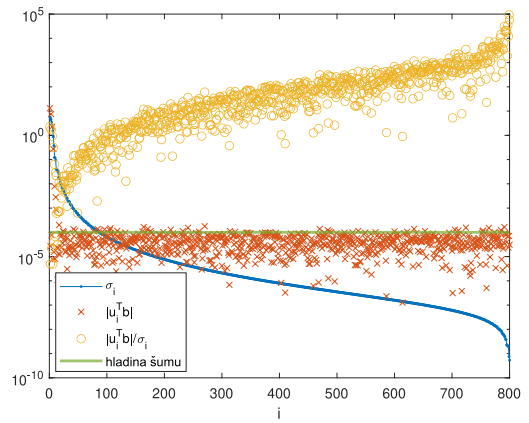


(f) Vykreslenie presného riešenia a optimálnych regul. riešení pre skúmané regul. metódy

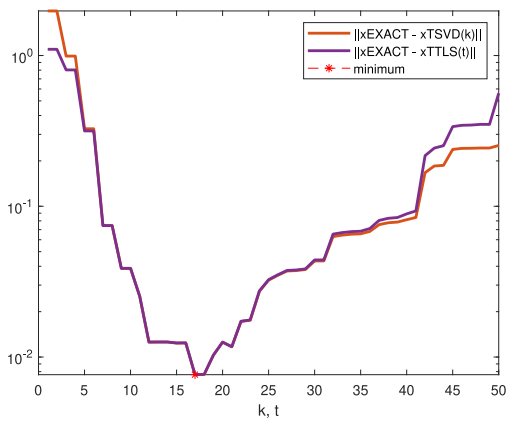
Obr. 3.1: Experiment 2 – Regularizácia úlohy SHAW(24) s náhodným šumom, $\nu = 1e - 6$



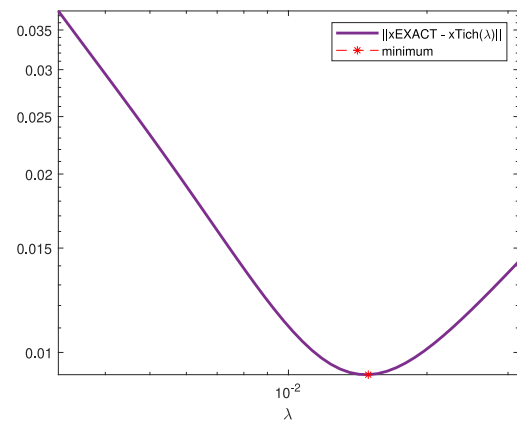
(a) Vykreslenie presného a naivného riešenia pre danú úlohu



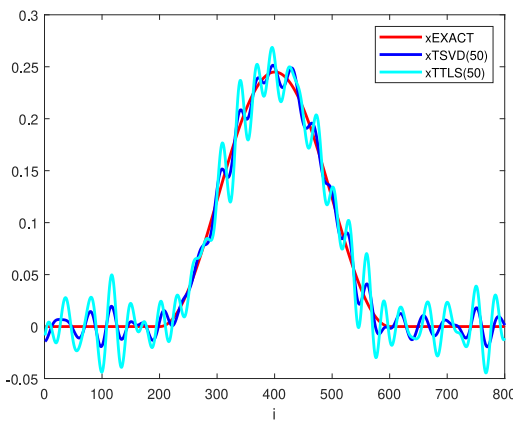
(b) Picardov graf pre danú úlohu



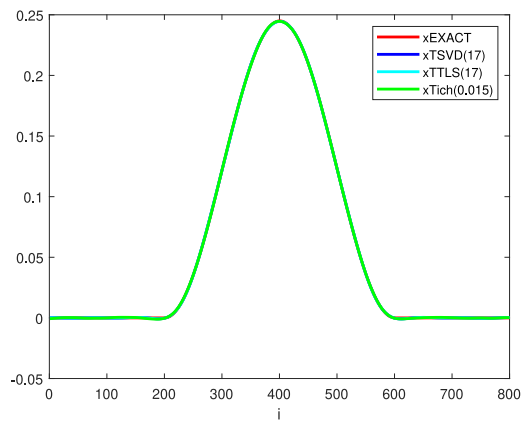
(c) Vykreslenie absolútnej chyby pre metódy T-SVD a T-TLS



(d) Vykreslenie absolútnej chyby pre Tichonovskú regularizáciu



(e) Vykreslenie presného riešenia a vybraných regul. riešení pre metódy T-SVD, T-TLS



(f) Vykreslenie presného riešenia a optimálnych regul. riešení pre skúmané regul. metódy

Obr. 3.2: Experiment 3 – Regularizácia úlohy PHILLIPS(800) s náhodným šumom, $\nu = 1e - 4$

4. Rekonštrukcia obrazu

Nakoniec sa budeme zaoberať jednou konkrétnou aplikáciou riešenia inverzných úloh, a to rekonštrukciou obrazu. V praxi táto úloha zvyčajne patrí medzi large-scale úlohy a na jej riešenie používame skôr iteračné regularizačné metódy. V experimentoch sa teda zameriame len na úlohu s menšími obrázkami. Budeme tak môcť použiť priame filtračné regularizačné metódy, ktorým sme sa venovali v Kapitole 3. Úloha rekonštrukcie obrazu a špeciálne práca s digitálnym obrazom má isté špecifiká, ktoré si na základe naštudovanej literatúry zhrnieme. Vychádzame z publikácií (Hansen, Nagy a O’Leary, 2006), (Hansen, 2010, kap. 7.5).

Podstatou úlohy rekonštrukcie obrazu je, že z rozmazaného obrazu chceme získať čo najostrejšiu aproximáciu pôvodného obrazu, s využitím znalosti matematického modelu popisujúceho proces rozmazania. Túto úlohu môžeme taktiež vyjadriť v tvare Fredholmovej integrálnej rovnice, pozri (Hansen, 2010, str. 144),

$$\int_0^1 \int_0^1 K(s,t) f(t) dt_1 dt_2 = g(s), \quad (4.1)$$

kde

$$s = (s_1, s_2) \in [0,1] \times [0,1], \quad t = (t_1, t_2).$$

Funkcia f potom reprezentuje ostrý pôvodný obraz, funkcia g rozmazaný obraz, a jadro K model rozmazania. Priamou úlohou je spočítať rozmazaný obraz pokiaľ máme presný obraz a model rozmazania. Inverznou úlohou je rekonštrukcia pôvodného ostrého obrazu. Pozri (Hansen, 2010, str. 8). Úlohu popísanú integrálnou rovnicou (4.1) si taktiež obdobne ako v jedno-dimenzionálnom prípade musíme diskretizovať, aby sme ju mohli riešiť numericky na počítači.

Najskôr si ale rozmyslíme, ako je reprezentovaný digitálny obraz. Tento je zložený z bodov – pixelov, ktoré reprezentujú intenzitu na sivej alebo farebnej škále. Špeciálne si digitálny obraz v odtieňoch sivej potom môžeme zdefinovať nasledujúcim spôsobom, porov. (Hansen a kol., 2006, str. 1–4, 13–14).

Definícia 13. *Digitálny obraz v odtieňoch sivej je obdĺžnikové pole čísel s rozmermi $p \times q$, $p, q \in \mathbb{N}$, ktorého prvky reprezentujú intenzitu na sivej škále. Špeciálne v prípade osem-bitového kódovania, reprezentuje číslo 0 čiernu farbu, číslo 255 bielu farbu a celočíselné hodnoty z tohoto intervalu rôzne odtiene sivej.*

Poznámka. Pri reprezentácii farebného obrazu môžeme využívať napríklad RGB formát, kedy je obraz definovaný pomocou troch matíc. Tie popisujú po rade intenzitu červenej, zelenej a modrej farby, pozri (Hansen a kol., 2006, str. 2–3, kap. 7.1). Farebnému obrazu sa však v tejto práci podrobnejšie nebudeme venovať.

Pre jednoduchosť teda budeme obraz z Definície 13 chápať ako maticu. Ako sa uvádza v (Hansen a kol., 2006, str. 4-5), pokiaľ uvažujeme, že rozmazanie stĺpcov matice obrazu je nezávislé na rozmazaní riadkov matice obrazu, tak platí

$$\mathbf{A}_c \mathbf{X}_{exact} \mathbf{A}_r^\top = \mathbf{B}_{exact}, \quad (4.2)$$

kde

$\mathbf{A}_r \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{A}_c \in \mathbb{R}^{m \times m}$... reprezentujú rozmazanie riadkov, resp. stĺpcov,
 $\mathbf{B}_{exact} \in \mathbb{R}^{m \times n}$... reprezentuje rozmazaný obraz,
 $\mathbf{X}_{exact} \in \mathbb{R}^{m \times n}$... reprezentuje ostrý obraz.

Toto rozmazanie vzniká napríklad pri nezaostrení objektívu fotoaparátu, prípadne môže byť zapríčinené rôznymi fyzikálnymi javmi, ako sú turbulencie v atmosfére alebo optické javy súvisiace s dopadajúcim svetlom. Viac podrobností v (Hansen a kol., 2006, str. 21–22).

Podobne ako sme mali v Sekcii 1.2, aj v tomto prípade môže rozmazaný obraz navyše obsahovať ešte náhodný šum $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, napríklad v dôsledku ukladania dát. Znovu budeme uvažovať Gaussovský biely šum. Riešime teda inverznú lineárnu aproximačnú úlohu

$$\mathbf{A}_c \mathbf{X} \mathbf{A}_r^\top \approx \mathbf{B}, \quad (4.3)$$

kde $\mathbf{B} := \mathbf{B}_{exact} + \mathbf{E} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, a hľadáme čo najlepšiu aproximáciu $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ presného obrazu \mathbf{X}_{exact} . Pri takejto reprezentácii by sme však museli riešiť úlohu s tzv. násobnou pravou stranou.

Ako sa uvádza v (Hnětynková, Plešinger a Žáková, 2017, str. 106), pre regularizačné metódy T-SVD a Tichonovskú regularizáciu, ktoré sú odvodené od LS, to nie je problematické. Pre každý stĺpec matice pravej strany je možné prevádzať regularizáciu nezávisle. Pre metódu T-TLS odvodenú od TLS, je to ale zložitejšie. Pre analýzu problému TLS v takomto tvare pozri (Hnětynková a kol., 2011). Filtračné faktory pre metódu T-TLS pre úlohu s násobnou pravou stranou boli zase odvodené v článku (Hnětynková a kol., 2017).

My tu popíšeme iný postup. Úlohu (4.3) si môžeme pomocou tzv. vektorizácie (Hansen a kol., 2006, str. 8, 23) upraviť na tvar lineárneho aproximačného problému (1.6), ktorým sme sa zaoberali v predchádzajúcich kapitolách. K tomu budeme potrebovať Kroneckerov súčin matíc. Definíciu preberáme z (Golub a Van Loan, 1996, str. 180), kde sú uvedené aj základné vlastnosti tohoto súčinu.

Definícia 14 (Kroneckerov súčin). *Nech $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{p \times q}$ a $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{r \times s}$ sú matice. Potom ich Kroneckerov súčin definujeme ako blokovú maticu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{pr \times qs}$,*

$$\mathbf{A} = \mathbf{C} \otimes \mathbf{D} = \begin{bmatrix} c_{1,1}\mathbf{D} & c_{1,2}\mathbf{D} & \cdots & c_{1,q}\mathbf{D} \\ c_{2,1}\mathbf{D} & c_{2,2}\mathbf{D} & \cdots & c_{2,q}\mathbf{D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{p,1}\mathbf{D} & c_{p,2}\mathbf{D} & \cdots & c_{p,q}\mathbf{D} \end{bmatrix},$$

kde $c_{i,j}$ značí prvok na pozícii (i, j) v matici \mathbf{C} .

Využitím tejto definície dostávame maticu $\mathbf{A} := \mathbf{A}_r \otimes \mathbf{A}_c \in \mathbb{R}^{mn \times mn}$, ako výsledok Kroneckerovho súčinu matíc rozmazania riadkov a stĺpcov obrazu. Ďalej si zapíšeme $\mathbf{x} := \text{vec}(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}^{mn}$ a $\mathbf{b} := \text{vec}(\mathbf{B}) \in \mathbb{R}^{mn}$. Operácia vec znamená, že jednotlivé stĺpce matice naskladáme za sebou do vektoru (Golub a Van Loan, 1996, str. 180). Potom môžeme problém (4.3) ekvivalentne prepísať do tvaru

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

ktorý už zodpovedá problému s jednoduchou pravou stranou. Vidíme ale, že v tomto prípade môže byť matica \mathbf{A} obrovských rozmerov, a tým pádom nemusí byť možné spočítať celý jej singulárny rozklad. V (Hansen a kol., 2006, kap. 3–4) je podrobne vysvetlené, ako matica \mathbf{A} vzniká, a akú môže mať špeciálnu štruktúru v závislosti na type rozmazania jednotlivých pixelov a okrajovej podmienky. Z tejto štruktúry potom ťažia v určitých prípadoch rýchle algoritmy pre výpočet spektrálneho rozkladu, ktoré sú v uvedenej referencii taktiež popísané.

V nasledujúcich experimentoch budeme uvažovať nulovú okrajovú podmienku, kedy predpokladáme, že navôkol nasnímaného obrazu je čierna farba. Pre túto okrajovú podmienku je potom \mathbf{A} bloková matica s Toeplitzovskými blokmi; špeciálne matice \mathbf{A}_c a \mathbf{A}_r sú Toeplitzovské, pozri (Hansen a kol., 2006, str. 38–39). Poznamenajme, že Toeplitzovská matica má konštantné všetky diagonály (Golub a Van Loan, 1996, str. 193).

Experiment 4. V klasickom počítačovom skicári sme si vytvorili malý štvorcový obrázok s rozmerom 100×100 pixelov, obsahujúci biely text¹ na čiernom pozadí. Tento obrázok sme si najskôr pomocou príkazu `rgb2gray` prekonvertovali do odtieňov sivej, a následne sme ho pomocou príkazu `double` previedli do aritmetiky s plávajúcou čiarkou, aby sme s ním mohli prevádzať rôzne aritmetické operácie. Tento obrázok budeme ďalej považovať za ideálny ostrý, teda \mathbf{X}_{exact} . Matice rozmazania \mathbf{A}_c a \mathbf{A}_r sme získali z úlohy v (Hansen a kol., 2006, str. 6), pre $m = n = 100$. Obe tieto matice sú Toeplitzovské.

Aplikáciou matíc \mathbf{A}_c a \mathbf{A}_r na \mathbf{X}_{exact} takým spôsobom, ako sme mali popísané v teoretickom úvode, dostaneme rozmazaný obrázok \mathbf{B}_{exact} . Pridáme si doň Gaussovský biely šum \mathbf{E} , pre $\sigma = 5e - 2$. Najskôr si vykreslíme pôvodný ostrý obrázok \mathbf{X}_{exact} , rozmazaný obrázok s pridaným náhodným šumom, t. j. \mathbf{B} a naivnú rekonštrukciu \mathbf{X}_{naive} , ktorú spočítame obdobne ako v predchádzajúcich úlohách. Pozri Obrázok 4.1(a).

Pomocou funkcie `kron` si ďalej spočítame Kroneckerov súčin matíc \mathbf{A}_c a \mathbf{A}_r a vektorizujeme si rozmazaný obrázok s pridaným šumom. S touto maticou \mathbf{A} a vektorom \mathbf{b} budeme ďalej pracovať. Po spočítaní singulárneho rozkladu danej matice si vykreslíme dvoj-dimenzionálne reprezentácie vybraných pravých singulárnych vektorov \mathbf{v}_i matice \mathbf{A} , ktoré si pomocou príkazu `reshape` najskôr prevedieme na maticový tvar \mathbf{V}_i . Pozri Obrázok 4.1(b). Poznamenajme, že v (Hansen a kol., 2006, kap. 5.4) je pre \mathbf{V}_i používaný názov bázové obrazy. So stúpajúcim i môžeme pozorovať pribúdajúce oscilácie, čo nám pri klesajúcom σ_i spôsobí v aproximácii riešenia nárast invertovaného šumu, ako sme mohli v práci vidieť už viackrát. Pri rekonštrukcii obrazu to vnímame ako určitú zrnitosť, čo budeme môcť neskôr pozorovať pri podregularizovaných rekonštrukciách.

Ďalej budeme pomocou naimplementovaných regularizačných metód hľadať čo najlepšiu rekonštrukciu \mathbf{x} , resp. \mathbf{X} obrázku \mathbf{b} , resp. \mathbf{B} tak, aby sme boli schopní prečítať daný text.

Najskôr budeme testovať metódu T-SVD, pozri prvý riadok Obrázku 4.1(c). Z vykreslených rekonštrukcií sa javí najlepšie rekonštrukcia pre $k = 6000$. Môžeme predpokladať, že na okolí tohoto parametru by sme našli ešte o niečo lepší

¹Ako text sme použili citát R. Bacona v tvare, v akom je uvedený nad vchodom do pavilónu Impakt, čo je najnovšia budova MFF v Prahe.

výsledok. Pre ostatné použité parametre k , vidíme preregularizovanú alebo podregularizovanú rekonštrukciu.

Pre metódu T-TLS sme použili rovnaké regularizačné parametre. K tomu nás motivovalo to, že v predchádzajúcich experimentoch sme mali pre tieto metódy s rovnakými parametrami veľmi podobné absolútne chyby aproximácie. Aj v tomto prípade dostávame podobné rekonštrukcie ako metódou T-SVD, najlepšiu znova na okolí parametru $t = 6000$. Pozri druhý riadok Obrázku 4.1(c). Poznamenajme ešte, že pri T-TLS(200) rekonštrukcii sme pozorovali, že filtračné faktory pre zopár najväčších singulárnych čísel boli dokonca o niečo väčšie ako jedna. To je v súlade s odhadmi v práci (Fierro a kol., 1997, kap. 3.3). Zdôraznime teda, že pre filtračné faktory pre metódu T-TLS neplatí horný odhad jednotkou, ako sme mali pri metódach T-SVD, resp. Tichonovskej regularizácii.

Pre Tichonovskú regularizáciu dostávame podobné výsledky ako pri použití predchádzajúcich dvoch metód, pozri tretí riadok Obrázku 4.1(c). Na pohľad sa môže zdať, že sú tieto rekonštrukcie dokonca o niečo málo lepšie. Poznamenajme, že parametre λ sme volili ako hodnoty k -tého singulárneho čísla matice \mathbf{A} , pre parametre k použité pri rekonštrukcii T-SVD. Nabádala nás k tomu aproximácia (3.26), ktorú sme videli pri skúmaní filtračných faktorov pre Tichonovskú regularizáciu, a tvar filtračných faktorov pre T-SVD.

Poznamenajme, že pri tejto úlohe sme už značne pocítovali časovú náročnosť pri numerických výpočtoch. Najmä pri výpočte singulárneho rozkladu a pri násobení matíc. Taktiež sme sa museli vysporiadať s pamäťovými limitmi, hlavne pri metóde T-TLS. Výpočty z príslušnej funkcie sme robili (pokiaľ to bolo možné) postupne, a výsledky sme priebežne ukladali do počítača pre ďalšie použitie. Učinili sme tak z toho dôvodu, že v pamäti Matlabu nebolo možné uchovávať singulárne rozklady dvoch veľkých matíc a taktiež ďalšie matice a vektory súčasne.

Experiment 5. V poslednom experimente tejto práce sa pokúsime rekonštruovať reálnu fotografiu². Orezali sme ju do štvorcovej podoby 638×638 pixelov, a využitím tých istých príkazov ako v predchádzajúcom experimente, sme získali obrázok v požadovanej forme. Matice rozmazania \mathbf{A}_r a \mathbf{A}_c sme vygenerovali obdobne ako v predošlom experimente, tentokrát pre $m = n = 638$. Vykreslíme si pôvodný ostrý obrázok \mathbf{X}_{exact} , rozmazaný obrázok s pridaným Gaussovským bielym šumom \mathbf{E} (pre $\sigma = 0,5$), teda \mathbf{B} , a naivnú rekonštrukciu \mathbf{X}_{naive} . Pozri Obrázky 4.2(a)–4.2(c). Na spodnom okraji Obrázku 4.2(b) si môžeme všimnúť nepatrný čierny pásik, ktorý vznikol pri rozmazaní použitím nulovej okrajovej podmienky, v kontraste s bielou rukou. Nakoľko bolo ale použité iba malé rozmazanie, tak sa táto okrajová podmienka veľmi neprejavila.

V tomto prípade už nie je možné spočítať v Matlabe Kroneckerov súčin matíc \mathbf{A}_r a \mathbf{A}_c , teda maticu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{638^2 \times 638^2}$. V publikácii (Hansen a kol., 2006, kap. 6.2) je ale uvedený alternatívny postup, ktorý môžeme použiť v prípade nezávislého rozmazania riadkov a stĺpcov. Ten je založený na výpočte SVD rozkladov matíc \mathbf{A}_r a \mathbf{A}_c , a znalosti vlastností Kroneckerovho súčinu, pozri (Hansen a kol., 2006, str. 39). Špeciálne nás bude zaujímať Kroneckerov súčin diagonálnych matíc.

Obrázok budeme rekonštruovať metódami T-SVD a Tichonovskou regularizáciou. Využijeme príslušné časti kódov pre výpočet filtračných faktorov a regula-

²Fotografiu sme získali z webovej stránky <https://stocksnap.io/photo/craft-paper-UYR9S9MIDW> (navštívené dňa 18.7.2023). Má licenciu CC0 1.0 a status voľného diela.

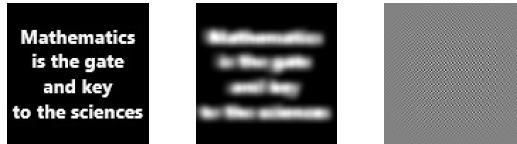
rizovaného riešenia z (Hansen a kol., 2006, str. 75). Poznamenajme, že takýmto spôsobom by bolo možné ľahko modifikovať aj naše naimplementované funkcie. Nasledujúcu časť kódu preberáme z uvedenej referencie.

```
[Uc, Sc, Vc] = svd(Ac);
[Ur, Sr, Vr] = svd(Ar);
S = diag(Sc) * diag(Sr)';
Sfilt = Phi ./ S;
Xfilt = Vc * ( (Uc' * B * Ur) .* Sfilt ) * Vr';

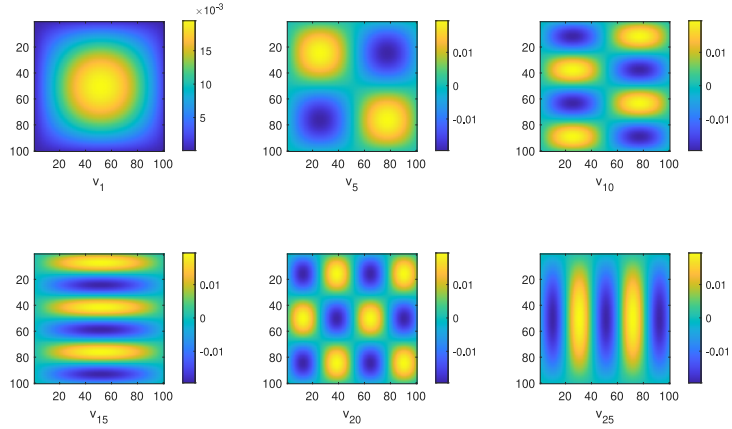
Phi = (S >= tol); pre T-SVD
Phi = S.^2 ./ (S.^2 + alpha ^2); pre Tichonovskú regularizáciu
```

V tomto prípade už nie je všeobecne matica filtračných faktorov Φ ani matica singularných čísel S diagonálna. Matica singularných čísel S vlastne obsahuje singularne čísla veľkej matice \mathbf{A} , ktorú nebolo možné priamo spočítať. Čísla z matice S si potom môžeme usporiadať zostupne do vektora veľkosti 638^2 , ktorý reprezentuje diagonálu matice Σ z pomyselného singularného rozkladu matice \mathbf{A} . Pre metódu T-SVD potom vyberáme z regularizačných parametrov $k = 1, \dots, 638^2$. Pozrieme sa na príslušné k -té singularne číslo matice \mathbf{A} z daného vektora, a to potom volíme za parameter tol v kóde z citovanej referencie. Použili sme $\text{tol} = 1, 0.06, 0.002$, čomu odpovedajú po rade $k = 13437, 83520, 265302$. Pre Tichonovskú regularizáciu sme volili parametre $\text{alpha} := \text{tol}$.

Vykreslíme si po rade preregularizované, optimálne a podregularizované rekonštrukcie metódou T-SVD, Obrázky 4.2(d)–4.2(f), a Tichonovskou regularizáciou, Obrázky 4.2(g)–4.2(i). Pri preregularizovaných riešeniach pozorujeme napríklad rozmazané detaily kvetu z notového papiera, alebo nezretelné čiary na dlani. Pri podregularizovanom riešení zase vidíme už vyššie spomínanú zrnitosť. Drobné rozdiely medzi skúmanými metódami sú zrejmé z Obrázkov 4.2(d) a 4.2(e). Tu vidíme, že rekonštrukcia metódou T-SVD je pre danú voľbu regularizačného parametra o niečo horšia. To vyplýva z povahy jednoduchosti, alebo lepšie povedané striktnosti jej filtračných faktorov. Vo výsledku ale dostávame obidvomi metódami výborné optimálne rekonštrukcie.



(a) Pôvodný ostrý obrázok, rozmazaný obrázok s pridaným šumom a naivná rekonštrukcia



(b) Vykreslenie vybraných bázových obrazov



(c) Rekonštrukcie metódami T-SVD(k), T-TLS(t) a Tich(λ), pre vybrané parametre

Obr. 4.1: Experiment 4 - Rekonštrukcia malého obrázku v odtieňoch sivej



(a) Pôvodný ostrý obrázok



(b) Rozmazaný obrázok s pridaným šumom



(c) Naivná rekonštrukcia



(d) Rekonštrukcia T-SVD (13 437)



(e) Rekonštrukcia T-SVD (83 520)



(f) Rekonštrukcia T-SVD (265 302)



(g) Rekonštrukcia Tichonov (1)



(h) Rekonštrukcia Tichonov (0,06)



(i) Rekonštrukcia Tichonov (0,002)

Obr. 4.2: Experiment 5 - Rekonštrukcia fotografie v odtieňoch sivej

Záver

Získali sme prehľad o najpoužívanejších priamych regularizačných metódach; metóde T-SVD, T-TLS a Tichonovskej regularizácii. Snažili sme sa čo najlepšie analyzovať ich súvis s metódami najmenších štvorcov, čo bolo jedným z hlavných cieľov práce. Videli sme, že k týmto metódam sa dá často pristupovať intuitívnym spôsobom čo je jednou z výhod, avšak v dôsledku nutnosti výpočtu SVD nie sú vhodné pre úlohy s veľkými maticami. Z analýzy týchto metód sme ale mohli pozorovať, že sa dajú v určitom zmysle riešiť aj iteračne. Taktiež sme videli, že k nim môžeme pristupovať ako k tzv. filtračným metódam a regularizované riešenie tak ekvivalentne vyjadriť využitím filtračných faktorov.

Všetky skúmané metódy sme si otestovali na numerických experimentoch, ktoré reprezentovali širokú škálu daných úloh. Rôzne sme volili typ úlohy, dimenziu a veľkosť pridaného šumu. Najoptimálnejší regularizačný parameter sme určovali z absolútnej chyby aproximácie, avšak tam kde to bolo možné, sme ukázali prepojenosť s Picardovým grafom a numerickou hodnotou matice. Pri vhodnej voľbe regularizačného parametra sme pozorovali, že všetky metódy boli takmer rovnako spoľahlivé a dávali veľmi dobrú aproximáciu riešenia. Bolo to aj v dôsledku toho, že dané úlohy nemali obrovský rozmer a neobsahovali až také veľké množstvo šumu. To je v zhode so závermi v práci (Fierro, Golub, Hansen a O’Leary, 1997, kap. 6–7). Tu je taktiež ukázané, že v určitých prípadoch pre väčšie hladiny šumu sú regularizačné vlastnosti T-SVD najslabšie.

Pri práci s veľkými maticami v aplikačnej úlohe rekonštrukcie obrazu sme pocítili limity skúmaných priamych metód, najmä časovú a pamäťovú náročnosť. Regularizačné parametre sme tu volili pokusne tak, aby sme dostali na pohľad dobrý výsledok rekonštrukcie. Pri vhodnej voľbe parametrov sme s každou metódou dosiahli uspokojivý výsledok.

Možné rozšírenia tejto práce vidíme v skúmaní kritérií výberu regularizačných parametrov a analýze iteračných metód, ktoré by mohli byť použiteľné pre large-scale úlohy. Zaujímavé by tiež bolo hlbšie preniknutie do problematiky rekonštrukcie obrazu, zameranie sa na rôzne okrajové podmienky a efektívnejšie algoritmy numerických výpočtov.

Zoznam použitej literatúry

- BEČVÁŘ, J. (2019). *Lineární algebra*. 5. vyd. Matfyzpress, Praha. ISBN 978-80-7378-378-5.
- BJÖRCK, A. (1996). *Numerical Methods for Least Squares Problems*. SIAM Publications, Philadelphia. ISBN 978-0-89871-360-2.
- DRKOŠOVÁ, J. a STRAKOŠ, Z. (1997). *Úvod do teorie citlivosti a stability v numerické lineární algebře*. Vydavatelství ČVUT, Praha. ISBN 80-01-01560-2.
- DUPAČ, V. a HUŠKOVÁ, M. (2013). *Pravděpodobnost a matematická statistika*. 2. upr. vyd. Nakladatelství Karolinum, Praha. ISBN 978-80-246-2208-8.
- FIERRO, R. D., GOLUB, G. H., HANSEN, P. C. a O'LEARY, D. P. (1997). Regularization by Truncated Total Least Squares. *SIAM J. Scient. Comp.*, **18** (4), 1223–1241.
- GOLUB, G. H. a VAN LOAN, C. F. (1980). An Analysis of the Total Least Squares Problem. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **17**(6), 883–893.
- GOLUB, G. H. a VAN LOAN, C. F. (1996). *Matrix Computations*. Third Edition. The Johns Hopkins University Press, USA. ISBN 978-8018-5414-9.
- HANSEN, P. C. (1998). *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*. SIAM, Philadelphia. ISBN 978-0-89871-403-6.
- HANSEN, P. C. (2007). Regularization Tools Version 4.1 for MATLAB 7.3. *Numer. Algorithms*, **46**, 189–194.
- HANSEN, P. C. (2010). *Discrete Inverse Problems: Insight and Algorithms*. SIAM, Philadelphia. ISBN 978-0-89871-696-2.
- HANSEN, P. C., NAGY, J. G. a O'LEARY, D. P. (2006). *Deblurring Images: Matrices, Spectra, and Filtering*. SIAM, Philadelphia. ISBN 978-0-89871-618-4.
- HANSEN, P. C., PEREYRA, V. a SCHERER, G. (2013). *Least Squares Data Fitting with Applications*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore. ISBN 978-1-4214-0786-9.
- HNĚTYNKOVÁ, I., PLEŠINGER, M., SIMA, D. M., STRAKOŠ, Z. a VAN HUFEL, S. (2011). The total least squares problem in $\mathbf{AX} \approx \mathbf{B}$. A new classification with the relationship to the classical works. *SIAM Journal Matrix Analysis Applications*, **32**(3), 748–770.
- HNĚTYNKOVÁ, I., PLEŠINGER, M. a ŽÁKOVÁ, J. (2017). Filter factors of truncated TLS regularization with multiple observations. *Applications of Mathematics*, **62**(2), 105–120.
- HÁJKOVÁ, V., JOHANIS, M., JOHN, O., KALENDA, O. F. K. a ZELENÝ, M. (2012). *Matematika*. 2. upr. vyd. Matfyzpress, Praha. ISBN 978-80-7378-193-4.

- PAIGE, C. a STRAKOŠ, Z. (2002a). Unifying least squares, total least squares and data least squares. In VAN HUFFEL, S. a LEMMERLING, P., editors, *Total Least Squares and Errors-in-Variables Modeling*, pages 25–34. Springer, Dordrecht.
- PAIGE, C. a STRAKOŠ, Z. (2002b). Scaled total least squares fundamentals. *Numerische Mathematik*, **91**, 117–146.
- RAO, B. D. (1997). Unified treatment of LS, TLS and truncated SVD methods using a weighted TLS framework. In VAN HUFFEL, S., editor, *Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Errors-in-Variables Modeling*, pages 11–20. SIAM Publications, Philadelphia.
- TEBBENS, J. D., HNĚTYNKOVÁ, I., PLEŠINGER, M., STRAKOŠ, Z. a TICHÝ, P. (2012). *Analýza metod pro maticové výpočty – Základní metody*. Matfyzpress, Praha. ISBN 978-80-7378-201-6.
- VAN HUFFEL, S. a VANDEWALLE, J. (1991). *The Total Least Squares Problem – Computational Aspects and Analysis*. SIAM, Philadelphia. ISBN 978-0-89871-275-9.