IA353 - Redes Neurais

* Solução de Quadrados Mínimos

Considere o sistema linear $A\underline{w} = \underline{b}$, onde

$A = \begin{bmatrix} \underline{a}_1^T \\ \vdots \\ \underline{a}_N^T \end{bmatrix}$, sendo que $\underline{a}_i = [a_{i1} \dots a_{in}]^T$ denota um conjunto de n entradas (p/ o i-ésimo padrão)

$\underline{w} = [w_1 \dots w_n]^T$ é o vetor de coeficientes

$\underline{b} = [b_1 \dots b_N]^T$ é o vetor de respostas desejadas

Queremos determinar os valores ótimos dos coeficientes no sentido de quadrados mínimos, i.e., o vetor $\underline{w}$ que minimiza a norma do vetor $\underline{e} = A\underline{w} - \underline{b}$.

<u>1º caso</u> : $A \in \mathbb{R}^{N \times n}$, com $n < N$ e de posto completo

- temos mais padrões de entrada $\underline{a}_i$ do que parâmetros ajustáveis
- OBJETIVO: $\min_{\underline{w}} \frac{1}{2} \|\underline{e}\|^2$

Ora,

$$\|\underline{e}\|^2 = \|A\underline{w} - \underline{b}\|^2 = (A\underline{w} - \underline{b})^T (A\underline{w} - \underline{b})$$
$$= (\underline{w}^T A^T A \underline{w} - \underline{w}^T A \underline{b} - \underline{b}^T A \underline{w} + \underline{b}^T \underline{b})$$

Derivando com respeito a $\underline{w}$:

$$\frac{\partial \frac{1}{2}\|e\|^2}{\partial \underline{w}} = \frac{1}{2}\left(2 w^T A^T A - b^T A - (A\underline{b})^T\right)$$

$$= w^T A^T A - \frac{1}{2} b^T A - \frac{1}{2} b^T A = 0$$ no ponto ótimo

Então, $w^T A^T A = b^T A$

Com isto, $w^T = b^T A (A^T A)^{-1}$

Aplicando o operador $(\cdot)^T$:

$$\boxed{\underline{w} = (A^T A)^{-1} A^T \underline{b}}$$

Note que a inversa é tomada sobre $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

<u>2º caso</u> : $A \in \mathbb{R}^{N \times n}$, com $N < n$ e de posto completo

- temos mais parâmetros livres do que padrões de entrada; ou, equivalentemente, temos mais variáveis a determinar do que equações. Neste caso, há infinitas soluções.

/ /

Sendo assim, é possível definir como única solução aquela que atinge a mínima norma do vetor de coeficientes, resultando no problema:

$$\min_{\underline{w}} \ \frac{1}{2} \underline{w}^T \underline{w}$$
$$\text{s.a.} \quad A\underline{w} = \underline{b}$$

O lagrangeano fica: $\mathcal{L}(\underline{w}, \underline{\lambda}) = \frac{1}{2} \underline{w}^T \underline{w} - \underline{\lambda}^T (A\underline{w} - \underline{b})$

Aplicando as condições de otimalidade:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\underline{w}, \underline{\lambda})}{\partial \underline{w}} = \underline{w}^T - \underline{\lambda}^T A = 0 \Rightarrow \underline{w} = A^T \underline{\lambda} \quad (\mathrm{I})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\underline{w}, \underline{\lambda})}{\partial \underline{\lambda}} = (A\underline{w} - \underline{b}) = 0 \quad (\mathrm{II})$$

Substituindo $\underline{w}$ de (I) em (II), obtemos:

$$AA^T \underline{\lambda} = \underline{b}$$

Como a matriz A é de posto completo, então AA^T possui inversa, de modo que:

$$\underline{\lambda} = (AA^T)^{-1} \underline{b} \quad (\mathrm{III})$$

Substituindo (III) em (I), chegamos à outra forma da solução baseada na pseudo-inversa de A:

$$\boxed{\underline{w} = A^T (AA^T)^{-1} \underline{b}}$$

Dentre as infinitas soluções que atingem o mesmo erro quadrático, esta é a de mínima norma