

Numerička matematika

8. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.hr/~singer`

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
 - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
 - Normalne jednačbe.
 - Linearizacija.
 - Matrična formulacija problema najmanjih kvadrata.
 - QR faktorizacija.
 - Givensove rotacije.
 - Householderovi reflektori.

Informacije

Rezultati prvog kolokvija — komentar:

- Nisu tako “strašni”, ali moglo je i puno bolje.
- Oni koji imaju manje od 20 bodova su ozbiljno “ugroženi”.

Kolokviji ispituju gradivo cijelog kolegija, a ne samo vježbe!

Informacije — nastavak

Domaće zadaće iz NM — realizacija ide preko **web** aplikacije. Pogledajte na **službeni** web kolegija, pod “**zadaće**”.

● Tamo su **početne upute**.

Skraćeni link je

<http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php>

Direktni link na **aplikaciju** za **zadaće** je

<http://degiorgi.math.hr/nm/>

Kolegij “**Numerička matematika**” ima **demonstratora**!

● **Sonja Šimpraga** — termin je **četvrtkom**, od **16–18**.

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

http://web.math.hr/~singer/num_mat/

Skraćena verzija skripte — 1. dio (prvih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat1.pdf

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat2.pdf

Informacije — nastavak

Na molbu Sanje Singer i Vedrana Novakovića, za goste je otvorena i web stranica kolegija Matematika 3 i 4 na FSB-u.

Tamo možete naći dodatne materijale za neke dijelove NM,

• posebno — vježbe i riješene zadatke.

Predavanja su “malo nježnija” od naših. Početna stranica je

<http://e-ucenje.fsb.hr/>

Zatim potražite “Katedra za matematiku” i onda:

• odete (kliknete) na kolegije Matematika 3 i 4,

• kliknete na gumb “Prijava kao gost”,

• na stranici potražite blok 3 “Numerička matematika”.

Iskoristite! Naravno, smijete pogledati i ostalo!

Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija vektora pogreške

Neka je funkcija f

• zadana na diskretnom skupu točaka x_0, \dots, x_n .

Točaka x_0, \dots, x_n ima mnogo više nego nepoznatih parametara a_0, \dots, a_m aproksimacijske funkcije φ , tj. $n \gg m$.

Aproksimacijska funkcija

$$\varphi(x, a_0, \dots, a_m)$$

određuje se iz uvjeta da je 2-norma vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije najmanja moguća, tj. minimizira se

$$S = \sum_{k=0}^n (f(x_k) - \varphi(x_k))^2 \rightarrow \min.$$

Sustav normalnih jednadžbi

Uočimo da je

- uvijek $S \geq 0$, bez obzira kakvi su parametri, jer se radi o zbroju kvadrata.
- Funkcija S minimizira se kao funkcija više varijabli a_0, \dots, a_m .
- S je dovoljno glatka funkcija, jer je funkcija u parametrima a_k , pa je nužni uvjet ekstrema

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, \dots, m.$$

Takav pristup vodi na tzv. sustav normalnih jednadžbi.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje treba po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati **pravcem**

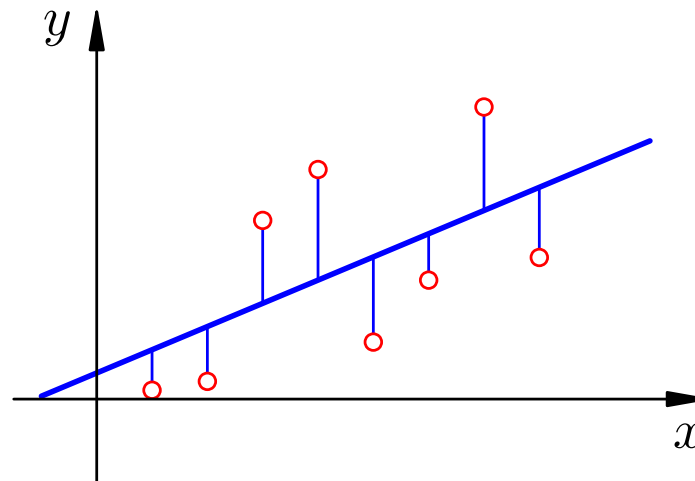
$$\varphi(x) = a_0 + a_1x.$$

Greška aproksimacije (u čvorovima), koju **minimiziramo** je

$$\begin{aligned} S &= S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (f_k - \varphi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1x_k)^2 \rightarrow \min. \end{aligned}$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika **zadanih** točaka u ravnini i **pravca** koji ih aproksimira.



Uočiti da se **greška** u svakoj točki “mjeri” u **smjeru** osi y

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \rightarrow \min .$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 su:

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1 x_k),$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 - a_1 x_k) x_k.$$

Dijeljenjem s -2 i sređivanjem po nepoznanicama a_0 , a_1 , dobivamo **linearni sustav**

$$a_0(n + 1) + a_1 \sum_{k=0}^n x_k = \sum_{k=0}^n f_k$$

$$a_0 \sum_{k=0}^n x_k + a_1 \sum_{k=0}^n x_k^2 = \sum_{k=0}^n f_k x_k.$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$s_\ell = \sum_{k=0}^n x_k^\ell, \quad t_\ell = \sum_{k=0}^n f_k x_k^\ell, \quad \ell \geq 0,$$

onda linearni sustav možemo pisati kao

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$

$$s_1 a_0 + s_2 a_1 = t_1.$$

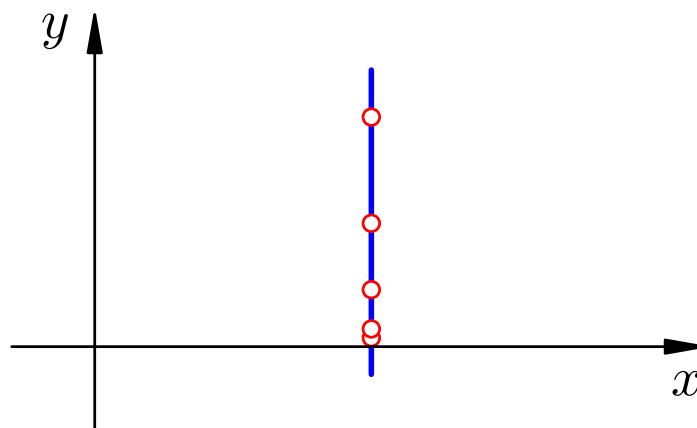
Matrica sustava je **regularna**, što slijedi iz linearne nezavisnosti vektora

$$(1, 1, \dots, 1)^T \quad \text{i} \quad (x_0, x_1, \dots, x_n)^T,$$

uz uvjet da imamo **barem dvije** različite točke x_k , pa postoji **jedinstveno** rješenje sustava.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika **situacije** u kojoj problem najmanjih kvadrata za pravac **nema** rješenja, s tim da je $n \geq m = 1$, tj. imamo barem **dvije** točke.



Ako imamo **više različitih** podataka u **jednoj** jednoj točki x_0 ,

- aproksimacijski **pravac** (očito) **postoji** i jedinstven je,
- ali je **okomit** na x -os,
- pa njegova jednadžba **nema** oblik $y = a_0 + a_1x$.

Minimalnost rješenja?

Je li to zaista **minimum**?

- To nije teško pokazati, korištenjem **drugih parcijalnih derivacija** (**dovoljan** uvjet minimuma je **pozitivna definitnost** Hesseove matrice).

Provjera je li to minimum, može i puno **lakše**, jer se radi o **zbroju kvadrata**, pa

- S predstavlja **paraboloid** s otvorom prema **gore**, u varijablama a_0, a_1 , pa je jasno da takvi paraboloidi imaju minimum.

Zbog toga se nikad ni **ne provjerava** je li dobiveno rješenje minimum za S .

Najmanji kvadrati za polinome

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_mx^m,$$

ali postoji **opasnost** da je za malo veće m ($m \approx 10$)

- dobiveni sustav **vrlo loše uvjetovan**, pa dobiveni **rezultati** mogu biti jako **pogrešni**.

U praksi se to **nikada** direktno ne radi (na ovaj način), već za $m \geq 2, 3$.

Ako se koriste aproksimacije **polinomima viših stupnjeva**,

- onda se to radi korištenjem **ortogonalnih polinoma** (vidjeti kasnije).

Najmanji kvadrati za opće linearne funkcije

Linearni model diskretnih najmanjih kvadrata je potpuno primjenjiv na **opću linearnu funkciju**

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x),$$

gdje su $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ poznate (zadane) funkcije.

Zadatak. Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje treba po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x).$$

Rješenje. Ide sasvim analogno (pogledati u skripti).

Što s nelinearnim funkcijama?

Što ako φ **nelinearno** ovisi o parametrima?

- Dobivamo **nelinearni** sustav jednačbi, koji se relativno **teško** rješava.
- Problem postaje **ozbiljan** optimizacijski problem, koji se može **približno** rješavati.
- Metode koje se najčešće koriste su **metode pretraživanja** ili **Levenberg–Marquardt** metoda.

Postoji i **drugi** pristup.

- Katkad se jednostavnim **transformacijama** problem može transformirati u **linearni** problem najmanjih kvadrata.
- Rješenja lineariziranog i nelinearnog problema **nisu jednaka**, jer je i greška (**nelinearno**) transformirana!

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, koje po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata treba aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x}.$$

Uočite da φ **nelinearno** ovisi o parametru a_1 .

Direktni pristup problemu vodi na minimizaciju

$$\begin{aligned} S &= S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (f_k - \varphi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 e^{a_1 x_k})^2 \rightarrow \min. \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Parcijalnim deriviranjem po varijablama a_0 i a_1 dobivamo

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 e^{a_1 x_k}) e^{a_1 x_k},$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^n (f_k - a_0 e^{a_1 x_k}) a_0 x_k e^{a_1 x_k}.$$

To je **nelinearan** sustav jednažbi, kojeg ne znamo riješiti!

S **druge** strane, ako **logaritmujemo** relaciju

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x},$$

dobivamo

$$\ln \varphi(x) = \ln(a_0) + a_1 x.$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Moramo **logaritmirati** još i vrijednosti funkcije f u točkama x_k , pa uz supstitucije

$$h(x) = \ln f(x), \quad h_k = h(x_k) = \ln f_k, \quad k = 0, \dots, n,$$

i

$$\psi(x) = \ln \varphi(x) = b_0 + b_1 x,$$

gdje je

$$b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1,$$

dobivamo **linearni** problem najmanjih kvadrata

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= \tilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - \psi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^n (h_k - b_0 - b_1 x_k)^2 \rightarrow \min. \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Iz rješenja b_0 i b_1 , lako očitamo a_0 i a_1

$$a_0 = e^{b_0}, \quad a_1 = b_1.$$

Napomene uz **linearizaciju**:

- Pri linearizaciji smo pretpostavili da je $f_k > 0$, da bismo mogli **logaritmirati**.
- Ovako dobiveno rješenje **uvijek** daje **pozitivan** a_0 , tj. linearizirani $\varphi(x)$ će uvijek biti veći od 0.
- Kad su neki $f_k \leq 0$, korištenjem **translacije** svih podataka treba dobiti $f_k + \text{translacija} > 0$, pa onda linearizirati.
- Pokušajte **korektno** formulirati takvu **linearizaciju**!

Tipične linearizacije — opća potencija

Kratki popis funkcija koje su često u upotrebi i njihovih **standardnih linearizacija** u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

$$\varphi(x) = a_0 x^{a_1}$$

linearizira se logaritmiranjem

$$\psi(x) = \log \varphi(x) = \log(a_0) + a_1 \log x,$$

$$h_k = \log f_k, \quad k = 0, \dots, n.$$

Uvedimo oznake

$$b_0 = \log(a_0), \quad b_1 = a_1.$$

Tipične linearizacije — opća potencija

Linearizirani problem najmanjih kvadrata glasi

$$\tilde{S} = \tilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - b_0 - b_1 \log(x_k))^2 \rightarrow \min,$$

U ovom slučaju, da bismo mogli provesti linearizaciju,

● mora biti i $x_k > 0$ i $f_k > 0$.

Tipične linearizacije — 1 / linearna funkcija

(b) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$$

linearizira se na sljedeći način

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni **linearni problem** najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \rightarrow \min.$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

(c) Funkciju

$$\varphi(x) = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$$

možemo linearizirati na **više** načina.

1. način:

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 \frac{1}{x} + a_1,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni **linearni** problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n \left(h_k - a_0 \frac{1}{x_k} - a_1 \right)^2 \rightarrow \min.$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

2. način:

$$\psi(x) = \frac{x}{\varphi(x)} = a_0 + a_1x,$$

$$h_k = \frac{x_k}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni **linearni** problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1x_k)^2 \rightarrow \min.$$

Tipične linearizacije — još jedan primjer

(d) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}}$$

linearizira se stavljanjem

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 e^{-x},$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \quad k = 0, \dots, n.$$

Pripadni **linearni** problem najmanjih kvadrata je

$$\tilde{S} = \tilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^n (h_k - a_0 - a_1 e^{-x_k})^2 \rightarrow \min.$$

Primjer

Primjer. Uvaženi znanstvenik **dr. Zurić**, Ulica astronoma 69, dobio je ideju da se Zemlja giba oko Sunca po **eliptičnoj orbiti**, sa Suncem u jednom fokusu.

Nakon niza opažanja i mjerenja (uz dosta računa), dobio je slijedeće podatke

$x [^\circ]$	0	45	90	135	180
$r [10^6 \text{ km}]$	147	148	150	151	152

u kojima je

- r **udaljenost** od Zemlje do Sunca (u 10^6 km),
- a x je **kut** između **spojnice** Zemlja–Sunce i **glavne osi** elipse (u **stupnjevima**):

Primjer (nastavak)

Dr. Zurić, naravno, zna da se **elipsa** može opisati formulom

$$r = \frac{\rho}{1 + \varepsilon \cos x}.$$

Pomognite mu da nađe ρ i ε , **diskretnom linearnom** metodom najmanjih kvadrata, nakon **preuređenja** ove formule.

Rješenje. Pomnožimo formulu s **nazivnikom** funkcije, pa dobivamo

$$r(1 + \varepsilon \cos x) = \rho,$$

odnosno

$$-\varepsilon r \cos x + \rho = r.$$

Primjer (nastavak)

Relaciju $-\varepsilon r \cos x + \rho = r$ gledamo kao funkciju oblika

$$au + b = v,$$

gdje je

$$u = r \cos x, \quad v = r, \quad a = -\varepsilon, \quad b = \rho.$$

Zatim se primijeni **linearna** metoda najmanjih kvadrata za **pravac**.

Prema tome, treba minimizirati

$$S = \sum_{i=0}^4 (v_i - au_i - b)^2 \rightarrow \min.$$

Primjer (nastavak)

Deriviranjem izlazi

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=0}^4 (v_i - au_i - b)u_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=0}^4 (v_i - au_i - b) = 0.$$

Nakon sređivanja, uz $n + 1 = 5$, imamo

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^4 u_i^2 & \sum_{i=0}^4 u_i \\ \sum_{i=0}^4 u_i & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^4 u_i v_i \\ \sum_{i=0}^4 v_i \end{bmatrix}.$$

Primjer (nastavak)

Kad se radi “na ruke”, traženi podaci se obično slože u **tablicu**

i	$v_i = r_i$	$u_i = r_i \cos x_i$	u_i^2	$u_i v_i$
0	147	147	21609	21609
1	148	104.6518036	10952	15488.46693
2	150	0	0	0
3	151	-106.7731240	11400.5	-16122.74172
4	152	-152	23104	-23104
Σ	748	-7.1213204	67065.5	-2129.27479

Primjer (nastavak)

Linearni sustav za koeficijente je

$$\begin{bmatrix} 67065.5 & -7.1213204 \\ -7.1213204 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2129.27479 \\ 748 \end{bmatrix}.$$

Rješenje tog sustava je

$$a = -1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad b = 149.5774021,$$

pa je

$$\varepsilon = 1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad \rho = 149.5774021.$$

Značenja:

- ε je **ekscentricitet** elipse,
- ρ je “**srednja**” udaljenost od Zemlje do Sunca.

Izbor aproksimacijske funkcije

Kad smo jednom odabrali oblik aproksimacijske funkcije pitamo se — jesmo li **dobro** izabrali njezin oblik?

- Kad nađemo aproksimaciju, moramo pogledati **graf pogreške**.
- Ako on “**jednoliko**” oscilira oko **nule**, onda je aproksimacijska funkcija **dobro** odabrana.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Metoda najmanjih kvadrata uklanja i slučajne greške (recimo, kod mjerenja). To joj je osnovna svrha u statistici!

Primjer. Eksperimentalni podaci uzeti su tako da se y koordinate točaka na pravcu

$$y(x) = 4x + 3$$

za $x = 0, 1, \dots, 100$, perturbiraju za

• uniformno distribuirani slučajni broj, između -1 i 1 .

Tako se dobiju podaci

$$f_i = 4x_i + 3 + \text{slučajna perturbacija između } -1 \text{ i } 1,$$
$$i = 0, \dots, 100.$$

Primjer uklanjanja slučajne greške

Prvih nekoliko podataka izgleda ovako:

x_i	$y(x_i)$	f_i
0	3	3.481757957246973
1	7	7.905987449877890
2	11	11.931070097690015
3	15	15.495131876084549
4	19	18.681441353019998
5	23	22.984820207108194

Kad se metodom najmanjih kvadrata za **pravac** $\varphi(x) = ax + b$ izračunaju parametri, oni su

$$a = 3.99598, \quad b = 3.20791.$$

Primjer uklanjanja slučajne greške

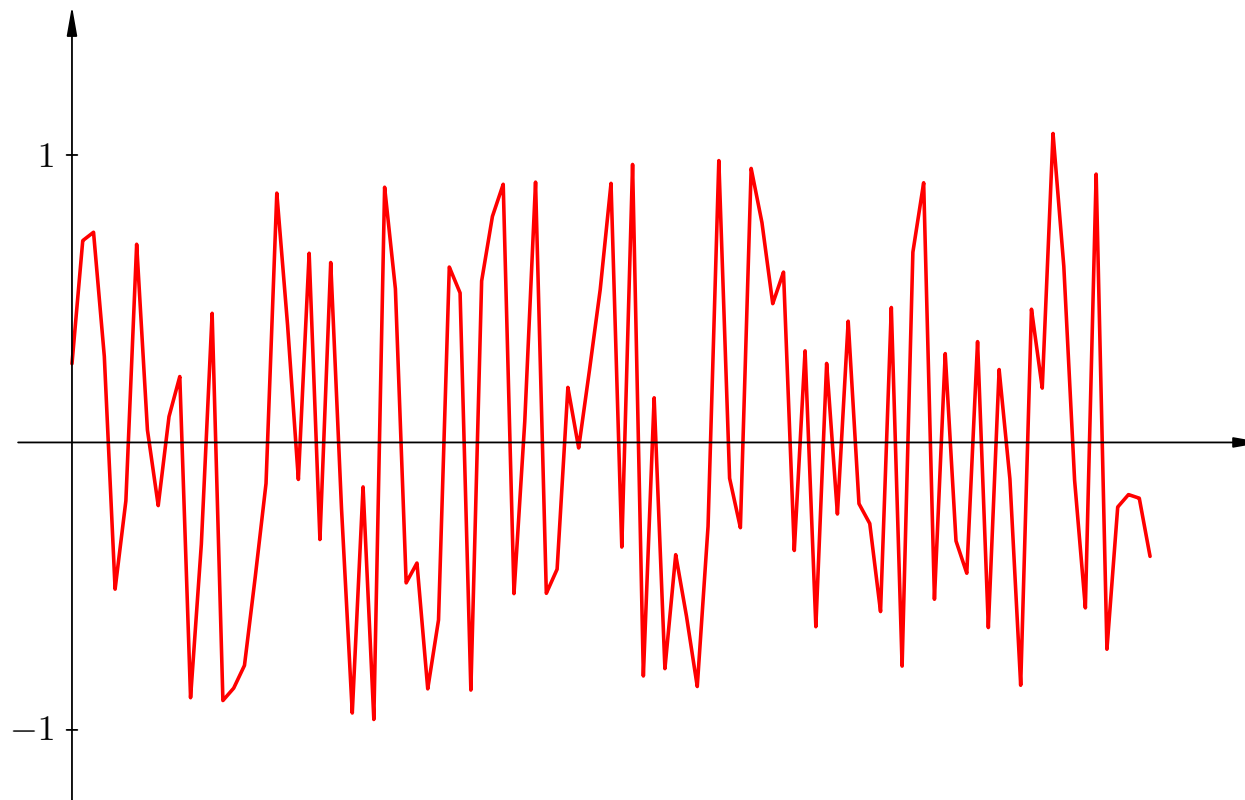
Pogledajmo što su aproksimacije vrijednosti f_i za prvih nekoliko podataka:

x_i	$y(x_i)$	$\varphi(x_i)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.199857875299690
3	15	15.195834231399269
4	19	19.191810587498847
5	23	23.187786943598425

Uočite da su greške $\varphi(x_i)$ obzirom na $y(x_i)$ **znatno manje** nego greške f_i obzirom na $y(x_i)$.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Pogledajmo kako se ponaša greška $f_i - \varphi(x_i)$.



Greška izgleda kao slučajna uniformna funkcija između -1 i 1 , što znači da smo uklonili slučajnu grešku.

Demo primjeri

GnuPlot demo za prethodni problem.

- `Num_Pas\Mls\GnuPlot\Pravac.plt`

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se podaci za **viskoznost 40%** etilnog alkohola.

- Primjer pokazuje **različita** rješenja ako problem **lineariziramo** ili ako ga **ne lineariziramo**.
- Također, pokazan je **način izbora** aproksimacijske funkcije.
- `Num_Pas\Mls\GnuPlot\Etil.plt`

Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata

Matrična formulacija

Diskretni **linearni** problem najmanjih kvadrata najčešće se rješava u **matričnom** obliku.

Da bismo formirali **matrični zapis** linearnog problema najmanjih kvadrata, zgodno je **preimenovati** nepoznanice,

- tako da **matricu**,
- vektor **desne** strane i
- **nepoznanice** u linearnom sustavu

pišemo u uobičajenoj formi:

- **standardno** su nepoznanice x_1, \dots, x_m ,
- a ne a_0, \dots, a_m .

Matrična formulacija

Pretpostavimo da skup podataka (t_k, y_k) , za $k = 1, \dots, n$, želimo aproksimirati **linearnom** funkcijom

$$\varphi(t) = x_1\varphi_1(t) + \dots + x_m\varphi_m(t).$$

Želimo pronaći parametre x_j tako da podaci (t_k, y_k) zadovoljavaju

$$y_k = \sum_{j=1}^m x_j\varphi_j(t_k), \quad k = 1, \dots, n.$$

Primijetite da to nije uvijek moguće, jer je podataka uobičajeno **znatno više** nego parametara.

Matrična formulacija

Ako označimo

$$a_{kj} = \varphi_j(t_k), \quad b_k = y_k,$$

onda prethodne jednačbe možemo napisati u matričnom obliku

$$Ax = b.$$

Budući da je matrica A “dugačka”, postavlja se pitanje što je najbolje rješenje ovog sustava.

Najčešće određujemo x tako da se minimizira rezidual $r = Ax - b$, tj. tražimo rješenje problema

$$\min_x \|r\|_2 = \min_x \|Ax - b\|_2, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times m}, \quad b \in \mathbb{R}^n.$$

Komentar

Ako smo dobro birali bazične funkcije φ_i , onda je razumno pretpostaviti da su one **linearno nezavisne** na **zadanim podacima**, pa

- matrica A ima **puni stupčani rang**, tj. $\text{rang}(A) = m$.

S druge strane, ako je $\text{rang}(A) < m$, onda

- rješenje x **nije jedinstveno**, jer mu možemo dodati bilo koji vektor iz nul-potprostora od A , a da se rezidual ne promijeni.

Odsad nadalje, pretpostavimo (ako drugačije nije rečeno) da A ima **puni stupčani rang**.

Veza s problemom najmanjih kvadrata

Teorem. Skup svih rješenja problema $\min_x \|r\|_2$ označimo s

$$\mathcal{S} = \{x \in \mathbb{R}^m \mid \|Ax - b\|_2 = \min\}.$$

Tada je $x \in \mathcal{S}$ ako i samo ako vrijedi sljedeća relacija ortogonalnosti

$$A^T(b - Ax) = 0,$$

koju obično nazivamo **sustav normalnih jednažbi** i pišemo u obliku

$$A^T Ax = A^T b.$$

Veza s problemom najmanjih kvadrata

Dokaz. Pretpostavimo da \hat{x} zadovoljava normalne jednadžbe

$$A^T \hat{r} = 0, \quad \hat{r} = b - A\hat{x}.$$

Tada za bilo koji $x \in \mathbb{R}^m$ imamo

$$r = b - Ax = \hat{r} + A\hat{x} - Ax = \hat{r} - A(x - \hat{x}).$$

Ako označimo $e = x - \hat{x}$, onda je $r = \hat{r} - Ae$, pa imamo

$$\begin{aligned} \|r\|_2^2 &= r^T r = (\hat{r} - Ae)^T (\hat{r} - Ae) \\ &= \hat{r}^T \hat{r} - \hat{r}^T Ae - (Ae)^T \hat{r} + (Ae)^T Ae \\ &= \|\hat{r}\|_2^2 - (A^T \hat{r})^T e - e^T (A^T \hat{r}) + \|Ae\|_2^2 = \{A^T \hat{r} = 0\} \\ &= \|\hat{r}\|_2^2 + \|Ae\|_2^2 = \|\hat{r}\|_2^2 + \|A(x - \hat{x})\|_2^2, \end{aligned}$$

što je **minimizirano** kad je $e = 0$, tj. $x = \hat{x}$.

Veza s problemom najmanjih kvadrata

S druge strane, pretpostavimo da \hat{x} **minimizira** normu reziduala, ali **ne zadovoljava** sustav normalnih jednažbi

$$A^T \hat{r} = z \neq 0.$$

Tada možemo definirati

$$x = \hat{x} + \varepsilon z,$$

za proizvoljni dovoljno **mali** broj $\varepsilon > 0$, pa je

$$r = \hat{r} - \varepsilon Az$$

i

$$\|r\|_2^2 = r^T r = \hat{r}^T \hat{r} - 2\varepsilon z^T z + \varepsilon^2 (Az)^T (Az) < \hat{r}^T \hat{r} = \|\hat{r}\|_2^2,$$

što znači da, **protivno** pretpostavci, \hat{x} **nije** rješenje problema minimizacije reziduala $\|r\|_2$, za **svaki** dovoljno **mali** $\varepsilon > 0$. ■

Karakterizacija rješenja

Prethodni teorem, zapravo je rekao da je rješenje problema minimizacije $\|r\|_2$ isto što i rješenje sustava normalnih jednadžbi

$$A^T A x = A^T b.$$

Sada odmah vidimo:

- matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna, jer za svaki vektor x vrijedi

$$x^T A^T A x = (x^T A^T)(Ax) = (Ax)^T(Ax) = \|Ax\|_2^2 \geq 0,$$

- sustav normalnih jednadžbi uvijek ima rješenje, jer je

$$A^T b \in \mathcal{R}(A^T) = \mathcal{R}(A^T A),$$

(v. teorem Kronecker–Capelli).

Karakterizacija rješenja

Vrijedi čak i jače.

Teorem. Matrica $A^T A$ je **pozitivno definitna** (pa onda i regularna) ako i samo ako su stupci od A **linearno nezavisni**, tj. ako je $\text{rang}(A) = m$.

Dokaz. Ako su stupci od A **linearno nezavisni**, tada za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Ax \neq 0$ (definicija linearne nezavisnosti), pa je za takav x

$$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

tj. $A^T A$ je **pozitivno definitna**.

Karakterizacija rješenja

S druge strane, ako su stupci **linearno zavisni**, tada postoji $x_0 \neq 0$ takav da je $Ax_0 = 0$, pa je za takav x_0

$$x_0^T A^T Ax_0 = \|Ax_0\|_2^2 = 0.$$

Ako je x takav da je $Ax \neq 0$, onda je

$$x^T A^T Ax = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

pa je $A^T A$ **pozitivno semidefinitna**. ■

Karakterizacija rješenja

Ako je $A^T A$ pozitivno definitna, tj. ako je $\text{rang}(A) = m$, onda postoji **jedinstveno** rješenje problema najmanjih kvadrata (matrica sustava je regularna)!

$$A^T A x = A^T b,$$

koje je dano s

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

s tim da mu je **rezidual**

$$r = b - A(A^T A)^{-1} A^T b.$$

Geometrijska interpretacija rješenja

Desna strana b može se napisati kao

$$b = Ax + r,$$

pri čemu je $Ax \in \mathcal{R}(A)$. Nadalje, iz sustava normalnih jednažbi

$$A^T(b - Ax) = -A^T r = 0,$$

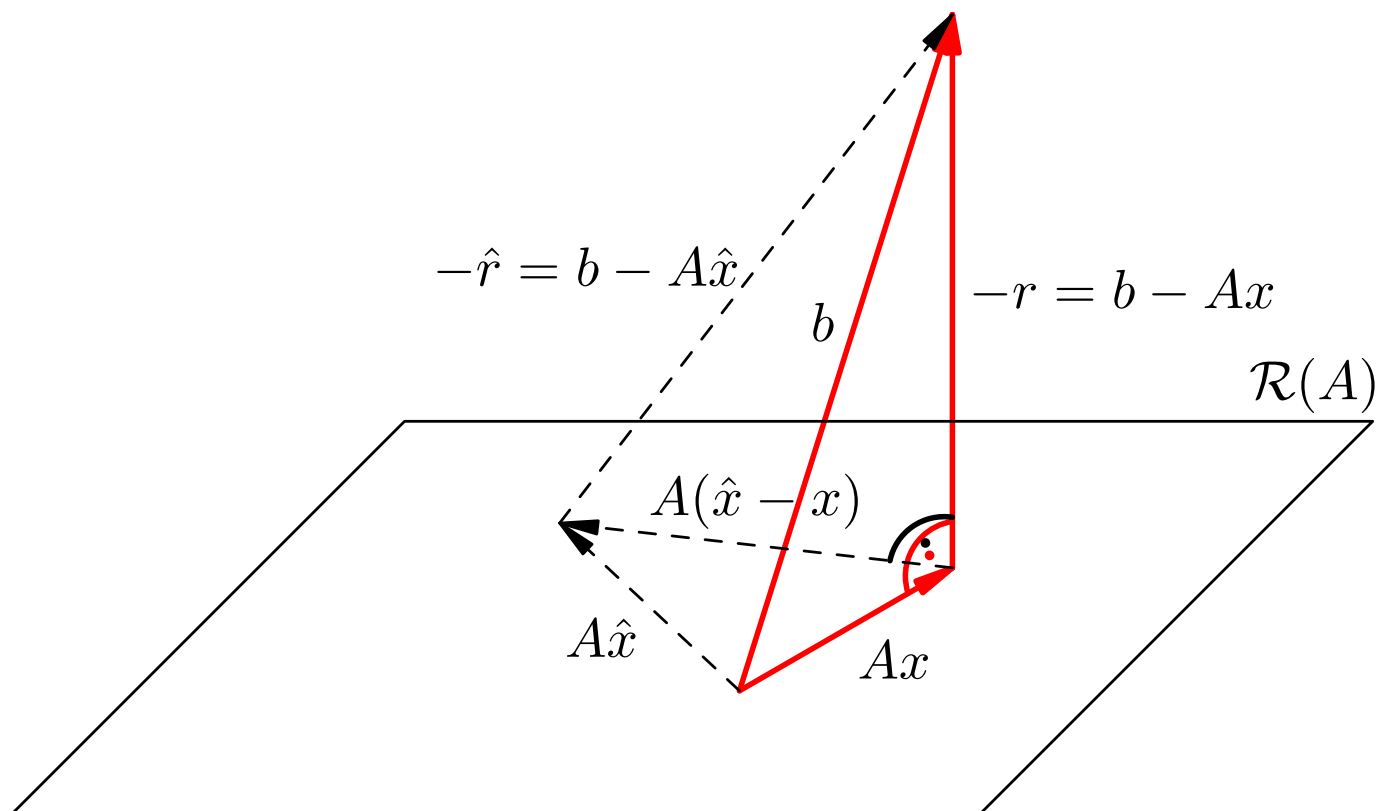
izlazi da je $r \in \mathcal{N}(A^T)$. Prisjetimo li se da je

$$\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T) = \mathbb{R}^n$$

dobivamo **geometrijsku** interpretaciju problema najmanjih kvadrata.

Geometrijska interpretacija rješenja

Rješenje problema najmanjih kvadrata dobivamo tako da napravimo ortogonalnu projekciju vektora b na potprostor $\mathcal{R}(A)$.



Rješenje problema najmanjih kvadrata

Treba još samo pronaći način kako jednostavno “pročitati” rješenje. Jasno je da se matrica $A^T A$ ne invertira, nego se rješava linearni sustav

$$A^T A x = A^T b.$$

Ovaj **pozitivno definitni** sustav normalnih jednažbi mogli bismo riješiti tako da iskoristimo **faktorizaciju Choleskog**.

Prednosti/nedostaci metode:

- ukupan broj aritmetičkih operacija za rješenje je $nm^2 + \frac{1}{3}m^3 + O(m^2)$, što je **brzo**,
- ali, rješavanje na ovaj način **nije naročito točno**.

Korištenje QR faktorizacije

Ponovno, neka je $A^T A$ pozitivno definitna. Promatramo problem minimizacije

$$\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min.$$

Prisjetite se, za proizvoljnu ortogonalnu matricu Q^T vrijedi da čuva skalarni produkt, (onda i kvadrat norme, pa i normu).

Dakle, rješenje problem minimizacije možemo lako zapisati kao

$$\|Ax - b\|_2 = \|Q^T(Ax - b)\|_2 = \|Q^T Ax - Q^T b\|_2 \rightarrow \min.$$

Pitanje je samo kako naći pogodan Q^T tako da lako pročitamo rješenje.

Odgovor: korištenjem QR faktorizacije.

QR faktorizacija

Definicija QR faktorizacije

Neka je zadana matrica G tipa (m, n) koja ima **puni** stupčani rang. Rastav matrice G tako da je

$$G = QR = Q \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

gdje je

- Q **ortogonalna** matrica reda m , a
- R_0 **gornja trokutasta** matrica reda n , s **pozitivnim** dijagonalnim elementima,

zove se **QR faktorizacija** matrice G .

Definicija QR faktorizacije

Ako postoji, prethodna faktorizacija može se pisati i u **jednostavnijoj** formi.

- Prvih n stupaca matrice Q označimo s Q_0 ,
- a preostale stupce, koji su **okomiti** na Q_0 s Q_0^\perp .

Onda je

$$G = QR = [Q_0 \quad Q_0^\perp] \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_0 R_0, \quad Q_0^T Q_0 = I_n.$$

Ostaje samo pokazati da takva faktorizacija postoji.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, i neka je $\text{rang}(G) = n$.
Tad **postoji jedinstvena** faktorizacija oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

pri čemu je Q_0 tipa $m \times n$,

$$Q_0^T Q_0 = I_n,$$

a R_0 **gornja trokutasta** s pozitivnim dijagonalnim elementima.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Dokaz. Najjednostavniji je dokaz ovog teorema je korištenjem Gram-Schmidtove ortogonalizacije.

Ako stupce matrice

$$G = [g_1, g_2, \dots, g_n]$$

ortogonaliziramo s lijeva u desno, dobit ćemo **ortonormalni** niz vektora q_1 do q_n koji razapinju isti potprostor kao i stupci od G .

Stavimo li

$$Q_0 = [q_1, q_2, \dots, q_n],$$

dobili smo $m \times n$ **ortogonalnu** matricu.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije računa i koeficijente

$$r_{ji} = q_j^T g_i$$

koji polazni stupac g_i izražavaju kao linearnu kombinaciju prvih i vektora q_j ortonormirane baze, tako da je

$$g_i = \sum_{j=1}^i r_{ji} q_j.$$

Elementi r_{ji} su elementi matrice R_0 . Iz Gram–Schmidtovog algoritma bit će jasno da se može uzeti $r_{ii} > 0$. ■

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije

U praksi se **nikad** ne koristi (klasični) Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije (skraćeno **CGS**), jer

- vektore ortogonalizira obzirom na prethodne **originalne** vektore g_j ,
- zbog toga je **nestabilan** kad su stupci od G skoro **linearno zavisni**.

Umjesto CGS-a, može se koristiti tzv. **modificirani Gram–Schmidtov** postupak (skraćeno **MGS**),

- koji ortogonalizira vektore obzirom na prethodno **ortogonaliziranu bazu** q_j , pa je mnogo stabilniji,
- ali i kod njega se može dogoditi da je izračunati Q_0 vrlo **daleko** od ortogonalnog, tj. $\|Q_0^T Q_0 - I\| \gg u$ kad je G loše uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klasični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam

```
za i = 1 do n radi {  
  /* Nađi i-ti stupac od Q i R */  
  q_i = g_i;  
  za j = 1 do i - 1 radi {  
    /* Oduzmi komponentu u q_j u smjeru g_i */  
    /* kod CGS-a je */  
    r_ji = q_jTg_i;  
    /* ILI */  
    /* kod MGS-a je */  
    r_ji = q_jTq_i;  
    q_i = q_i - r_ji q_j ;  
  };
```


Gram–Schmidtov algoritam

```
r_ii = ||q_i||2;  
ako je r_ii > 0 onda {  
    q_i = q_i / r_ii;  
};  
inače {  
    /* Matrica R je singularna -- stani */  
};
```

Pokažite da su dvije formule za r_{ji} koje koriste CGS i MGS matematički ekvivalentne.

Drugi algoritmi

U praksi, kad želimo ortogonalan Q , koristimo

- ili Givensove rotacije,
- ili Householderove reflektore

kojima poništavamo odgovarajuće elemente u matrici G . To ponovno daje konstrukciju QR faktorizacije.

Bitna razlika među ta dva algoritma:

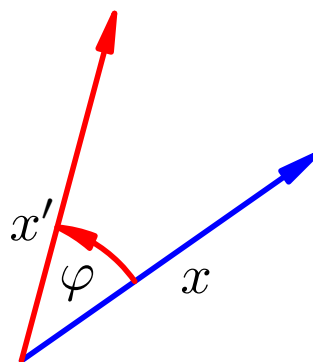
- Givensove rotacije poništavaju po jedan element u stupcu,
- Householderovi reflektori poništavaju sve osim jednog elementa u (skraćenom) stupcu.

Givensove rotacije

Matrica

$$R(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

je **Givensova rotacija** koja svaki vektor $x \in \mathbb{R}^2$ **rotira** obrnuto od kazaljke na satu za kut φ .



Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Za zadani vektor $x \in \mathbb{R}^m$,

- **poništavamo** njegovu j -tu komponentu x_j , korištenjem rotacije $R(i, j, \varphi)$.

Množenjem matrice $R(i, j, \varphi)$ slijeva na x mijenjamo

- **samo** i -tu i j -tu komponentu u x ,
- poništavanje možemo gledati samo u (i, j) ravnini.

Dobiveni sustav je

$$\begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x'_i \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Drugi redak u matičnoj jednadžbi je

$$\sin \varphi x_i + \cos \varphi x_j = 0.$$

Ako je $x_j = 0$ nemamo što poništavati, a ako nije, dobivamo

$$\operatorname{ctg} \varphi = -\frac{x_i}{x_j},$$

odakle, korištenjem trigonometrijskog identiteta

$$1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi = \frac{1}{\sin^2 \varphi}$$

slijedi

$$\sin^2 \varphi = \frac{x_j^2}{x_i^2 + x_j^2}, \quad \cos^2 \varphi = 1 - \sin^2 \varphi = \frac{x_i^2}{x_i^2 + x_j^2}.$$

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Predznake za $\sin \varphi$ i $\cos \varphi$, tako da x'_i bude **pozitivan**. Ako stavimo

$$\sin \varphi = -\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad \cos \varphi = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}},$$

dobivamo

$$\begin{aligned} x'_i &= \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_i + \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_j = \frac{x_i^2 + x_j^2}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \\ &= \sqrt{x_i^2 + x_j^2} > 0. \end{aligned}$$

Element x'_i je **norma** i -te i j -te komponente polaznog vektora.

Sustavno poništavanje

Sustavnim **poništvanjem** elemenata, konstruirat ćemo QR faktorizaciju matrice G .

- postoji puno redosljeda kako **napraviti** nule u faktoru G ,
- u sljedećem je primjeru navedeni redosljed redom po **stupcima**.

Poništavanje.

- Počnimo s **prvim** stupcem.
- Redom, možemo **poništavati** elemente

$$g_{j1}, \quad j = 2, \dots, m$$

korištenjem **rotacija** $R(1, j, \varphi)$, koje “**nabacuju**” normu prvog stupca na **prvi** element u stupcu.

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo “pokvariti” već sređene nule u prethodnim stupcima.

Grafički, za jednu matricu tipa 4×3 to izgleda ovako.

1. stupac:

$$\begin{bmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \end{bmatrix}$$

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo “pokvariti” već sređene nule u prethodnim stupcima.

Grafički, za jednu matricu tipa 4×3 to izgleda ovako.

2. stupac:

$$\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & x & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix}$$

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo “pokvariti” već sređene nule u prethodnim stupcima.

Grafički, za jednu matricu tipa 4×3 to izgleda ovako.

3. stupac:

$$\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Poredak poništavanja i ocjena greške

Drugi raspored poništavanja.

- Za **ocjenu greške** zaokruživanja postoji i **bolji** raspored poništavanja elemenata.
- Gore opisanim algoritmom, pri “sređivanju” prvog stupca **prvi redak** se mijenja $m - 1$ puta.
- **Ujednačimo** da se svaki redak **podjednak** broj puta transformira.
- To se postiže korištenjem niza **nezavisnih** rotacija koje **ne** zahvaćaju iste retke.
- Takav raspored odvijanja rotacija dozvoljava **paralelizaciju** algoritma.

Poredak poništavanja i ocjena greške

Grafički, za jednu matricu tipa 4×3 to izgleda ovako.

Crveno i zeleno su nezavisne rotacije koje možemo istovremeno primjenjivati.

$$\begin{array}{ccc} \begin{bmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix} & \rightarrow & \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ x & x & x \\ 0 & x & x \end{bmatrix} & \rightarrow & \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix} \\ & & \rightarrow & & \rightarrow \\ & & \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \end{bmatrix} & \rightarrow & \begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

Kako doći do Q ?

Na kraju algoritma, na mjestu matrice G piše matrica R .

Do matrice Q se dolazi **nakupljanjem** primijenjenih rotacija

$$R(n, m, \varphi_{nm}) \cdots R(1, 2, \varphi_{12}) G := Q^{-1} G = R.$$

Dakle, matricu G smo

- **slijeva** množili produktom **ortogonalnih** matrica, koji označimo s Q^{-1} .
- Produkt ortogonalnih matrica je **ortogonalna**, pa je $Q^{-1} = Q^T$.
- Zaključak: $G = QR$.

Matrica Q^T dobiva se primjenom **istih** rotacija, samo na početnu matricu I — “što na G , to na I ”.

Householderovi reflektori

Matrica H definirana s

$$H = I - 2uu^T, \quad \|u\|_2 = 1$$

zove se **Householderov reflektor**.

Matrica H je

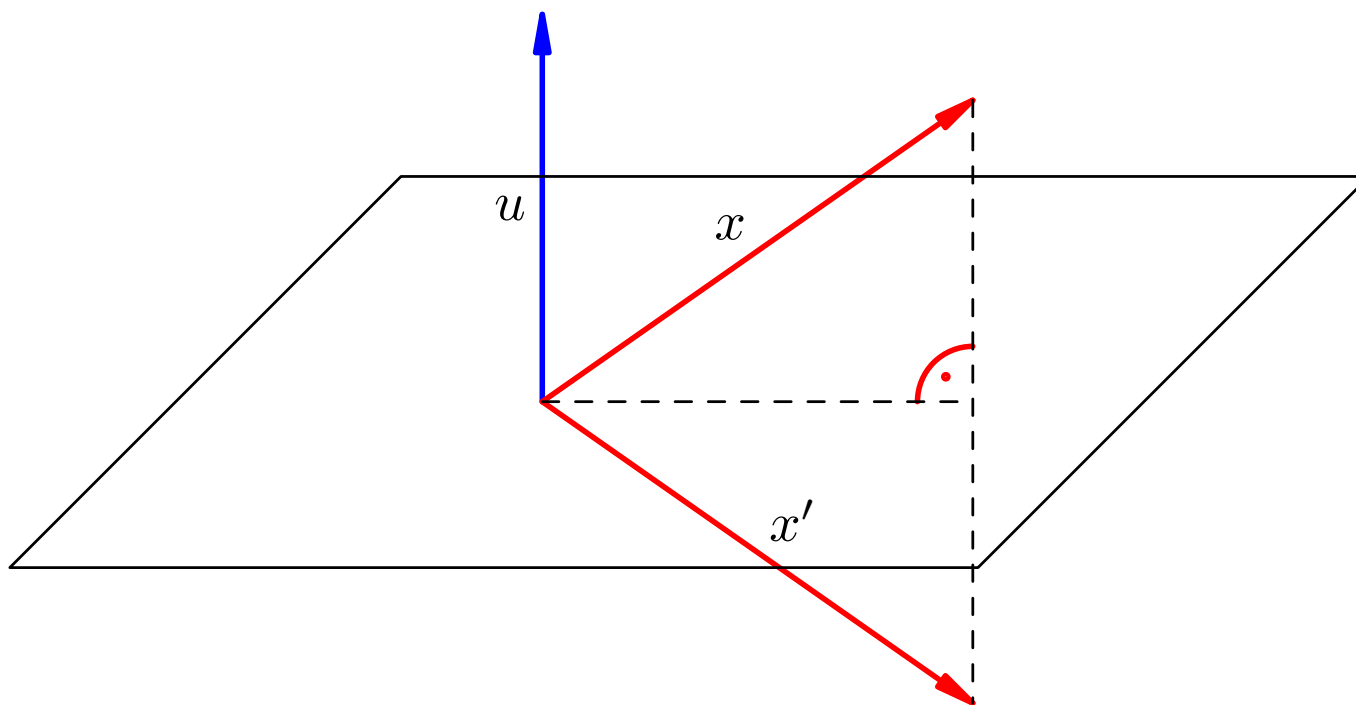
- **simetrična**,
- **i ortogonalna**, jer je

$$\begin{aligned} HH^T &= H^2 = (I - 2uu^T)(I - 2uu^T) \\ &= I - 4uu^T + 4u(u^T u)u^T \\ &= I - 4uu^T + 4\|u\|_2^2 uu^T = I. \end{aligned}$$

Zašto baš ime reflektor?

Promatrajmo **hiperravninu** koja je **okomita** na vektor u .

- Reflektor H sve vektore x preslikava u **simetrične** obzirom na tu hiperravninu.



Poništavanje Householderovim reflektorima

Ako je zadan vektor x , nađimo vektor u koji definira **Householderov reflektor** koji **poništava** sve (osim **prve**) komponente vektora x .

Tražimo da je

$$Hx = \begin{bmatrix} c \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = c \cdot e_1.$$

Raspišimo tu jednadžbu

$$Hx = (I - 2uu^T)x = x - 2u(u^T x) = c \cdot e_1.$$

($u^T x$ je broj!)

Poništavanje Householderovim reflektorima

Premještanjem pribrojnika, dobivamo

$$u = \frac{1}{2(u^T x)}(x - ce_1),$$

pa je u linearna kombinacija od x i e_1 . Preciznije, mora biti

$$u = \alpha(x - ce_1),$$

za neki broj α . Unitarne matrice čuvaju normu, pa je

$$\|x\|_2 = \|Hx\|_2 = |c|.$$

Nadalje, u mora biti jedinične norme, a paralelan s vektorom

$$\tilde{u} = x \pm \|x\|_2 e_1.$$

Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

$$u = \frac{\tilde{u}}{\|\tilde{u}\|_2}.$$

Oba izbora znakova u definiciji \tilde{u} zadovoljavaju

$$Hx = ce_1,$$

dok je $\tilde{u} \neq 0$. U praksi se, zbog **numeričke stabilnosti**, koristi

$$\tilde{u} = x + \text{sign}(x_1)\|x\|_2 e_1,$$

jer to znači da **nema kraćenja** pri računanju prve komponente od \tilde{u} , koja je jednaka

$$\tilde{u}_1 = x_1 + \text{sign}(x_1)\|x\|_2,$$

tj. oba su pribrojnika **istog** znaka.

Drugi način definicije H

Napomena. Računanje u se može **izbjeći**, ako definiramo

$$H = I - 2 \frac{\tilde{u}\tilde{u}^T}{\tilde{u}^T\tilde{u}}.$$

Kako djelovati na ostale stupce?

Kad smo jednom izračunali u , **ne treba** računati **cijelu** matricu H . Dovoljno je pogledati kako ona djeluje na vektor z :

$$Hz = (I - 2uu^T)z = z - 2u(u^T z).$$

Dakle, treba izračunati **skalarni produkt** $u^T z$, a zatim **modificirati** vektor z .

QR faktorizacija korištenjem reflektora

QR faktorizacija provodi se sustavnom primjenom **Householderovih reflektora** na matricu G i to **slijeva**.

- Prvo se ponište svi elementi **prvog** stupca (do na prvi), a na ostale stupce se djeluje reflektorom H_1 .
- Zatim se ponište elementi dijela **drugog** stupca od dijagonale nadalje (osim dijagonalnog elementa). To se radi “**skraćenim**” reflektorom H'_2 .

Ortogonalna matrica kojom smo djelovali na radnu matricu je onda

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & H'_2 \end{bmatrix}.$$

QR faktorizacija korištenjem reflektora

I tako redom. U k -tom koraku, za $k = 1, \dots, n$, poništava se

• k -ti “skraćeni” stupac u radnoj matrici — od dijagonale nadalje.

Ortogonalna matrica kojom djelujemo na radnu matricu ima oblik

$$H_k = \begin{bmatrix} I & \\ & H'_k \end{bmatrix},$$

s tim da je I reda $k - 1$, a H'_k reda $m - k + 1$.

Ako želimo formirati matricu Q , onda je

$$H_n H_{n-1} \cdots H_1 G = R, \quad \text{tj.} \quad Q = (H_n H_{n-1} \cdots H_1)^T.$$