

Numerička matematika

8. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

`web.math.pmf.unizg.hr/~singer`

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
 - QR faktorizacija.
 - Givensove rotacije.
 - Householderovi reflektori.
 - QR faktorizacija i pivotiranje.
 - Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije.
 - Neprekidni problem najmanjih kvadrata.
 - Jednostavni primjer.
 - Složeniji primjer.

Komentar rezultata 1. kolokvija

Rezultati prvog kolokvija — komentar:

- Općenito gledajući, rezultati su **dobri** :-)

Idemo redom ...

- **Pohvala** svima koji imaju ≥ 40 bodova — ima ih čak **16**.

Medjutim, za **neke** — moglo je i puno **bolje**.

- **Oni** koji imaju ≤ 20 bodova ozbiljno su “**ugroženi**”.
- Takvih ima **42**, od **142** pridošlih.

Kolokviji ispituju gradivo **cijelog** kolegija, a ne samo **vježbe**!
Sudeći prema bodovima na **prvom** zadatku,

- **velik** dio vas je to **ozbiljno shvatio**.

Informacije

Konzultacije (službeno):

- samo za NM: ponedjeljak u 13 sati (iza predavanja),
- petak, 12–14 sati, ili — po dogovoru.

Ne zaboravite, “žive” su i **domaće zadaće** na adresi

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

ili, izravno

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

Dodatni bodovi “čekaju na vas”.

Informacije

Moja web stranica za **Numeričku matematiku** je

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

Tamo su kompletna **predavanja** od prošlih **5** godina, a stizat će i **nova** (kako nastaju).

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

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

Skraćena verzija **skripte** — **2. dio** (drugih **6** tjedana):

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

Informacije — demonstratori

Kolegij “Numerička matematika” ima dva demonstratora:

- Mario Berljafa

- termini: utorak, 9–10 i petak, 12–13.

- e-mail: mberljaf@student.math.hr

- Marin Bužančić

- termin: utorak, 16–18.

- e-mail: buzancic@student.math.hr

Demosi lijepo mole da im se najavite mailom bar dan ranije!

- Sastanak za demonstrature je pred oglasnom pločom (bar zasad).

QR faktorizacija

Definicija QR faktorizacije

Neka je zadana matrica G tipa (m, n) koja ima **puni** stupčani rang, tj. $\text{rang}(G) = n \leq m$. 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** (tzv. skraćenoj) 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 $\text{rang}(G) = n$. Tada **postoji jedinstvena** faktorizacija oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

pri čemu je Q_0 matrica tipa $m \times n$, s **ortonormiranim** stupcima, tj. vrijedi

$$Q_0^T Q_0 = I_n,$$

a R_0 je **gornja trokutasta** matrica s **pozitivnim** dijagonalnim elementima (dovoljno je **fiksirati** predznake na dijagonali).

Pravokutnu matricu Q_0 s **ortonormiranim** stupcima, također, skraćeno zovemo “**ortogonalnom**”.

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, \dots, 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

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

Koeficijenti r_{ji} su upravo elementi matrice R_0 .

Iz Gram–Schmidtovog algoritma bit će jasno da se može uzeti $r_{ii} > 0$ (dovoljno je $r_{ii} \neq 0$ za fiksiranje predznaka). ■

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.
- No, 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 **vrlo loše** uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klasični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam:

```
za i = 1 do n radi {  
  /* Nađi i-ti stupac od Q_0 i R_0 */  
  q_i = g_i;  
  za j = 1 do i - 1 radi {  
    /* Oduzmi komponentu od q_j u smjeru g_i */  
    /* kod CGS-a je */  
    r_ji = q_jT g_i;  
    /* ILI */  
    /* kod MGS-a je */  
    r_ji = q_jT q_i;  
    q_i = q_i - r_ji q_j;  
  };
```

Gram–Schmidtov algoritam (nastavak)

```
r_ii = ||q_i||2;  
ako je r_ii > 0 onda {  
    q_i = q_i / r_ii;  
}  
inače {  
    /* Matrica R_0 je singularna -- stani */  
};  
};
```

Napomena: $r_{ii} = 0$ je ekvivalentno s tim da je

- g_i linearna kombinacija **prethodnih** stupaca matrice G (linearna zavisnost, pad ranga).

Pokažite da su **dvije** formule za r_{ji} koje koriste **CGS** i **MGS** matematički **ekvivalentne**. **Numerički**, naravno, **nisu** (greške).

Gram–Schmidtov algoritam — komentari

Gram–Schmidtov algoritam daje **skraćenu QR** faktorizaciju $G = Q_0 R_0$. Za “**punu**” faktorizaciju, tj. **kvadratni Q**,

☛ fali nam **ortogonalni komplement** Q_0^\perp ,

kojeg **nemamo** iz čega izračunati — “fale” stupci u G .

Čim je $\|q_i\|_2 \neq 0$, za dijagonalni element r_{ii} možemo uzeti bilo koji od **dva** predznaka

$$r_{ii} = \pm \|q_i\|_2.$$

Dakle, bilo kojim **fiksiranjem predznaka** na dijagonali od R_0 ,

☛ opet dobivamo **jedinstvenu skraćenu QR** faktorizaciju.

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.

Oba algoritma mogu dati skraćenu i punu QR faktorizaciju.

Givensove rotacije

Givensove rotacije

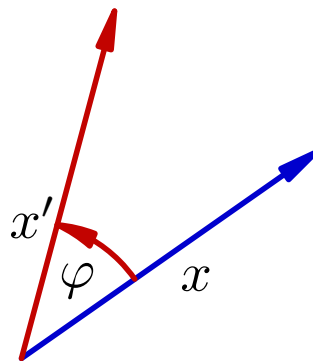
Matrica oblika

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

zove se **Givensova rotacija** u ravnini.

Ova transformacija **rotira** svaki vektor $x \in \mathbb{R}^2$ za kut φ , u smjeru **obrnutom** od kazaljke na satu.

Slika za $x' = R(\varphi)x$ je



Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Matrica $R(i, j, \varphi)$ je **ortogonalna**. 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 ,
- pa poništavanje možemo gledati samo u (i, j) ravnini.

Dobiveni sustav je

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

Traže se elementi matrice **rotacije** $R(i, j, \varphi)$ i **novi** element x'_i .

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Drugi redak u matricnoj jednadžbi opisuje poništavanje

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

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

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

Oдавде, 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 $\cos \varphi$ biramo tako da x'_i bude pozitivan.

Ako stavimo

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

iz prve jednačbe 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. Ove formule vrijede i kad je $x_j = 0$ (tada je $\varphi = 0$ ili $\varphi = \pi$).

Sustavno poništavanje

Sustavnim poništavanjem elemenata, konstruirat ćemo QR faktorizaciju matrice G .

- Postoji puno redosljeda kako napraviti nule u faktoru G .
- U sljedećem primjeru uzet je “standardni” redosljed redom, po stupcima, odozgo nadolje.

Poništavanje.

- Počinjemo s prvim stupcem i poništavamo redom elemente g_{21}, \dots, g_{m1} .
- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo “pokvariti” već sređene nule u prethodnim stupcima.

Sustavno poništavanje - primjer

Primjer. Za jednu matricu G , tipa 4×3 , to izgleda ovako.

1. stupac:

U radnoj matrici G , redom **poništavamo** elemente

$$g_{i1}, \quad i = 2, \dots, m = 4,$$

rotacijama $R(1, i, \varphi_{1i})$, koje “**nabacuju**” normu **prvog** stupca na **prvi** element u stupcu.

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

Sustavno poništavanje - primjer (nastavak)

2. stupac:

- U radnoj matrici G , redom **poništvamo** elemente

$$g_{i2}, \quad i = 3, \dots, m = 4,$$

rotacijama $R(2, i, \varphi_{2i})$, koje “**nabacuju**” normu **drugog** stupca (od dijagonale nadolje) na **drugi** element u stupcu.

- To neće “**pokvariti**” već sređene **nule** u **prvom** stupcu.
- Prvi** redak se više **ne mijenja**.

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

Sustavno poništavanje - primjer (kraj)

3. stupac:

- U radnoj matrici G , redom **poništvamo** elemente

$$g_{i3}, \quad i = 4, \dots, m = 4,$$

rotacijama $R(3, i, \varphi_{3i})$, koje “**nabacuju**” normu **trećeg** stupca (od dijagonale nadolje) na **treći** element u stupcu.

- To neće “**pokvariti**” već sređene **nule** u prva **dva** stupca.
- Prva **dva** retka se više **ne mijenjaju**.

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

Poredak poništavanja i ocjena greške

Drugi rasporedi 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, a svi ostali samo **jednom**.
- **Poboljšanje** dobivamo “**ujednačavanjem**”, tako da se svaki redak transformira **podjednak** broj puta.
- To se postiže korištenjem niza **nezavisnih** rotacija koje **ne** zahvaćaju **iste** retke.
- Takav raspored odvijanja rotacija, usput, još dozvoljava i **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 (samo su dvije, jer je m premalen).

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

Parovi su: $(1, 2)$ i $(3, 4)$, $(1, 3)$ i $(2, 4)$, a na samom kraju više “ne ide”.

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} .
- Zaključak: $G = QR$.
- Produkt ortogonalnih matrica je **ortogonalna**, pa je $Q^{-1} = Q^T$. Dakle, Q se lako računa iz Q^T .

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

Puni i skraćeni Q

U punoj QR faktorizaciji, kvadratnu matricu Q^T , reda m , dobivamo akumulacijom rotacija slijeva, na početnu jediničnu matricu I_m , reda m ,

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

Pravokutnu matricu Q_0^T iz skraćene QR faktorizacije

• dobivamo trivijalno — radeći na prvih n stupaca!

Dovoljno je startati s matricom $I_m(1:n)$ koja sadrži prvih n stupaca jedinične matrice I_m

$$Q_0^T = R(n, m, \varphi_{nm}) \cdots R(1, 2, \varphi_{12}) I_m(1:n).$$

A obratno? Napravimo punu QR faktorizaciju matrice Q_0^T !

Householderovi reflektori

Householderovi reflektori

Za zadani **jedinični** vektor $u \in \mathbb{R}^m$, matrica H definirana s

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

zove se **Householderov reflektor**.

Matrica H je

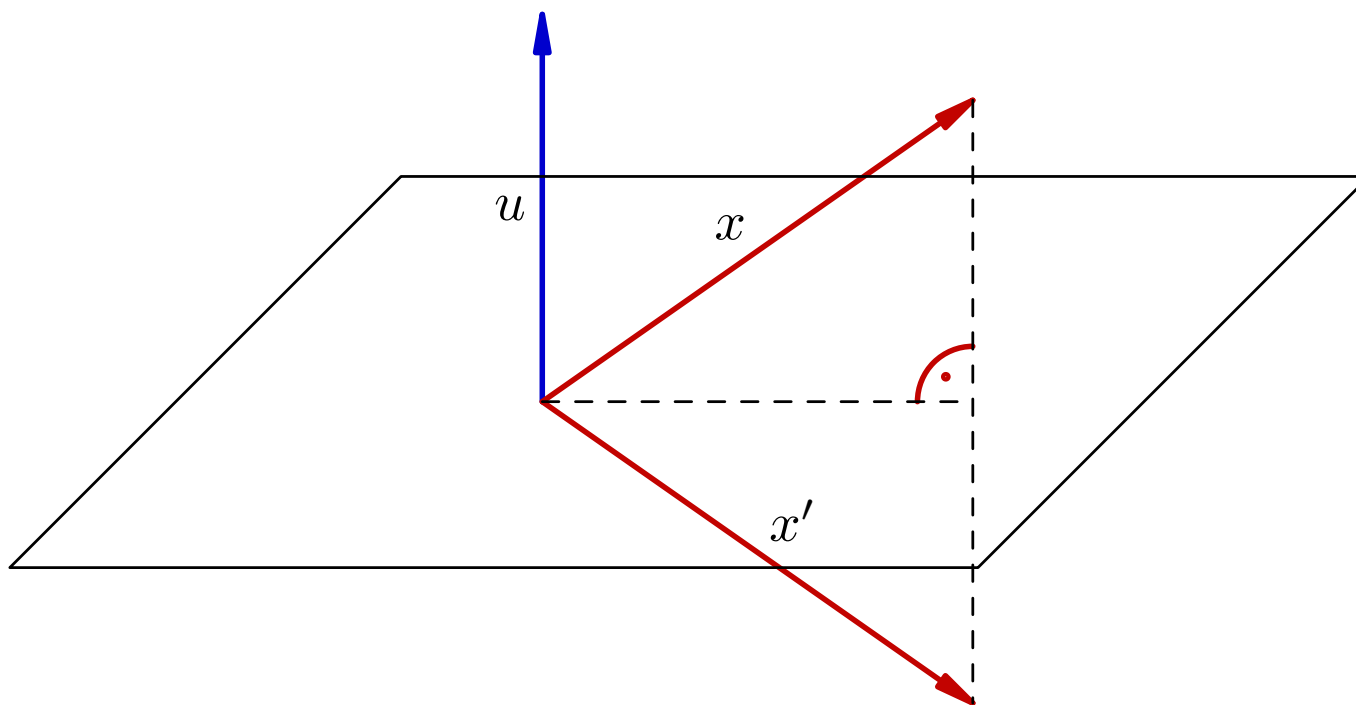
- **simetrična**,
- i **ortogonalna**, jer je

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

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 — skalarni produkt!)

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

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

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 nadolje (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 nadolje. 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

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

ili

$$Q = (H_n H_{n-1} \cdots H_1)^T = H_1 \cdots H_{n-1} H_n.$$

QR faktorizacija i pivotiranje

Računanje QR faktorizacije

Neka je G zadana matrica tipa $m \times n$, s tim da je $m \geq n$.

Računanje QR faktorizacije matrice G

- provodimo u nizu od n koraka. Ako dozvolimo i $m < n$, broj koraka je $\min\{m, n\}$.

Na početku algoritma označimo $R^{(0)} := G$.

Opišimo kako izgleda k -ti korak algoritma, za $k = 1, \dots, n$.

- Na početku k -tog koraka trenutna radna matrica je $R^{(k-1)}$.
- U njoj prvih $k - 1$ stupaca već ima gornjetrokutastu formu, tj. nule ispod dijagonale.
- Ti stupci se više neće mijenjati!

Računanje QR faktorizacije

Izgled radne matrice $R^{(k-1)}$ na početku k -tog koraka:

$$\left[\begin{array}{cccc|ccc}
 r_{1,1}^{(1)} & r_{1,2}^{(2)} & \cdots & r_{1,k-1}^{(k-1)} & r_{1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{1,n}^{(k-1)} \\
 & r_{2,2}^{(2)} & \cdots & r_{2,k-1}^{(k-1)} & r_{2,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{2,n}^{(k-1)} \\
 & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & r_{k-1,k-1}^{(k-1)} & r_{k-1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k-1,n}^{(k-1)} \\
 & & & & r_{k,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k,n}^{(k-1)} \\
 & & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & r_{m,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{m,n}^{(k-1)}
 \end{array} \right] .$$

Računanje QR faktorizacije

U k -tom koraku — u matrici $R^{(k-1)}$

- poništavamo sve elemente k -tog stupca ispod dijagonale, nekom ortogonalnom transformacijom Q_k .
- Tako dobivamo novu radnu matricu $R^{(k)}$ koja ima jedan “sređeni” stupac više.

Ovu transformaciju možemo prikazati u obliku

$$R^{(k)} = Q_k R^{(k-1)}, \quad k = 1, \dots, n.$$

Na kraju dobivamo gornju trokutastu matricu $R := R^{(n)}$.

Nije bitno kako računamo Q_k — rotacijama ili reflektorima!

Pivotiranje stupaca u QR faktorizaciji

Slično kao kod LR faktorizacije, i kod QR faktorizacije možemo koristiti **pivotiranje**.

- Uobičajeno se koristi pivotiranje **stupaca**

$$GP = QR,$$

gdje je P matrica permutacije.

- Ako su x_ℓ , $\ell = k, \dots, n$, **skraćeni** stupci, na prvo mjesto dovodi se onaj s **najvećom** normom, tj. takav da je $\|x_k\|_2$ **maksimalna**.
- Postupak dovođenja na prvo mjesto **ponavljamo** u svakom koraku QR faktorizacije sa sve kraćim i kraćim stupcima.

Svrha pivotiranja

Svrha?

- Ako je matrica G bila takva da su joj stupci (skoro) linearno zavisni, onda se QR faktorizacijom s pivotiranjem određuje rang matrice G .

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrica ranga r . Tada postoje $n \times n$ matrica permutacije P , ortogonalna matrica Q reda m , te gornja trokutasta matrica R_0 ranga r , tipa $\min\{m, n\} \times n$, tako da vrijedi

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

i

$$\|(R_0)_{kk}\|^2 \geq \sum_{i=k}^j \|(R_0)_{ij}\|^2, \quad 1 \leq k \leq \min\{m, n\}, \quad k \leq j \leq n.$$

Rješenje matricne formulacije korištenjem QR faktORIZACIJE

Korištenje QR faktorizacije

Već smo najavili da ćemo za rješenje **diskretnog** problema **najmanjih kvadrata** koristiti **QR** faktorizaciju.

Prisjetimo se, ako je A **punog** stupčanog ranga (tj. vrijedi $\text{rang}(A) = m$), onda **QR** faktorizacija matrice A ima oblik

$$A = QR = [Q_0 \quad Q_0^\perp] \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_0 R_0.$$

Za početak, ako minimiziramo $\|Ax - b\|_2^2$, minimizirali smo i $\|Ax - b\|_2$. Zbog **unitarne invarijantnosti** 2-norme, imamo

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2 = \min_x \|Q^T(Ax - b)\|_2^2 = \min_x \|Q^T Ax - Q^T b\|_2^2.$$

Korištenje QR faktorizacije

Za Q uzmimo ortogonalnu matricu iz QR faktorizacije, pa je

$$\begin{aligned}\min_x \|Q^T(Ax - b)\|_2^2 &= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} x - Q^T b \right\|_2^2 \\ &= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} Q_0^T \\ (Q_0^\perp)^T \end{bmatrix} b \right\|_2^2 \\ &= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 x - Q_0^T b \\ 0 - (Q_0^\perp)^T b \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \min_x \left(\|R_0 x - Q_0^T b\|_2^2 + \|(Q_0^\perp)^T b\|_2^2 \right).\end{aligned}$$

Korištenje QR faktorizacije

Primijetimo da **samo prvi član** u prethodnom minimumu ovisi o x , a **drugi** ne.

Budući da je R_0 kvadratna i **punog ranga**, onda je i **regularna**, pa postoji **jedinstveno** rješenje x linearnog sustava

$$R_0x = Q_0^T b.$$

Time smo **prvi** član u kvadratu norme napravili **najmanjim** mogućim, jer je $\|R_0x - Q_0^T b\|_2^2 = 0$.

Zaključak. Onda vrijedi

$$\min_x \|Ax - b\|_2 = \|(Q_0^\perp)^T b\|_2,$$

a **postize** se za vektor x koji je rješenje sustava $R_0x = Q_0^T b$.

Drugi način

Napomena. Postoji i lakši način da se dođe do prethodnog zaključka, ako znamo da su rješenja **problema minimizacije**

$$\min_x \|Ax - b\|_2$$

jednaka rješenju **sustava normalnih jednažbi**

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

Ako je $A^T A$ **nesingularna**, što je ekvivalentno tome da A ima **puni** stupčani rang, onda problem najmanjih kvadrata ima **jedinstveno** rješenje

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

Drugi način

Napravimo skraćenu QR faktorizaciju matrice A

$$A = Q_0 R_0.$$

Uvrštavanjem u rješenje x izlazi

$$\begin{aligned}x &= (A^T A)^{-1} A^T b = ((Q_0 R_0)^T Q_0 R_0)^{-1} (Q_0 R_0)^T b \\ &= (R_0^T Q_0^T Q_0 R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b = (R_0^T R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b \\ &= R_0^{-1} (R_0^T)^{-1} R_0^T Q_0^T b = R_0^{-1} Q_0^T b,\end{aligned}$$

pa je x , očito, rješenje sustava

$$R_0 x = Q_0^T b.$$

Primjer

Primjer. Diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata nađite funkciju oblika

$$\varphi(x) = \frac{x + a}{bx + c}$$

koja aproksimira slijedeći skup podataka (točaka):

x_i	0	1	2	3	4
f_i	2.02	0.97	0.82	0.70	0.67

Nađite

- aproximacije i pogreške u čvorovima x_i i
- sumu kvadrata apsolutnih grešaka S .

Primjer — linearizacija

Rješenje nađite

- korištenjem sustava **normalnih jednadžbi** i faktorizacije Choleskog,
- korištenjem **QR** faktorizacije,
- korištenjem **QR** faktorizacije s **pivotiranjem** stupaca.

Rješenje. Traženi oblik funkcije je **nelinearan**, pa ga treba **linearizirati**. To možemo napraviti na više načina.

1. Pomnožimo oblik funkcije φ s $bx + c$ i dobivamo

$$(bx + c)\varphi(x) = x + a,$$

odnosno

$$-a + bx\varphi(x) + c\varphi(x) = x.$$

Primjer — linearizacija

2. Ovu funkciju $-a + bx\varphi(x) + c\varphi(x) = x$ možemo podijeliti s $\varphi(x)$, pa dobivamo drugu linearizaciju

$$-a \cdot \frac{1}{\varphi(x)} + bx + c = \frac{x}{\varphi(x)}.$$

Primijetite da ove dvije linearizacije

ne moraju (i neće) dati isto rješenje!

Obje pripadaju “grupi” linearizacija oblika

$$D + Eu + Fv = w,$$

pri čemu je $w = w(u, v)$.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Prvo riješimo problem korištenjem sustava **normalnih jednadžbi** i faktorizacije **Choleskog**.

Za **1. slučaj** metoda najmanjih kvadrata ima oblik

$$S = \sum_{i=0}^n (w_i - (-a + bu_i + cv_i))^2 \rightarrow \min,$$

pri čemu su supstitucije za **varijable**

$$u = x\varphi(x), \quad v = \varphi(x), \quad w = x,$$

a za **vrijednosti** varijabli u čvorovima

$$u_i = x_i f_i, \quad v_i = f_i, \quad w_i = x_i.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Deriviranjem po sve tri varijable izlazi

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=0}^n (w_i - (-a + bu_i + cv_i))(-1) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=0}^n (w_i - (-a + bu_i + cv_i))u_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c} = -2 \sum_{i=0}^n (w_i - (-a + bu_i + cv_i))v_i = 0.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav

$$\begin{bmatrix} (n+1) & -\sum_{i=0}^n u_i & -\sum_{i=0}^n v_i \\ -\sum_{i=0}^n u_i & \sum_{i=0}^n u_i^2 & \sum_{i=0}^n u_i v_i \\ -\sum_{i=0}^n v_i & \sum_{i=0}^n u_i v_i & \sum_{i=0}^n v_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{i=0}^n w_i \\ \sum_{i=0}^n u_i w_i \\ \sum_{i=0}^n v_i w_i \end{bmatrix} .$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Kad uvrstimo zadane podatke, za **1. slučaj** dobivamo linearni sustav $Mx = d$, gdje je

$$M = \begin{bmatrix} 5 & -7.39 & -5.18 \\ -7.39 & 15.2229 & 5.5513 \\ -5.18 & 5.5513 & 6.6326 \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} -10 \\ 21.27 \\ 7.39 \end{bmatrix}.$$

Faktorizacija **Choleskog** matrice M je $M = R^T R$, uz

$$R \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Sad moramo još riješiti dva trokutasta sustava:

$$R^T y = d, \quad Rx = y.$$

Rješenja **prvog**, pa **drugog** sustava su

$$y \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}, \quad x \approx \begin{bmatrix} 1.768586298 \\ 1.936999050 \\ 0.874229442 \end{bmatrix}.$$

Prema tome, rješenje za parametre u **1. slučaju** je

$$a = 1.768586298,$$

$$b = 1.936999050,$$

$$c = 0.874229442.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Vrijednosti u čvorovima dobivamo tako da uvrstimo x_i u $\varphi(x)$

$$\varphi(x_i) = \frac{x_i + 1.768586298}{1.936999050x_i + 0.874229442},$$

pripadne greške su $f_i - \varphi(x_i)$, a zbroj kvadrata grešaka je

$$S = \sum_{i=0}^4 (f_i - \varphi(x_i))^2.$$

Izračunajte sami!

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Za 2. slučaj treba uvesti supstitucije za varijable

$$u = -\frac{1}{\varphi(x)}, \quad v = x, \quad w = \frac{x}{\varphi(x)},$$

i vrijednosti varijabli u čvorovima

$$u_i = -\frac{1}{\varphi(f_i)}, \quad v_i = x_i, \quad w_i = \frac{x_i}{f_i}.$$

Metoda najmanjih kvadrata imat će oblik

$$S = \sum_{i=0}^n (w_i - (au_i + bv_i - c))^2 \rightarrow \min.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Pripadni linearni sustav glasi $Mx = d$, gdje je

$$M \approx \begin{bmatrix} 7.0636 & -13.7258 & -5.6666 \\ -13.7258 & 30 & 10 \\ -5.6666 & 10 & 5 \end{bmatrix}, \quad d \approx \begin{bmatrix} -19.0704 \\ 42.6467 \\ 13.7258 \end{bmatrix}.$$

Rješenje za parametre u **2. slučaju** je

$$a = 1.752205717,$$

$$b = 1.938744602,$$

$$c = 0.853483129.$$

Ova rješenja se **ponešto razlikuju** od prethodnih!

Primjer — QR faktorizacija

Riješimo sad **1. slučaj** korištenjem QR faktorizacije.
Uvrštavanjem točaka (x_i, f_i) u

$$-a + bx\varphi(x) + c\varphi(x) = x,$$

dobivamo

$$-a + bx_i f_i + c f_i = x_i, \quad i = 0, \dots, 4,$$

pa su A i b iz **problema minimizacije** jednaki

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0.00 & 2.02 \\ -1 & 0.97 & 0.97 \\ -1 & 1.64 & 0.82 \\ -1 & 2.10 & 0.70 \\ -1 & 2.68 & 0.67 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija

Skraćena forma QR faktorizacije od A je $A = Q_0 R_0$, gdje je

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} -0.447213595 & -0.712715113 & 0.536492779 \\ -0.447213595 & -0.244965682 & -0.647620310 \\ -0.447213595 & 0.078118977 & -0.281410215 \\ -0.447213595 & 0.299938295 & -0.065005678 \\ -0.447213595 & 0.579623522 & 0.457543425 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Uočite: $R_0 = R$ iz faktorizacije Choleskog za $M = A^T A$.

Primjer — QR faktorizacija

Desna strana linearnog sustava je $Q_0^T b$, gdje je

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}.$$

Rješenje trokutastog sustava $R_0 x = Q_0^T b$ je

$$x \approx \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}$$

Napravite isto sami za drugu linearizaciju.

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Ako napravimo QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca, dobit ćemo $AP = Q_0 R_0$, gdje je poredak stupaca $p = [2, 3, 1]$,

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} 0.000000000 & 0.940989460 & 0.332153833 \\ 0.248612544 & 0.287082061 & -0.731570874 \\ 0.420334610 & 0.103390036 & -0.312927468 \\ 0.538233342 & -0.030653048 & -0.059615261 \\ 0.686888265 & -0.143155917 & 0.502991359 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 3.901653496 & 1.422807024 & -1.894068760 \\ & 2.146676541 & -1.157652593 \\ & & 0.268968410 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Dobiveno rješenje trokutastog sustava $R_0 x' = Q_0^T b$ je

$$x' \approx \begin{bmatrix} 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \\ 1.76858629811 \end{bmatrix}.$$

Sad još treba vratiti x u “pravi poredak”. Budući da je finalni pivotni vektor bio $p = [2, 3, 1]$, to odgovara matrici permutacije

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Pravo rješenje x dobit ćemo kao

$$x = P^T x' = \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix} .$$

Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

Neka je G pravokutna matrica tipa (m, n) , koja ima **puni stupčani rang**, tj. $\text{rang}(G) = n \leq m$.

Matrica G ima jedinstvenu **QR** faktorizaciju (na pr. punu)

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

gdje je R_0 **gornja trokutasta** matrica reda n , s **pozitivnim** dijagonalnim elementima, a Q je unitarna matrica.

S druge strane, neka je $H := G^*G$ **Gramova matrica** skalarnih produkata stupaca matrice G .

Znamo da je onda H **pozitivno definitna** matrica. Zato H ima jedinstvenu faktorizaciju **Choleskog** ...

Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

$$H = R^*R,$$

gdje je R gornja trokutasta s pozitivnom dijagonalom.

Tvrdnja. Ovi trokutasti faktori su jednaki, tj. vrijedi $R = R_0$.

Dokaz. U $H = G^*G$ uvrstimo QR faktorizaciju od G i “skratimo” $Q^*Q = I$. Jedinственost faktora R daje tvrdnju. ■

Ista veza (jednakost) vrijedi i za faktorizacije s pivotiranjem:

- pivotiranje stupaca po normi u QR faktorizaciji, i
- dijagonalno pivotiranje u faktorizaciji Choleskog.

Korist: ako znamo “faktor” G matrice H , i tražimo R ,

- ne treba računati H , pa Choleskog, već samo QR od G .

Neprekidni problem najmanjih kvadrata

Još jednom o najmanjim kvadratima

U uvodu o aproksimaciji rečeno je da se parametri funkcije $\varphi \in \mathcal{F}$ po **metodi najmanjih kvadrata**, traže tako da bude

$$\min_{\varphi \in \mathcal{F}} \|e(x)\|_2,$$

pri čemu je $e(x) = f(x) - \varphi(x)$.

Da bismo mogli naći **minimalnu grešku** u **neprekidnom** slučaju, moramo definirati

- **skalarni produkt** za **neprekidne** funkcije na odgovarajućem intervalu.
- Definicija **norme nije dovoljna**, jer je rješenje već u **diskretnom** slučaju bila **projekcija** na potprostor, a za to nam je potreban skalarni produkt.

Definicija norme i skalarnog produkta

Neka je $w(x)$ zadana funkcija. $w(x)$ je **težinska funkcija** ako je

- $w(x) \geq 0$ na intervalu $[a, b]$,
- $w(x)$ može biti jednaka 0 samo u **izoliranim** točkama.

Težinska L_2 -norma (ili samo **2-norma**) funkcije u na $[a, b]$ je

$$\|u\|_2 = \left(\int_a^b w(x) |u(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Ako je ta norma **konačna** i za funkciju u i za funkciju v , onda možemo definirati **težinski skalarni produkt**

$$\langle u, v \rangle = \int_a^b w(x) u(x) \overline{v(x)} dx.$$

Definicija skalarnog produkta

Skalarni produkt $\langle u, v \rangle$ je dobro definiran (konačan), jer vrijedi Cauchy–Schwarzova nejednakost

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\|_2 \cdot \|v\|_2.$$

$\langle u, v \rangle$ je skalarni produkt, jer

1. $\langle u, u \rangle \geq 0$, a jednak je 0 za one funkcije u koje su nula u svim točkama gdje je $w(x) > 0$, (v. mjera i integral)
2. vrijedi linearnost u prvom argumentu

$$\langle \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2, v \rangle = \alpha_1 \langle u_1, v \rangle + \alpha_2 \langle u_2, v \rangle,$$

3. i antilinearnost/linearnost (\mathbb{C}/\mathbb{R}) u drugom argumentu,

$$\langle u, \beta_1 v_1 + \beta_2 v_2 \rangle = \bar{\beta}_1 \langle u, v_1 \rangle + \bar{\beta}_2 \langle u, v_2 \rangle.$$

Ortogonalne funkcije

Napomena. Ako se radi o **realnim** funkcijama, onda kompleksno konjugiranje drugog argumenta izbacujemo.

U nastavku radimo samo s poljem \mathbb{R} , tj. s **realnim** funkcijama.

Za funkcije u i v reći ćemo da su **ortogonalne** ako vrijedi

$$\langle u, v \rangle = 0.$$

Ako su u i v **ortogonalne**, onda vrijedi

$$\begin{aligned}\|u + v\|^2 &= \langle u, u \rangle + \langle u, v \rangle + \langle v, u \rangle + \langle v, v \rangle \\ &= \|u\|^2 + 2\langle u, v \rangle + \|v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2.\end{aligned}$$

Pitagorin poučak!

Sustavi ortogonalnih funkcija

Ako imamo **sustav ortogonalnih funkcija** u_k , $k = 0, \dots, m$, za koje vrijedi

$$\langle u_i, u_j \rangle = 0, \quad \text{za } i \neq j, \quad i, j = 0, \dots, m,$$

i $u_k \not\equiv 0$ tamo gdje je $w(x) > 0$, onda vrijedi

$$\left\| \sum_{k=0}^m \alpha_k u_k \right\|_2^2 = \sum_{k=0}^m |\alpha_k|^2 \|u_k\|_2^2.$$

Prethodna jednakost znači da je **ortogonalni sustav** funkcija **linearno nezavisan** tamo gdje je $w(x) > 0$.

Ako je lijeva strana jednaka **nula**, mora biti i desna, a po pretpostavci je $\|u_k\|_2 > 0$, pa je jedino moguće da je $\alpha_k = 0$ za $k = 0, \dots, m$.

Norma kvadrata greške

Ako je φ linearna funkcija, tj. $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_m\varphi_m(x)$,
onda za **normu kvadrata greške** dobivamo

$$S := \|e\|_2^2 = \|f - \varphi\|_2^2 = \langle f, f \rangle - 2\langle f, \varphi \rangle + \langle \varphi, \varphi \rangle.$$

Ako uvrstimo oblik funkcije φ i definiciju **skalarnog produkta**,
dobivamo

$$S = \int_a^b w(x) f^2(x) dx - 2 \int_a^b w(x) f(x) \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(x) \right) dx \\ + \int_a^b w(x) \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(x) \right)^2 dx.$$

Sustav normalnih jednažbi

Kvadrat norme greške S je funkcija koeficijenata a_j .

- Radi o kvadratnoj funkciji u $m + 1$ varijabli, pa je uvjet **minimuma** da su sve parcijalne derivacije jednake 0 .

Dakle,

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_i} = 2 \int_a^b w(x) \left(\sum_{j=0}^m a_j \varphi_j(x) \right) \varphi_i(x) dx - 2 \int_a^b w(x) f(x) \varphi_i(x) dx,$$

pa mora biti ...

Sustav normalnih jednažbi

pa mora biti ...

$$\sum_{j=0}^m a_j \int_a^b w(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = \int_a^b w(x) f(x) \varphi_i(x) dx,$$

za $i = 0, \dots, m$. Uočimo da su odgovarajući integrali **skalarni produkti**, pa imamo

$$\sum_{j=0}^m \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j = \langle \varphi_i, f \rangle.$$

Ako označimo

$$m_{ij} = \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle, \quad t_i = \langle \varphi_i, f \rangle, \quad i, j = 0, \dots, m,$$

Sustav normalnih jednažbi

pri čemu je

$$a^T = [a_0, a_1, \dots, a_m],$$

onda problem najmanjih kvadrata možemo pisati kao **sustav normalnih jednažbi**

$$Ma = t.$$

Matrica M je

- (očito) **simetrična**,
- ali i **pozitivno definitna**.

Pozitivna definitnost matrice M

Pozitivna definitnost izlazi iz definicije elemenata m_{ij} . Za svaki vektor $x \neq 0$ imamo

$$\begin{aligned}x^T M x &= \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^m x_i x_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^m \langle x_i \varphi_i, x_j \varphi_j \rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=0}^m x_i \varphi_i, \sum_{j=0}^m x_j \varphi_j \right\rangle = \left\| \sum_{i=0}^m x_i \varphi_i \right\|_2^2,\end{aligned}$$

što je očito **nenegativno**. Nuli je jednako ako i samo ako je

$$\sum_{i=0}^m x_i \varphi_i \equiv 0, \quad \text{čim je } w(x) > 0.$$

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Zaključak. Simetrične pozitivno definitne matrice su **nesingularne**, pa

• postoji **jedinstveno** rješenje problema $Ma = t$.

Nadalje, izračunati vektor a je **jedinstveni minimum** za problem najmanjih kvadrata, jer je

• **Hesseova matrica** drugih parcijalnih derivacija H pozitivno definitna, što slijedi iz

$$h_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial a_i \partial a_j} = 2 \int_a^b w(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = 2m_{ij},$$

tj. $H = 2M!$

Jednostavni primjer

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite **polinom** stupnja 1 koji aproksimira funkciju

$$f(x) = e^x$$

na intervalu $[-1, 1]$ uz **težinsku funkciju** $w(x) = 1$.

Rješenje. Treba minimizirati

$$S = \int_{-1}^1 (e^x - a_1x - a_0)^2 dx \rightarrow \min .$$

Jednostavni primjer

Deriviranjem dobivamo

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \int_{-1}^1 (e^x - a_1 x - a_0) x dx$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \int_{-1}^1 (e^x - a_1 x - a_0) dx,$$

pa uz oznake

$$s_k := \int_{-1}^1 x^k dx, \quad t_k := \int_{-1}^1 e^x x^k dx,$$

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

Jednostavni primjer

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

$$s_2 a_1 + s_1 a_0 = t_1$$

$$s_1 a_1 + s_0 a_0 = t_0,$$

Izračunajmo integrale s lijeve strane

$$\begin{aligned} s_k &= \int_{-1}^1 x^k dx = \frac{1}{k+1} x^{k+1} \Big|_{-1}^1 = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1} \\ &= \begin{cases} \frac{2}{k+1}, & \text{za } k \text{ paran,} \\ 0, & \text{za } k \text{ neparan.} \end{cases} \end{aligned}$$

Jednostavni primjer

Za integrale desne strane dobivamo

$$t_0 := \int_{-1}^1 e^x dx = e^x \Big|_{-1}^1 = e - e^{-1}$$

$$\begin{aligned} t_1 &:= \int_{-1}^1 x e^x dx = \left\{ \begin{array}{ll} u = x & du = dx \\ dv = e^x & v = e^x \end{array} \right\} = x e^x \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 e^x dx \\ &= e + e^{-1} - (e - e^{-1}) = 2e^{-1}. \end{aligned}$$

Jednostavni primjer

Linearni sustav tada glasi:

$$\begin{aligned}\frac{2}{3} \cdot a_1 + 0 \cdot a_0 &= 2e^{-1} \\ 0 \cdot a_1 + 2 \cdot a_0 &= e - e^{-1},\end{aligned}$$

a njegovo rješenje je

$$\begin{aligned}a_1 &= \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.103638324, \\ a_0 &= \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \text{sh}(1) \approx 1.175201194.\end{aligned}$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

$$p_1(x) \approx 1.103638324x + 1.175201194.$$

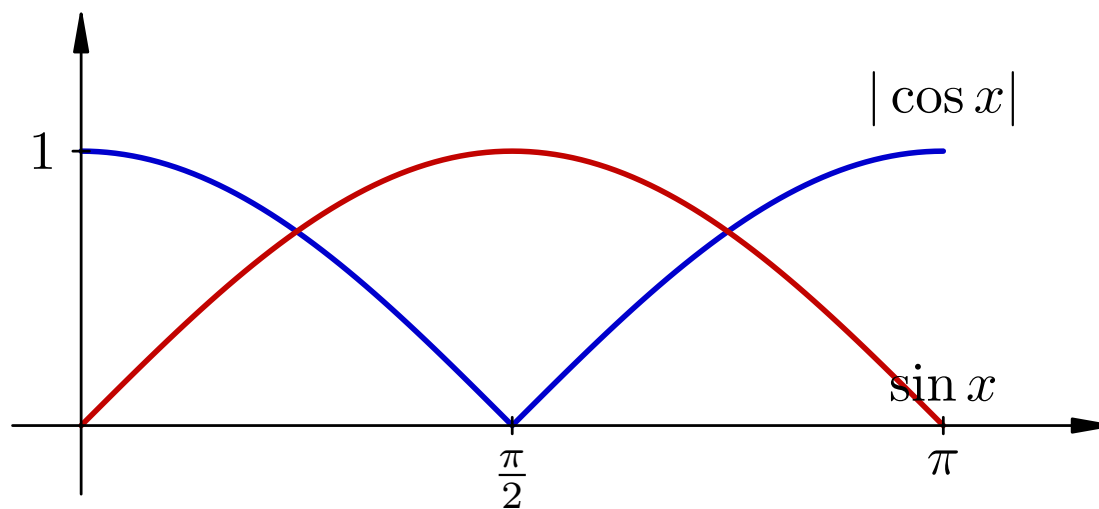
Složeniji primjer

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite **polinome** stupnjeva 1, 2 i 3 koji aproksimiraju funkciju

$$f(x) = \sin x$$

na intervalu $[0, \pi]$ uz **težinsku funkciju** $w(x) = |\cos x|$.

Rješenje. Skicirajmo prvo funkcije f i w .



Složeniji primjer

Budući da su obje funkcije **simetrične** oko točke $\frac{\pi}{2}$, polinome se isplati pisati u **bazi** $(x - \frac{\pi}{2})^k$.

Označimo s p_n polinom stupnja n ,

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n a_{nk} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k.$$

Treba minimizirati

$$S = \int_0^{\pi} |\cos x| (\sin x - p_n(x))^2 dx \rightarrow \min.$$

Složeniji primjer

Iz uvjeta

$$\frac{\partial S}{\partial a_{nk}} = 0, \quad k = 0, \dots, n,$$

dobivamo linearni sustav

$$\sum_{j=0}^n a_{nj} \int_0^{\pi} |\cos x| \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^{k+j} dx = \int_0^{\pi} |\cos x| \sin x \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k dx,$$

za $k = 0, \dots, n$.

Složeniji primjer

Nađimo sad potrebne integrale:

$$\int_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| dx = \left\{ \begin{array}{l} y = x - \frac{\pi}{2} \quad x = 0 \Rightarrow y = -\frac{\pi}{2} \\ dy = dx \quad x = \pi \Rightarrow y = \frac{\pi}{2} \end{array} \right\}$$
$$= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} y^k |\sin y| dy = \left\{ \begin{array}{l} 0, \quad \text{za } k \text{ neparan,} \\ 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y dy, \quad \text{za } k \text{ paran.} \end{array} \right\}$$

Napomena. Neparni koeficijenti su **nula** jer je **baza** pogodno odabrana, tako da koristi činjenicu da je $w(x)$ **parna** funkcija obzirom na $\frac{\pi}{2}$. Baza sadrži samo “**parne**” i “**neparne**” funkcije.

Složeniji primjer

Nađimo rekurziju za integral

$$\begin{aligned} s_k &:= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \, dy = \left\{ \begin{array}{ll} u = y^k & du = ky^{k-1} \, dy \\ dv = \sin y \, dy & v = -\cos y \end{array} \right\} \\ &= 2 \left(-y^k \cos y \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + k \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos y \, dy \right) \\ &= \left\{ \begin{array}{ll} u = y^{k-1} & du = (k-1)y^{k-2} \, dy \\ dv = \cos y \, dy & v = \sin y \end{array} \right\} \\ &= 2ky^{k-1} \sin y \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - k(k-1) \left(2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2} \sin y \, dy \right) \\ &= 2k \left(\frac{\pi}{2} \right)^{k-1} - k(k-1) s_{k-2}. \end{aligned}$$

Složeniji primjer

Još treba izračunati

$$s_0 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sin y| dy = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin y dy = -2 \cos y \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 2.$$

Sada je

$$s_2 = 4 \frac{\pi}{2} - 4s_0 = 2\pi - 4,$$

$$s_4 = 8 \left(\frac{\pi}{2}\right)^3 - 12s_2 = \pi^3 - 24\pi + 48,$$

$$s_6 = 12 \left(\frac{\pi}{2}\right)^5 - 30s_4 = \frac{3}{8}\pi^5 - 24\pi^3 + 720\pi - 1440.$$

Složeniji primjer

Ostaje još izračunati integrale s desne strane:

$$t_k := 2 \int_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| \sin x \, dx$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} y = x - \frac{\pi}{2} & x = 0 \Rightarrow y = -\frac{\pi}{2} \\ dy = dx & x = \pi \Rightarrow y = \frac{\pi}{2} \end{array} \right\} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} y^k |\sin y| \cos y \, dy$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{za } k \text{ neparan,} \\ 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \cos y \, dy = \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y) \, dy, & \text{za } k \text{ paran.} \end{array} \right\}$$

Složeniji primjer

Za parne indekse k s desne strane imamo

$$\begin{aligned} t_k &:= \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y) dy = \left\{ \begin{array}{ll} u = y^k & du = ky^{k-1} dy \\ dv = \sin(2y) dy & v = -\cos(2y)/2 \end{array} \right\} \\ &= -\frac{1}{2} y^k \cos(2y) \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{k}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos(2y) dy \\ &= \left\{ \begin{array}{ll} u = y^{k-1} & du = (k-1)y^{k-2} dy \\ dv = \cos(2y) dy & v = \sin(2y)/2 \end{array} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^k + \frac{k}{2} \cdot \frac{1}{2} y^{k-1} \sin(2y) \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{k-1}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2} \sin(2y) dy \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^k - \frac{k(k-1)}{4} t_{k-2}. \end{aligned}$$

Složeniji primjer

Još treba izračunati

$$t_0 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(2y) dy = -\frac{1}{2} \cos(2y) \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 1.$$

Sada je

$$t_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 - \frac{1}{2} t_0 = \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} = \frac{\pi^2 - 4}{8}.$$

Linearni sustav sada ima oblik

$$\sum_{j=0}^n a_{nj} s_{k+j} = t_k, \quad k = 0, \dots, n.$$

Složeniji primjer

Za $n = 1$ sustav je:

$$s_0 a_{10} + s_1 a_{11} = t_0$$

$$s_1 a_{10} + s_2 a_{11} = t_1,$$

tj. ako uvrstimo izračunate s_k i t_k , imamo

$$2 \cdot a_{10} + 0 \cdot a_{11} = 1$$

$$0 \cdot a_{10} + (2\pi - 4) \cdot a_{11} = 0.$$

Rješenje tog sustava je $a_{10} = \frac{1}{2}$, $a_{11} = 0$, pa je aproksimacijski polinom

$$p_1(x) = \frac{1}{2}.$$

Složeniji primjer

Za $n = 2$ sustav je:

$$s_0 a_{20} + s_1 a_{21} + s_2 a_{22} = t_0$$

$$s_1 a_{20} + s_2 a_{21} + s_3 a_{22} = t_1$$

$$s_2 a_{20} + s_3 a_{21} + s_4 a_{22} = t_2.$$

Ako uvrstimo izračunate veličine, sustav glasi:

$$2 \cdot a_{20} + 0 \cdot a_{21} + (2\pi - 4) \cdot a_{22} = 1$$

$$0 \cdot a_{20} + (2\pi - 4) \cdot a_{21} + 0 \cdot a_{22} = 0$$

$$(2\pi - 4) \cdot a_{20} + 0 \cdot a_{21} + (\pi^3 - 24\pi + 48) \cdot a_{22} = \frac{\pi^2 - 4}{8}.$$

Složeniji primjer

Rješenje tog sustava je

$$a_{20} \approx 0.964909552, \quad a_{21} = 0, \quad a_{22} \approx -0.407246447,$$

pa je aproksimacijski polinom

$$p_2(x) \approx -0.407246447 \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 + 0.964909552.$$

Za $n = 3$ dobije se rješenje $p_3 = p_2$ (provjerite sami).

Još jedan primjer

Primjer. Ako funkciju $f(x)$ na $[0, 1]$ uz $w(x) = 1$ aproksimiramo **polinomom** stupnja n po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata, **matrica** linearnog sustava je

$$M = \begin{bmatrix} s_0 & s_1 & \cdots & s_n \\ s_1 & s_2 & \cdots & s_{n+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ s_n & s_{n+1} & \cdots & s_{2n} \end{bmatrix},$$

pri čemu su

$$s_k := \int_0^1 x^k dx = \frac{x^{k+1}}{k+1} \Big|_0^1 = \frac{1}{k+1}.$$

Matrica linearnog sustava je **Hilbertova matrica** reda $n + 1!$

Komentari primjera

U posljednja dva primjera uočili smo sljedeće:

- Ako za bazu biramo funkcije $1, x, x^2, \dots$, matrica sustava može biti **vrlo loše uvjetovana**.
- U složenijem primjeru, podizanjem stupnja polinoma **mijenjaju** se koeficijenti polinoma p_n . Na primjer, a_0 **ovisi** o stupnju n .

Prethodna dva problema otklanjaju se ako se za bazu funkcija uzmu **ortogonalne funkcije**.