

Numerička matematika

7. predavanje

Saša Singer

`singer@math.hr`

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

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
 - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
 - Normalne jednačbe.
 - Linearizacija.
 - Matrična formulacija problema najmanjih kvadrata.
 - QR faktorizacija.
 - Gram–Schmidtov postupak ortonormalizacije.
 - Givensove rotacije.
- Dodatak:
 - Primjer za najmanje kvadrate — etil.

Informacije

Prvi kolokvij: petak, 24. 4. 2015., u 12 sati.

Konzultacije (službeno):

- 🕒 samo za NM: utorak 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** iz prošlih 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 **dvije demonstratorice**:

● **Angela Bašić–Šiško**

● termin: **ponedjeljak, 12–14.**

● e-mail: **abasic@student.math.hr**

● **Mia Jukić**

● termin: **srijeda, 14–16.**

● e-mail: **mia.jukic2@gmail.com**

Demosice lijepo **mole** da im se **najavite** mailom bar **dan ranije!**

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

Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija vektora pogreške

Neka je funkcija f

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

Uzmimo da 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 se minimizira 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**

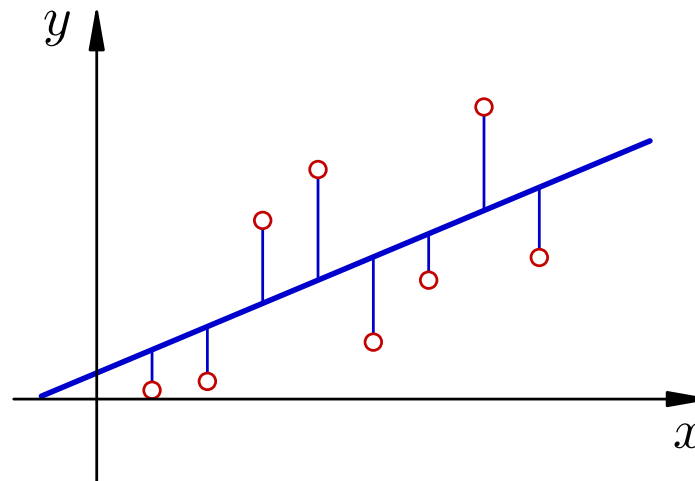
$$\varphi(x) = a_0 + a_1x.$$

Suma kvadrata grešaka 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

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$

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

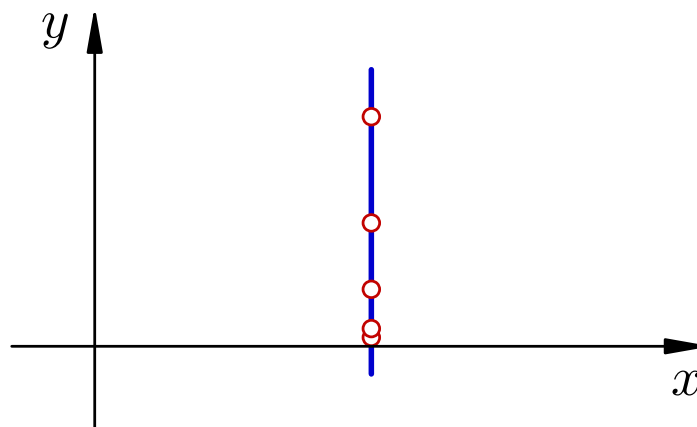
Matrica ovog sustava je **regularna**, uz **uvjet** da imamo **barem dvije** različite točke x_k . To je ekvivalentno (Gramova matrica) linearnoj **nezavisnosti** vektora

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

U tom slučaju, 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 podataka.



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

- aproksimacijski **pravac** (očito) **postoji** i jedinstven je,
- ali je **okomit** na x -os (jednadžba je $x = x_0$),
- pa njegova jednadžba **nema** oblik $y = a_0 + a_1x$.

Minimalnost rješenja?

Je li dobiveno rješenje zaista minimum?

- To nije teško pokazati, korištenjem drugih parcijalnih derivacija — dovoljan uvjet minimuma je pozitivna definitnost Hesseove matrice (v. kasnije, za opći slučaj).

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

- S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore, u varijablama a_0, a_1 ,
- pa je očito 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), čim je $m \geq 2, 3$.

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 zadane vrijednosti funkcije f u točkama x_k . 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 (u izabranoj nekoj bazi)

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

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

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 jednačbom

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

gdje je ε **ekscentricitet** elipse, a ρ je tzv. “**srednja**” udaljenost elipse od fokusa.

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

Rješenje. Pomnožimo jednačbu 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**, s nepoznatim koeficijentima a i b .

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 $n + 1 = 5$, dobivamo linearni sustav

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

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

Brojevi na dnu tablice su poznati elementi linearnog sustava.

Primjer (nastavak)

Linearni sustav za nepoznate 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

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

Ove vrijednosti su **vrlo blizu** pravih, kad se sjetimo značenja:

- 🕒 ε je **ekscentricitet** Zemljine orbite,
- 🕒 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**, i
- te oscilacije izgledaju kao “**slučajne**”, a **ne** “sistematske”, onda je aproksimacijska funkcija **dobro** odabrana.

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

- Postoji tzv. **Gauss–Markovljev** teorem koji opravdava metodu najmanjih kvadrata.

Primjer uklanjanja slučajne greške

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 početni podaci (x_i, f_i) , gdje je $x_i = i$, a

$$f_i = 4x_i + 3 + (\text{slučajna perturbacija između } -1 \text{ i } 1),$$

za $i = 0, \dots, 100$.

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**, dobijemo

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

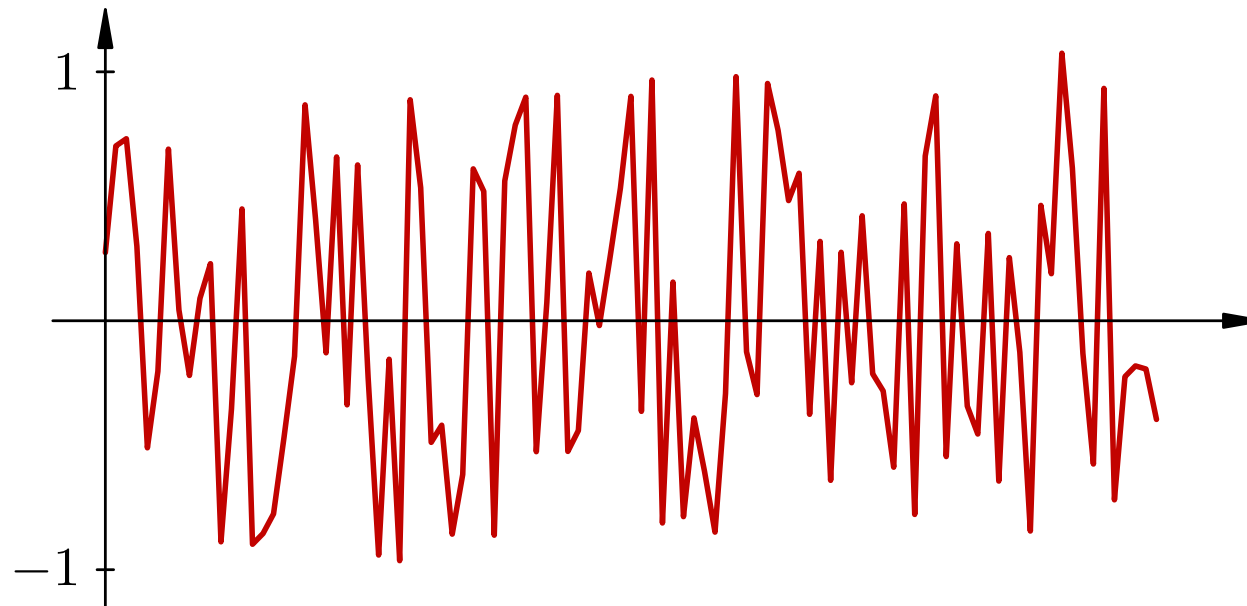
Pogledajmo što su **aproksimacije** $\varphi(x_i)$ za vrijednosti f_i u prvih nekoliko podataka:

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 **polazne** greške f_i obzirom na $y(x_i)$.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Pogledajmo kako se ponaša greška $f_i - \varphi(x_i)$ u **svim** točkama.



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

Krivac za “**skoro**” = “**slučajni**” brojevi imaju **sistematsku** grešku na početku (uglavnom su > 0) i zato je b prevelik!

Demo primjeri

GnuPlot demo za prethodni problem.

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

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se

- `izmjereni` podaci za `viskoznost 40%` etilnog alkohola, u ovisnosti o temperaturi.

Primjer pokazuje `način izbora` aproksimacijske funkcije i

- `različita` rješenja, ako problem `lineariziramo`, ili ako ga `ne lineariziramo` (rješenja nelinearnih problema = `Nelder-Mead` metoda).

- `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 — oznake

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

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

Funkcija φ je neka **linearna** kombinacija izabranih **funkcija baze** $\varphi_1, \dots, \varphi_m$.

Želimo **pronaći** parametre x_j tako da zadani 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 ($n \gg m$).

Matrična formulacija — preodređeni sustav

Uz oznake

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

prethodne jednadžbe možemo napisati u **matričnom obliku**

$$Ax = b.$$

Oprez: ovdje je A matrica tipa $n \times m$, a ne $m \times n$, kao inače!

Budući da je matrica A “**visoka i tanka**” ($n \geq m$), imamo

● **preodređen** sustav linearnih jednadžbi.

Taj sustav **ne mora** uvijek **imati** rješenje, tj. može se dogoditi da je

$$r := b - Ax \neq 0, \quad \text{za svaki } x \in \mathbb{R}^m.$$

Upravo to se, gotovo uvijek, i događa u praksi.

Matrična formulacija — min norme reziduala

Postavlja se pitanje: Što je onda “najbolje” rješenje x ovog sustava $Ax = b$? Prirodni odgovor:

- onaj vektor $x \in \mathbb{R}^m$ za kojeg dobivamo “najmanji” rezidual $r = r(x)$.

Naravno, “najmanji” se mjeri u nekoj normi na prostoru \mathbb{R}^n .

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

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

Problem “najmanjih kvadrata”: minimizacija norme $\|Ax - b\|_2$ ekvivalentna je minimizaciji kvadrata norme $\|Ax - b\|_2^2$.

Komentar

Ako smo dobro izabrali bazne funkcije φ_j , onda je razumno pretpostaviti da su one **linearno nezavisne** na **zadanim podacima**, tj. **stupci** matrice A su **linearno nezavisni**, pa

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

Pokazat ćemo da, uz taj uvjet, problem **najmanjih kvadrata** uvijek **ima jedinstveno** rješenje.

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

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

Za početak, **nećemo** pretpostaviti nikakva specijalna svojstva matrice A , tj. tvrdnje u nastavku **vrijede za bilo koji problem**.

Rješenje problema 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 $x \in \mathcal{S}$, tj. x je rješenje problema najmanjih kvadrata, ako i samo ako vrijedi sljedeća relacija ortogonalnosti

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

koju obično nazivamo sustav normalnih jednažbi i pišemo u obliku

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

Napomena. Raniji pristup — minimizacijom norme vektora greške, daje baš ovaj sustav normalnih jednažbi. Provjerite!

$A^T A$ je Gramova matrica skalarnih produkata stupaca od A .

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Dokaz. Pretpostavimo da je $x \in \mathcal{S}$, tj. da x **minimizira** normu reziduala. Treba pokazati da x **zadovoljava** sustav normalnih jednažbi, odnosno, da za rezidual $r = b - Ax$ vrijedi $A^T r = 0$.

Pretpostavimo **suprotno** — da za rezidual r vrijedi

$$A^T r = z \neq 0.$$

Za $\varepsilon \in \mathbb{R}$, promatramo vektor $\hat{x} = x + \varepsilon z$. Njegov rezidual je

$$\hat{r} = b - A\hat{x} = b - Ax - \varepsilon Az = r - \varepsilon Az,$$

pa je

$$\begin{aligned} \|\hat{r}\|_2^2 &= \hat{r}^T \hat{r} = r^T r - \varepsilon r^T Az - \varepsilon (Az)^T r + \varepsilon^2 (Az)^T (Az) \\ &= \{A^T r = z\} = r^T r - 2\varepsilon z^T z + \varepsilon^2 (Az)^T (Az) \\ &= \|r\|_2^2 - 2\varepsilon \|z\|_2^2 + \varepsilon^2 \|Az\|_2^2. \end{aligned}$$

Rješenje problema najmanjih kvadrata

No, zbog $\|z\| > 0$, za dovoljno mali $\varepsilon > 0$ dobivamo da je

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

što je **kontradikcija** s pretpostavkom da x **minimizira** rezidual.

Zaključujemo da **mora** biti $z = 0$, tj. da x **zadovoljava** sustav **normalnih** jednažbi.

Obrat. Pretpostavimo da x **zadovoljava** **normalne** jednažbe

$$A^T r = 0, \quad r = b - Ax.$$

Za bilo koji vektor $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$, njegov rezidual \hat{r} ima oblik

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

Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

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

Zbog $\|Ae\|_2^2 \geq 0$, odavde odmah slijedi da je

$$\|\hat{r}\| \geq \|r\|, \quad \text{za svaki } \hat{x} \in \mathbb{R}^m,$$

pa x minimizira normu reziduala, tj. vrijedi $x \in \mathcal{S}$. ■

Struktura skupa svih rješenja

Iz zadnje relacije

$$\|\hat{r}\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|Ae\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|A(\hat{x} - x)\|_2^2$$

odmah dobivamo i preciznu **strukturu** skupa \mathcal{S} svih rješenja problema **najmanjih kvadrata**.

Korolar. Neka je $x \in \mathcal{S}$. Onda je $\hat{x} \in \mathcal{S}$ ako i samo ako je $\hat{x} - x \in \mathcal{N}(A)$, tj. skup \mathcal{S} je **linearna mnogostrukost** u \mathbb{R}^m .

Dokaz. Očito je $\hat{x} \in \mathcal{S}$, ako i samo ako vrijedi $\|\hat{r}\|_2 = \|r\|_2$. No, iz prethodne relacije vidimo da je to **ekvivalentno** s $Ae = A(\hat{x} - x) = 0$, odnosno, $\hat{x} - x \in \mathcal{N}(A)$. ■

Usput (kao dodatak dokazu teorema), onda iz $\hat{r} = r - Ae$ slijedi $\hat{r} = r$, pa i \hat{r} zadovoljava normalne jednadžbe.

Egzistencija rješenja — uvijek postoji!

Prethodni teorem, zapravo, kaže da je skup \mathcal{S} rješenja problema minimizacije $\|r\|_2$ jednak skupu rješenja sustava normalnih jednažbi

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

Odavde odmah slijedi egzistencija rješenja, tj. $\mathcal{S} \neq \emptyset$.

- Matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna, jer za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^m$ vrijedi

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

- Sustav normalnih jednažbi uvijek ima rješenje, jer je

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

(v. teorem Kronecker–Capelli).

Jedinstvenost rješenja

Dobivamo čak i jače — zaključak o **jedinstvenosti** rješenja.

Teorem. Problem **najmanjih kvadrata** ima **jedinstveno** rješenje, ako i samo ako vrijedi bilo koja od sljedećih tvrdnji:

- A ima **puni stupčani rang**, tj. vrijedi $\text{rang}(A) = m$,
- **stupci** matrice A su **linearno nezavisni**,
- $A^T A$ je **pozitivno definitna** matrica.

Dokaz. Iz korolara o **strukturi** skupa \mathcal{S} svih rješenja problema najmanjih kvadrata, vidimo da je

- skup \mathcal{S} **jednočlan**, ako i samo ako
- matrica A ima **trivijalan** nul-potprostor $\mathcal{N}(A)$, tj. vrijedi $\dim \mathcal{N}(A) = 0$, odnosno, $x \neq 0 \implies Ax \neq 0$.

Jedinstvenost rješenja

Trivijalnost $\mathcal{N}(A)$ ekvivalentna je sljedećim zaključcima.

1. tvrdnja — koristimo $\dim \mathcal{N}(A) = 0$.

- Iz teorema o **rangu i defektu** za matricu A , tipa $n \times m$, to je ekvivalentno s $\text{rang}(A) = m$. Usput, **onda je** $n \geq m$.

2. i 3. tvrdnja — koristimo $x \neq 0 \implies Ax \neq 0$.

- Po **definiciji**, stupci matrice A su **linearно nezavisni**, ako i samo ako za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Ax \neq 0$.
- Znamo da je $A^T A$ simetrična i pozitivno **semidefinitna**. Onda je gornja implikacija ekvivalentna pozitivnoj **definitnosti** matrice $A^T A$, jer za $x \neq 0$ vrijedi

$$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 > 0. \quad \blacksquare$$

Karakterizacija jedinstvenog rješenja

Zadnja tvdnja — pozitivna definitnost matrice $A^T A$, odgovara činjenici da sustav **normalnih** jednažbi

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

ima jedinstveno rješenje, ako i samo ako je $A^T A$ **regularna** matrica (pozitivno definitna matrica je regularna).

U tom slučaju, **jedinstveno** rješenje problema **najmanjih kvadrata** je

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

a pripadni **rezidual najmanje 2-norme** je

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

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Desna strana b može se napisati preko **reziduala** kao

$$b = Ax + r,$$

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

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

što znači da je $r \in \mathcal{N}(A^T)$. Na kraju, prisjetimo se da je

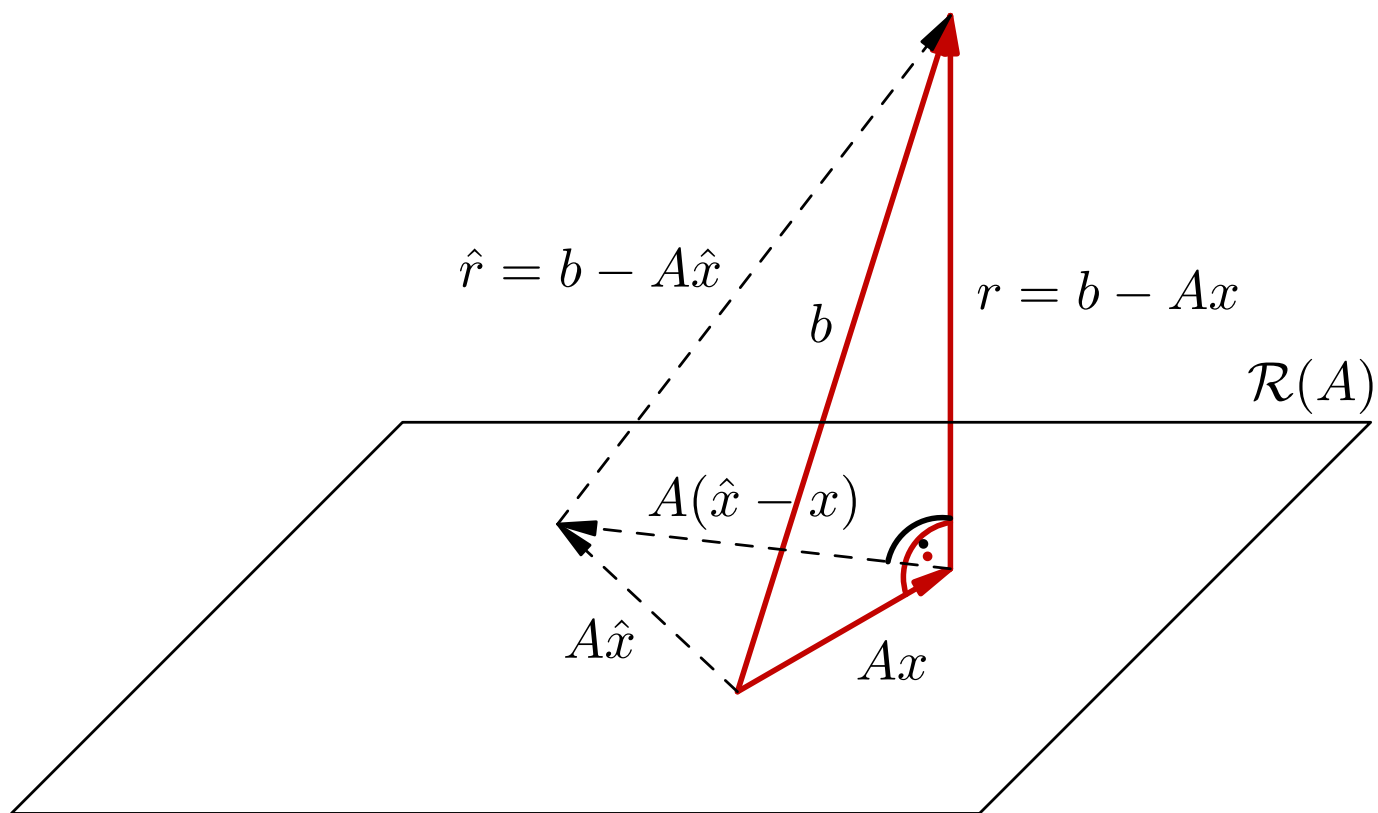
$$\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T) = \mathbb{R}^n,$$

pa vektor r mora biti **okomit** na Ax . To daje **geometrijsku** interpretaciju rješenja problema **najmanjih kvadrata**.

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Rješenje problema najmanjih kvadrata dobivamo

- ortogonalnom projekcijom vektora b na potprostor $\mathcal{R}(A)$.



Struktura skupa rješenja i linearni sustav

Označimo s $\mathcal{P}(b)$ ortogonalnu projekciju vektora b na $\mathcal{R}(A)$.

• Taj vektor $\mathcal{P}(b)$ je sigurno **jedinstven** (kao projekcija).

Prema slici, za rješenje x mora vrijediti $Ax = \mathcal{P}(b)$. Preciznije,

• **sva** rješenja $x \in \mathcal{S}$ problema **najmanjih kvadrata** su,

• upravo, **sva** rješenja **linearnog sustava** $Ax = \mathcal{P}(b)$.

Zato skup \mathcal{S} ima **istu** strukturu — **linearna mnogostrukost**, kao i **opće** rješenje linearnog sustava s matricom A , s tim da

• ovdje znamo da je \mathcal{S} **neprazan**, tj. **postoji** $x_0 \in \mathcal{S}$.

Analogno, **jedinstvenost** rješenja x svodi se na

• **jedinstvenost** rješenja linearnog sustava s matricom A , tj. **trivijalnost** nul-potprostora $\mathcal{N}(A)$.

Numeričke metode i jedinstvenost rješenja

Numeričke metode za računanje rješenja problema najmanjih kvadrata imaju smisla samo kad je

- objekt kojeg računamo jedinstven.

Znamo da linearni problem najmanjih kvadrata uvijek ima rješenje. Osim toga, rješenje je jedinstveno, ako i samo ako

- matrica A ima puni stupčani rang.

Sjetite se uvodnih komentara o izboru “baznih” funkcija φ_j .

U nastavku, tražimo efikasne i točne numeričke metode za računanje rješenja. Promatramo samo one probleme

- u kojima imamo garantiranu jedinstvenost rješenja.

Prije toga — završni komentar o jedinstvenosti.

Osiguranje jedinstvenosti u općem problemu

Ako matrica A nema puni rang po stupcima, tj. ako je $\text{rang}(A) < m$, onda

- rješenje problema najmanjih kvadrata **nije** jedinstveno.

U tom slučaju, **jedinstvenost** rješenja se dobiva **dodatnim** uvjetom — pored $\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min$, još tražimo

- rješenje $x \in \mathcal{S}$ koje ima **najmanju 2-normu**, tj. **dodatni** uvjet je $\|x\|_2 \rightarrow \min$.
- To rješenje je **ortogonalna projekcija** ishodišta, odnosno, **nul-vektora** na **linearnu mnogostrukost** $\mathcal{S} = x_0 + \mathcal{N}(A)$ (očito je jedinstveno).

Ovaj pristup ima smisla u primjenama, na pr., u **statistici**.

Jedinstveno rješenje — ponavljanje

Odsad nadalje, pretpostavljamo (ako drugačije nije rečeno) da matrica A ima **puni stupčani rang**. Posebno, to znači da

- A ima **više** redaka nego stupaca, $n \geq m$, i
- **stupci** od A su **linearno nezavisni**, $\text{rang}(A) = m$.

Matrica $A^T A$ je **pozitivno definitna**, a iz sustava **normalnih** jednadžbi

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

dobivamo **jedinstveno** rješenje problema **najmanjih kvadrata**

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

Pripadni **rezidual** najmanje 2–norme je

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

Računanje rješenja problema najmanjih kvadrata

Treba još 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 jednadžbi mogli bismo riješiti tako da iskoristimo faktorizaciju Choleskog.

Prednosti/nedostaci ove 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.

Može se koristiti za mali broj parametara m , ako ne tražimo jako točno rješenje (često u praksi — za “mala” mjerenja).

Korištenje QR faktorizacije

Opet, neka A ima **puni stupčani rang**. 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 problema minimizacije možemo zapisati kao

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

Pitanje. Kako naći **pogodan** Q^T , tako da, iz problema ili “sustava” s matricom $Q^T A$, **lako** izračunamo rješenje x ?

Odgovor. Korištenjem **QR faktorizacije** — tako da $Q^T A$ bude **gornja trokutasta** matrica R , tj. faktorizacijom $A = QR$!

QR faktorizacija

Definicija QR faktorizacije

Napomena. U ovom dijelu mijenjamo oznake $m \leftrightarrow n$, na uobičajene za matrice: m = broj redaka, a n = broj stupaca.

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 , tako da matrica Q_0 ima **isti** tip kao i G ,
- a **preostale** stupce, koji su **okomiti** na Q_0 , označimo s Q_0^\perp .

Onda je

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

Ostaje samo pokazati da takva faktorizacija **postoji**.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m \times n}$, za $m \geq n$, 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 u R).

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

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Dokaz. Najjednostavniji dokaz ide tako da **stupce** matrice

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

ortonormiramo korištenjem **Gram-Schmidto**vog postupka.

1. korak: Zbog $g_1 \neq 0$, definiramo

$$q'_1 = g_1, \quad q_1 = \frac{q'_1}{\|q'_1\|_2}.$$

j -ti korak: Već imamo **ortonormirane** vektore q_1, \dots, q_{j-1} , koji razapinju isti potprostor kao i stupci g_1, \dots, g_{j-1} matrice G .

Onda definiramo novi vektor q'_j i normiramo ga

$$q'_j = g_j - \sum_{i=1}^{j-1} \langle g_j, q_i \rangle q_i, \quad q_j = \frac{q'_j}{\|q'_j\|_2}.$$

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Stupci matrice G su linearno **nezavisni**, što osigurava $q'_j \neq 0$.

Stavljanjem

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

dobivamo $m \times n$ **ortogonalnu** matricu.

Uz oznaku za skalarne produkte i norme iz prethodne formule

$$r_{ij} = \langle g_j, q_i \rangle = q_i^T g_j, \quad r_{jj} = \|q'_j\|_2,$$

polazni stupac g_j možemo napisati kao **linearnu kombinaciju** prvih j vektora q_i **ortonormirane** baze, u obliku

$$g_j = \sum_{i=1}^j r_{ij} q_i.$$

Koeficijenti r_{ij} su upravo elementi tražene matrice R_0 . ■

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije

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

- vektore g_j ortogonalizira obzirom na prethodne **originalne** vektore g_i .
- 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 g_j obzirom na prethodno **ortogonalizirane** vektore q_i , pa je mnogo stabilniji.
- No, i kod njega se može dogoditi da je izračunati Q_0 vrlo **daleko** od ortogonalnog, tj. $\|Q_0^T Q_0 - I_n\| \gg u$, kad je G **vrlo loše** uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klasični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam:

```
za j = 1 do n radi {  
  /* Nađi j-ti stupac od Q_0 i R_0 */  
  q'_j = g_j;  
  za i = 1 do j - 1 radi {  
    /* Oduzmi komponentu od g_j u smjeru q_i */  
    /* kod CGS-a je */  
    r_ij = q_iT * g_j;  
    /* kod MGS-a je */  
    r_ij = q_iT * q'_j;  
    q'_j = q'_j - r_ij * q_i;  
  };
```

Gram–Schmidtov algoritam (nastavak)

```
r_jj = ||q'_j||2;  
ako je r_jj > 0 onda {  
    q_j = q'_j / r_jj;  
}  
inače {  
    /* Matrica R_0 je singularna -- stani */  
};  
};
```

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

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

Pokažite da su **dvije** formule za r_{ij} , ona iz **CGS** i ona iz **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. za **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 i dokaz teorema.

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

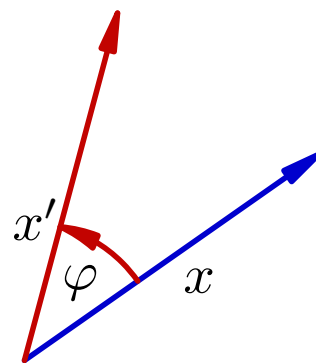
Matrica oblika

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

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 jednažbi 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 matrici 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

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

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 **poništavamo** elemente

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

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 **poništavamo** elemente

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

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.

Nezavisne rotacije — paralelno poništavanje

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).

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

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

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, kojeg označimo s Q^{-1} .
- Zaključak: $G = QR$.
- Produkt ortogonalnih matrica je opet **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 !

Dodatak: Primjer — etil

Demo primjer — viskoznost “votke”

Promatramo kako ovisi

- viskoznost 40% etilnog alkohola o temperaturi.

Treba naći:

- “zgodan” oblik aproksimacijske funkcije i
- parametre za dobru aproksimaciju.

Za aproksimaciju koristimo metodu najmanjih kvadrata.

Ovaj primjer pokazuje:

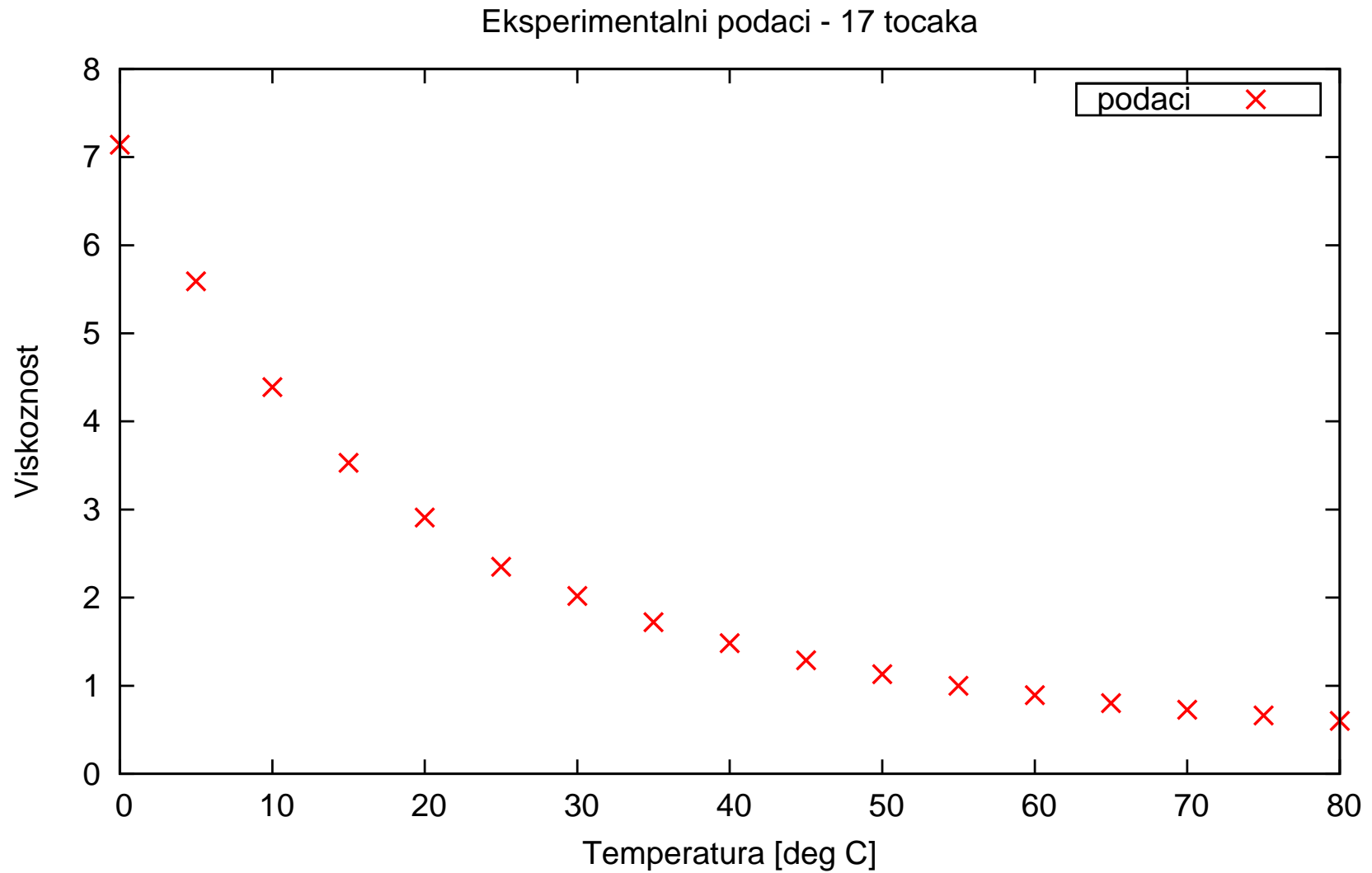
- način izbora aproksimacijske funkcije,
- i različita rješenja koja dobivamo ako problem lineariziramo ili ako ga ne lineariziramo.

Eksperimentalno izmjereni podaci — tablica

Eksperimentalno su **izmjereni** sljedeći podaci (17 točaka):

Temperat.	Viskoznost	Temperat.	Viskoznost
0	7.14	45	1.289
5	5.59	50	1.132
10	4.39	55	0.998
15	3.53	60	0.893
20	2.91	65	0.802
25	2.35	70	0.727
30	2.02	75	0.663
35	1.72	80	0.601
40	1.482		

Eksperimentalno izmjereni podaci — slika



Prva aproksimacija — oblik i parametri

Izmjereni podaci imaju

● “eksponencijalno” padajući oblik, a **ne** polinomni!

Nelinearni model:

$$f(x) = e^{ax+b}$$

ima parametre

$$a = -3.848637 \cdot 10^{-2}, \quad b = 1.911946.$$

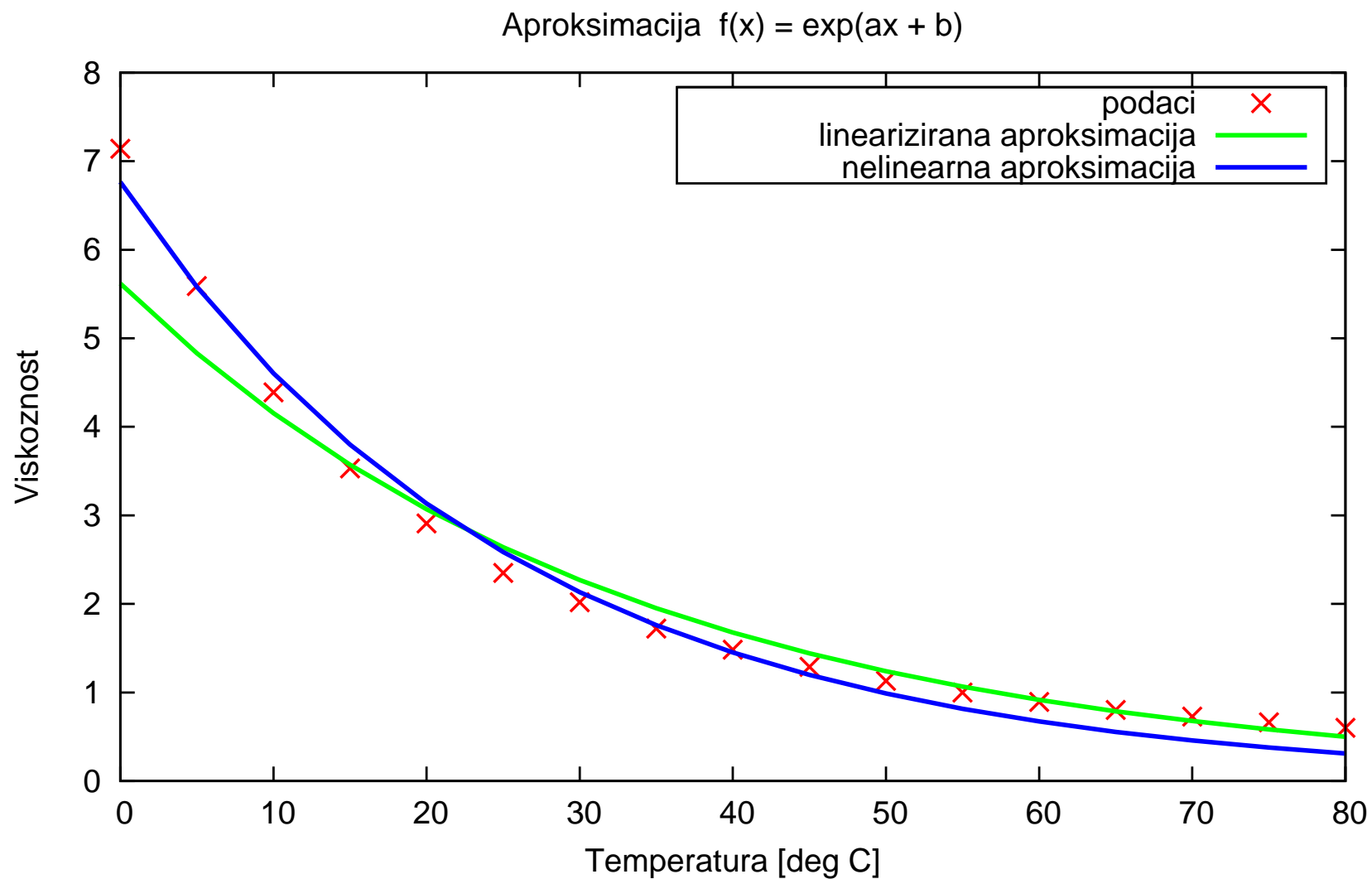
Linearizirani model:

$$\ln f(x) = ax + b$$

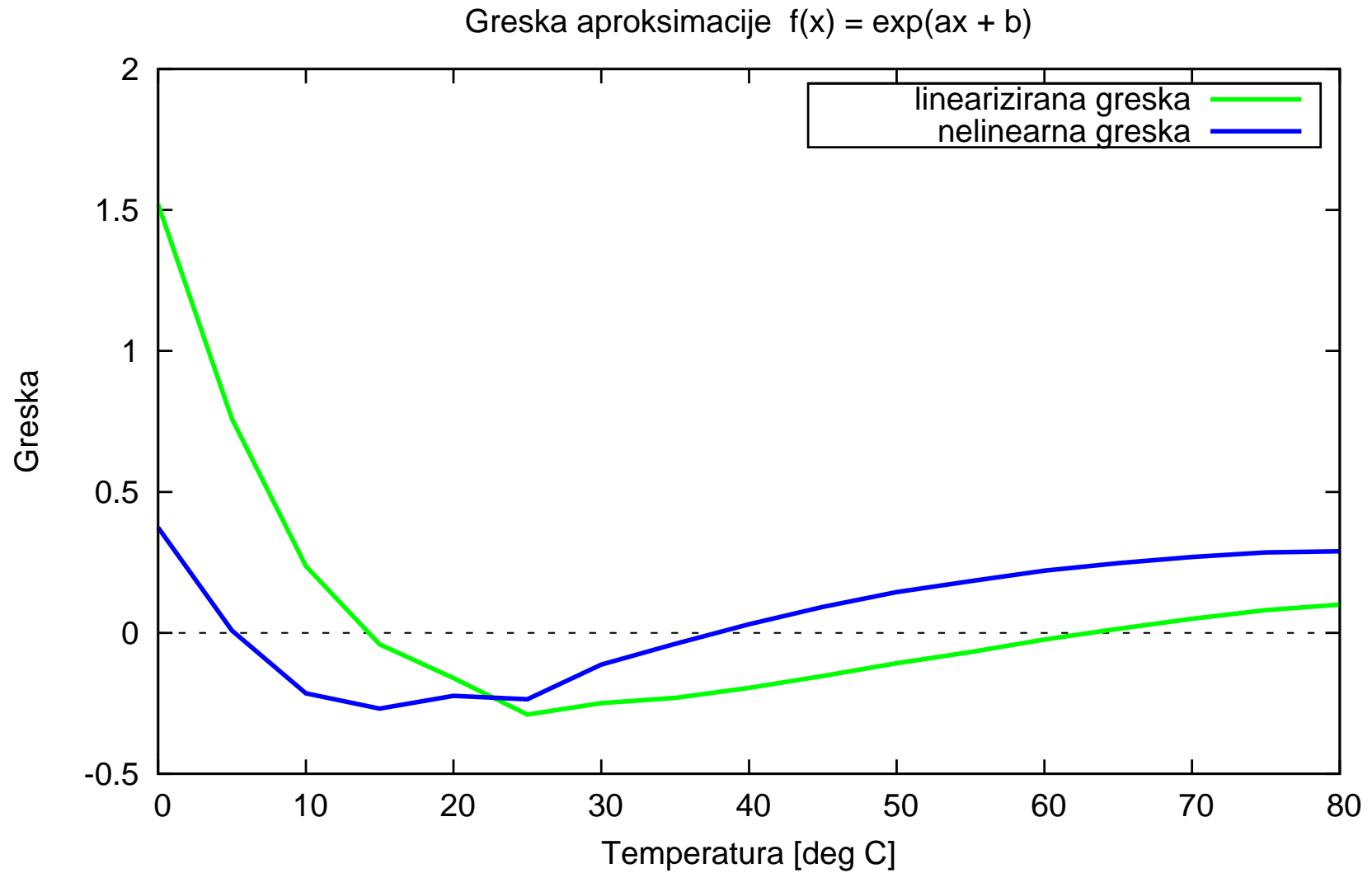
ima parametre

$$a = -3.022676 \cdot 10^{-2}, \quad b = 1.726233.$$

Prva aproksimacija



Greške prve aproksimacije



Druga aproksimacija — oblik i parametri

Dobivene greške nisu “slučajne”, pa nismo baš pogodili oblik.

● Ponašanje upućuje na “popravak” kvadratnim članom.

Nelinearni model:

$$f(x) = e^{ax^2+bx+c}$$

ima parametre

$$a = 2.487568 \cdot 10^{-4}, \quad b = -4.977411 \cdot 10^{-2}, \quad c = 1.962208.$$

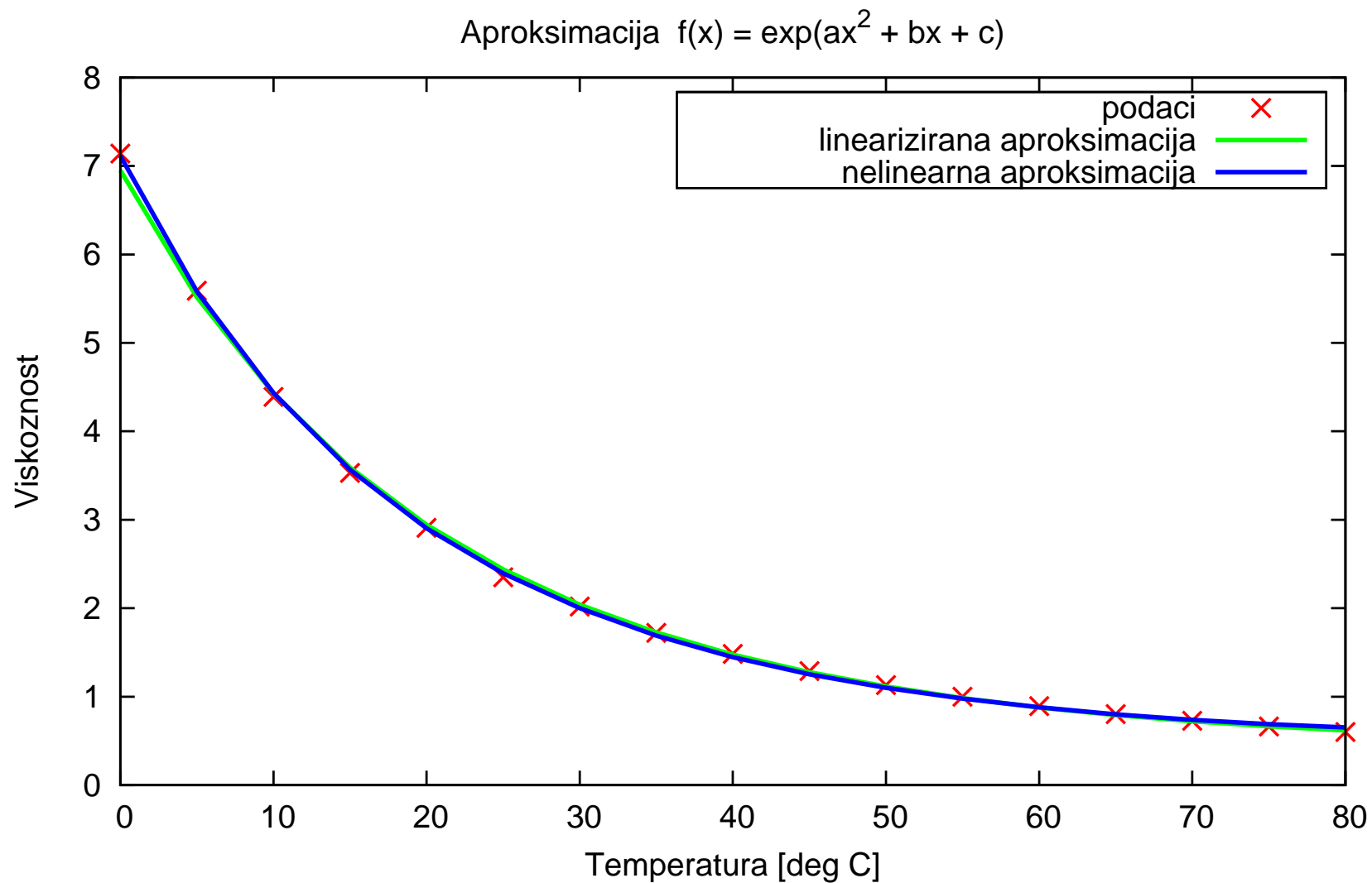
Linearizirani model:

$$\ln f(x) = ax^2 + bx + c$$

ima parametre

$$a = 2.128853 \cdot 10^{-4}, \quad b = -4.725758 \cdot 10^{-2}, \quad c = 1.939119.$$

Druga aproksimacija



Greške druge aproksimacije

