# *Numerička matematika*
# *8. predavanje*

Saša Singer

singer@math.hr

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

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

# Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata (nastavak):
  - QR faktorizacija.
    - Gram–Schmidtov postupak ortonormalizacije.
    - Givensove rotacije.
    - Householderovi reflektori.
  - QR faktorizacija i pivotiranje.
  - Rješenje matrične formulacije QR faktorizacijom.
  - Neprekidni problem najmanjih kvadrata.
    - Jednostavni primjer. Složeniji primjer.
  - Ortogonalne familije funkcija, primjeri.
    - Trigonometrijske funkcije i Fourierov red.
- Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR.

## *Komentar rezultata 1. kolokvija*

Rezultati prvog kolokvija — komentar:

- Općenito gledajući, rezultati su loši, čak jako loši :-(
- Prosjek bodova je 23.21, na 139 pristiglih. To je minimum (od 2015. g.) i čak 7.6 bodova manje nego lani!

Idemo redom ...

- Pohvala svima koji imaju $\geq 40$ bodova — ima ih samo 3.
- Svi s $\leq 20$ bodova ozbiljno su "ugroženi" — takvih je 51.

Kolokviji ispituju gradivo cijelog kolegija, a ne samo vježbe!

- Samo dio vas je to ozbiljno shvatio.
- Čak 50 studenata nema ni boda na 1. zad., a rezultat na 2. zad. je još gori!

## Komentar rezultata 1. kolokvija — nastavak

Evo statistike po zadacima, na 139 pristiglih studenata:

| Zadatak | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ukupno |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Uk. bod. | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 50 |
| Prosjek | 2.14 | 0.53 | 9.38 | 6.67 | 4.48 | 23.21 |

Komentar o "tužnijem" dijelu rezultata (bez 1. zadatka):

- 2. zad. — Zapis je $x_k = f_k(a_{ij})$, za $k = 1, 2$, i gledamo uvjetovanost funkcije $f_k$ (sve je skalarno). Što bi???
- 5. zad. — Broje se točni rezultati, ne "znanje postupka". Deriviranje i max. aps. vrijednosti (vježbe).

Savjet: Isplati se bar pogledati predavanja i pazite na "račun".

## Informacije — riješeni zadaci ...

Zadaci. Na mojoj i službenoj web stranici možete naći

- riješene zadatke iz neprekidnih najmanjih kvadrata (pdf format).

Tamo ima 6 zadataka s detaljnim rješenjima, a neki zadaci imaju i dva rješenja.

Neprekidni najmanji kvadrati se

- detaljno rade na predavanjima, skupa sa zadacima,

a ovo je dodatak za vježbanje.

# 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. $\mathrm{rang}(G) = n \leq m$. 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 napisati 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

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

Ostaje samo pokazati da takva faktorizacija postoji.

Napomena. Ako je $m > n$, onda $Q_0^\perp$ možemo izabrati na više načina $\Longrightarrow$ "puna" QR faktorizacija sigurno nije jedinstvena.

# Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$, za $m \geq n$, i neka je $\mathrm{rang}(G) = n$. Tada postoji jedinstvena "skraćena" QR faktorizacija, oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

gdje 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-Schmidtovog postupka.

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

$$q_1' = g_1, \qquad q_1 = \frac{q_1'}{\|q_1'\|_2}.$$

$j$-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

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

# 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 (ortonormirani stupci).

Uz oznaku za skalarne produkte i norme iz prethodne formule

$$r_{ij} = \langle g_j, q_i \rangle = q_i^T g_j, \qquad r_{jj} = \|q_j'\|_2,$$

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, tj. kad je $G$ loše uvjetovana.

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_i^T * g_j;

      /* kod MGS-a je */
    r_ij = q_i^T * 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 stupaca, 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 $G = Q_0R_0$. Ako je $m > n$ (matrica $Q_0$ nije kvadratna), onda nam za "punu" faktorizaciju, tj. za kvadratni $Q$,

- fali ortogonalni komplement $Q_0^{\perp}$,

kojeg nemamo iz čega izračunati — "fale" stupci u $G$.

Čim je $\|q_j'\|_2 \neq 0$, za dijagonalni element $r_{jj}$ možemo uzeti bilo koji od dva predznaka

$$r_{jj} = \pm\|q_j'\|_2.$$

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

- opet dobivamo jedinstvenu skraćenu QR faktorizaciju.

## Drugi algoritmi

U praksi, kad želimo ortogonalni $Q$, 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 punu i skraćenu QR faktorizaciju.

# Givensove rotacije

# Givensove rotacije

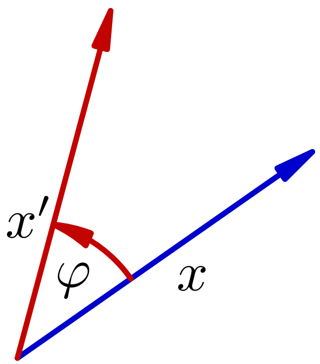
Matrica oblika

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

zove se Givensova rotacija u ravnini.

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

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



# Givensove rotacije u $(i,j)$ ravnini

U $\mathbb{R}^m$, možemo definirati Givensovu rotaciju u $(i,j)$ ravnini s

$$
R(i,j,\varphi) = \begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccccc} & & & \overset{i}{\downarrow} & & & \overset{j}{\downarrow} & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ i \rightarrow \\ \\ \\ \\ j \rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{bmatrix}
1 & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & \\
 & & & \cos\varphi & & & -\sin\varphi & & \\
 & & & & 1 & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & \\
 & & & & & & 1 & & \\
 & & & \sin\varphi & & & \cos\varphi & & \\
 & & & & & & & 1 & \\
 & & & & & & & & \ddots \\
 & & & & & & & & & 1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

# 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 jednadžbi 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 $x_i'$.

Za $x_i = x_j = 0$, mora biti $x_i' = 0$ i možemo uzeti $R(i,j,\varphi) = I$.

# *Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija*

U nastavku uzimamo da je $x_i^2 + x_j^2 > 0$, tj. bar jedan nije nula.

Drugi redak u matričnoj jednadžbi opisuje poništavanje

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

Ako je $x_j = 0$ (tj. nemamo što poništavati), onda je $\sin\varphi = 0$.
U suprotnom, izlazi

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

Odavde, korištenjem trigonometrijskog identiteta

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

slijedi

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

# Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Predznake za $\sin\varphi$ i $\cos\varphi$ biramo tako da $x_i'$ bude pozitivan. Ako stavimo

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

iz prve jednadžbe dobivamo

$$x_i' = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}\, x_i + \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}\, x_j = \frac{x_i^2 + x_j^2}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

$$= \sqrt{x_i^2 + x_j^2} > 0.$$

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 ($\rightarrow$), odozgo nadolje ($\downarrow$) u stupcu.

Poništavanje.

- Počinjemo s prvim stupcem i poništavamo redom elemente $g_{21}, \ldots, g_{m1}$.
- 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 $4 \times 3$, to izgleda ovako.

1. stupac:

- U radnoj matrici $G$, redom poništavamo elemente

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

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

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

# Sustavno poništavanje — primjer (nastavak)

2. stupac:

- U radnoj matrici $G$, redom poništavamo elemente

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

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 (i stupac) se više ne mijenja.

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

# Sustavno poništavanje — primjer (kraj)

3. stupac:

- U radnoj matrici $G$, redom poništavamo elemente

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

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 (i stupca) se više ne mijenjaju.

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

# 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 primjene rotacija, usput, još dozvoljava i paralelizaciju algoritma.

# Nezavisne rotacije — paralelno poništavanje

Grafički, za jednu matricu tipa $4 \times 3$ to izgleda ovako.

Crveno i zeleno su nezavisne rotacije koje možemo istovremeno primjenjivati (samo su dvije, jer je $m$ premalen).

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

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

Parovi su: $(1, 2)$ i $(3, 4)$, $(1, 3)$ i $(2, 4)$. Na samom kraju, u zadnja dva retka, više "ne ide" paralelno. Plave $0$ su konačne.

# Kako doći do $Q$?

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

Do matrice $Q$ dolazi se nakupljanjem primijenjenih rotacija, na pr.

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

Matricu $G$ smo slijeva pomnožili

- produktom ortogonalnih matrica, kojeg označimo s $Q^{-1}$.
- Produkt ortogonalnih matrica je opet ortogonalna, pa i regularna. Isto vrijedi i za njezin inverz $(Q^{-1})^{-1} = Q$.
- Zaključak: $G = QR$, gdje je $Q$ ortogonalna.
- Ako znamo $Q^{-1} = Q^T$, onda se $Q$ lako računa iz $Q^T$.

Matrica $Q^{-1} = Q^T$ dobiva se primjenom istih rotacija, samo na početnu matricu $I_m$, reda $m$ — "što na $G$, to na $I_m$".

# Alternativa za $Q$, puni i skraćeni $Q$

Kvadratnu matricu $Q$, u punoj QR faktorizaciji, možemo dobiti i bez transponiranja — akumulacijom produkta

- inverznih rotacija zdesna, na početnu matricu $I_m$.

Inverzna rotacija = rotacija za suprotni kut (tj. $\varphi \mapsto -\varphi$). Na pr.,

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

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

Pravokutnu matricu $Q_0$ iz skraćene QR faktorizacije dobivamo tako da uzmemo prvih $n$ stupaca od završne matrice $Q$,

$$Q_0 = Q(1:n).$$

A obratno? Napravimo punu QR faktorizaciju matrice $Q_0$!

# 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

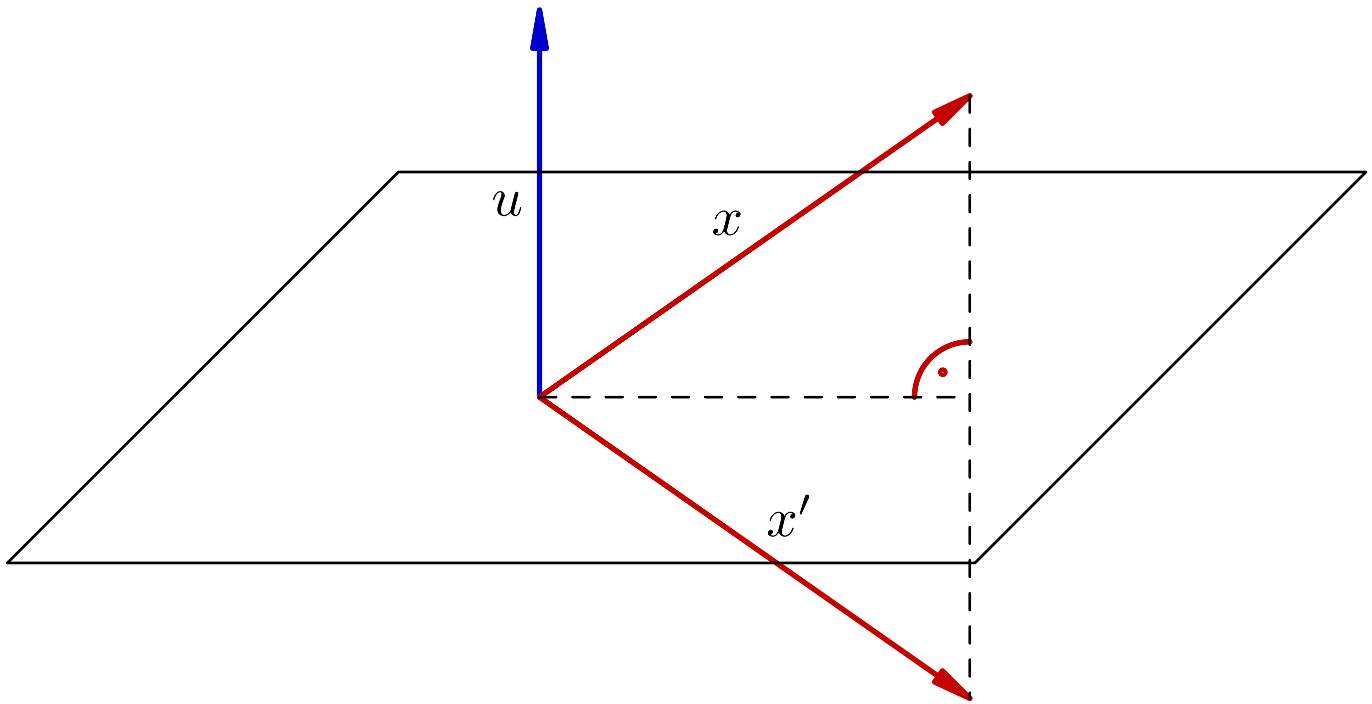
- simetrična,
- i ortogonalna, jer je

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

# Zašto baš ime reflektor?

Promatrajmo hiperravninu koja je okomita na vektor $u$.

- Reflektor $H$ sve vektore $x$ preslikava u simetrične obzirom na tu hiperravninu, $x' = Hx$.




Usput, $P(u) := I - uu^T$ je projektor na tu hiperravninu.

# Poništavanje Householderovim reflektorima

Neka je zadan vektor $x$. Treba naći Householderov reflektor $H$ koji poništava sve komponente vektora $x$, osim prve. Dakle, treba naći jedinični vektor $u$ koji definira takav reflektor $H$.

Tražimo da je

$$Hx = \begin{bmatrix} c \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = c \cdot e_1, \quad c \in \mathbb{R}.$$

Za početak, $H$ je unitarna matrica, pa čuva normu vektora,

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

odakle slijedi da je $c = \pm\|x\|_2$.

# Poništavanje Householderovim reflektorima

Napišimo traženu jednadžbu preko nepoznatog vektora $u$

$$Hx = (I - 2uu^T)x = x - 2u(u^T x) = \pm\|x\|_2\, e_1.$$

Uočimo da je $u^T x$ broj = skalarni produkt dva vektora.

Zanemarimo na trenutak mogućnost da je $u^T x = 0$. Onda je

$$u = \frac{1}{2(u^T x)}\,(x \mp \|x\|_2\, e_1).$$

Obzirom na to da $u^T x$ ne znamo, možemo zaključiti da je

$$u = \alpha(x \mp \|x\|_2\, e_1), \quad \text{za neki } \alpha \in \mathbb{R},$$

tj. da je $u$ paralelan s vektorom $\widetilde{u} = x \mp \|x\|_2 e_1$. Konačno, konstantu $\alpha$ nalazimo normiranjem vektora $\widetilde{u}$ na normu $1$.

# Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

$$u = \frac{\widetilde{u}}{\|\widetilde{u}\|_2},$$

ako je $\widetilde{u} \neq 0$. U protivnom, stavljamo $u = 0$, odnosno, $H = I$.

Uočite da oba izbora predznaka $(\mp)$ u definiciji $\widetilde{u}$ uvijek daju

$$Hx = c \cdot e_1 = \pm\|x\|_2\, e_1.$$

Ako je $x = 0$, onda je $\widetilde{u} = 0$, a to znači da je $H = I$. Tada možemo uzeti bilo koji $u$, jer je $H \cdot 0 = 0$ za svaki $H$.

U protivnom je i $\|x\|_2 \neq 0$, pa barem jedan izbor predznaka $(\mp)$ u formuli za $\widetilde{u}$ daje $\widetilde{u} \neq 0$. Ako drugi izbor daje $\widetilde{u} = 0$, onda je $x = \pm\|x\|_2\, e_1$. Dakle, oba reflektora su korektna.

## Izbor predznaka za $u$

Ranija mogućnost da je $u^T x = 0$ ne pravi nikakve poteškoće. Onda je $Hx = x = \pm\|x\|_2\, e_1$ i samo tada bar jedan izbor predznaka daje $\widetilde{u} = 0$. Dobiveni $H(u)$ je i tada korektan!

Za $x \neq 0$, u praksi se, zbog numeričke stabilnosti, često koristi

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

zato da nema kraćenja pri računanju prve komponente od $\widetilde{u}$, tj. da oba pribrojnika budu istog znaka,

$$\widetilde{u}_1 = x_1 + \operatorname{sign}(x_1)\|x\|_2.$$

To znači da je $c = -\operatorname{sign}(x_1)$, što ponekad zbunjuje u praksi.

- Na primjer, za $x = e_1$ dobivamo $Hx = -e_1$!

Stvarno, uz pažljiviji poredak računanja, to nije potrebno!

# Drugi način definicije $H$, primjena $H$ na vektor

Napomena. Normiranje $\widetilde{u} \mapsto u$ se, formalno, može izbjeći, ako definiramo

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

Kako djelovati s $H$ na ostale stupce (ili neki vektor)?

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

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

Dakle, treba izračunati skalarni produkt $u^Tz$, a zatim modificirati vektor $z$ (to je neki stupac radne matrice).

Ako koristimo $H(\widetilde{u})$, onda $\widetilde{u}^Tz$ stalno treba dijeliti s $\|\widetilde{u}\|_2^2$.

# QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- Prvo se reflektorom $H_1$ 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 $H_2'$.

  Na cijelu radnu matricu onda djelujemo reflektorom

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

  U pripadnom vektoru $u$, prva komponenta je $u_1 = 0$.

# QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- reflektorom $H_k'$ se poništava $k$-ti “skraćeni” stupac u radnoj matrici — od dijagonale nadolje.
- Na cijelu radnu matricu onda djelujemo reflektorom

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

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

Ako želimo formirati ortogonalnu 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 $k = 1, \ldots, n$.

- 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 — radna matrica

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 — $k$-ti korak

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 matrcu $R^{(k)}$ koja ima jedan "sređeni" stupac više.

Ovu transformaciju možemo prikazati u obliku

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

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

Nije bitno kako računamo $Q_k$ — rotacijama ili reflektorima!

# Pivotiranje stupaca u QR faktorizaciji

Kod QR faktorizacije, također, možemo koristiti pivotiranje, slično kao kod LR faktorizacije ili faktorizacije Choleskog.

- Uobičajeno se koristi pivotiranje (= zamjene) stupaca

$$GP = QR,$$

  gdje je $P$ matrica permutacije.

Pivotiranje stupaca u $k$-tom koraku algoritma ($k = 1, \ldots, n$):

- Ako su $x_\ell$, za $\ell = k, \ldots, n$, skraćeni stupci (od $k$-tog do $m$-tog reda), na "prvo" (tj. $k$-to) mjesto dovodi se onaj s najvećom normom, tj. tako da $\|x_k\|_2$ bude maksimalna.
- Zamjene se rade s cijelim stupcima, a ne sa skraćenim!

U zadnjem koraku više nema zamjena (samo jedan stupac).

# Svrha pivotiranja

Svrha?

- Ako matrica $G$ ima (skoro) linearno zavisne stupce, onda se QR faktorizacijom s pivotiranjem numerički određuje rang matrice $G$ — "rez" kad dijagonala u $R_0$ "padne".

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

$$r_{kk}^2 \geq \sum_{i=k}^{j} r_{ij}^2, \quad j = k+1, \ldots, n, \quad k = 1, \ldots, \min\{m, n\}.$$

# Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

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

Matrica $G$ ima jedinstvenu skraćenu QR faktorizaciju, pa je puni QR oblika

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

gdje je $R_0$ jedinstvena 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" $Q^* Q = I$. Jedinstvenost 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 $G$.

# Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije

# Korištenje QR faktorizacije

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

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

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

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 (zbog $A$), onda je i regularna, pa postoji jedinstveno rješenje $x$ linearnog sustava

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

Time smo prvi član u kvadratu norme napravili najmanjim mogućim, jer je $\|R_0 x - Q_0^T b\|_2^2 = 0$.

Zaključak. Onda vrijedi

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

a postiže se za vektor $x$ koji je rješenje sustava $R_0 x = Q_0^T b$.

# 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 rješenjima sustava normalnih jednadžbi

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

Ako je $A^T A$ regularna, 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

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

Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR.

# 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 (ili širu klasu) na odgovarajućem intervalu.
- Definicija norme nije dovoljna! Već u diskretnom slučaju, rješenje je 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 vrijede sljedeća svojstva:

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. 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 $u_k$, $k = 0, \ldots, m$, za koje vrijedi

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

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 $k = 0, \ldots, m$.

# Najmanji kvadrati — kvadrat norme greške

Ako je $\varphi$ linearna funkcija, tj. $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x)$, onda za kvadrat norme 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 $\varphi$ 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 jednadžbi

Kvadrat norme greške $S$ je funkcija koeficijenata $a_j$.

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

Dakle, mora vrijediti

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

za $i = 0, \ldots, m$. Onda je ...

# Sustav normalnih jednadžbi

Onda je

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

za $i = 0, \ldots, m$. Uočimo da su odgovarajući integrali, zapravo, skalarni produkti, pa linearni sustav za koeficijente ima opći oblik

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

Uvedimo oznake

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

# Sustav normalnih jednadžbi

i neka je

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

vektor nepoznatih parametara. Onda problem najmanjih kvadrata možemo zapisati kao sustav normalnih jednadžbi

$$Ma = t.$$

Matrica $M$, reda $m+1$, je

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

Dodatno, ako su funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne na $[a, b]$, onda je $M$ pozitivno definitna matrica.

# *Pozitivna (semi)definitnost matrice* $M$

Pozitivna (semi)definitnost izlazi iz definicije elemenata $m_{ij}$. Za svaki vektor $x$ imamo

$$x^T M x = \sum_{i=0}^{m} \sum_{j=0}^{m} x_i x_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \sum_{i=0}^{m} \sum_{j=0}^{m} \langle x_i \varphi_i, x_j \varphi_j \rangle$$

$$= \left\langle \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i, \sum_{j=0}^{m} x_j \varphi_j \right\rangle = \left\| \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \right\|_2^2,$$

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

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

Ako su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne, odavde slijedi i $x = 0$.

# Rješenje problema najmanjih kvadrata

Neka su funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne na $[a, b]$.

Zaključak. Simetrične pozitivno definitne matrice su regularne, 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 $H$, također, pozitivno definitna, što slijedi iz

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

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. Zapišimo traženi polinom $p_1$ u obliku

$$p_1(x) = a_1 x + a_0.$$

Treba minimizirati

$$S = \int\limits_{-1}^{1} (e^x - a_1 x - a_0)^2 \, dx \to \min .$$

# Jednostavni primjer

Deriviranjem dobivamo

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

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

Uz standardne oznake

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

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

## Jednostavni primjer

... treba riješiti sljedeći linearni sustav

$$\begin{aligned} s_2 a_1 + s_1 a_0 &= t_1 \\ s_1 a_1 + s_0 a_0 &= t_0. \end{aligned}$$

Izračunajmo integrale s lijeve strane

$$s_k = \int_{-1}^{1} x^k \, dx = \frac{1}{k+1} x^{k+1} \Big|_{-1}^{1} = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1}$$

$$= \begin{cases} \dfrac{2}{k+1}, & \text{za } k \text{ paran}, \\ 0, & \text{za } k \text{ neparan}. \end{cases}$$

# Jednostavni primjer

Za integrale s desne strane dobivamo

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

$$t_1 := \int_{-1}^{1} x e^x \, dx = \left\{ \begin{array}{ll} u = x & du = dx \\ dv = e^x \, dx & v = e^x \end{array} \right\}$$

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

$$= e + e^{-1} - (e - e^{-1}) = 2e^{-1}.$$

# 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

$$a_1 = \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.103638324,$$

$$a_0 = \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1) \approx 1.175201194.$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

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

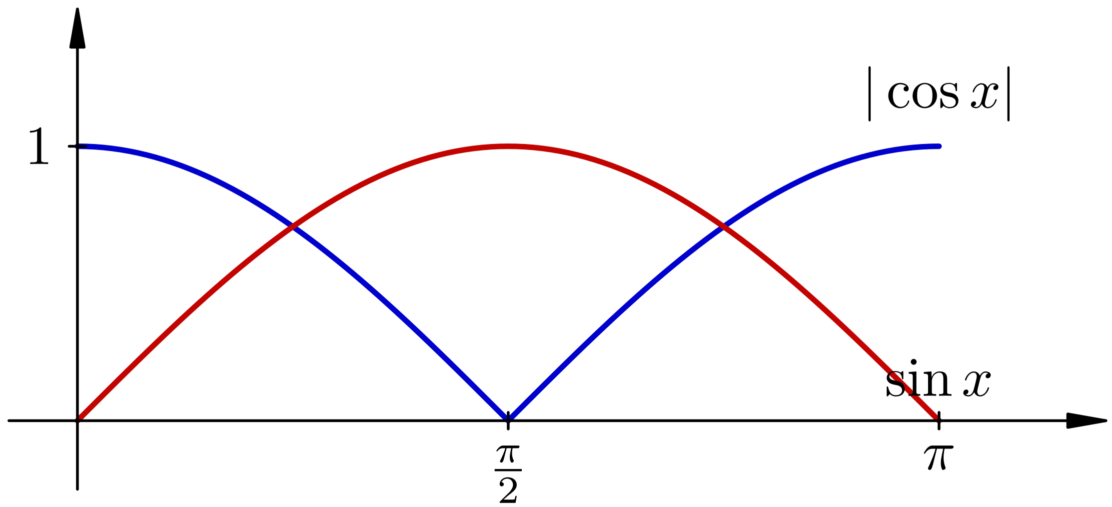
## Složeniji primjer

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 $\varphi_j(x) = (x - \frac{\pi}{2})^j$.

Ključna je "parnost" težinske funkcije $w$ oko $\frac{\pi}{2}$, jer u matrici sustava dobivamo hrpu nula (oko polovine elemenata).

Neka je $p_n$ polinom stupnja $n$, zapisan u toj "par–nepar" bazi

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

Za fiksni $n$, treba minimizirati

$$S = \int_0^\pi |\cos x| \big(\sin x - p_n(x)\big)^2 \, dx \to \min .$$

## Složeniji primjer

U izabranoj bazi $\{\varphi_0, \ldots, \varphi_n\}$, iz uvjeta

$$\frac{\partial S}{\partial a_{ni}} = 0, \quad i = 0, \ldots, n,$$

dobivamo linearni sustav za koeficijente, općeg oblika

$$\sum_{j=0}^{m} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_{nj} = \langle \varphi_i, f \rangle, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Kad uvrstimo sve što treba, sustav glasi

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

za $i = 0, \ldots, n$.

# Složeniji primjer

Izračunajmo potrebne integrale u matrici sustava ($k = i + j$):

$$\int_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| \, dx = \left\{ \begin{array}{ll} y = x - \frac{\pi}{2} & x = 0 \ \Rightarrow \ y = -\frac{\pi}{2} \\ dy = dx & x = \pi \ \Rightarrow \ y = \frac{\pi}{2} \end{array} \right\}$$

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

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, kad je $k$ paran i $k > 0$,

$$
\begin{aligned}
s_k := 2\int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y\, dy &= \left\{ \begin{array}{cc} u = y^k & du = k y^{k-1}\, dy \\ dv = \sin y\, dy & v = -\cos y \end{array} \right\} \\
&= 2\left( -y^k \cos y \,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + k \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos y\, dy \right) \\
&= \left\{ \begin{array}{cc} u = y^{k-1} & du = (k-1) y^{k-2}\, dy \\ dv = \cos y\, dy & v = \sin y \end{array} \right\} \\
&= 2k y^{k-1} \sin y \,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - k(k-1) \left( 2 \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2} \sin y\, dy \right) \\
&= 2k \left( \frac{\pi}{2} \right)^{k-1} - k(k-1)\, s_{k-2}.
\end{aligned}
$$

# Složeniji primjer

Još treba izračunati početni integral, za $k = 0$:

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

Onda je, redom:

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

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

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

# Složeniji primjer

Ostaje još izračunati integrale s desne strane $(k = i)$:

$$t_k := 2 \int\limits_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| \sin x \, dx$$

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

$$= \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{za } k \text{ neparan}, \\ 2 \displaystyle\int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \cos y \, dy = \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y) \, dy, & \text{za } k \text{ paran}. \end{array} \right\}$$

## Složeniji primjer

Za parne indekse $k > 0$, s desne strane imamo

$$t_k := \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y)\,dy = \left\{ \begin{array}{ll} u = y^k & du = k y^{k-1}\,dy \\ dv = \sin(2y)\,dy & v = -\cos(2y)/2 \end{array} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2}\,y^k \cos(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{k}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos(2y)\,dy$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} u = y^{k-1} & du = (k-1) y^{k-2}\,dy \\ dv = \cos(2y)\,dy & v = \sin(2y)/2 \end{array} \right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^k + \frac{k}{2}\left[\frac{1}{2}\,y^{k-1}\sin(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{k-1}{2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2}\sin(2y)\,dy\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^k - \frac{k(k-1)}{4}\,t_{k-2}.$$

# Složeniji primjer

Još treba izračunati

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

Onda 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 za koeficijente sada ima oblik

$$\sum_{j=0}^{n} s_{i+j} a_{nj} = t_i, \quad i = 0, \ldots, n.$$

## Složeniji primjer

Za $n = 1$ sustav je:

$$\begin{aligned} s_0 a_{10} + s_1 a_{11} &= t_0 \\ s_1 a_{10} + s_2 a_{11} &= t_1. \end{aligned}$$

Kad uvrstimo izračunate $s_k$ i $t_k$, imamo

$$\begin{aligned} 2 \cdot a_{10} + \qquad\qquad 0 \cdot a_{11} &= 1 \\ 0 \cdot a_{10} + (2\pi - 4) \cdot a_{11} &= 0. \end{aligned}$$

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:

$$
\begin{aligned}
s_0 a_{20} + s_1 a_{21} + s_2 a_{22} &= t_0 \\
s_1 a_{20} + s_2 a_{21} + s_3 a_{22} &= t_1 \\
s_2 a_{20} + s_3 a_{21} + s_4 a_{22} &= t_2.
\end{aligned}
$$

Ako uvrstimo izračunate veličine, sustav glasi:

$$
\begin{aligned}
2 \cdot a_{20} + {}& 0 \cdot a_{21} + (2\pi - 4) \cdot a_{22} = 1 \\
0 \cdot a_{20} + {}& (2\pi - 4) \cdot a_{21} + 0 \cdot a_{22} = 0 \\
(2\pi - 4) \cdot a_{20} + {}& 0 \cdot a_{21} + (\pi^3 - 24\pi + 48) \cdot a_{22} = \frac{\pi^2 - 4}{8}.
\end{aligned}
$$

## 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).

Uočiti bitna olakšanja, uz izbor "par–nepar" baze $(x - \frac{\pi}{2})^j$:

- Zbog parne simetrije težine i zadane funkcije oko točke $\frac{\pi}{2}$,
- u svim polinomima $p_n$ ostaju samo "parni" članovi, tj. koeficijenti uz neparni dio baze su jednaki nula!

# Još jedan primjer

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

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

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 $1, x, x^2, \ldots$, 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 (= nestaju!), ako se

- za bazu funkcija uzmu ortogonalne funkcije, obzirom na zadani skalarni produkt.

# Ortogonalne funkcije

# Ortogonalne funkcije i najmanji kvadrati

Linearni sustav za neprekidni problem najmanjih kvadrata je

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

Ako $\varphi_i$, $i = 0, \ldots, m$, tvore ortogonalni sustav funkcija, onda je

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \quad \text{za } j \neq i, \quad \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = \|\varphi_i\|^2 > 0.$$

Uvrštavanjem u linearni sustav, izlazi da je matrica sustava dijagonalna. Rješenje tog sustava je (namjerno piše $j$, a ne $i$)

$$a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle} = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\|\varphi_j\|_2^2}, \quad j = 0, \ldots, m.$$

Uočite da koeficijenti $a_j$ (u aproksimaciji $\varphi$) više ne ovise o $m$!

## *Variranje $m$ — niz sve boljih aproksimacija*

Neka je $\Phi_m$ prostor razapet ortogonalnim funkcijama $\varphi_k$, za $k = 0, \ldots, m$, uz neki zadani skalarni produkt $\langle\ ,\ \rangle$.

Za zadanu funkciju $f$, neka je $\varphi^{(m)}$ aproksimacija za $f$, po pripadnoj metodi najmanjih kvadrata (MLS) u prostoru $\Phi_m$.

U početnom zapisu (za MLS), $\varphi^{(m)}$ je linearna kombinacija funkcija baze

$$\varphi^{(m)}(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x).$$

Zbog ortogonalnosti baze, koeficijenti $a_j$ ne ovise o $m$, pa je

$$\varphi^{(m)}(x) = \varphi^{(m-1)}(x) + a_m \varphi_m(x), \quad \text{za } m > 0.$$

To sugerira povećavanje $m$, dok ne dobijemo dovoljno dobru aproksimaciju za $f$. Oprez: Uvjet da to "ide" je $\|\varphi_m\|_2 > 0$.

# Problemi kod ortogonalnih baza

Ovim oblikom koeficijenata $a_j$ nismo izbjegli sve probleme.

- Tipično, norme $\|\varphi_j\|_2^2$ blago variraju, kad $j$ raste.
- Za koeficijente $a_j$ se očekuje da rapidno padaju (v. dalje).
- Zbog toga se očekuju greške nastale kraćenjem pri računanju skalarnog produkta $\langle \varphi_j, f \rangle$ u brojniku.

Alternativna forma za računanje $a_j$ je

$$a_j = \frac{1}{\|\varphi_j\|_2^2} \left\langle f - \sum_{k=0}^{j-1} a_k \varphi_k, \varphi_j \right\rangle, \quad j = 0, \ldots, m.$$

Navedena suma = prethodna aproksimacija $\varphi^{(j-1)}$ za $f$, a skalarni produkt te sume s $\varphi_j$ je nula, zbog ortogonalnosti. Dakle, u brojniku je greška prethodne aproksimacije $\varphi^{(j-1)}$.

# Algoritam računanja koeficijenata

Sljedeći algoritam (na razini operacija s funkcijama!) računa ne samo koeficijente $a_j$, nego i aproksimaciju

$$\varphi^{(m)}(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x).$$

Računanje koeficijenata i aproksimacija

```
s[-1] = 0;
za j = 0 do m radi {
  a[j] = ⟨f - s[j - 1], phi[j]⟩ / ‖phi[j]‖²₂;
  s[j] = s[j - 1] + a[j] * phi[j];
};
```

Funkcija $\varphi^{(j)}$ izračunata je u `s[j]`, za $j = 0, \ldots, m$.

# Projekcija je opet rješenje

Tvrdimo da je greška aproksimacije $f - \varphi^{(m)}$ okomita na sve linearne kombinacije funkcija $\varphi_k$, za $k = 0, \ldots, m$.

Dovoljno je pokazati da je greška okomita na svaki $\varphi_k$:

$$
\begin{aligned}
\langle f - \varphi^{(m)}, \varphi_k \rangle &= \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \varphi_k \right\rangle = \langle f - a_k \varphi_k, \varphi_k \rangle \\
&= \langle f, \varphi_k \rangle - a_k \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle \\
&= \langle f, \varphi_k \rangle - \frac{\langle \varphi_k, f \rangle}{\langle \varphi_k, \varphi_k \rangle} \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle = 0.
\end{aligned}
$$

Dobiveni rezultat ima jednostavno geometrijsko značenje.

- Aproksimacija $\varphi^{(m)}$ je ortogonalna projekcija funkcije $f$ na prostor $\Phi_m$, razapet funkcijama $\varphi_k$, za $k = 0, \ldots, m$.

# Projekcija je opet rješenje

Iz ortogonalnosti

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \psi \rangle = 0,$$

gdje je $\psi \in \Phi_m$ bilo koja linearna kombinacija $\varphi_k$, slijedi da je i

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \varphi^{(m)} \rangle = 0.$$

Tada, zbog okomitosti, možemo pisati (Pitagorin počak)

$$\|f\|_2^2 = \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \|\varphi^{(m)}\|_2^2 = \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \left\| \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j \right\|_2^2$$

$$= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2.$$

# Greška rješenja, kad $m$ raste

Iz prethodne relacije slijedi da se greška aproksimacije $\varphi^{(m)}$ može zapisati kao

$$\|f - \varphi^{(m)}\|_2 = \left( \|f\|_2^2 - \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2 \right)^{1/2}.$$

Ako je zadan niz uklopljenih prostora $\Phi_m$, za $m = 0, 1, \ldots$ (?), što odgovara povećanju $m$ (dok ide), tj. vrijedi da je

$$\Phi_0 \subset \Phi_1 \subset \Phi_2 \subset \cdots ,$$

onda je, iz prethodne relacije, jasno da greške padaju

$$\|f - \varphi^{(0)}\|_2 \geq \|f - \varphi^{(1)}\|_2 \geq \|f - \varphi^{(2)}\|_2 \geq \cdots .$$

# Greška rješenja — konvergencija?

Ako je prostora $\Phi_m$ beskonačno mnogo, očito je da je norma greške aproksimacije

- monotono padajuća i odozdo ograničena s $0$,

pa mora konvergirati.

Pitenje: Mora li norma greške konvergirati u $0$?

Odgovor je ne — ovisi o $f$! Naravno, nužni i dovoljni uvjet da bi norma greške konvergirala u nulu je (Besselova jednakost)

$$\|f\|_2^2 = \sum_{j=0}^{\infty} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2,$$

što se odmah čita iz oblika greške. To je tzv. konvergencija po normi. Ali, ni tada, ne mora vrijediti uniformna konvergencija.

# Ortogonalizacija

Ako je zadan skalarni produkt $\langle\ ,\ \rangle$ i skup funkcija $\widehat{\varphi}_j$ koje su linearno nezavisne, ali nisu ortogonalne u tom produktu,

- $\widehat{\varphi}_j$ ortogonaliziramo korištenjem Gram–Schmidtovog procesa ortogonalizacije (klasičnog ili modificiranog).
- Dobivene ortogonalne funkcije $\varphi_j$ ne treba normirati!

Ortogonalizacija započinje s:

$$\varphi_0 := \widehat{\varphi}_0.$$

Zatim, za $j = 1, 2, \ldots$, stavimo $\varphi_j := \widehat{\varphi}_j - \widehat{\varphi}_j^{(j-1)}$, ili

$$\varphi_j := \widehat{\varphi}_j - \sum_{k=0}^{j-1} a_{jk}\varphi_k, \quad a_{jk} = \frac{\langle \widehat{\varphi}_j, \varphi_k \rangle}{\|\varphi_k\|_2^2}.$$

Tada je $\varphi_j$ ortogonalan na sve prethodne $\varphi_k$, $k = 0, \ldots, j-1$.

# Primjer ortogonalizacije

Primjer. Nađite ortogonalnu bazu za prostor $\Phi_2$ razapet funkcijama $1, x, x^2$, u integralnom skalarnom produktu na intervalu $[-1, 1]$, s težinskom funkcijom $w(x) = 1$.

Rješenje. Skalarni produkt funkcija $u$ i $v$ definiran je s

$$\langle u, v\rangle = \int\limits_{-1}^{1} w(x)u(x)v(x)\,dx = \int\limits_{-1}^{1} u(x)v(x)\,dx.$$

Ovdje je $\widehat{\varphi}_0(x) = 1$, $\widehat{\varphi}_1(x) = x$, $\widehat{\varphi}_2(x) = x^2$.

Prva funkcija u ortogonalnoj bazi jednaka je prvoj zadanoj funkciji, tj.

$$\varphi_0(x) = 1.$$

# Primjer ortogonalizacije

Sada je

$$\langle x, \varphi_0 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x \cdot 1 \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} 1 \cdot 1 \, dx = x \,\Big|_{-1}^{1} = 2,$$

pa je

$$a_{10} = \frac{\langle x, \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{0}{2} = 0.$$

Odatle odmah dobivamo

$$\varphi_1(x) = x - a_{10} \cdot 1 = x.$$

# Primjer ortogonalizacije

Za ortogonalni polinom stupnja $2$ treba izračunati $r_{02}$ i $r_{12}$

$$\langle x^2, \varphi_0 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x^2 \cdot 1 \, dx = \frac{x^3}{3} \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3},$$

$$\langle x^2, \varphi_1 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x^2 \cdot x \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x \cdot x \, dx = \frac{2}{3},$$

pa je

$$a_{20} = \frac{\langle x^2, \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{\frac{2}{3}}{2} = \frac{1}{3}, \qquad a_{21} = \frac{\langle x^2, \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle} = \frac{0}{\frac{2}{3}} = 0.$$

# Primjer ortogonalizacije i primjena

Odatle je

$$\varphi_2(x) = x^2 - a_{21} \cdot x - a_{20} \cdot 1 = x^2 - \frac{1}{3}.$$

Primjer. Korištenjem ortogonalnih polinoma izračunatih u prethodnom primjeru, po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata nađite polinome stupnjeva $0$ i $1$, koji aproksimiraju funkciju

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

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

# Jednostavni primjer — ortogonalni polinomi

Rješenje problema najmanjih kvadrata je funkcija

$$\varphi^{(m)} = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \qquad a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}, \quad j = 0, 1.$$

Za račun koeficijenata $a_j$ moramo izračunati

$$\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot 1 \, dx = 2, \qquad \langle \varphi_0, e^x \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot e^x \, dx = e - e^{-1},$$

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot x \, dx = \frac{2}{3}, \qquad \langle \varphi_1, e^x \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot e^x \, dx = 2e^{-1}.$$

# Jednostavni primjer — ortogonalni polinomi

Odatle odmah izlazi

$$a_0 = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1), \quad a_1 = \frac{2e^{-1}}{\frac{2}{3}} = 3e^{-1}.$$

Aproksimacija konstantom je

$$\varphi^{(0)}(x) = \mathrm{sh}(1) \cdot \varphi_0(x) = \mathrm{sh}(1) \cdot 1 = \mathrm{sh}(1).$$

Aproksimacija polinomom stupnja 1 je

$$\varphi^{(1)}(x) = \mathrm{sh}(1) \cdot \varphi_0(x) + 3e^{-1} \cdot \varphi_1(x) = \mathrm{sh}(1) + 3e^{-1} \cdot x.$$

To se, naravno, poklapa s već izračunatim rješenjem, koje nije koristilo ortogonalne polinome.

# Primjeri ortogonalnih familija funkcija

# Trigonometrijske funkcije

Trigonometrijske funkcije

$$\{1, \cos x, \cos 2x, \cos 3x, \ldots, \sin x, \sin 2x, \sin 3x, \ldots\}$$

čine ortogonalnu familiju funkcija na intervalu $[0, 2\pi]$, uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Pokažimo da je to zaista tako. Neka su $k, \ell \in \mathbb{N}_0$. Tada vrijedi (produkt trigonometrijskih funkcija pretvaramo u zbroj)

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \sin \ell x \, dx = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \big(\cos(k+\ell)x - \cos(k-\ell)x\big) \, dx.$$

Sad gledamo posebne slučajeve — je li $k = \ell > 0$ ili ne.

# Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Ako je $k = \ell > 0$, onda je prethodni integral jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - x\right)\Big|_0^{2\pi} = \pi.$$

Ako je $k \neq \ell$, onda je jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - \frac{\sin(k-\ell)x}{k-\ell}\right)\Big|_0^{2\pi} = 0.$$

Drugim riječima, vrijedi

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \sin \ell x \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq \ell, \\ \pi, & k = \ell, \end{cases} \qquad k, \ell = 1, 2, \ldots .$$

# Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Na sličan način, pretvaranjem produkta trigonometrijskih funkcija u zbroj, možemo pokazati da je

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cdot \cos \ell x \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq \ell, \\ 2\pi, & k = \ell = 0, \\ \pi, & k = \ell > 0, \end{cases} \qquad k, \ell = 0, 1, \ldots,$$

te, također, da je

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cdot \sin \ell x \, dx = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, \qquad \ell = 1, 2, \ldots.$$

# Fourierov red

Ako periodičku funkciju $f$, osnovnog perioda duljine $2\pi$, aproksimiramo (u smislu najmanjih kvadrata) redom oblika

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx),$$

onda, množenjem odgovarajućim trigonometrijskim funkcijama i integriranjem, dobivamo izraze za koeficijente

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos kx \, dx, \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin kx \, dx.$$

Prethodni red poznat je pod imenom Fourierov red, a koeficijenti kao Fourierovi koeficijenti.

# Fourierov red i najmanji kvadrati

Ako Fourierov red odsiječemo za $k = m$, onda dobijemo tzv. trigonometrijski polinom

$$f_m(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{m} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

Taj polinom je

- najbolja aproksimacija u smislu najmanjih kvadrata za $f$, u klasi trigonometrijskih polinoma "stupnja" manjeg ili jednakog $m$ (prostor dimenzije $2m + 1$).

Uz ortogonalnost trigonometrijskih funkcija (obzirom na integralni skalarni produkt), postoji i diskretna ortogonalnost (integral se zamijeni sumom, po odgovarajućim točkama).

# Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR

# 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

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

# Primjer — linearizacija

Rješenje nađite korištenjem:

- sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog,
- QR faktorizacije,
- 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 $\varphi$ s $bx + c$ i dobivamo

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

odnosno,

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

# Primjer — linearizacija

2. Ovu funkciju $-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x$ 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

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

gdje je $w = w(u, v)$, uz odgovarajuće supstitucije za $u$, $v$, $w$.

# Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Prvo riješimo problem korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog.

Za 1. slučaj metoda najmanjih kvadrata ima oblik

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

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

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

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

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

# 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

$$R \approx \begin{bmatrix} 2.2360679775 & -3.3049084707 & -2.3165664247 \\ & 2.0737598704 & -1.0149391114 \\ & & 0.4858174557 \end{bmatrix}.$$

# Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Sad moramo još riješiti dva trokutasta sustava:

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

Rješenja prvog, pa drugog sustava su

$$y \approx \begin{bmatrix} -4.4721359550 \\ 3.1295812465 \\ 0.4247159232 \end{bmatrix}, \quad x \approx \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix}.$$

Prema tome, rješenje za parametre u 1. slučaju je

$$a = 1.7685862981,$$

$$b = 1.9369990502,$$

$$c = 0.8742294419.$$

# Primjer — sustav normalnih jednadžbi

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

$$\varphi(x_i) = \frac{x_i + 1.7685862981}{1.9369990502 x_i + 0.8742294419},$$

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

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

Metoda najmanjih kvadrata imat će oblik

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

# *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

$$\begin{aligned} a &= 1.7522057170, \\ b &= 1.9387446017, \\ c &= 0.8534831289. \end{aligned}$$

Ova rješenja se ponešto razlikuju od prethodnih!

# Primjer — QR faktorizacija

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

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

dobivamo

$$-a + bx_i f_i + cf_i = x_i, \quad i = 0, \ldots, 4,$$

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

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

## Primjer — QR faktorizacija

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

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} -0.4472135955 & -0.7127151128 & 0.5364927787 \\ -0.4472135955 & -0.2449656815 & -0.6476203098 \\ -0.4472135955 & 0.0781189772 & -0.2814102151 \\ -0.4472135955 & 0.2999382951 & -0.0650056784 \\ -0.4472135955 & 0.5796235221 & 0.4575434246 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 2.2360679775 & -3.3049084707 & -2.3165664247 \\ & 2.0737598704 & -1.0149391114 \\ & & 0.4858174557 \end{bmatrix}.$$

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

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} -4.4721359550 \\ 3.1295812465 \\ 0.4247159232 \end{bmatrix}.$$

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

$$x \approx \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix}$$

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 $p = [2, 3, 1]$,

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} 0.0000000000 & 0.9409894604 & 0.3321538334 \\ 0.2486125437 & 0.2870820614 & -0.7315708741 \\ 0.4203346099 & 0.1033900358 & -0.3129274676 \\ 0.5382333419 & -0.0306530483 & -0.0596152612 \\ 0.6868882649 & -0.1431559168 & 0.5029913595 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 3.9016534956 & 1.4228070243 & -1.8940687604 \\ & 2.1466765410 & -1.1576525926 \\ & & 0.2689684102 \end{bmatrix}.$$

## Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

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

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} 5.4515348490 \\ -0.1707206788 \\ 0.4756938448 \end{bmatrix}.$$

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

$$x' \approx \begin{bmatrix} 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \\ 1.7685862981 \end{bmatrix}.$$

# Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

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

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

Pravo rješenje $x$ dobit ćemo kao

$$x = P^T x' = \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix}.$$