Numerička matematika

8. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

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

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

Metoda najmanjih kvadrata

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 φ 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 jednadžbu $-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x$ 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 (1)

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 (1)

Deriviranjem po sva tri parametra izlaze jednadžbe

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

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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav normalnih jednadžbi

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

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 (1)

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

$$\begin{aligned} a &= 1.7685862981, \\ b &= 1.9369990502, \\ c &= 0.8742294419. \end{aligned}$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

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

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

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

$$S_0 = \sum_{i=0}^{4} (f_i - \varphi(x_i))^2 = 0.0010995831.$$

Napomena. Ovaj S_0 dobijemo uvrštavanjem parametara u polazni nelinearni model — to je ono što nas zanima!

- Dakle, ovo nije najmanji S za linearizirani model, nego pripadni S_0 za polazni model.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (2)

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 ima isti oblik

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

ali s drugačijim značenjem varijabli i parametara.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (2)

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! Na kraju, dobivamo da je $S_0 = 0.0022172135$ ($\approx 2 \cdot$ prethodni S_0).

Primjer — QR faktorizacija (1)

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

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

dobivamo

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

Matrice A i b iz problema minimizacije reziduala su jednake

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

Primjer — QR faktorizacija (1)

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 (1)

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

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

a minimalna norma reziduala je $\|Ax - b\|_2 = 0.1591779081$.

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem (1)

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 (1)

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 (1)

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

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

Pravo rješenje x dobit ćemo kao rješenje sustava $P^T x = x'$, tj.

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

Zadatak. Napravite to isto za drugu linearizaciju.

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD) proizvoljne matrice A je matrična faktorizacija sa najširom primjenom. O njenoj egzistenciji govori sljedeći teorem.

Teorem. Neka je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, za $m \geq n$, matrica ranga $\operatorname{rang}(A) = r \leq n$. Tada postoje ortogonalne matrice $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ i $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ takve da je na jedinstven način određena dijagonalna matrica

$$U^T A V = \Sigma = \begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right] & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array}$$

gdje je $\Sigma_r = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, uz $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$. Kažemo da je

$$A = U \Sigma V^T$$

dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD) matrice A.

Za $m < n$ postupamo na isti način ali sa A^T.

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

Dokaz. Matematičkom indukcijom po m i n.

■

I ova faktorizacija može se napisati u jednostavnijoj — tzv. skraćenoj formi.

- Prvih r stupaca matrice U označimo s U_r,
- a preostale stupce, koji su okomiti na U_r, označimo s $U_r^{\perp}$, tako da je
$$U = [U_r \; U_r^{\perp}].$$
- Na isti način particioniramo matricu V
$$V = [V_r \; V_r^{\perp}].$$

Onda je

$$A = \begin{bmatrix} U_r & U_r^{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_r^T \\ (V_r^{\perp})^T \end{bmatrix} = U_r \Sigma_r V_r^T$$

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

Napomena: $\|A\|_2 = \sigma_1$ jer zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, vrijedi

$$\|A\|_2 = \|U^T AV\|_2 = \|\Sigma\|_2 = (\rho(\Sigma^2))^{1/2} = \sigma_1.$$

SVD se računa iterativnom metodom na više načina. Tipične metode uključuju

- primjenu Householderovih reflektora,
- primjenu Givensovih i Jacobijevih rotacija,
- neke specifične faktorizacije.

Potprogrami za računanje SVD-a se nalaze u sklopu svih standardnih matematičkih softvare-a.

Korištenje SVD-a

Diskretni linearni problem najmanjih kvadrata riješit ćemo pomoću dekompozicije singularnih vrijednosti.

Ako je A ($n \times m$) ranga r (tj. vrijedi $\mathrm{rang}(A) = r \leq n$), onda SVD matrice A ima oblik

$$A = U \Sigma V^T = U_r \Sigma_r V_r^T.$$

Kao i u slučaju QR faktorizacije, ako minimiziramo $\|Ax - b\|_2^2$, minimizirali smo i $\|Ax - b\|_2$. Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, imamo

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

Korištenje SVD-a

Za U uzmimo ortogonalnu matricu iz dekompozicije singularnih vrijednosti, pa je

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

Korištenje SVD-a

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

Budući da je Σ_r kvadratna i punog ranga (zbog definicije SVD-a), onda je i regularna, pa postoji jedinstveno rješenje x linearnog sustava

$$\Sigma_r V_r^T x = U_r^T b.$$

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

Zaključak. Onda vrijedi

$$\min_x \|Ax - b\|_2 = \|(U_r^{\perp})^T b\|_2,$$

a postiže se za vektor x koji je rješenje sustava $\Sigma_r V_r^T x = U_r^T b$, tj.

$$x = V_r \Sigma_r^{-1} U_r^T b.$$

Osiguranje jedinstvenosti rješenja

U slučaju da je $r < n$ preostaje pokazati da ovo rješenje ima minumalnu normu na skupu $\mathcal{S} = x + \mathcal{N}(A)$.

- Ovaj uvjet je ekvivalentan uvjetu da je

$$x \perp \mathcal{N}(A).$$

- Prema teoremu o "rangu i defektu" dimenzija jezgre koju nazivamo defektom jednaka je

$$d(A) = n - r.$$

- Promotrimo $n - r$ stupaca od $V_r^\perp$:
  - oni su ortonormirani, tj. linearno nezavisni,
  - za bilo koji vektor iz prostora koji oni razapinju: $V_r^\perp z$, vrijedi

$$A \cdot V_r^\perp z = U_r \Sigma_r V_r^T V_r^\perp z = 0,$$

    jer su svi stupci iz $V_r^\perp$ okomiti na sve stupce iz V_r, tj. $V_r^T V_r^\perp = 0$.
  - Zaključujemo da stupci od $V_r^\perp$ čine bazu za $\mathcal{N}(A)$.

Osiguranje jedinstvenosti rješenja

S druge strane za rješenje problema najmanjih kvadrata dobiveno preko SVD-a vrijedi

$$x^T V_r^{\perp} z = b^T U_r \Sigma_r^{-1} V_r^T V_r^{\perp} z = 0,$$

ponovo jer je $V_r^T V_r^{\perp} = 0$.

Dakle možemo zaključiti da je x okomit na svaki vektor iz jezgre od A, odnosno da je

$$x \perp \mathcal{N}(A)$$

pa je prema tome rješenje sa najmanjom 2-normom.

SVD i aproksimacija matricom nižeg ranga

Zapišimo matrice U i V iz SVD-a od $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) u stupčanom obliku $U = [u_1, \ldots, u_n]$ i $V = [v_1, \ldots, v_n]$. Matricu A možemo zapisati i kao zbroj matrica ranga 1 (tipa $m \times n$)

$$A = U \Sigma V^T = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T .$$

Matricu A_k, istog tipa kao i A, ranga $\mathrm{rang}(A_k) \leq k < n$, koja je po 2-normi najbliža matrici A, možemo zapisati kao

$$A_k = U \Sigma_k V^T = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T ,$$

pri čemu je $\Sigma_k = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, 0, \ldots, 0)$. Pritom je

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

najmanja udaljenost između A i svih matrica ranga najviše k.

SVD i aproksimacija matricom nižeg ranga

Ova aproksimacija je temelj kompresije velike količine podataka na oblik manjeg volumena.

- Može se koristiti kod kompresije slika koje su spremljene kao kvadratne matrice čiji elementi predstavljaju brojčane kodove boja piksela.
- Ako je originalna slika spremljena kao matrica $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ (mn podataka), tada njenu najbolju aproksimaciju A_k ranga k možemo spremiti kao

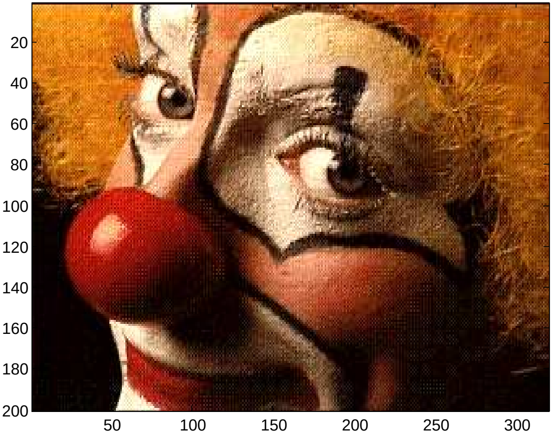
$$U_k = [u_1, \ldots, u_k] \in \mathbb{R}^{m\times k}, \quad \text{i} \quad W_k = [\sigma_1 v_1, \ldots, \sigma_k v_k] \in \mathbb{R}^{n\times k},$$

što je ukupno $(m+n)k$ podataka, i za dovoljno mali k može biti znatno manje od originalne količine podataka mn.

SVD i aproksimacija matricom nižeg ranga

Originalna slika dimenzija 200×320.

- Količina podataka za spremanje: $200 \cdot 320 = 64000$,
- odnos u odnosu na original: 100%



SVD i aproksimacija matricom nižeg ranga

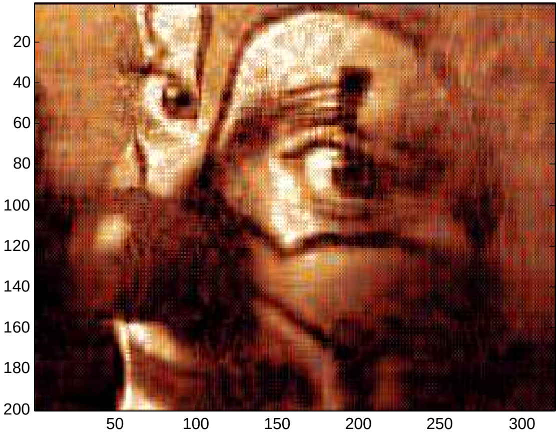
Aproksimacija ranga 50.

- Količina podataka za spremanje: $(200 + 320) \cdot 50 = 26000$,
- odnos u odnosu na original: 40.63%

SVD i aproksimacija matricom nižeg ranga

Aproksimacija ranga 20.

- Količina podataka za spremanje: $(200 + 320) \cdot 20 = 10400$,
- odnos u odnosu na original: 16.25%



Metoda najmanjih kvadrata

Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije

Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR

Rješenje matrične formulacije korištenjem dekompozicije singularnih vrijednosti (SVD)

Neprekidni problem najmanjih kvadrata

Ortogonalne funkcije

Primjeri ortogonalnih familija funkcija

Još jednom o najmanjim kvadratima

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

$$\|e(x)\|_2 \to \min, \quad \text{za } \varphi \in \mathcal{F},$$

gdje je $e(x) = f(x) - \varphi(x)$ funkcija greške na nekoj domeni.

Da bismo mogli naći minimalnu normu greške u neprekidnom slučaju, moramo definirati

- skalarni produkt za neprekidne funkcije (ili još širu klasu) na odgovarajućem intervalu $[a, b]$.

Definicija norme nije dovoljna!

- Već u diskretnom slučaju, rješenje je bila ortogonalna projekcija na potprostor, a za to treba skalarni produkt.

Definicija norme i skalarnog produkta

Definicija. Zadana funkcija w je težinska funkcija na intervalu $[a, b]$, ako je $w(x) \geq 0$ na $[a, b]$, s tim da

- $w(x)$ može biti jednako 0 samo u izoliranim točkama x.

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

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

Za funkcije u i v, ako taj integral postoji i norma je konačna, onda možemo definirati težinski skalarni produkt tih funkcija

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

Svojstva integralnog skalarnog produkta

Ovako definirana vrijednost $\langle u, v\rangle$ je sigurno konačna, jer vrijedi Cauchy–Schwarzova nejednakost

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

Iz svojstava integrala (linearnost) odmah dobivamo da vrijede sljedeći zahtjevi (ili aksiomi) iz definicije skalarnog produkta:

2. simetrija: $\langle u, v\rangle = \overline{\langle v, u\rangle}$ nad $\mathbb{C}$, ili $\langle u, v\rangle = \langle v, u\rangle$ nad $\mathbb{R}$,
3. linearnost u prvom argumentu:

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

a onda vrijedi i (anti)linearnost ($\mathbb{C}/\mathbb{R}$) u drugom argumentu:

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

Pozitivna definitnost skalarnog produkta

Do korektnosti definicije skalarnog produkta, fali još samo

1. pozitivna definitnost:
   $\langle u, u \rangle \geq 0$, a jednakost vrijedi ako i samo ako je $u = 0$.

Prvi dio (= nenegativnost) isto odmah slijedi iz $w|u|^2 \geq 0$.
Međutim, drugi dio je problem i to u ovom smjeru:

- $\langle u, u \rangle = 0 \implies u = 0$, ili $u \neq 0 \implies \langle u, u \rangle > 0$.

To ovisi o težini w i vektorskom prostoru za funkcije u.

Ako još pretpostavimo da su w i u neprekidne funkcije na $[a, b]$, onda to vrijedi! Opravdanje za to je sljedeća tvrdnja:

- Ako je f neprekidna funkcija i u nekoj točki $x \in [a, b]$ vrijedi $f(x) > 0$, onda je $f > 0$ i na nekom intervalu (pozitivne duljine) oko točke x. Stoga i njen integral mora biti pozitivan.

Pozitivna definitnost za neprekidne funkcije

Teorem. Ako je w neprekidna funkcija na $[a, b]$, onda je integralni skalarni produkt $\langle u, v \rangle$ pozitivno definitan na vektorskom prostoru $C[a, b]$ svih neprekidnih funkcija na $[a, b]$.

Dokaz. Neka je u neprekidna i neka je $u \neq 0$, tj. postoji točka $x \in [a, b]$, za koju je $u(x) \neq 0$. Zbog $|u(x)|^2 > 0$, postoji interval I oko točke x, sadržan u $[a, b]$, na kojem je $|u|^2 > 0$.

Težinska funkcija $w \geq 0$ može imati samo izolirane nultočke, tj. ne može poništiti $|u|^2$ na cijelom I. Dakle, sigurno postoji točka $x' \in I$ u kojoj je $w(x')|u(x')|^2 > 0$.

Sad iskoristimo da je w neprekidna, pa to vrijedi i za produkt $w|u|^2$. To znači da postoji interval I' oko x', sadržan u $[a, b]$ i pozitivne duljine, na kojem je $w|u|^2 > 0$. Onda integral te funkcije mora biti pozitivan, tj. vrijedi $\langle u, u \rangle > 0$. ∎

Unitarni prostori i pretpostavke za nastavak

Ako je interval $[a, b]$ konačan, a w neprekidna na cijelom $[a, b]$,

- onda je $C[a, b]$ unitarni prostor — neprekidne funkcije na segmentu su integrabilne, tj. norma $\|u\|_2$ je konačna.

Možemo uzeti i nešto blaže pretpostavke (bitno u praksi):

- težina w je neprekidna na otvorenom intervalu (a, b), a može imati singularitete u rubovima, ili
- interval $[a, b]$ je beskonačan (jedan ili oba ruba).

Za pripadni unitarni prostor onda možemo uzeti potprostor

- svih kvadratno integrabilnih funkcija iz $C[a, b]$.

Možemo gledati i diskretni skalarni produkt funkcija u i v, definiranom na diskretnom skupu točaka $x_1, \ldots, x_n$

$$\langle u, v\rangle = \sum_{i=1}^{n} w_i\, u(x_i)\overline{v(x_i)}, \quad \text{gdje su } w_i > 0.$$

Najmanji kvadrati — kvadrat norme greške

Napomena. U nastavku radimo samo nad poljem $\mathbb{R}$, tj. s realnim funkcijama $\Rightarrow$ nema kompleksnog konjugiranja.

Kvadrat norme greške izrazimo preko skalarnih produkata

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

Neka je φ linearna funkcija,

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

U gornji izraz za S uvrstimo ovaj oblik funkcije φ i definiciju integralnog skalarnog produkta. Izlazi

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

Najmanji kvadrati — nužni uvjet minimuma

Ovdje je S funkcija nepoznatih koeficijenata a_j, $j = 0, \ldots, m$.

- To je kvadratna funkcija od $m + 1$ varijabli, pa je nužni uvjet minimuma da su sve parcijalne derivacije jednake 0.

Dakle, mora vrijediti

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

za $i = 0, \ldots, m$. Podijelimo s 2 i sredimo ove jednadžbe.

Sustav normalnih jednadžbi

Dobivamo linearni sustav jednadžbi za nepoznate koeficijente

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

za $i = 0, \ldots, m$. Ove integrale možemo zapisati kao skalarne produkte, 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 sljedeće oznake za koeficijente u sustavu

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

Sustav normalnih jednadžbi

Na kraju, neka je

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

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

$$Ma = t.$$

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

- očito simetrična (iz simetrije skalarnog produkta),
- 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. Dokažimo to.

Pozitivna (semi)definitnost matrice M

Pozitivna (semi)definitnost izlazi iz definicije elemenata m_{ij}. Za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^{m+1}$ vrijedi

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

Zbog pozitivne definitnosti skalarnog produkta, ovo je $= 0$, ako i samo ako je

$$
\sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \equiv 0.
$$

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

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Simetrična pozitivno definitna matrica M je regularna. To dokazuje sljedeću tvrdnju.

Teorem. Neka su funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne na $[a, b]$. Onda postoji jedinstveno rješenje problema $Ma = t$.

■

Hesseova matrica H drugih parcijalnih derivacija je, također, pozitivno definitna. To slijedi iz

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

tj. vrijedi $H = 2M$. Dakle, dobiveni vektor parametara a je jedinstveni minimum za linearni problem najmanjih kvadrata.

Najmanji kvadrati — završne napomene

U neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata,

- kad tražimo aproksimaciju φ na intervalu $[a, b]$,

nema matrične formulacije i QR pristupa, kao kod diskretnog problema. Za matričnu formulaciju problema

- trebalo bi napisati jednadžbe u svakoj točki x iz intervala $[a, b]$, a njih je beskonačno (i to neprebrojivo) mnogo.

Dakle, to ne ide. Ostaje samo sustav normalnih jednadžbi.

- I ovdje je rješenje ortogonalna projekcija funkcije f na potprostor razapet funkcijama $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$,

samo argument ide drugačije (v. kod ortogonalnih funkcija).

Izvod za neprekidnu metodu je zapravo isti kao i kod diskretnog slučaja.

Jednostavni primjer — početak

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

$$S = \int_{-1}^{1} \left(e^x - a_1 x - a_0\right)^2 dx \to \min .$$

Jednostavni primjer — normalne jednadžbe

Deriviranjem dobivamo

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

Uz standardne oznake

$$s_k := \int_{-1}^{1} x^k\, dx, \qquad t_k := \int_{-1}^{1} e^x x^k\, dx, \qquad k \geq 0,$$

dobivamo sustav normalnih jednadžbi (v. sljedeća stranica).

Jednostavni primjer — integrali za matricu

Treba riješiti sljedeći linearni sustav

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

Izračunajmo integrale s lijeve strane

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

Jednostavni primjer — integrali desne strane

Za integrale s desne strane dobivamo

$$
\begin{aligned}
t_0 &:= \int_{-1}^{1} e^x \, dx = e^x \Big|_{-1}^{1} = e - e^{-1}, \\
t_1 &:= \int_{-1}^{1} x e^x \, dx = \left\{ \begin{matrix} u = x & du = dx \\ dv = e^x \, dx & v = e^x \end{matrix} \right\} \\
&= x e^x \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} e^x \, dx \\
&= e + e^{-1} - (e - e^{-1}) = 2e^{-1}.
\end{aligned}
$$

Jednostavni primjer — rješenje

Linearni sustav onda glasi

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

a njegovo rješenje je

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1) \approx 1.1752011936, \\ a_1 &= \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.1036383235. \end{aligned}$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

$$p_1(x) \approx 1.1036383235\, x + 1.1752011936.$$

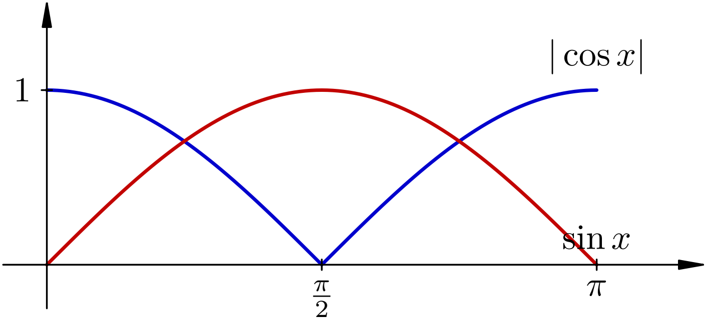
Složeniji primjer — početak

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 (crveno) i w (plavo).



Složeniji primjer — simetrija problema

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

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

Za fiksni n, treba minimizirati

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

Složeniji primjer — normalne jednadžbe

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

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

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

Složeniji primjer — integrali za matricu

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

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

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

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 — integrali za matricu

Nađimo rekurziju za integral s_k, kad je k paran i $k > 0$,

$$s_k = 2\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y\, dy = \left\{ \begin{matrix} u = y^k & du = ky^{k-1}\, dy \\ dv = \sin y\, dy & v = -\cos y \end{matrix} \right\}$$

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

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

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

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

Složeniji primjer — integrali za matricu

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

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

Onda je, redom:

$$\begin{aligned}
s_2 &= 4\frac{\pi}{2} - 2s_0 = 2\pi - 4, \\
s_4 &= 8\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 - 12s_2 = \pi^3 - 24\pi + 48, \\
s_6 &= 12\left(\frac{\pi}{2}\right)^5 - 30s_4 = \frac{3}{8}\pi^5 - 30\pi^3 + 720\pi - 1440.
\end{aligned}$$

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

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

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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 polinoma p_n onda ima oblik

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

Složeniji primjer — rješenje za $n = 1$

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, izlazi

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

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

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

U polinomu p_1 nema linearnog člana i još je $p_1 = p_0$.

Složeniji primjer — sustav za $n = 2$

Za $n = 2$, sustav je

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

Kad uvrstimo izračunate vrijednosti, sustav glasi

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

Uočite 4 nule u matrici sustava i još jednu na desnoj strani.

Složeniji primjer — rješenje za $n = 2, 3$

Rješenje tog sustava je

$$a_{20} \approx 0.9649095515, \quad a_{21} = 0, \quad a_{22} \approx -0.4072464465,$$

pa je aproksimacijski polinom

$$p_2(x) \approx -0.4072464465 \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^2 + 0.9649095515.$$

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

Uočite 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 — Hilbertova matrica

Primjer. Funkciju f aproksimiramo polinomom p_n, stupnja n, po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata, na intervalu $[0, 1]$, uz težinu $w(x) = 1$. U bazi potencija $\{1, x, x^2, \ldots\}$, matrica M 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

Iz posljednja dva primjera možemo zaključiti sljedeće:

- Ako za bazu biramo funkcije $1, x, x^2, \ldots$, matrica sustava može biti vrlo loše uvjetovana.
- U složenijem primjeru, podizanjem stupnja n polinoma mijenjaju se koeficijenti polinoma p_n.
  Na primjer, a_{n0} ovisi o stupnju n (jer je $a_{10} \neq a_{20}$).

Prethodna dva problema otklanjaju se (= potpuno nestaju!),

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

Ortogonalne funkcije

Neka je $\langle\ ,\ \rangle$ zadani skalarni produkt na nekom (unitarnom) prostoru funkcija, na nekoj domeni. U nastavku, taj

- skalarni produkt može biti neprekidan ili diskretan.

Za funkcije u i v kažemo da su ortogonalne ili okomite, ako je

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

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!

Ortogonalni sustav funkcija, nezavisnost

Definicija. Funkcije $u_0, \ldots, u_m$ tvore ortogonalni sustav funkcija, ako je $\|u_k\|_2 > 0$, za $k = 0, \ldots, m$, i bilo koje dvije funkcije su međusobno ortogonalne, tj. vrijedi

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

Generalizacijom Pitagorinog poučka, za takve funkcije vrijedi

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

Teorem. Ortogonalni sustav funkcija je linearno nezavisan.

Dokaz. Ako je lijeva strana jednaka nula, mora biti i desna. Zbog $\|u_k\|_2 > 0$, za $k = 0, \ldots, m$, to je moguće samo tako da je $\alpha_k = 0$, za $k = 0, \ldots, m$.

Ortogonalni sustav funkcija i najmanji kvadrati

Linearni sustav za linearni 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 φ_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

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

Uočite da koeficijenti a_j (u aproksimaciji φ) više ne ovise o m!

Variranje m — niz sve boljih aproksimacija

Neka je Φ_m prostor razapet ortogonalnim sustavom funkcija $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$, uz neki zadani skalarni produkt $\langle\ ,\ \rangle$.

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

U početnom zapisu (za MNK), $\varphi^{[m]}$ 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 $\|\varphi_m\|_2 > 0$.

Ortogonalna projekcija je uvijek rješenje

Teorem. Greška aproksimacije $f - \varphi^{[m]}$ je okomita na sve linearne kombinacije funkcija $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$, tj. na prostor Φ_m.

Dokaz. Dovoljno je pokazati da je greška okomita na svaki φ_i,

$$\begin{aligned}
\langle f - \varphi^{[m]}, \varphi_i \rangle &= \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \varphi_i \right\rangle = \langle f - a_i \varphi_i, \varphi_i \rangle \\
&= \langle f, \varphi_i \rangle - a_i \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle \\
&= \langle f, \varphi_i \rangle - \frac{\langle \varphi_i, f \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle} \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Dobiveni rezultat ima jednostavno geometrijsko značenje.

- Aproksimacija $\varphi^{[m]}$ je ortogonalna projekcija funkcije f na prostor Φ_m, razapet funkcijama $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$.

Opći dokaz = normalne jednadžbe

Mala digresija. Prethodni teorem “Projekcija je rješenje” vrijedi uvijek, a ne samo za ortogonalne sustave funkcija.

Aproksimaciju $\varphi^{[m]}$ možemo prikazati u bilo kojoj drugoj bazi $\widehat{\varphi}_0, \ldots, \widehat{\varphi}_m$ prostora Φ_m.

- Aproksimacija $\varphi^{[m]}$ je ista, samo je zapis drugačiji.

Dokaz onda ide izravno iz normalnih jednadžbi za koeficijente:

$$\langle f - \varphi^{[m]}, \widehat{\varphi}_i \rangle = \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \widehat{\varphi}_j, \widehat{\varphi}_i \right\rangle = \langle f, \widehat{\varphi}_i \rangle - \sum_{j=0}^{m} a_j \langle \widehat{\varphi}_j, \widehat{\varphi}_i \rangle$$

$$= \{\ i\text{-ta normalna jednadžba}\ \} = 0.$$

Upravo zato i naziv “normalne” jednadžbe. ∎

Projekcija je rješenje — norma funkcije i greške

Aproksimacija $\varphi^{[m]}$ funkcije f, naravno, pripada prostoru Φ_m. Iz prethodnog teorema onda slijedi da je greška okomita i na funkciju $\varphi^{[m]}$

$$\langle f - \varphi^{[m]}, \varphi^{[m]} \rangle = 0.$$

Prema Pitagorinom poučku, onda možemo pisati

$$\begin{aligned}
\|f\|_2^2 &= \|\,(f - \varphi^{[m]}) + \varphi^{[m]}\|_2^2 = \|f - \varphi^{[m]}\|_2^2 + \|\varphi^{[m]}\|_2^2 \\
&= \|f - \varphi^{[m]}\|_2^2 + \left\| \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j \right\|_2^2 \\
&= \|f - \varphi^{[m]}\|_2^2 + \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2.
\end{aligned}$$

Norma greške rješenja, kad m raste

Iz te relacije slijedi da se norma greške aproksimacije $\varphi^{[m]}$ može zapisati kao

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

Neka je zadan niz uklopljenih prostora Φ_m, za $m = 0, 1, \ldots (?)$, tako da je

$$\Phi_0 \subset \Phi_1 \subset \Phi_2 \subset \cdots .$$

To odgovara povećanju m (dok ide). Iz prethodne relacije je očito da norme grešaka monotono padaju

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

Greška rješenja — konvergencija?

Ako je prostora Φ_m beskonačno mnogo ($m \in \mathbb{N}$), onda je

- niz normi grešaka monotono padajući i odozdo ograničen s 0, pa mora konvergirati.

Pitanje: Mora li norma greške aproksimacije konvergirati u 0?

Odgovor je ne — ovisi o f i o prostorima Φ_m!

Iz oblika greške (prošla stranica), nužni i dovoljni uvjet da bi norma greške konvergirala u nulu je (Besselova jednakost)

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

To je tzv. konvergencija po normi. Ni tada, ne mora vrijediti obična ili uniformna konvergencija (v. Fourierov razvoj).

Neortogonalni sustavi — 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 φ_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 φ_j ortogonalan na sve prethodne φ_k, $k = 0, \ldots, j-1$.

Ortogonalizacija funkcija

Početni dio jednog i drugog sustava razapinje isti prostor

$$\Phi_j = \mathcal{L}(\varphi_0, \ldots, \varphi_j) = \mathcal{L}(\widehat{\varphi}_0, \ldots, \widehat{\varphi}_j), \quad j = 0, 1, \ldots \ .$$

Najpoznatija ortogonalizacija su tzv. ortogonalni polinomi, obzirom na zadani skalarni produkt (koji može biti neprekidan ili diskretan).

Iz sustava potencija $\widehat{\varphi}_j(x) = x^j$, ortogonalizacijom dobivamo

- ortogonalne polinome $\varphi_j = p_j$.

Zbog $\Phi_j = \mathcal{P}_j$, stupanj polinoma p_j je baš jednak j.

Više o ortogonalnim polinomima — nakon primjera.

Primjer ortogonalizacije — početak

Primjer. Nađite ortogonalnu bazu za prostor Φ_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

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

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 — funkcija φ_1

Računamo φ_1

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

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

pa je

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

Odatle dobivamo

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

Primjer ortogonalizacije — funkcija φ_2

Za ortogonalni polinom stupnja 2 treba izračunati a_{20} i a_{21}

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

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

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

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

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

Uočite da je

- $\varphi_1(x) = \widehat{\varphi}_1(x) = x$ (zbog parnosti težinske funkcije), ali je
- $\varphi_2(x) = x^2 - \frac{1}{3} \neq \widehat{\varphi}_2(x) = x^2$.

Primjer. Korištenjem ortogonalnih polinoma iz prethodnog primjera, 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 — ortog. najmanji kvadrati

Rješenje problema najmanjih kvadrata su funkcije

$$\varphi^{[m]} = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \quad m = 0, 1, \quad \text{uz} \quad a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}, \quad j = 0, 1.$$

Za nalaženje 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 — rješenja

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

$$\varphi^{(1)}(x) = \varphi^{(0)}(x) + 3e^{-1} \cdot \varphi_1(x) = \mathrm{sh}(1) + 3e^{-1} \cdot x.$$

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

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 $[0, 2\pi]$, obzirom na integralni skalarni produkt s težinskom funkcijom $w(x) = 1$.

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

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

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

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

Drugim riječima, vrijedi ortogonalnost sinusa

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

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Na sličan način, možemo pokazati da je

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

kao i

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

Potrebne formule za pretvaranje produkta u zbroj su

$$\cos kx \cdot \cos \ell x = \big(\cos(k+\ell)x + \cos(k-\ell)x\big)/2,$$
$$\cos kx \cdot \sin \ell x = \big(\sin(k+\ell)x - \sin(k-\ell)x\big)/2.$$

Fourierov red i koeficijenti

Periodičku funkciju f, osnovnog perioda duljine 2π, možemo aproksimirati (u smislu najmanjih kvadrata) redom oblika

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

Izraze za koeficijente dobivamo množenjem odgovarajućim trigonometrijskim funkcijama i integriranjem,

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

Prethodni red poznat je pod imenom Fourierov red (ili razvoj) funkcije f, 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).