Numerička matematika
7. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

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

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
  - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
  - Normalne jednadžbe.
  - Linearizacija.
  - Primjer za najmanje kvadrate — etil.
  - Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata.

Informacije

Trenutno nema bitnih informacija.

Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija 2-norme vektora pogreške

Neka je funkcija f

- zadana na diskretnom skupu točaka (čvorova) $x_0, \ldots, x_n$.

Uzmimo da točaka $x_0, \ldots, x_n$ ima mnogo više nego nepoznatih parametara $a_0, \ldots, a_m$ aproksimacijske funkcije φ, tj. $n \gg m$.

U diskretnoj metodi najmanjih kvadrata, aproksimacijska funkcija

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, \ldots, a_m)$$

određuje se tako da 2-norma vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije bude najmanja moguća, tj. minimizira se

$$S = \sum_{k=0}^{n} \big(f(x_k) - \varphi(x_k; a_0, \ldots, a_m)\big)^2 \to \min .$$

Sustav normalnih jednadžbi

Ovdje se S gleda kao funkcija nepoznatih parametara

$$S = S(a_0, \ldots, a_m) : \mathbb{R}^{m+1} \to \mathbb{R}.$$

Uočimo da uvijek vrijedi $S \geq 0$, bez obzira na to kakvi su parametri, jer se radi o zbroju kvadrata.

- Funkcija S se minimizira kao funkcija više varijabli $a_0, \ldots, a_m$.
- Pretpostavljamo da je S dovoljno glatka funkcija, kao funkcija parametara a_k, pa je nužni uvjet ekstrema

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \qquad k = 0, \ldots, m.$$

Ovaj pristup vodi na tzv. sustav normalnih jednadžbi.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

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

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

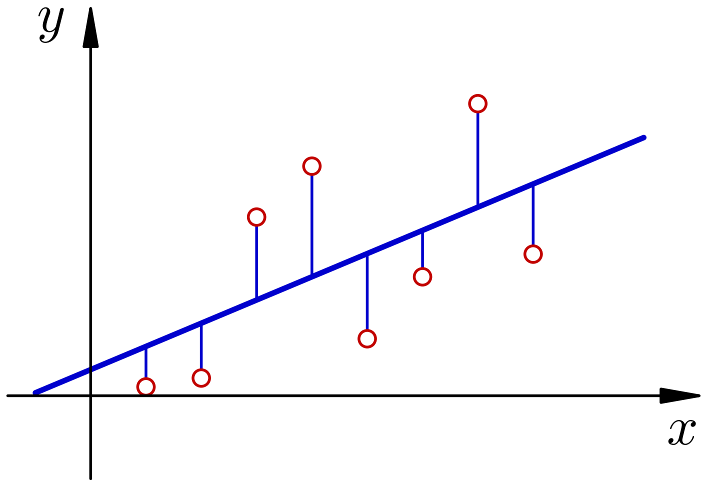
Suma kvadrata grešaka ove aproksimacije u čvorovima je (to je izraz kojeg minimiziramo)

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

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

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika zadanih točaka u ravnini i pravca koji ih aproksimira:



Uočiti da se greška u svakoj točki "mjeri" u smjeru osi y, pa je

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

Može se gledati i "okomita" udaljenost do pravca $\to$ problem "potpunih" najmanjih kvadrata (engl. "total least squares").

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 su:

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

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

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

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

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

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Uvedemo li standardne skraćene oznake

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

onda linearni sustav možemo napisati kao

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$
$$s_1 a_0 + s_2 a_1 = t_1.$$

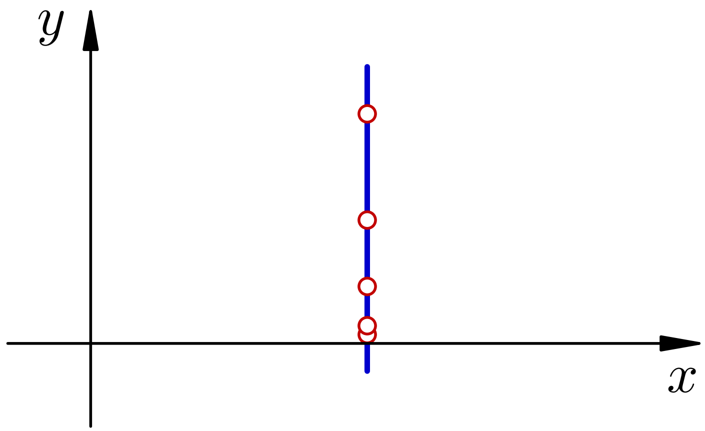
Matrica ovog sustava je regularna, uz uvjet da imamo barem dvije različite točke x_k. To je ekvivalentno (Gramova matrica) linearnoj nezavisnosti vektora

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

U tom slučaju, postoji jedinstveno rješenje sustava.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

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



Ako imamo više različitih podataka u jednoj jedinoj točki x_0,

- aproksimacijski pravac (očito) postoji i jedinstven je,
- ali je okomit na x-os (jednadžba je $x = x_0$),
- pa njegova jednadžba nema oblik $y = a_0 + a_1 x$.

Minimalnost rješenja?

Je li dobiveno rješenje zaista minimum?

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

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

- S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore, u varijablama a_0, a_1, tj. nad (a_0, a_1)-ravninom,
- pa je očito da takav paraboloid ima minimum.

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

Najmanji kvadrati za polinome

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m.$$

Međutim, tu postoji opasnost — za malo veće m ($m \approx 10$)

- dobiveni sustav je (skoro sigurno) vrlo loše uvjetovan,
- pa dobiveni rezultati mogu biti jako pogrešni.

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

Ako se koriste aproksimacije polinomima viših stupnjeva,

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

Najmanji kvadrati za opće linearne funkcije

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

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

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

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

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

Rješenje. Ide sasvim analogno (pogledati u skripti).

Što s nelinearnim funkcijama?

Što ako φ nelinearno ovisi o parametrima?

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

Postoji i drugi pristup.

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

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

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

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

Uočite da φ nelinearno ovisi o parametru a_1.

Direktni pristup problemu vodi na minimizaciju

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

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Parcijalnim deriviranjem po varijablama a_0 i a_1 dobivamo

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

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

To je nelinearan sustav jednadžbi, kojeg ne znamo riješiti!

S druge strane, ako logaritmiramo relaciju

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

dobivamo

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

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Moramo logaritmirati još i zadane vrijednosti funkcije f u točkama x_k. Uz supstitucije

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

i

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

gdje je

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

dobivamo linearni problem najmanjih kvadrata

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

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Grafički, to je pravac u tzv. lin–log skali. Iz rješenja b_0 i b_1, lako izlaze a_0 i a_1

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

Napomene uz linearizaciju:

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

Tipične linearizacije — opća potencija

Kratki pregled nekih funkcija koje se često koriste i njihovih standardnih linearizacija u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

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

linearizira se logaritmiranjem (u nekoj izabranoj bazi)

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

$$h_k = \log f_k, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Uvedimo oznake

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

Tipične linearizacije — opća potencija

Linearizirani problem najmanjih kvadrata glasi

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

Grafički, to odgovara pravcu u tzv. log–log skali.

U ovom slučaju, da bismo mogli provesti linearizaciju,

- mora biti i $x_k > 0$ i $f_k > 0$.

Tipične linearizacije — 1 / linearna funkcija

(b) Funkcija

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

linearizira se na sljedeći način

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

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

(c) Funkciju

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

možemo linearizirati na više načina.

1. način:

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

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

2. način:

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

$$h_k = \frac{x_k}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Tipične linearizacije — još jedan primjer

(d) Funkcija

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

linearizira se stavljanjem

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

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Primjer

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

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

x [°]	0	45	90	135	180
r [10^6 km]	147	148	150	151	152

,

u kojima je

- r udaljenost od Zemlje do Sunca (u 10^6 km),
- a x je kut između spojnice Zemlja–Sunce i glavne osi elipse (u stupnjevima). [radijani $= \pi \cdot$ stupnjevi$/180$]!

Primjer (nastavak)

Dr. Zurić, naravno, zna da se elipsa može opisati jednadžbom

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

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

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

Rješenje. Pomnožimo jednadžbu s nazivnikom funkcije, pa dobivamo

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

odnosno,

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

Primjer (nastavak)

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

$$au + b = v,$$

gdje je

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

Zatim se primijeni linearna metoda najmanjih kvadrata za pravac, s nepoznatim koeficijentima a i b.

Prema tome, treba minimizirati

$$S = \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b)^2 \to \min.$$

Primjer (nastavak)

Deriviranjem izlazi

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

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

Nakon sređivanja, uz $n + 1 = 5$, dobivamo linearni sustav

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

Primjer (nastavak)

Kad se radi "na ruke", traženi podaci se obično slože u tablicu

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

Brojevi na dnu tablice su poznati elementi linearnog sustava.

Primjer (nastavak)

Linearni sustav za nepoznate koeficijente je

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

Rješenje tog sustava je

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

pa je

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

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

- ε je ekscentricitet Zemljine orbite,
- ρ je "srednja" udaljenost od Zemlje do Sunca.

Izbor aproksimacijske funkcije

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

Kad nađemo aproksimaciju, moramo pogledati graf pogreške.

- Ako on "jednoliko" oscilira oko nule, i
- te oscilacije izgledaju kao "slučajne", a ne "sistematske",

onda je aproksimacijska funkcija dobro odabrana.

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

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

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

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

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

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

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

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

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

Prvih nekoliko podataka izgleda ovako:

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

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

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

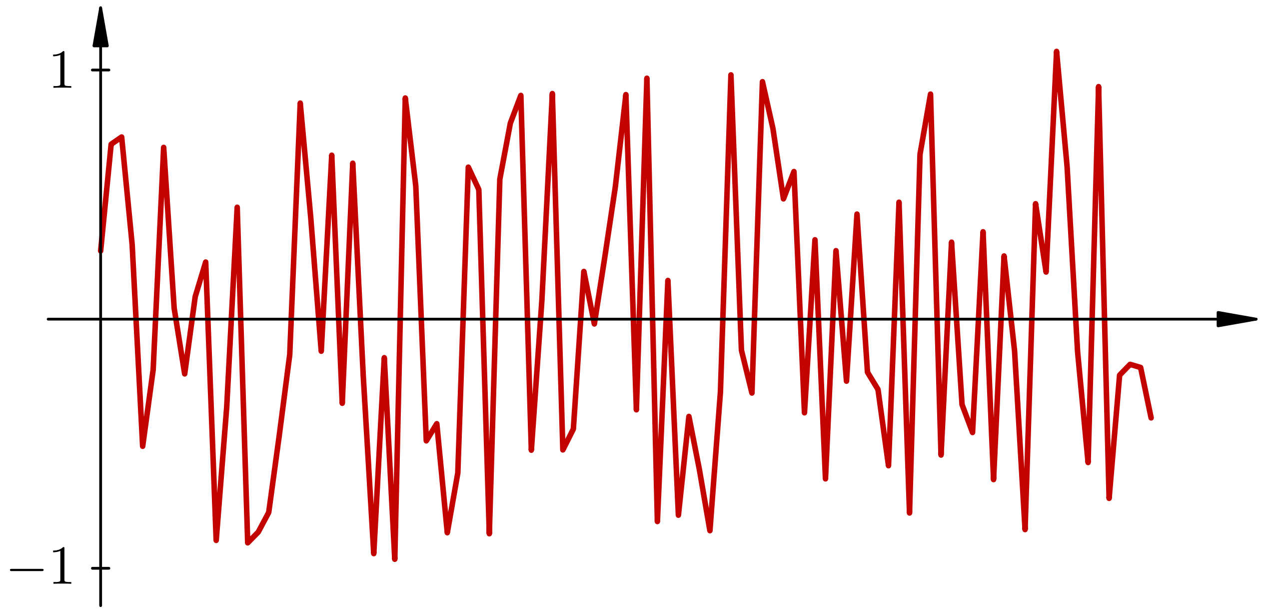
Pogledajmo što su aproksimacije $\varphi(x_i)$ za vrijednosti f_i u prvih nekoliko podataka:

x_i	$y(x_i)$	$\varphi(x_i)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.19985787529969 0
3	15	15.19583423139926 9
4	19	19.19181058749884 7
5	23	23.18778694359842 5

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

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



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

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

Demo primjeri

GnuPlot demo za prethodni problem.

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

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se

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

Primjer pokazuje način izbora aproksimacijske funkcije i

- različita rješenja, ako problem lineariziramo, ili ako ga ne lineariziramo
  (rješenja nelinearnih problema = Nelder–Mead metoda).
- `Num_Pas\Mls\GnuPlot\Etil.plt`

Primjer izbora funkcije — etil

Demo primjer — viskoznost "votke"

Promatramo kako ovisi

- viskoznost 40% etilnog alkohola o temperaturi.

Treba naći:

- "zgodan" oblik aproksimacijske funkcije i
- parametre za dobru aproksimaciju.

Za aproksimaciju koristimo metodu najmanjih kvadrata.

Ovaj primjer pokazuje:

- način izbora aproksimacijske funkcije,
- i različita rješenja — koja dobivamo kad problem linealiziramo, odnosno, kad ga ne linealiziramo.

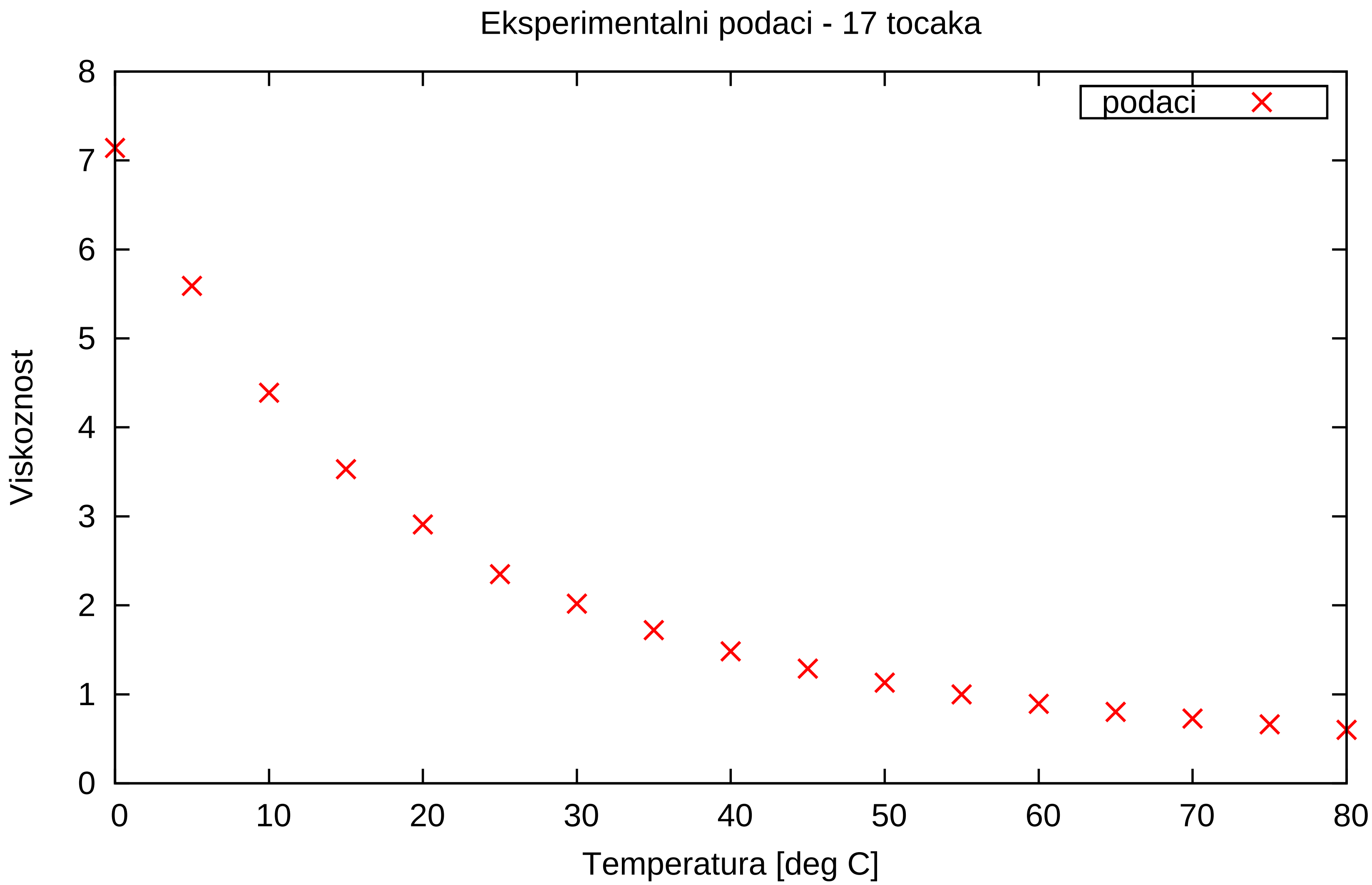
Eksperimentalno izmjereni podaci — tablica

Eksperimentalno su izmjereni sljedeći podaci (17 točaka):

Temperatura	Viskoznost
0	7.14
5	5.59
10	4.39
15	3.53
20	2.91
25	2.35
30	2.02
35	1.72
40	1.482

Temperatura	Viskoznost
45	1.289
50	1.132
55	0.998
60	0.893
65	0.802
70	0.727
75	0.663
80	0.601

Eksperimentalno izmjereni podaci — slika



Prva aproksimacija — oblik i parametri

Izmjereni podaci imaju

- "eksponencijalno" padajući oblik, a ne polinomni!

Nelinearni model:

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

ima parametre

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

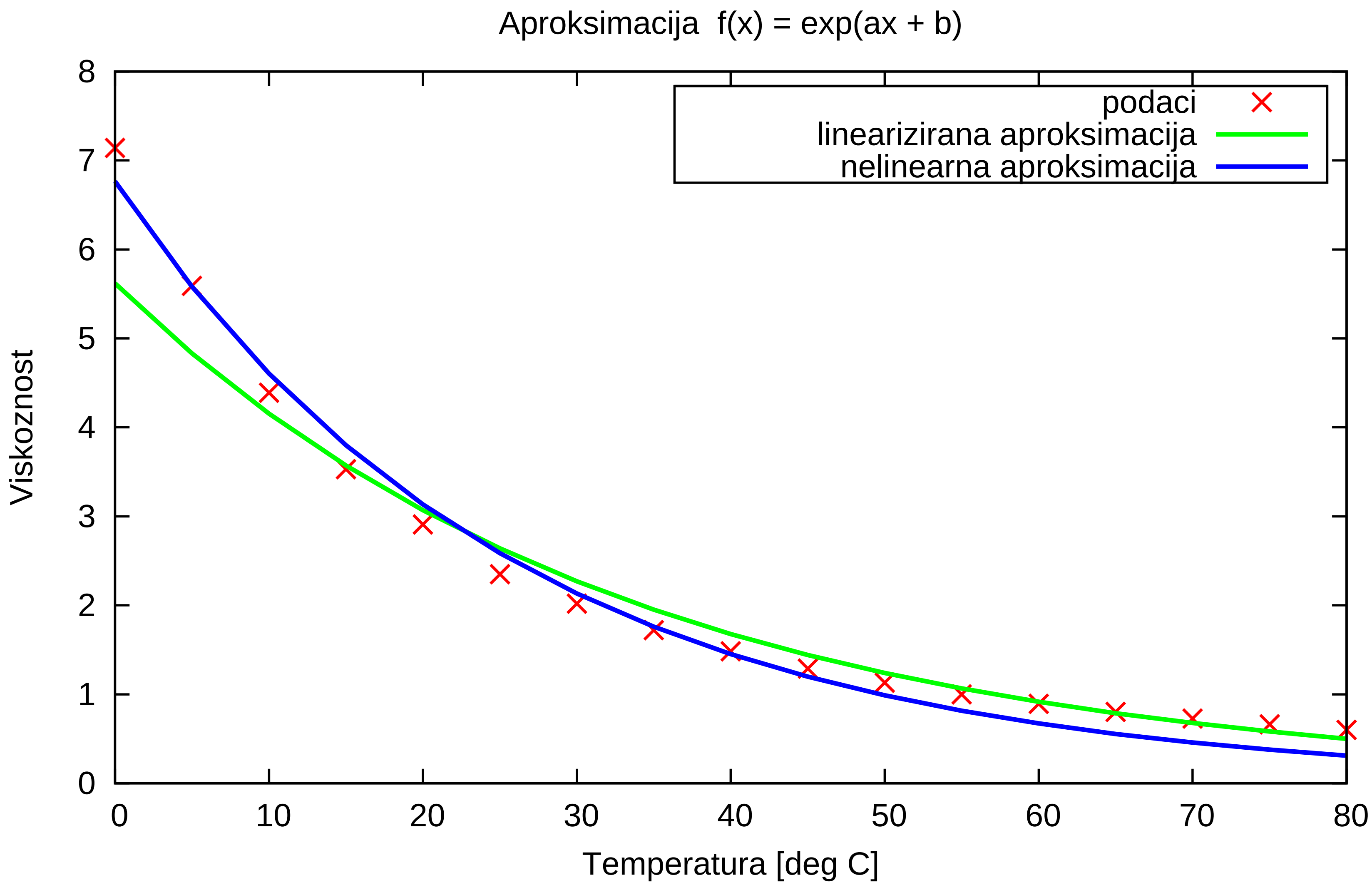
Linearizirani model:

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

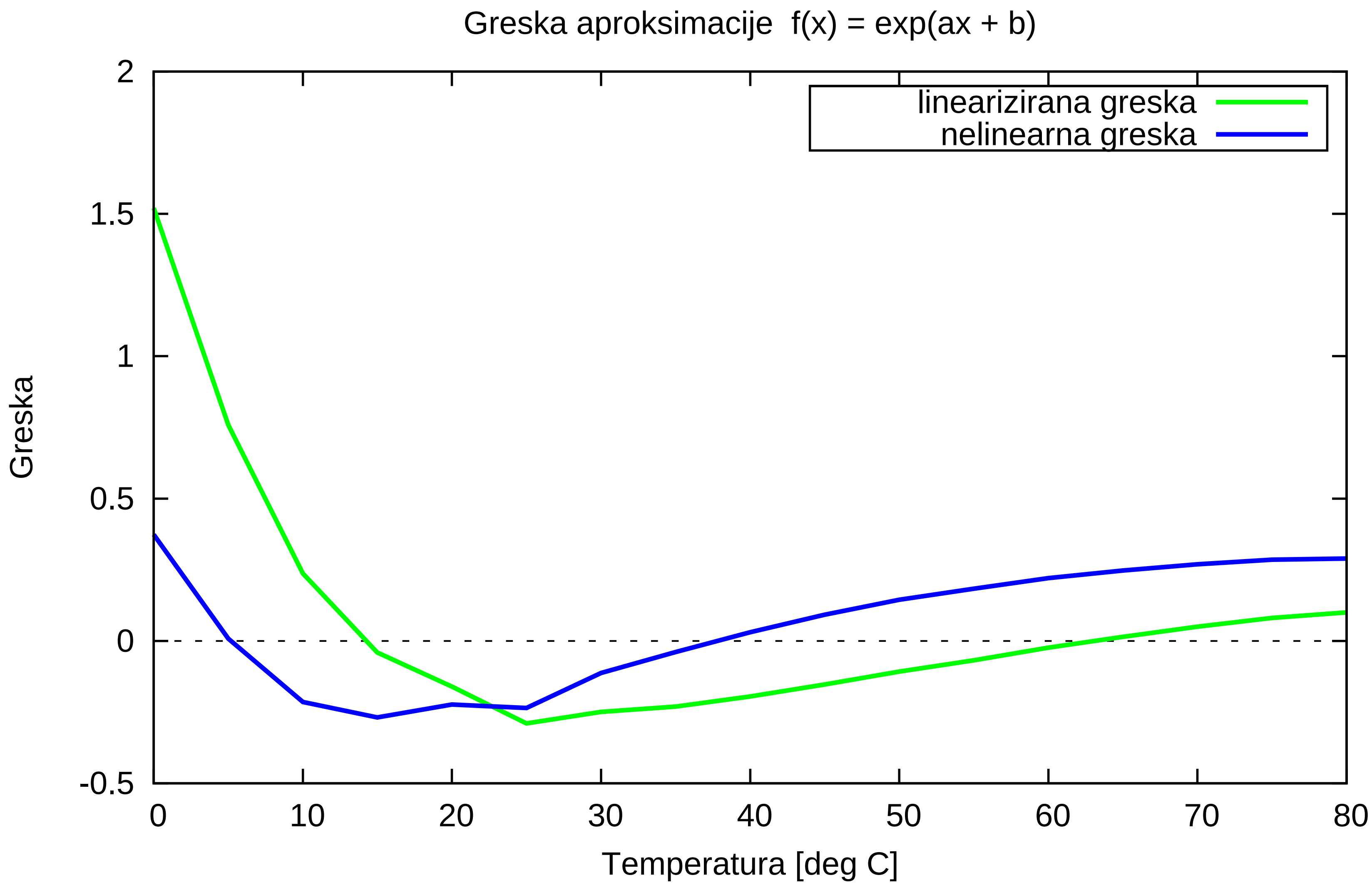
ima parametre

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

Prva aproksimacija



Greške prve aproksimacije



Druga aproksimacija — oblik i parametri

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

- Ponašanje upućuje na “popravak” kvadratnim članom.

Nelinearni model:

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

ima parametre

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

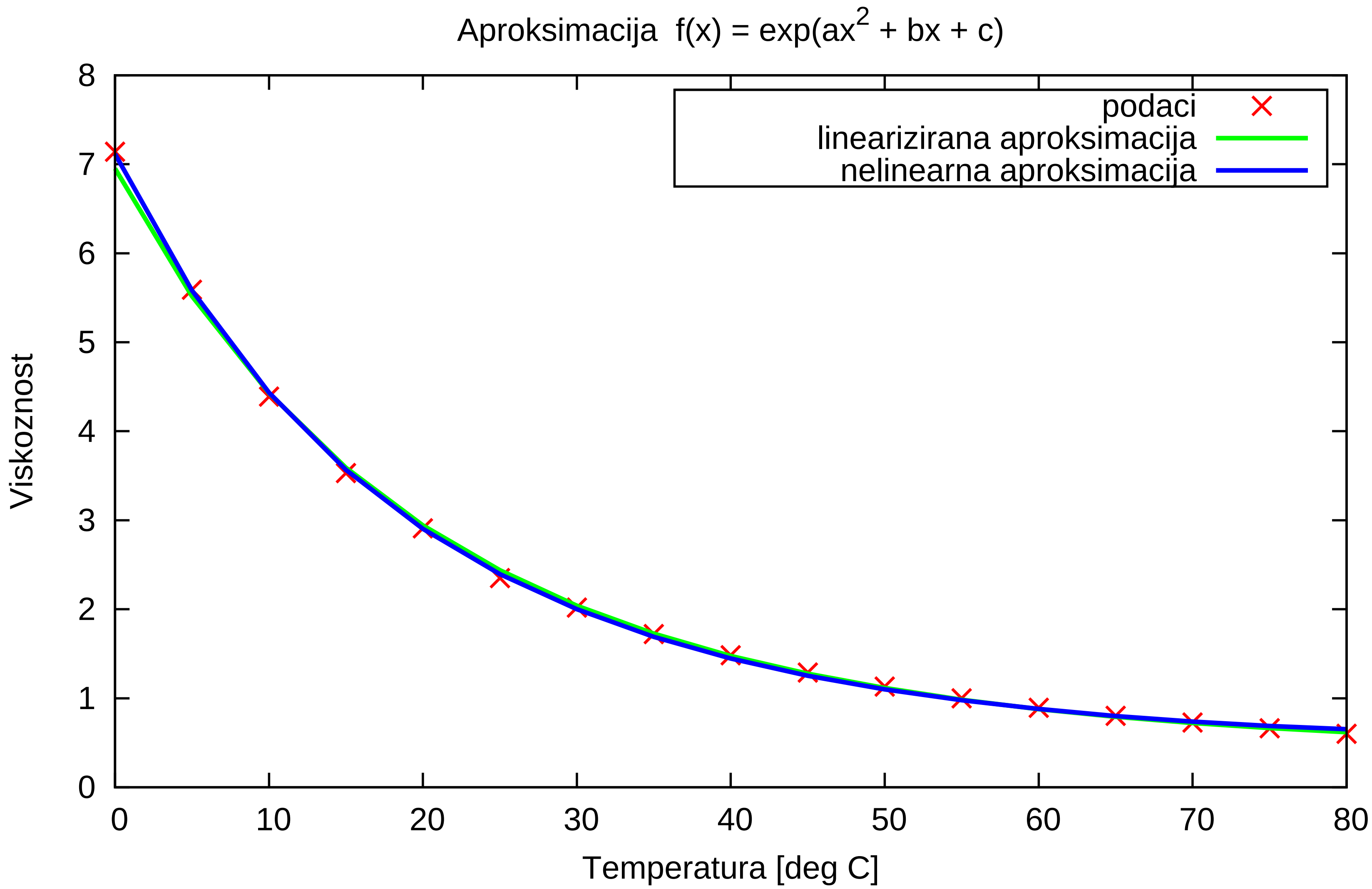
Linearizirani model:

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

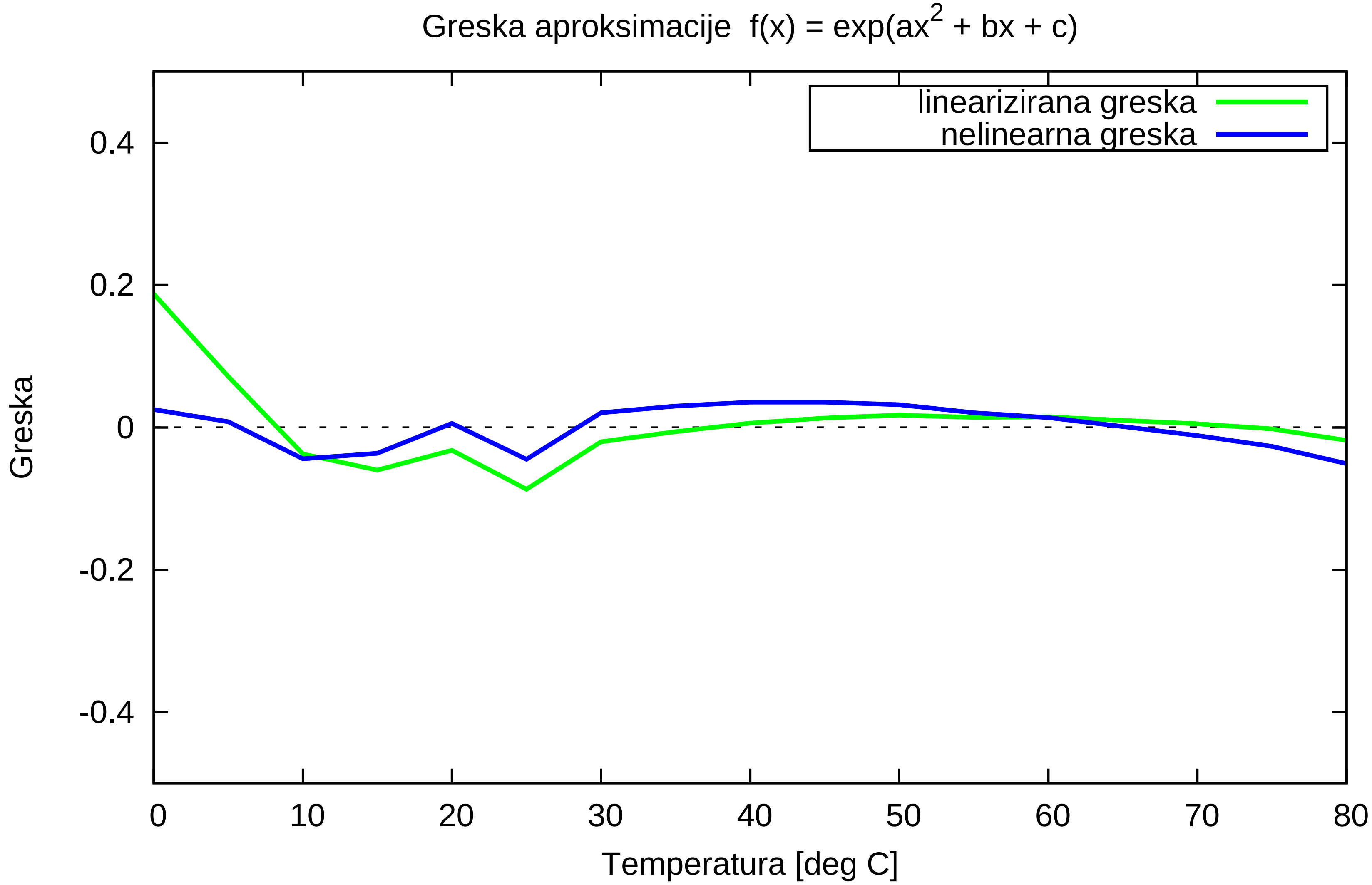
ima parametre

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

Druga aproksimacija



Greške druge aproksimacije



Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata

Matrična formulacija

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

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

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

pišemo u uobičajenoj formi:

- standardno su nepoznanice $x_1, \ldots, x_m$,
- a ne $a_0, \ldots, a_m$.

Matrična formulacija — oznake

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

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

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

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

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

Primijetite da to nije uvijek moguće, jer je podataka, uobičajeno, znatno više nego parametara $(n \gg m)$.

Matrična formulacija — preodređeni sustav

Uz oznake

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

prethodne jednadžbe možemo napisati u matričnom obliku

$$Ax = b.$$

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

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

- preodređen sustav linearnih jednadžbi.

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

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

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

Matrična formulacija — min norme reziduala

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

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

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

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

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

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

Komentar

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

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

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

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

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

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

Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

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

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

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

koju obično nazivamo sustav normalnih jednadžbi i pišemo u obliku

$$A^TAx = A^Tb.$$

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

A^TA je Gramova matrica skalarnih produkata stupaca od A.

Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

Pretpostavimo suprotno — da za rezidual r vrijedi

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

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

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

pa je

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

Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

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

što je kontradikcija s pretpostavkom da x minimizira rezidual.

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

Obrat. Pretpostavimo da x zadovoljava normalne jednadžbe

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

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

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

Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

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

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

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

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

Napomena. Trenutno, još uvijek ne znamo je li $\mathcal{S} \neq \emptyset$.

Struktura skupa svih rješenja

Iz zadnje relacije

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

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

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

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

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

Egzistencija rješenja — uvijek postoji!

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

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

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

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

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

- Sustav normalnih jednadžbi uvijek ima rješenje, jer je

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

(v. teorem Kronecker–Capelli). ■

Jedinstvenost rješenja

Dobivamo čak i jače — zaključak o jedinstvenosti rješenja.

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

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

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

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

Jedinstvenost rješenja

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

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

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

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

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

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

Karakterizacija jedinstvenog rješenja

Zadnja tvrdnja — preko pozitivne definitnosti matrice $A^T A$, odgovara činjenici da sustav normalnih jednadžbi

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

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

U tom slučaju, jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata je

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

a pripadni rezidual najmanje 2–norme je

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

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Desna strana b može se napisati preko reziduala kao

$$b = Ax + r,$$

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

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

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

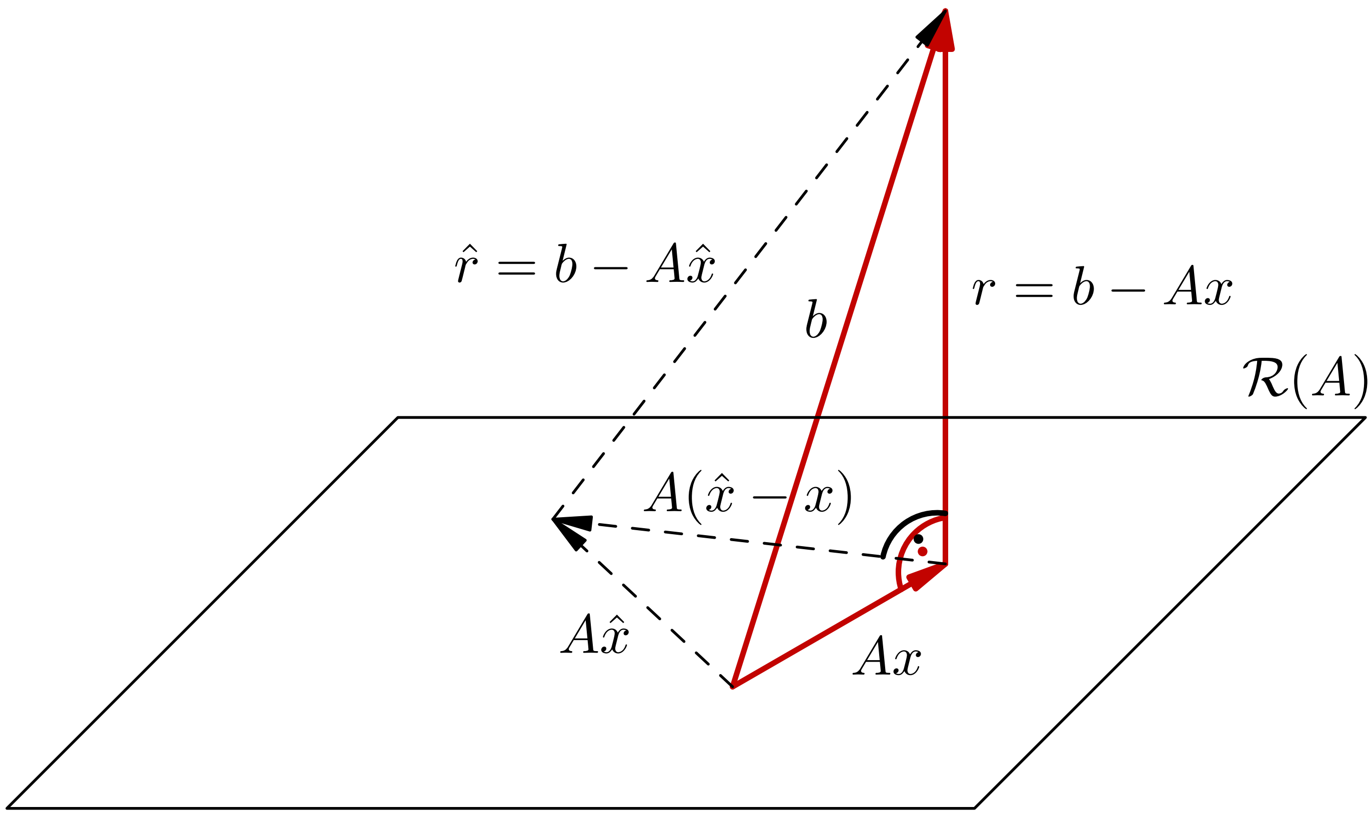
$$\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T) = \mathbb{R}^n,$$

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

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Rješenje problema najmanjih kvadrata dobivamo

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



Struktura skupa rješenja i linearni sustav

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

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

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

- sva rješenja $x \in \mathcal{S}$ problema najmanjih kvadrata su,
- upravo, sva rješenja linearnog sustava $Ax = \mathcal{P}(b)$.

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

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

Analogno, jedinstvenost rješenja x svodi se na

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

Numeričke metode i jedinstvenost rješenja

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

- objekt kojeg računamo jedinstven.

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

- matrica A ima puni stupčani rang.

Sjetite se uvodnih komentara o izboru "baznih" funkcija φ_j.

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

- u kojima imamo garantiranu jedinstvenost rješenja.

Prije toga — završni komentar o jedinstvenosti.

Osiguranje jedinstvenosti u općem problemu

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

- rješenje problema najmanjih kvadrata nije jedinstveno.

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

- rješenje $x \in \mathcal{S}$ koje ima najmanju 2-normu, tj. dodatni uvjet je $\|x\|_2 \to \min$.

Geometrijska interpretacija:

- To rješenje je ortogonalna projekcija ishodišta, odnosno, nul-vektora na linearnu mnogostrukost $\mathcal{S} = x_0 + \mathcal{N}(A)$ (očito je jedinstveno).

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

Jedinstveno rješenje — ponavljanje

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

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

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

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

dobivamo jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata

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

Pripadni rezidual najmanje 2–norme je

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

Računanje rješenja problema najmanjih kvadrata

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

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

Ovaj pozitivno definitni sustav normalnih jednadžbi možemo riješiti tako da iskoristimo faktorizaciju Choleskog za $A^T A$.

Prednosti/nedostaci ove metode = "množenje + Cholesky":

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

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

Korištenje QR faktorizacije

Opet, neka A ima puni stupčani rang. Promatramo problem minimizacije

$$\|Ax - b\|_2 \to \min\,.$$

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

Dakle, rješenje problema minimizacije možemo zapisati kao

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

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

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