

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 matricne 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.

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. $\text{rang}(G) = n \leq m$. Rastav matrice G tako da je

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

gdje je

- Q ortogonalna matrica reda m , a
- R_0 gornja trokutasta matrica reda n , s pozitivnim dijagonalnim elementima,

zove se **QR faktorizacija** matrice G .

Definicija QR faktorizacije

Ako postoji, prethodna faktorizacija može se 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

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

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

Napomena. Ako je $m > n$, onda Q_0^\perp možemo izabrati na više načina \implies “**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 $\text{rang}(G) = n$. 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-Schmidto**vog postupka.

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

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

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

Onda definiramo novi vektor q'_j i normiramo ga

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

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

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

Stavljanjem

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

dobivamo $m \times n$ **ortogonalnu** matricu (ortonormirani stupci).

Uz oznaku za skalarne produkte i norme iz prethodne formule

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

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

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

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

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije

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

- vektore g_j ortogonalizira obzirom na prethodne **originalne** vektore g_i .
- Zbog toga je **nestabilan** kad su stupci od G skoro **linearno zavisni**, 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_iT * g_j;  
        /* kod MGS-a je */  
        r_ij = q_iT * q'_j;  
        q'_j = q'_j - r_ij * q_i;  
    };  
};
```

Gram–Schmidtov algoritam (nastavak)

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

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

- g_j linearna kombinacija **prethodnih** stupaca matrice G (linearna zavisnost 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 $G = Q_0 R_0$. 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

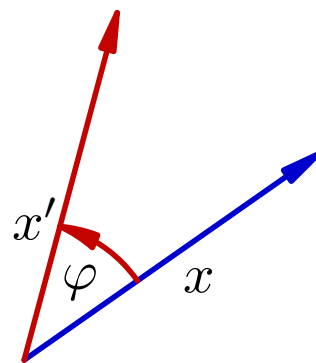
Matrica oblika

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

zove se **Givensova rotacija** u ravnini.

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

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



Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Matrica $R(i, j, \varphi)$ je **ortogonalna**. Za zadani vektor $x \in \mathbb{R}^m$,

● **poništavamo** njegovu j -tu komponentu x_j , korištenjem rotacije $R(i, j, \varphi)$.

Množenjem matrice $R(i, j, \varphi)$ **slijeva** na x mijenjamo

● **samo** i -tu i j -tu komponentu u x ,

● pa poništavanje možemo gledati samo u (i, j) ravnini.

Dobiveni sustav jednažbi je

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

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

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 **ponišavanje**

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

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

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Predznake za $\sin \varphi$ i $\cos \varphi$ biramo tako da x'_i bude pozitivan.

Ako stavimo

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

iz prve jednadžbe dobivamo

$$\begin{aligned} x'_i &= \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_i + \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_j = \frac{x_i^2 + x_j^2}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \\ &= \sqrt{x_i^2 + x_j^2} > 0. \end{aligned}$$

Element x'_i je norma i -te i j -te komponente polaznog vektora. Ove formule vrijede i kad je $x_j = 0$ (tada je $\varphi = 0$ ili $\varphi = \pi$).

Sustavno poništavanje

Sustavnim **poništvanjem** 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}, \dots, g_{m1} .
- Ponovimo to isto za **drugi, treći** i svaki daljnji stupac, od **dijagonalnog mjesta** nadolje.
- Time nećemo “**pokvariti**” već sređene **nule** u prethodnim stupcima.

Sustavno poništavanje — primjer

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

1. stupac:

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

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

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

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

Sustavno poništavanje — primjer (nastavak)

2. stupac:

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

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

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

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

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

Sustavno poništavanje — primjer (kraj)

3. stupac:

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

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

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

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

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

Poredak poništavanja i ocjena greške

Drugi rasporedi poništavanja.

- Za **ocjenu greške** zaokruživanja postoji i **bolji** raspored poništavanja elemenata.
- Gore opisanim algoritmom, pri sređivanju **prvog** stupca, **prvi redak** se mijenja $m - 1$ puta, a svi ostali samo **jednom**.
- **Poboljšanje** dobivamo “**ujednačavanjem**”, tako da se svaki redak transformira **podjednak** broj puta.
- To se postiže korištenjem niza **nezavisnih** rotacija, koje **ne** zahvaćaju **iste** retke.
- Takav raspored primjene rotacija, usput, još dozvoljava i **paralelizaciju** algoritma.

Nezavisne rotacije — paralelno poništavanje

Grafički, za jednu matricu tipa 4×3 to izgleda ovako.

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

$$\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc} x & x & x \\ 0 & x & x \\ x & x & x \\ 0 & x & x \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \end{array} \right] \\ \rightarrow \left[\begin{array}{ccc} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

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.,

$$\begin{aligned} Q &= \left(R(n, m, \varphi_{nm}) \cdots R(1, 2, \varphi_{12}) I_m \right)^T \\ &= I_m R(1, 2, -\varphi_{12}) \cdots R(n, m, -\varphi_{nm}). \end{aligned}$$

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

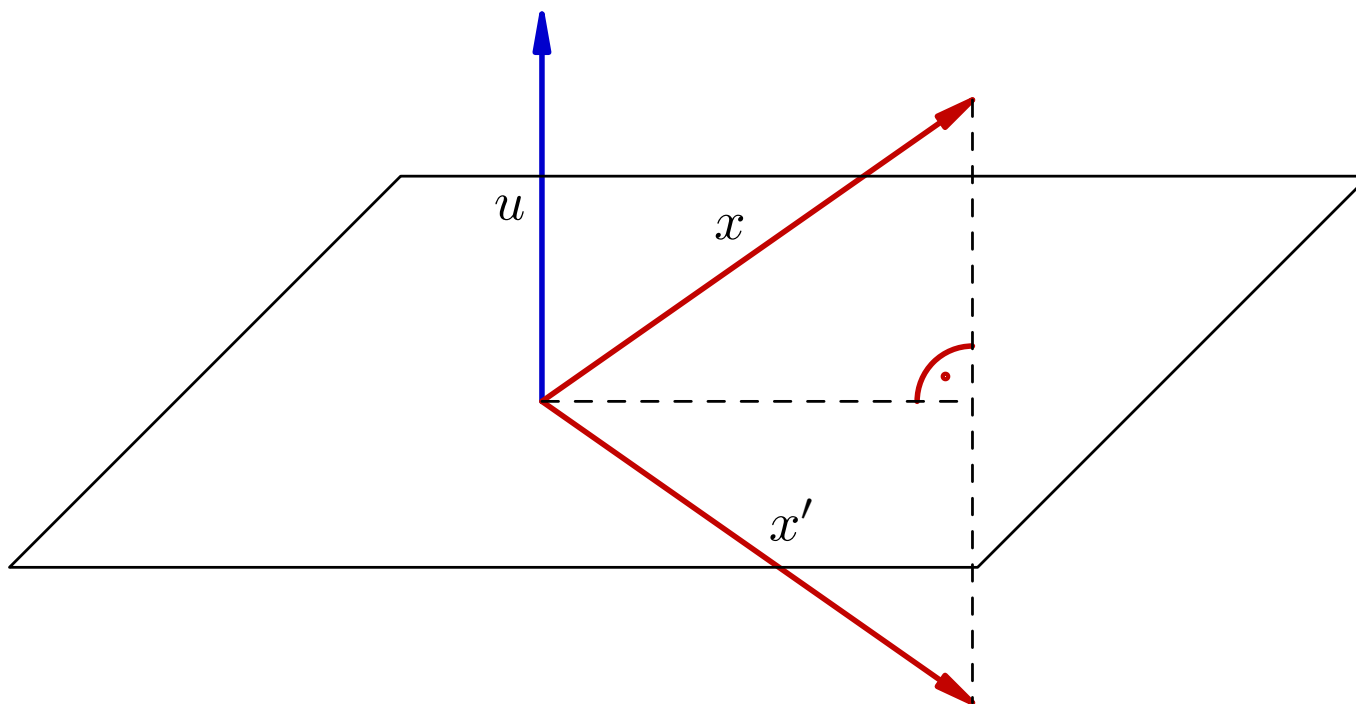
- **simetrična**,
- i **ortogonalna**, jer je

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

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 $\tilde{u} = x \mp \|x\|_2 e_1$. Konačno, konstantu α nalazimo normiranjem vektora \tilde{u} na normu 1.

Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

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

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

Uočite da **oba** izbora predznaka (\mp) u definiciji \tilde{u} **uvijek** daju

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

Ako je $x = 0$, onda je $\tilde{u} = 0$, 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 \tilde{u} daje $\tilde{u} \neq 0$. Ako **drugi** izbor daje $\tilde{u} = 0$, 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 $\tilde{u} = 0$. Dobiveni $H(u)$ je i tada korektan!

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

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

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

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

To znači da je $c = -\text{sign}(x_1)$, 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 $\tilde{u} \mapsto u$ se, **formalno**, može **izbjeci**, ako definiramo

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

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 :

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

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

Ako koristimo $H(\tilde{u})$, onda $\tilde{u}^T z$ **stalno** treba dijeliti s $\|\tilde{u}\|_2^2$.

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 $k = 1, \dots, n$,

- 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 $k = 1, \dots, n$.

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

Računanje QR faktorizacije — 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 matricu $R^{(k)}$ koja ima jedan “sređeni” stupac više.

Ovu transformaciju možemo prikazati u obliku

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

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

Nije bitno kako računamo Q_k — rotacijama ili reflektorima!

Pivotiranje stupaca u QR faktorizaciji

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 ($k = 1, \dots, n$):

- Ako su x_ℓ , za $\ell = k, \dots, n$, **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

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

Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

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

Matrica G ima jedinstvenu 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” $Q^* Q = I$. Jedinственost faktora R daje tvrdnju. ■

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

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

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

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

Rješenje matricne 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 $\text{rang}(A) = m$), onda **QR** faktorizacija matrice A ima oblik

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

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

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

Korištenje QR faktorizacije

Za Q uzmimo ortogonalnu matricu iz QR faktorizacije, pa je

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

Korištenje QR faktorizacije

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

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

$$R_0x = Q_0^T b.$$

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

Zaključak. Onda vrijedi

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

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

Drugi način

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

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

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

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

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 vrijedi $f(x) > 0$, onda je $f > 0$ i na nekom **intervalu** (pozitivne duljine) oko točke x .

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 $C[a, b]$.

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

Proširenje — integral po mjeri

“Obični” **Riemannov** integral (za ograničene funkcije) može se proširiti na tzv. **integral po mjeri** μ (v. Mjera i integral).

Skalarni produkt funkcija u i v onda možemo definirati ovako

$$\langle u, v \rangle = \int u(x) \overline{v(x)} d\mu.$$

Jedini **problem** kod ove definicije je **drugi** dio **prvog** svojstva skalarnog produkta:

$$\bullet \quad \|u\|_2^2 = \langle u, u \rangle = 0 \implies u = 0.$$

Naime, čim funkcija u **nije neprekidna**, onda se može dogoditi

- da je $u(x) \neq 0$ u beskonačno mnogo točaka x ,
- a da joj je **integral jednak 0**.

Proširenje — integral po mjeri, posebne mjere

Za tzv. **glatke** mjere μ , koje imaju **gustoću** ili **derivaciju** $w \geq 0$ (zamislite da je $d\mu = w dx$), dobivamo raniju definiciju

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

Granice integrala ovise o tome gdje je gustoća w jednaka nuli.

Za tzv. **diskretne** mjere μ , koje imaju “**gustoću**” koncentriranu na **diskretnom** skupu točaka x_1, \dots, x_n , integral prelazi u **sumu**

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

Ovo je **diskretni** skalarni produkt **funkcija** u i v .

\implies Zapis **integralom** pokriva i **diskretne** najmanje kvadrate!

Oprez kod diskretnog skalarnog produkta

Kod **diskretnog** skalarnog produkta s točkama x_1, \dots, x_n , treba **paziti** na **unitarnost** prostora **funkcija** u kojem se radi. U skalarni produkt ulaze samo **vektori** vrijednosti funkcija u **čvorovima**, tj. veza između funkcija i vektora je

$$f \leftrightarrow [f(x_1), \dots, f(x_n)]^T \in \mathbb{R}^n.$$

Pripadni unitarni prostor funkcija **mora** biti **izomorfan** s \mathbb{R}^n i treba osigurati pozitivnu definitnost!

Primjer. Ako uzmemo **polinom čvorova** za zadane točke

$$\omega(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n),$$

onda je $\|\omega\|_2 = 0$, a da je $\omega \neq 0$. Dakle, gubimo pozitivnu definitnost, ako ω pripada prostoru funkcija kojeg gledamo! Za **polinome**, odgovarajući unitarni prostor je \mathcal{P}_{n-1} .

Najmanji kvadrati — kvadrat norme greške

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, $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_m\varphi_m(x)$.
U gornji izraz za S uvrstimo ovaj oblik funkcije φ i definiciju integralnog skalarnog produkta. Izlazi

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

Najmanji kvadrati — nužni uvjet minimuma

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

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

Dakle, **mora** vrijediti

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

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

Sustav normalnih jednažbi

Dobivamo **linearni sustav** jednažbi 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 $i = 0, \dots, m$. Ove integrale možemo zapisati kao **skalarne produkte**, pa **linearni sustav** za koeficijente ima **opći** oblik

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

Uvedimo sljedeće oznake za koeficijente u sustavu

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

Sustav normalnih jednažbi

Na kraju, neka je

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

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

$$Ma = t.$$

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

- očito **simetrična** (iz simetrije skalarnog produkta),
- ali i **pozitivno (semi)definitna**.

Dodatno, ako su funkcije $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ 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 $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ 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 $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ 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 $\varphi_0, \dots, \varphi_m$,

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

Izvod za neprekidnu metodu vrijedi i u diskretnom slučaju, samo treba uzeti diskretni skalarni produkt. Sve ostalo je isto!

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

$$p_1(x) = a_1x + a_0.$$

Treba minimizirati

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

Jednostavni primjer — normalne jednadžbe

Deriviranjem dobivamo

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

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

Uz standardne oznake

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

dobivamo sustav normalnih jednadžbi (v. sljedeća stranica).

Jednostavni primjer — integrali za matricu

Treba riješiti sljedeći linearni sustav

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$

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

Izračunajmo integrale s lijeve strane

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

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

Jednostavni primjer — integrali desne strane

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 — rješenje

Linearni sustav onda glasi

$$2 \cdot a_0 + 0 \cdot a_1 = e - e^{-1}$$

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

a njegovo rješenje je

$$a_0 = \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \operatorname{sh}(1) \approx 1.1752011936,$$

$$a_1 = \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.1036383235.$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

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

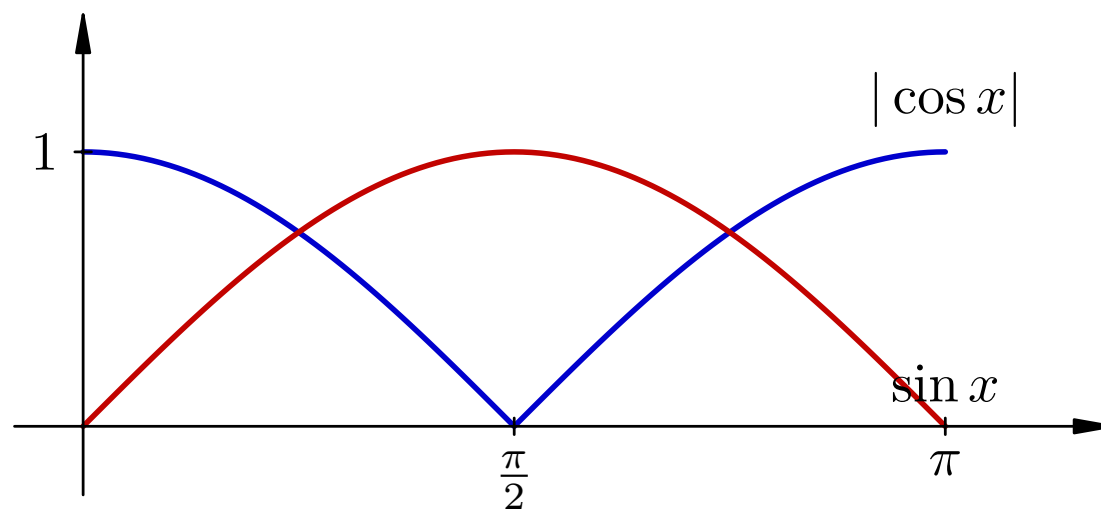
Složeniji primjer — početak

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

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

Složeniji primjer — normalne jednadžbe

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

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

dobivamo **linearni sustav** za koeficijente, općeg oblika

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

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 $i = 0, \dots, n$.

Složeniji primjer — integrali za matricu

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

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

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

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 — integrali za matricu

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

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

Složeniji primjer — 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:

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

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

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

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

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

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

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

Složeniji primjer — rješenje za $n = 1$

Za $n = 1$, sustav je

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

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

Kad uvrstimo izračunate s_k i t_k , izlazi

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

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

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

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

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

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

Kad uvrstimo izračunate vrijednosti, sustav glasi

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

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

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

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** $\{1, x, x^2, \dots\}$, **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 $1, x, x^2, \dots$, 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

Ortogonalne funkcije

Neka je $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 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, \dots, u_m tvore **ortogonalni sustav** funkcija, ako je $\|u_k\|_2 > 0$, za $k = 0, \dots, m$, i bilo koje dvije funkcije su međusobno **ortogonalne**, tj. vrijedi

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

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 $k = 0, \dots, m$, to je moguće samo tako da je $\alpha_k = 0$, za $k = 0, \dots, m$. \blacksquare

Ortogonalni sustav funkcija i najmanji kvadrati

Linearni sustav za linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Ako φ_i , $i = 0, \dots, m$, 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)

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

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 $\varphi_0, \dots, \varphi_m$, uz neki zadani skalarni produkt $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

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

Alternativna forma za računanje a_j je

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

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

Algoritam računanja koeficijenata

Za zadanu funkciju f , sljedeći algoritam (na razini operacija s funkcijama) računa koeficijente a_j i aproksimaciju

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

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];  
};
```

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

Ortogonalna projekcija je uvijek rješenje

Teorem. Greška aproksimacije $f - \varphi^{(m)}$ je **okomita** na sve **linearne kombinacije** funkcija $\varphi_0, \dots, \varphi_m$, 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 $\varphi_0, \dots, \varphi_m$. ■

Opći dokaz = normalne jednačbe

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** $\hat{\varphi}_0, \dots, \hat{\varphi}_m$ prostora Φ_m .

🔴 Aproksimacija $\varphi^{(m)}$ je **ista**, samo je zapis **drugačiji**.

Dokaz onda ide izravno iz **normalnih jednačbi** za koeficijente:

$$\begin{aligned}\langle f - \varphi^{(m)}, \hat{\varphi}_i \rangle &= \left\langle f - \sum_{j=0}^m a_j \hat{\varphi}_j, \hat{\varphi}_i \right\rangle = \langle f, \hat{\varphi}_i \rangle - \sum_{j=0}^m a_j \langle \hat{\varphi}_j, \hat{\varphi}_i \rangle \\ &= \{ i\text{-ta normalna jednačba} \} = 0.\end{aligned}$$

Upravo zato i naziv “**normalne**” jednačbe. ■

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 $m = 0, 1, \dots$ (?), tako da je

$$\Phi_0 \subset \Phi_1 \subset \Phi_2 \subset \dots.$$

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

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

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 **konvergiral**a 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 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 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 $j = 1, 2, \dots$, 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 , $k = 0, \dots, j - 1$.

Ortogonalizacija funkcija

Početni dio jednog i drugog sustava razapinje **isti** prostor

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

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

Iz sustava **potencija** $\hat{\varphi}_j(x) = x^j$, 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 — na sljedećem predavanju.

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

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

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

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

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

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

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

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

Jednostavni primjer — rješenja

Odatle odmah izlazi

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

Aproksimacija **konstantom** je

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

Aproksimacija **polinomom stupnja 1** je

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

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

Primjeri ortogonalnih familija funkcija

Trigonometrijske funkcije

Trigonometrijske funkcije

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

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**)

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

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 ortogonalnost **sinusa**

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

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Na **sličan** način, možemo pokazati da je

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

kao i

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

Potrebne formule za pretvaranje **produkta** u **zbroj** su

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

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

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).

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

- aproximacije 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,

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

Primjer — linearizacija

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

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

Primijetite da ove dvije linearizacije

ne moraju (i neće) dati isto rješenje!

Obje pripadaju “grupi” linearizacija oblika

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

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

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

pri čemu su supstitucije za **varijable**

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

a za **vrijednosti** varijabli u čvorovima

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Deriviranjem po sva tri parametra izlaze jednadžbe

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

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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav normalnih jednadžbi

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (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

$$a = 1.7685862981,$$

$$b = 1.9369990502,$$

$$c = 0.8742294419.$$

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

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

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

$$a = 1.7522057170,$$

$$b = 1.9387446017,$$

$$c = 0.8534831289.$$

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**

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

dobivamo

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

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.