Znanstveno računanje 2
9. i 10. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Izglađivanje podataka i metoda najmanjih kvadrata:
  - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
  - Normalne jednadžbe.
  - Linearizacija.
  - Izglađivanje podataka najmanjim kvadratima.
  - Matrična formulacija problema najmanjih kvadrata.
  - QR faktorizacija.
    - Givensove rotacije.
    - Householderovi reflektori.
  - QR faktorizacija i pivotiranje.
  - Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije.

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Izglađivanje podataka:
  - Veza izglađivanja i najmanjih kvadrata.
  - Globalno i lokalno izglađivanje.
  - Diskretni ortogonalni polonomi i Forsytheov algoritam.
  - Lokalno izglađivanje — najmanji kvadrati, integral.
  - Diskretna ortogonalnost trigonometrijskih funkcija.
  - Najmanji kvadrati i splajn funkcije.
  - Dierckx.

Informacije

Konzultacije (trajno, nažalost):

- utorak, 16–17 sati, petak, 19–20 sati.

Sljedeća dva tjedna — imamo nastavu:

- 26. 5. i 2. 6.

Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija vektora pogreške

Neka je funkcija f

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

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

Aproksimacijska funkcija

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

određuje se iz uvjeta da je 2-norma vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije najmanja moguća, tj. minimizira se

$$S = \sum_{k=0}^{n} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2 \to \min .$$

Sustav normalnih jednadžbi

Uočimo da je

- uvijek $S \geq 0$, bez obzira kakvi su parametri, jer se radi o zbroju kvadrata.
- Funkcija S minimizira se kao funkcija više varijabli $a_0, \ldots, a_m$.
- S je dovoljno glatka funkcija, jer je funkcija u parametrima a_k, pa je nužni uvjet ekstrema

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

Takav 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

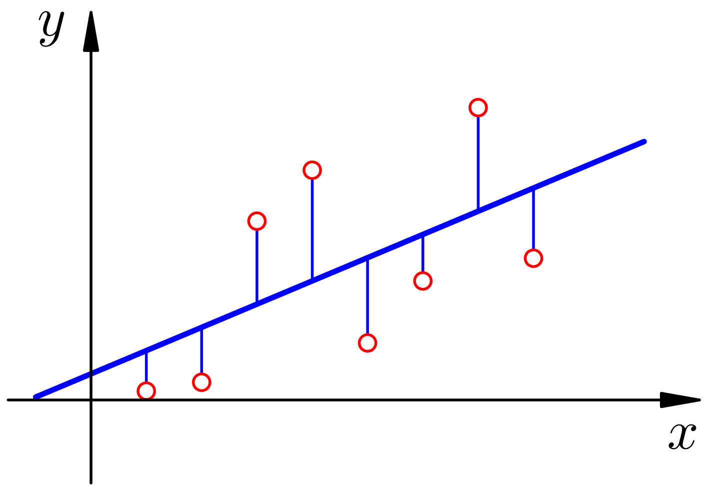
$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x.$$

Greška aproksimacije (u čvorovima), koju minimiziramo je

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

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika zadanih točaka u ravnini i pravca koji ih aproksimira.



Uočiti da se greška u svakoj točki “mjeri” u smjeru osi y

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

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 su:

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

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

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

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

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

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Uvedemo li standardne skraćene oznake

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

onda linearni sustav možemo pisati kao

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

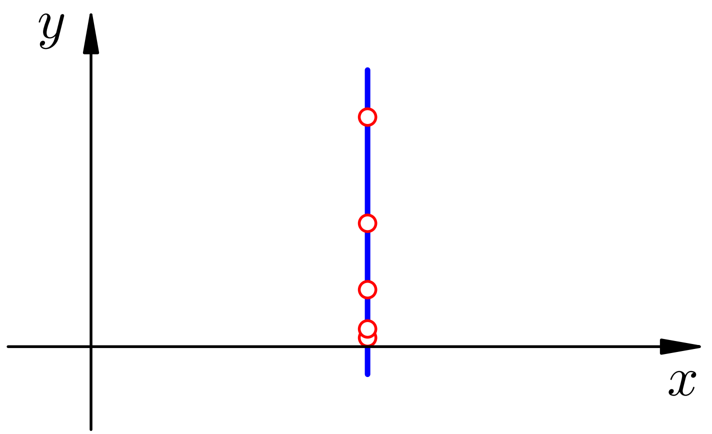
Matrica sustava je regularna, što slijedi iz linearne nezavisnosti vektora

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

uz uvjet da imamo barem dvije različite točke x_k, pa 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.



Ako imamo više različitih podataka u jednoj jedinoj točki x_0,

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

Minimalnost rješenja?

Je li to zaista minimum?

- To nije teško pokazati, korištenjem drugih parcijalnih derivacija (dovoljan uvjet minimuma je pozitivna definitnost Hesseove matrice).

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

- S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore, u varijablama a_0, a_1, pa je jasno da takvi paraboloidi imaju minimum.

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

Najmanji kvadrati za polinome

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

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

ali postoji opasnost da je za malo veće m ($m \approx 10$)

- dobiveni sustav vrlo loše uvjetovan, pa dobiveni rezultati mogu biti jako pogrešni.

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

Ako se koriste aproksimacije polinomima viših stupnjeva,

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

Najmanji kvadrati za opće linearne funkcije

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

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

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ 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 vrijednosti funkcije f u točkama x_k, pa 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

Iz rješenja b_0 i b_1, lako očitamo a_0 i a_1

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

Napomene uz linearizaciju:

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

Tipične linearizacije — opća potencija

Kratki popis funkcija koje su često u upotrebi i njihovih standardnih linearizacija u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

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

linearizira se logaritmiranjem

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

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

Uvedimo oznake

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

Tipične linearizacije — opća potencija

Linearizirani problem najmanjih kvadrata glasi

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

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):

Primjer (nastavak)

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

$$r = \frac{\rho}{1 + \varepsilon \cos x}.$$

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

Rješenje. Pomnožimo formulu 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.

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 $n + 1 = 5$, imamo

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

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

Primjer (nastavak)

Linearni sustav za 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

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

Značenja:

- ε je ekscentricitet elipse,
- 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, onda je aproksimacijska funkcija dobro odabrana.

Primjer uklanjanja slučajne greške

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

Primjer. Eksperimentalni podaci uzeti su tako da se 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 podaci

$$f_i = 4x_i + 3 + \text{slučajna perturbacija između } -1 \text{ i } 1,$$
$$i = 0, \ldots, 100.$$

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	11.93107009769015
3	15	15.49513187608454
4	19	18.68144135301998
5	23	22.98482020710819

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

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

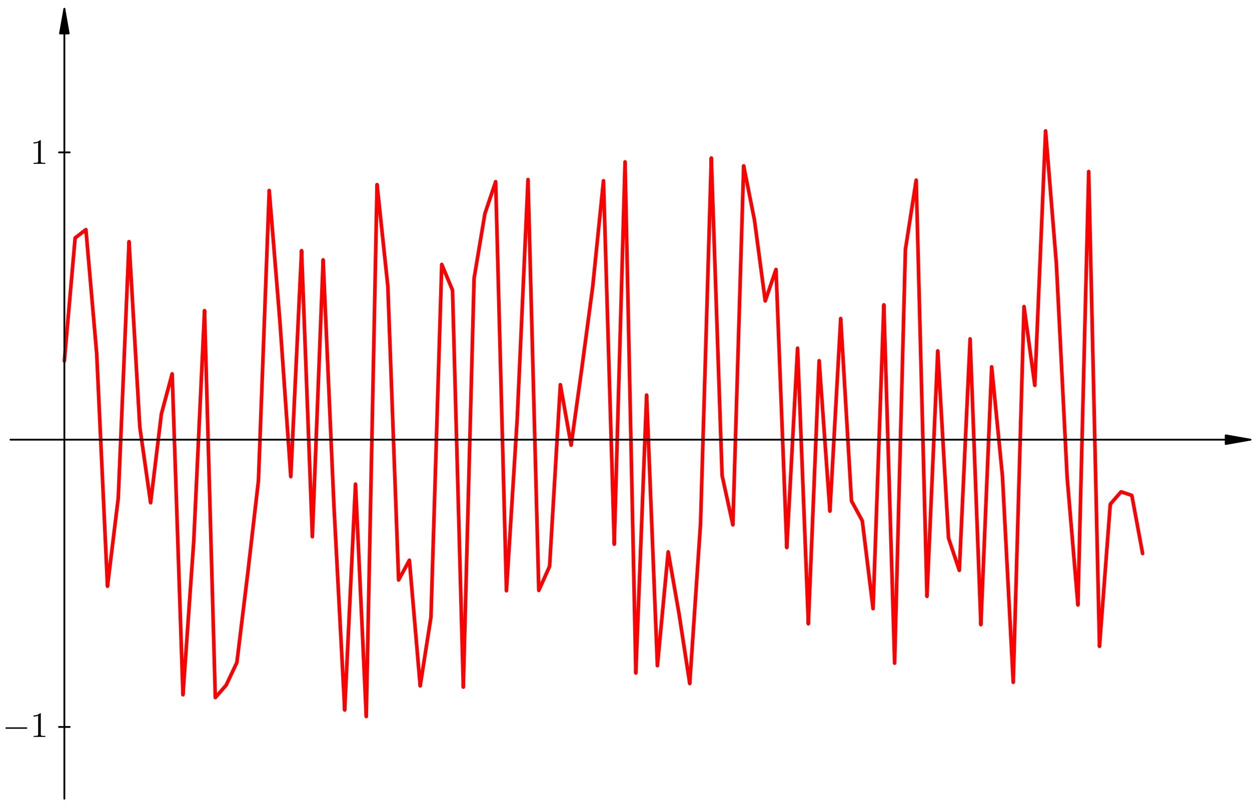
Pogledajmo što su aproksimacije vrijednosti f_i za prvih nekoliko podataka:

x_i	$y(x_i)$	$\varphi(x_i)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.199857875299690
3	15	15.195834231399269
4	19	19.191810587498847
5	23	23.187786943598425

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

Primjer uklanjanja slučajne greške

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



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

Demo primjeri

GnuPlot demo za prethodni problem.

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

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se podaci za viskoznost 40% etilnog alkohola.

- Primjer pokazuje različita rješenja ako problem lineariziramo ili ako ga ne lineariziramo.
- Također, pokazan je način izbora aproksimacijske funkcije.

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

Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata

Matrična formulacija

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

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

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

pišemo u uobičajenoj formi:

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

Matrična formulacija

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

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

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

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

Primijetite da to nije uvijek moguće, jer je podataka uobičajeno znatno više nego parametara.

Matrična formulacija

Ako označimo

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

onda prethodne jednadžbe možemo napisati u matričnom obliku

$$Ax = b.$$

Budući da je matrica A "dugačka", postavlja se pitanje što je najbolje rješenje ovog sustava.

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

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

Komentar

Ako smo dobro birali bazične funkcije φ_i, onda je razumno pretpostaviti da su one linearno nezavisne na zadanim podacima, pa

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

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

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

Odsad nadalje, pretpostavimo (ako drugačije nije rečeno) da A ima puni stupčani rang.

Veza s problemom 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 $x \in \mathcal{S}$ ako i samo ako vrijedi sljedeća relacija ortogonalnosti

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

koju obično nazivamo sustav normalnih jednadžbi i pišemo u obliku

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

Veza s problemom najmanjih kvadrata

Dokaz. Pretpostavimo da $\hat{x}$ zadovoljava normalne jednadžbe

$$A^T \hat{r} = 0, \quad \hat{r} = b - A\hat{x}.$$

Tada za bilo koji $x \in \mathbb{R}^m$ imamo

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

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

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

što je minimizirano kad je $e = 0$, tj. $x = \hat{x}$.

Veza s problemom najmanjih kvadrata

S druge strane, pretpostavimo da $\hat{x}$ minimizira normu reziduala, ali ne zadovoljava sustav normalnih jednadžbi

$$A^T\hat{r} = z \neq 0.$$

Tada možemo definirati

$$x = \hat{x} + \varepsilon z,$$

za proizvoljni dovoljno mali broj $\varepsilon > 0$, pa je

$$r = \hat{r} - \varepsilon A z$$

i

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

što znači da, protivno pretpostavci, $\hat{x}$ nije rješenje problema minimizacije reziduala $\|r\|_2$, za svaki dovoljno mali $\varepsilon > 0$. ■

Karakterizacija rješenja

Prethodni teorem, zapravo je rekao da je rješenje problema minimizacije $\|r\|_2$ isto što i rješenje sustava normalnih jednadžbi

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

Sada odmah vidimo:

- matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna, jer za svaki vektor x 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).

Karakterizacija rješenja

Vrijedi čak i jače.

Teorem. Matrica $A^T A$ je pozitivno definitna (pa onda i regularna) ako i samo ako su stupci od A linearno nezavisni, tj. ako je $\mathrm{rang}(A) = m$.

Dokaz. Ako su stupci od A linearno nezavisni, tada za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Ax \neq 0$ (definicija linearne nezavisnosti), pa je za takav x

$$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

tj. $A^T A$ je pozitivno definitna.

Karakterizacija rješenja

S druge strane, ako su stupci linearno zavisni, tada postoji $x_0 \neq 0$ takav da je $Ax_0 = 0$, pa je za takav x_0

$$x_0^T A^T A x_0 = \|Ax_0\|_2^2 = 0.$$

Ako je x takav da je $Ax \neq 0$, onda je

$$x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

pa je $A^T A$ pozitivno semidefinitna.

Karakterizacija rješenja

Ako je $A^T A$ pozitivno definitna, tj. ako je $\mathrm{rang}(A) = m$, onda postoji jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata (matrica sustava je regularna)!

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

koje je dano s

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

s tim da mu je rezidual

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

Geometrijska interpretacija rješenja

Desna strana b može se napisati kao

$$b = Ax + r,$$

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

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

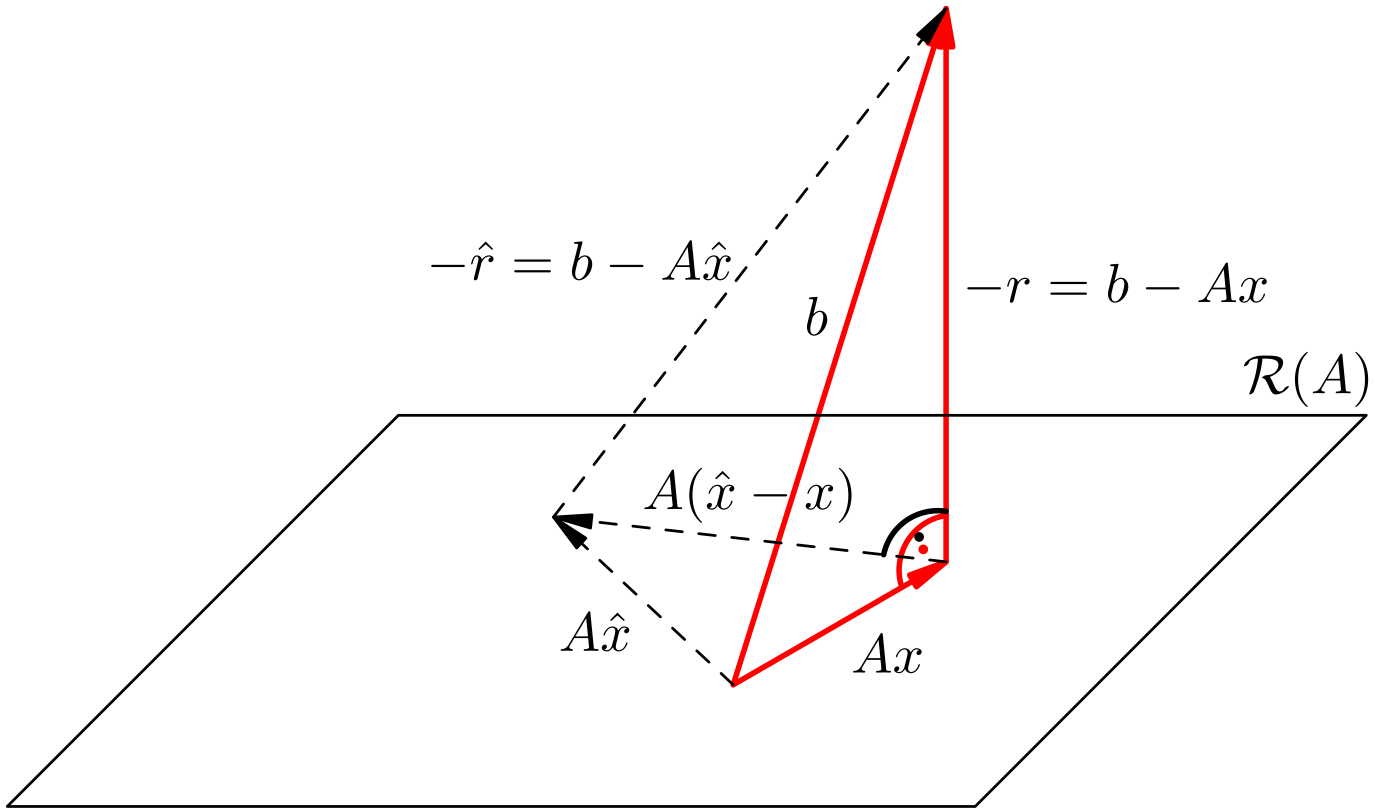
izlazi da je $r \in \mathcal{N}(A^T)$. Prisjetimo li se da je

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

dobivamo geometrijsku interpretaciju problema najmanjih kvadrata.

Geometrijska interpretacija rješenja

Rješenje problema najmanjih kvadrata dobivamo tako da napravimo ortogonalnu projekciju vektora b na potprostor $\mathcal{R}(A)$.



Rješenje problema najmanjih kvadrata

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

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

Ovaj pozitivno definitni sustav normalnih jednadžbi mogli bismo riješiti tako da iskoristimo faktorizaciju Choleskog.

Prednosti/nedostaci metode:

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

Korištenje QR faktorizacije

Ponovno, neka je $A^T A$ pozitivno definitna. 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 problem minimizacije možemo lako zapisati kao

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

Pitanje je samo kako naći pogodan Q^T tako da lako pročitamo rješenje.

Odgovor: korištenjem QR faktorizacije.

QR faktorizacija

Definicija QR faktorizacije

Neka je zadana matrica G tipa (m, n) koja ima puni stupčani rang. Rastav matrice G tako da je

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

gdje je

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

zove se QR faktorizacija matrice G.

Definicija QR faktorizacije

Ako postoji, prethodna faktorizacija može se pisati i u jednostavnijoj formi.

- Prvih n stupaca matrice Q označimo s Q_0,
- a preostale stupce, koji su okomiti na Q_0 s $Q_0^\perp$.

Onda je

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

Ostaje samo pokazati da takva faktorizacija postoji.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Teorem. Neka je $G \in^{m\times n}$, $m \geq n$ i neka je $\mathrm{rang}(G) = n$. Tad postoji jedinstvena faktorizacija oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

pri čemu je Q_0 tipa $m \times n$,

$$Q_0^T Q_0 = I_n,$$

a R_0 gornja trokutasta s pozitivnim dijagonalnim elementima.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Dokaz. Najjednostavniji je dokaz ovog teorema je korištenjem Gram-Schmidtove ortogonalizacije.

Ako stupce matrice

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

ortogonaliziramo slijeva udesno, dobit ćemo ortonormalni niz vektora q_1 do q_n koji razapinju isti potprostor kao i stupci od G.

Stavimo li

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

dobili smo $m \times n$ ortogonalnu matricu.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije računa i koeficijente

$$r_{ji} = q_j^T g_i$$

koji polazni stupac g_i izražavaju kao linearnu kombinaciju prvih i vektora q_j ortonormirane baze, tako da je

$$g_i = \sum_{j=1}^{i} r_{ji} q_j.$$

Elementi r_{ji} su elementi matrice R_0. Iz Gram–Schmidtovog algoritma bit će jasno da se može uzeti $r_{ii} > 0$. ■

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije

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

- vektore ortogonalizira obzirom na prethodne originalne vektore g_j,
- zbog toga je nestabilan kad su stupci od G skoro linearno zavisni.

Umjesto CGS-a, može se koristiti tzv. modificirani Gram–Schmidtov postupak (skraćeno MGS),

- koji ortogonalizira vektore obzirom na prethodno ortogonaliziranu bazu q_j, pa je mnogo stabilniji,
- ali i kod njega se može dogoditi da je izračunati Q_0 vrlo daleko od ortogonalnog, tj. $\|Q_0^T Q_0 - I\| \gg u$ kad je G loše uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klesični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam

```
za i = 1 do n radi {
  /* Nađi i-ti stupac od Q i R */
  q_i = g_i;
  za j = 1 do i - 1 radi {
    /* Oduzmi komponentu u q_j u smjeru g_i */
      /* kod CGS-a je */
    r_ji = q_j^T g_i;
    /* ILI */
      /* kod MGS-a je */
    r_ji = q_j^T q_i;
    q_i = q_i - r_ji q_j ;
  };
```

Gram–Schmidtov algoritam

```
r_ii = ‖q_i‖2;
ako je r_ii > 0 onda {
  q_i = q_i / r_ii;
};
inače {
  /* Matrica R je singularna -- stani */
};
```

Pokažite da su dvije formule za r_{ji} koje koriste CGS i MGS matematički ekvivalentne.

Drugi algoritmi

U praksi, kad želimo ortogonalan Q, koristimo

- ili Givensove rotacije,
- ili Householderove reflektore

kojima poništavamo odgovarajuće elemente u matrici G. To ponovno daje konstrukciju QR faktorizacije.

Bitna razlika među ta dva algoritma:

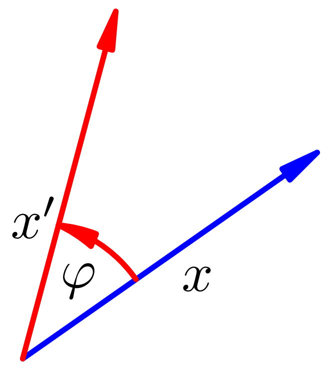
- Givensove rotacije poništavaju po jedan element u stupcu,
- Householderovi reflektori poništavaju sve osim jednog elementa u (skraćenom) stupcu.

Givensove rotacije

Matrica

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

je Givensova rotacija koja svaki vektor $x \in \mathbb{R}^2$ rotira obrnuto od kazaljke na satu za kut φ.



Givensove rotacije u (i, j) ravnini

Možemo definirati i Givensovu rotaciju u (i, j) ravnini s

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

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

Dobiveni sustav je

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Drugi redak u matričnoj jednadžbi je

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

Ako je $x_j = 0$ nemamo što poništavati, a ako nije, dobivamo

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

odakle, korištenjem trigonometrijskog identiteta

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

slijedi

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

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

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

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.

Sustavno poništavanje

Sustavnim poništavanjem elemenata, konstruirat ćemo QR faktorizaciju matrice G.

- postoji puno redosljeda kako napraviti nule u faktoru G,
- u sljedećem je primjeru navedeni redosljed redom po stupcima.

Poništavanje.

- Počnimo s prvim stupcem.
- Redom, možemo poništavati elemente

$$g_{j1}, \quad j = 2, \ldots m$$

korištenjem rotacija $R(1, j, \varphi)$, koje "nabacuju" normu prvog stupca na prvi element u stupcu.

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo "pokvariti" već sređene nule u prethodnim stupcima.

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

1. stupac:

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

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo "pokvariti" već sređene nule u prethodnim stupcima.

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

2. stupac:

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

Sustavno poništavanje

Poništavanje (nastavak).

- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo "pokvariti" već sređene nule u prethodnim stupcima.

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

3. stupac:

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

Poredak poništavanja i ocjena greške

Drugi raspored 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.
- Ujednačimo da se svaki redak podjednak broj puta transformira.
- To se postiže korištenjem niza nezavisnih rotacija koje ne zahvaćaju iste retke.
- Takav raspored odvijanja rotacija dozvoljava paralelizaciju algoritma.

Poredak poništavanja i ocjena greške

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

Crveno i zeleno su nezavisne rotacije koje možemo istovremeno primjenjivati.

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

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

Kako doći do Q?

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

Do matrice Q se dolazi nakupljanjem primijenjenih rotacija

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

Dakle, matricu G smo

- slijeva množili produktom ortogonalnih matrica, koji označimo s Q^{-1}.
- Produkt ortogonalnih matrica je ortogonalna, pa je $Q^{-1} = Q^T$.
- Zaključak: $G = QR$.

Matrica Q^T dobiva se primjenom istih rotacija, samo na početnu matricu I — "što na G, to na I".

Householderovi reflektori

Matrica H definirana s

$$H = I - 2uu^T, \quad \|u\|_2 = 1$$

zove se Householderov reflektor.

Matrica H je

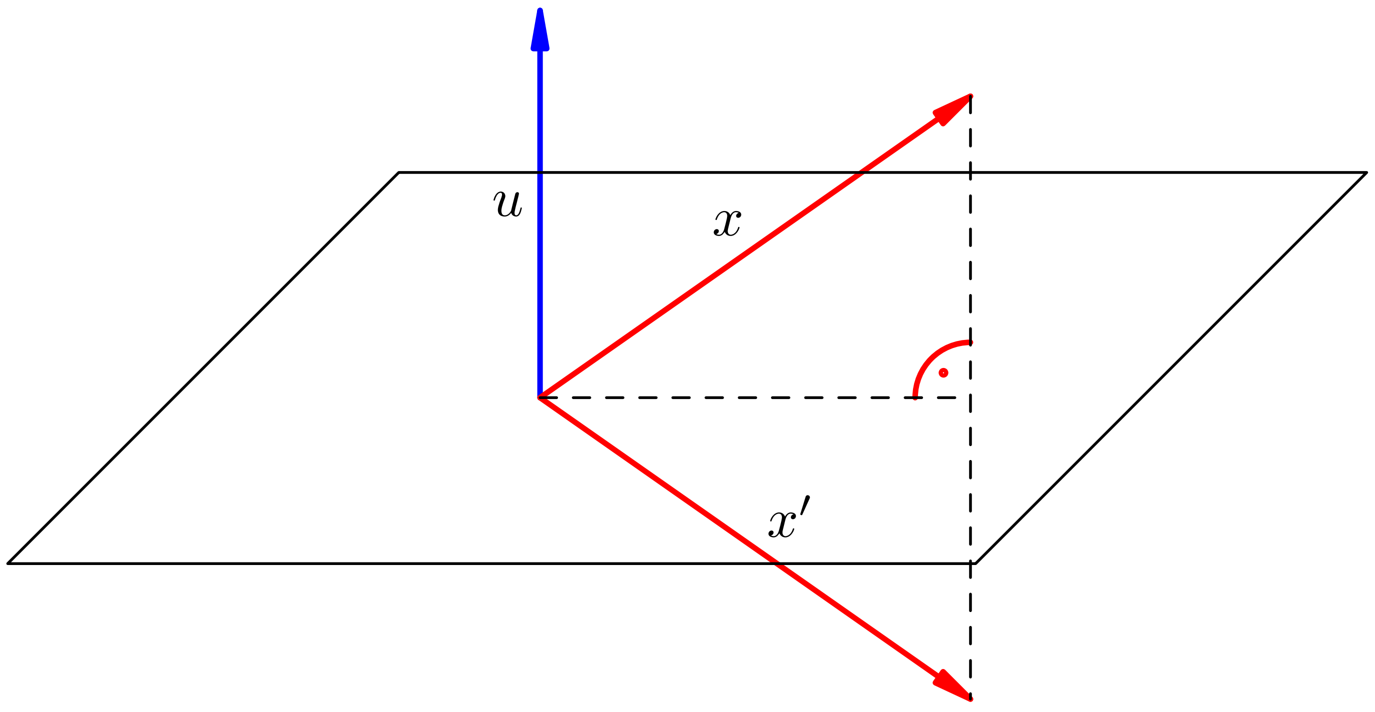
- simetrična,
- i ortogonalna, jer je

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

Zašto baš ime reflektor?

Promatrajmo hiperravninu koja je okomita na vektor u.

- Reflektor H sve vektore x preslikava u simetrične obzirom na tu hiperravninu.



Poništavanje Householderovim reflektorima

Ako je zadan vektor x, nađimo vektor u koji definira Householderov reflektor koji poništava sve (osim prve) komponente vektora x.

Tražimo da je

$$Hx = \begin{bmatrix} c \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = c \cdot e_1.$$

Raspišimo tu jednadžbu

$$Hx = (I - 2uu^T)x = x - 2u(u^T x) = c \cdot e_1.$$

($u^T x$ je broj!)

Poništavanje Householderovim reflektorima

Premještanjem pribrojnika, dobivamo

$$u = \frac{1}{2(u^T x)}(x - ce_1),$$

pa je u linearna kombinacija od x i e_1. Preciznije, mora biti

$$u = \alpha(x - ce_1),$$

za neki broj α. Unitarne matrice čuvaju normu, pa je

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

Nadalje, u mora biti jedinične norme, a paralelan s vektorom

$$\tilde{u} = x \pm \|x\|_2 e_1.$$

Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

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

Oba izbora znakova u definiciji $\tilde{u}$ zadovoljavaju

$$Hx = ce_1,$$

dok je $\tilde{u} \neq 0$. U praksi se, zbog numeričke stabilnosti, koristi

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

jer to znači da nema kraćenja pri računanju prve komponente od $\tilde{u}$, koja je jednaka

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

tj. oba su pribrojnika istog znaka.

Drugi način definicije H

Napomena. Računanje u se može izbjeći, ako definiramo

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

Kako djelovati na ostale stupce?

Kad smo jednom izračunali u, ne treba računati cijelu matricu H. Dovoljno je pogledati kako ona djeluje na 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.

QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- Prvo se 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'.

  Ortogonalna matrica kojom smo djelovali na radnu matricu je onda

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

QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- k-ti "skraćeni" stupac u radnoj matrici — od dijagonale nadolje.

  Ortogonalna matrica kojom djelujemo na radnu matricu ima oblik

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

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

Ako želimo formirati matricu Q, onda je

$$H_n H_{n-1} \cdots H_1 G = R, \quad \text{tj.} \quad Q = (H_n H_{n-1} \cdots H_1)^T.$$

QR faktorizacija i pivotiranje

Računanje QR faktorizacije

Neka je G zadana matrica tipa $m \times n$, s tim da je $m \geq n$.

Računanje QR faktorizacije matrice G

- provodimo u nizu od n koraka. Ako dozvolimo i $m < n$, broj koraka je $\min\{m, n\}$.

Na početku algoritma označimo $R^{(0)} := G$.

Opišimo kako izgleda k–ti korak algoritma, za $k = 1, \ldots, n$.

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

Računanje QR faktorizacije

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

U k-tom koraku — u matrici $R^{(k-1)}$

- poništavamo sve elemente k-tog stupca ispod dijagonale, nekom ortogonalnom transformacijom Q_k.
- Tako dobivamo novu radnu matrcu $R^{(k)}$ koja ima jedan "sređeni" stupac više.

Ovu transformaciju možemo prikazati u obliku

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

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

Nije bitno kako računamo Q_k — rotacijama ili reflektorima!

Pivotiranje stupaca u QR faktorizaciji

Slično kao kod LR faktorizacije, i kod QR faktorizacije možemo koristiti pivotiranje.

- Uobičajeno se koristi pivotiranje stupaca

  $$GP = QR,$$

  gdje je P matrica permutacije.
- Ako su x_ℓ, $\ell = k, \ldots, n$, skraćeni stupci, na prvo mjesto dovodi se onaj s najvećom normom, tj. takav da je $\|x_k\|_2$ maksimalna.
- Postupak dovođenja na prvo mjesto ponavljamo u svakom koraku QR faktorizacije sa sve kraćim i kraćim stupcima.

Svrha pivotiranja

Svrha?

- Ako je matrica G bila takva da su joj stupci (skoro) linearno zavisni, onda se QR faktorizacijom s pivotiranjem određuje rang matrice G.

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

$$\|(R_0)_{kk}\|^2 \geq \sum_{i=k}^{j} \|(R_0)_{ij}\|^2, \quad 1 \leq k \leq \min\{m,n\}, \quad k \leq j \leq n.$$

Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije

Korištenje QR faktorizacije

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

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

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

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

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

Korištenje QR faktorizacije

Za Q uzmimo ortogonalnu matricu iz QR faktorizacije, pa je

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

Korištenje QR faktorizacije

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

Budući da je R_0 kvadratna i punog ranga, onda je i regularna, pa postoji jedinstveno rješenje x linearnog sustava

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

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

Zaključak. Onda vrijedi

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

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

Drugi način

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

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

jednaka rješenju sustava normalnih jednadžbi

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

Ako je $A^T A$ nesingularna, 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

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

Primjer

Primjer. Diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata nađite funkciju oblika

$$\varphi(x) = \frac{x+a}{bx+c}$$

koja aproksimira slijedeći skup podataka (točaka):

x_i	0	1	2	3	4
f_i	2.02	0.97	0.82	0.70	0.67

.

Nađite

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

Primjer — linearizacija

Rješenje nađite

- korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog,
- korištenjem QR faktorizacije,
- korištenjem QR faktorizacije s pivotiranjem stupaca.

Rješenje. Traženi oblik funkcije je nelinearan, pa ga treba linearizirati. To možemo napraviti na više načina.

1. Pomnožimo oblik funkcije φ s $bx + c$ i dobivamo
$$(bx + c)\varphi(x) = x + a,$$
odnosno
$$-a + b\, x\varphi(x) + c\, \varphi(x) = x.$$

Primjer — linearizacija

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

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

Primijetite da ove dvije linearizacije

- ne moraju (i neće) dati isto rješenje!

Obje pripadaju "grupi" linearizacija oblika

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

pri čemu je $w = w(u, v)$.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Prvo riješimo problem korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog.

Za 1. slučaj metoda najmanjih kvadrata ima oblik

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

pri čemu su supstitucije za varijable

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

a za vrijednosti varijabli u čvorovima

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Deriviranjem po sve tri varijable izlazi

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

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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Kad uvrstimo zadane podatke, za 1. slučaj dobivamo linearni sustav $Mx = d$, gdje je

$$M = \begin{bmatrix} 5 & -7.39 & -5.18 \\ -7.39 & 15.2229 & 5.5513 \\ -5.18 & 5.5513 & 6.6326 \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} -10 \\ 21.27 \\ 7.39 \end{bmatrix}.$$

Faktorizacija Choleskog matrice M je $M = R^T R$, uz

$$R \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Sad moramo još riješiti dva trokutasta sustava:

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

Rješenja prvog, pa drugog sustava su

$$y \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}, \quad x \approx \begin{bmatrix} 1.768586298 \\ 1.936999050 \\ 0.874229442 \end{bmatrix}.$$

Prema tome, rješenje za parametre u 1. slučaju je

$$a = 1.768586298,$$
$$b = 1.936999050,$$
$$c = 0.874229442.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

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

$$\varphi(x_i) = \frac{x_i + 1.768586298}{1.936999050x_i + 0.874229442},$$

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

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

Izračunajte sami!

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Za 2. slučaj treba uvesti supstitucije za varijable

$$u = -\frac{1}{\varphi(x)}, \quad v = x, \quad w = \frac{x}{\varphi(x)},$$

i vrijednosti varijabli u čvorovima

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

Metoda najmanjih kvadrata imat će oblik

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Pripadni linearni sustav glasi $Mx = d$, gdje je

$$M \approx \begin{bmatrix} 7.0636 & -13.7258 & -5.6666 \\ -13.7258 & 30 & 10 \\ -5.6666 & 10 & 5 \end{bmatrix}, \quad d \approx \begin{bmatrix} -19.0704 \\ 42.6467 \\ 13.7258 \end{bmatrix}.$$

Rješenje za parametre u 2. slučaju je

$$a = 1.752205717,$$
$$b = 1.938744602,$$
$$c = 0.853483129.$$

Ova rješenja se donekle razlikuju od prethodnih!

Primjer — QR faktorizacija

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

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

dobivamo

$$-a + bx_if_i + cf_i = x_i, \quad i = 0, \dots, 4,$$

pa su A i b iz problema minimizacije jednaki

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

Primjer — QR faktorizacija

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

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} -0.447213595 & -0.712715113 & 0.536492779 \\ -0.447213595 & -0.244965682 & -0.647620310 \\ -0.447213595 & 0.078118977 & -0.281410215 \\ -0.447213595 & 0.299938295 & -0.065005678 \\ -0.447213595 & 0.579623522 & 0.457543425 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Uočite: $R_0 = R$ iz faktorizacije Choleskog za $M = A^T A$.

Primjer — QR faktorizacija

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

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}.$$

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

$$x \approx \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}$$

Napravite isto sami za drugu linearizaciju.

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Ako napravimo QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca, dobit ćemo $AP = Q_0 R_0$, gdje je poredak stupaca $p = [2, 3, 1]$,

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} 0.000000000 & 0.940989460 & 0.332153833 \\ 0.248612544 & 0.287082061 & -0.731570874 \\ 0.420334610 & 0.103390036 & -0.312927468 \\ 0.538233342 & -0.030653048 & -0.059615261 \\ 0.686888265 & -0.143155917 & 0.502991359 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 3.901653496 & 1.422807024 & -1.894068760 \\ & 2.146676541 & -1.157652593 \\ & & 0.268968410 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Dobiveno rješenje trokutastog sustava $R_0x' = Q_0^T b$ je

$$x' \approx \begin{bmatrix} 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \\ 1.76858629811 \end{bmatrix}.$$

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

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

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Pravo rješenje x dobit ćemo kao

$$x = P^T x' = \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}.$$