Numerička analiza

8. predavanje

Autori: Saša Singer i Nela Bosner

Predavač: Nela Bosner

nela@math.hr

web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Matrična formulacija linearnog problema najmanjih kvadrata:
  - Karakterizacija rješenja za puni i defektni rang.
  - Geometrijska interpretacija rješenja.
  - Rješavanje problema najmanjih kvadrata.
- QR faktorizacija:
  - Egzistencija i jedinstvenost
  - Gram–Schmidtov postupak
- Givensove rotacije:
  - Poništavanje elementa pomoću rotacije
  - Sustavno poništavanje — QR faktorizacija

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Householderovi reflektori:
  - Poništavanje elemenata pomoću reflektora
  - QR faktorizacija korištenjem reflektora
- QR faktorizacija i pivotiranje
- Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije:
  - Rješenje za puni rang
  - Rješenje za defektni rang

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 $x_1, \ldots, x_n$,
- a ne $a_0, \ldots, a_n$.

Matrična formulacija (nastavak)

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

$$\varphi(t) = x_1\varphi_1(t) + \cdots + x_n\varphi_n(t).$$

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

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

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

Matrična formulacija (nastavak)

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

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

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. $\mathrm{rang}(A) = n$.

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

- rješenje x nije jedinstveno, jer mu možemo dodati bilo koji vektor iz jezgre od A, a da se rezidual ne promijeni.
- Među svim rješenjima x problema najmanjih kvadrata uvijek postoji jedinstveno rješenje x najmanje norme, tj. koje još minimizira i $\|x\|_2$.

Karakterizacija rješenja

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

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

Tada je $x \in \mathcal{S}$ ako i samo ako vrijedi sljedeća relacija ortogonalnosti

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

koju obično nazivamo sustav normalnih jednadžbi i pišemo u obliku

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

Karakterizacija rješenja (nastavak)

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

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

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

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

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 $e \in \mathcal{N}(A)$, tj. $x = \hat{x} + e$.

Karakterizacija rješenja (nastavak)

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 (nastavak)

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 i još je $\mathcal{R}(A) \perp \mathcal{N}(A^T)$).

Karakterizacija rješenja (nastavak)

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 $\mathrm{rang}(A) = n$.

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 (nastavak)

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 — drugi način

Napomena. Karakterizaciju rješenja danu prethodnim teoremima možemo dobiti i na alternativni način.

- Definirajmo diferencijabilnu funkciju

$$\psi(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2,$$

  i izjednačimo $\nabla\psi(x) = 0$.

- Tada možemo raspisati $\psi(x)$ kao

$$\begin{aligned}\psi(x) =& \frac{1}{2}(Ax-b)^T(Ax-b) = \frac{1}{2}x^TA^TAx - x^TA^Tb + \frac{1}{2}b^Tb \\ =& \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} x_i(A^TA)_{ij}x_j - \sum_{i=1}^{n} x_i(A^Tb)_i + \frac{1}{2}b^Tb\end{aligned}$$

Karakterizacija rješenja — drugi način (nast.)

odnosno, kada $\psi(x)$ bolje pripremimo za deriviranje, imamo

$$\psi(x) = \frac{1}{2}\sum_{i}^{n}(A^TA)_{ii}x_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(A^TA)_{ij}x_ix_j - \sum_{i=1}^{n}(A^Tb)_ix_i + \frac{1}{2}b^Tb.$$

- Izračunajmo sada k-tu parcijalnu derivaciju od $\psi(x)$ i izjednačimo ju sa nulom.

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\psi(x) = (A^TA)_{kk}x_k + \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}(A^TA)_{kj}x_j + \frac{1}{2}\sum_{i\neq k}(A^TA)_{ik}x_i - (A^Tb)_k$$

$$\underset{\hookrightarrow}{=}^{\{(A^TA)_{ji}=(A^TA)_{ij}\}} \sum_{i=1}^{n}(A^TA)_{ki}x_i - (A^Tb)_k = (A^TAx - A^Tb)_k.$$

Karakterizacija rješenja — drugi način (nast.)

- Dakle,
$$\nabla\psi(x) = A^T A x - A^T b,$$
a iz $\nabla\psi(x) = 0$ slijedi $A^T(Ax - b) = A^T r = 0$, ili da rješenje problema najmanjih kvadrata zadovoljava sustav normalnih jednadžbi $A^T A x = A^T b$, što već znamo.
- Da bi to rješenje bilo zaista minimum funkcije ψ moramo provjeriti Hessian.
- Vrijedi
$$\frac{\partial^2}{\partial x_l \partial x_k}\psi(x) = (A^T A)_{kl},$$
što znači da je
$$H\phi = A^T A.$$

Karakterizacija rješenja — drugi način (nast.)

- $H\psi$ je
  - pozitivno definitna u slučaju da je matrica A punog stupčanog ranga, pa tada postoji jedinstveni minimum, i on je rješenje sustava
    $$A^T A x = A^T b$$
  - pozitivno semidefinitna u slučaju da matrica A nema puni stupčani rang, pa se tada minimum postiže na čitavom afinom potprostu.
    - To možemo provjeriti na sljedeći način.
    - Neka je x rješenje problema najmanjih kvadrata, i neka je i $x + z$ također rješenje istog problema.
    - Tada x i $x + z$ moraju zadovoljavati $A^T r = 0$, pa imamo
      $$0 = A^T[A(x + z) - b] = A^T(Ax - b) + A^T Az = A^T Az.$$

Karakterizacija rješenja — drugi način (nast.)

- Ako prethodnu jednakost skalarno pomnožimo sa z, dobit ćemo da je $\|Az\|_2 = 0$, odakle slijedi da je $Az = 0$ odnosno $z \in \mathcal{N}(A)$.
- Dakle skup rješenja u ovom slučaju čini skup

$$\mathcal{S} = x + \mathcal{N}(A).$$

- Ako je $x \perp \mathcal{N}(A)$, onda je

$$\|x + z\|_2^2 = \|x\|_2^2 + \|z\|_2^2,$$

pa je x jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata koje ima minimalnu 2-normu (za $z = 0$).

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

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

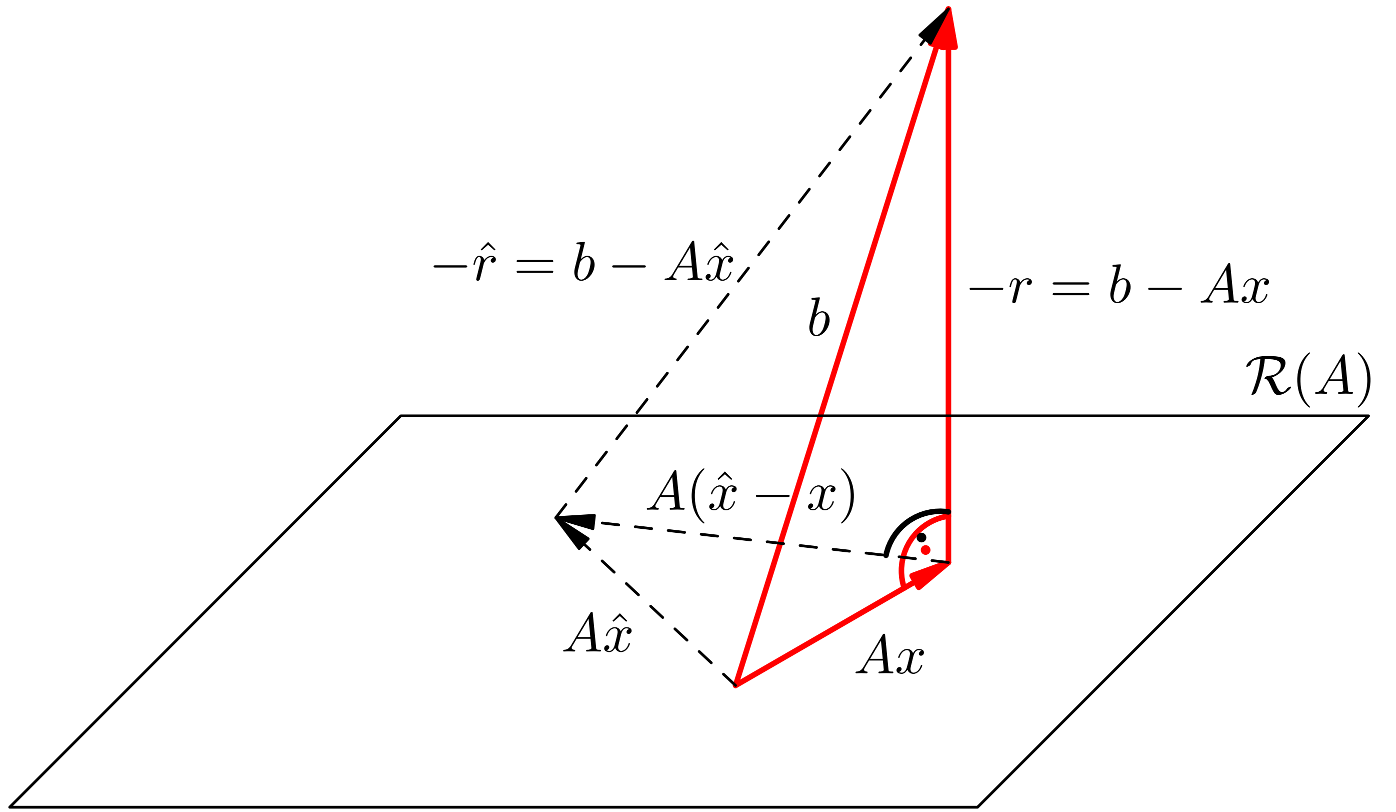
izlazi da je $r \in \mathcal{N}(A^T)$. Prisjetimo li se da je

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

dobivamo geometrijsku interpretaciju problema najmanjih kvadrata.

Geometrijska interpretacija rješenja (nastavak)

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. U slučaju punog ranga mogli bismo riješiti sustav normalnih jednadžbi. 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 $mn^2 + \frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$, 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 $m \times n$ koja ima puni stupčani rang, tj. $\mathrm{rang}(G) = n \leq m$. Rastav matrice G tako da je

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

gdje je

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

zove se QR faktorizacija matrice G.

Definicija QR faktorizacije (nastavak)

Ako postoji, prethodna faktorizacija može se pisati i u jednostavnijoj (tzv. skraćenoj) 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 $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, i neka je $\mathrm{rang}(G) = n$. Tada postoji jedinstvena faktorizacija oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

pri čemu 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).

Pravokutnu matricu Q_0 s ortonormiranim stupcima, također, skraćeno zovemo "ortogonalnom".

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Dokaz. Najjednostavniji dokaz ovog teorema dobiva se korištenjem Gram-Schmidtove ortogonalizacije.

Ako stupce matrice

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

ortogonaliziramo slijeva udesno, dobit ćemo ortonormalni niz vektora $q_1, \ldots, q_n$, 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

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

Koeficijenti r_{ji} su upravo elementi matrice R_0.

Iz Gram–Schmidtovog algoritma bit će jasno da se može uzeti $r_{ii} > 0$ (dovoljno je $r_{ii} \neq 0$ za fiksiranje predznaka). ■

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.
- No, 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 vrlo loše uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klasični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam:

```
za i = 1 do n radi {
  /* Nađi i-ti stupac od Q_0 i R_0 */
  q_i = g_i;
  za j = 1 do i - 1 radi {
    /* Oduzmi komponentu od 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 (nastavak)

```
    r_ii = ‖q_i‖₂;
    ako je r_ii > 0 onda {
      q_i = q_i / r_ii;
    }
    inače {
      /* Matrica R_0 je singularna -- stani */
    };
  };
```

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

- g_i linearna kombinacija prethodnih stupaca matrice G (linearna zavisnost, pad ranga).

Pokažite da su dvije formule za r_{ji} koje koriste CGS i MGS matematički ekvivalentne. Numerički, naravno, nisu (greške).

Gram–Schmidtov algoritam — komentari

Gram–Schmidtov algoritam daje skraćenu QR faktorizaciju $G = Q_0 R_0$. Za “punu” faktorizaciju, tj. kvadratni Q,

- fali nam ortogonalni komplement $Q_0^\perp$,

kojeg nemamo iz čega izračunati — “fale” stupci u G.

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

$$r_{ii} = \pm\|q_i\|_2.$$

Dakle, bilo kojim fiksiranjem predznaka na dijagonali od R_0,

- opet dobivamo jedinstvenu skraćenu QR faktorizaciju.

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 između 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 skraćenu i punu QR faktorizaciju.

Givensove rotacije

Givensove rotacije

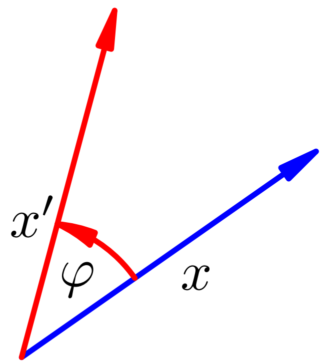
Matrica oblika

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

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.

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



Givensove rotacije u (i,j) ravnini

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

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Matrica $R(i,j,\varphi)$ je ortogonalna, i $R(i,j,\varphi)^{-1} = R(i,j,\varphi)^T$ $= R(i,j,-\varphi)$. 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 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'.

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Drugi redak u matričnoj jednadžbi opisuje poništavanje

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

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

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

Odavde, korištenjem trigonometrijskog identiteta

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

slijedi

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

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

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

iz prve jednadžbe dobivamo

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

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

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

Sustavno poništavanje — QR faktorizacija

Sustavnim poništavanjem elemenata, konstruirat ćemo QR faktorizaciju matrice G.

- Postoji puno redosljeda kako napraviti nule u faktoru G.
- U sljedećem primjeru uzet je "standardni" redosljed redom, po stupcima, odozgo nadolje.

Poništavanje.

- Počinjemo s prvim stupcem i poništavamo redom elemente $g_{21}, \ldots, g_{m1}$.
- Ponovimo to isto za drugi, treći i svaki daljnji stupac od dijagonalnog mjesta nadolje.
- Time nećemo "pokvariti" već sređene nule u prethodnim stupcima.

Sustavno poništavanje - primjer

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

1. stupac:

- U radnoj matrici G, redom poništavamo elemente

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

rotacijama $R(1, i, \varphi_{1i})$, koje "nabacuju" normu prvog stupca na prvi element u stupcu.

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

Sustavno poništavanje - primjer (nastavak)

2. stupac:

- U radnoj matrici G, redom poništavamo elemente

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

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 se više ne mijenja.

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

Sustavno poništavanje - primjer (kraj)

3. stupac:

- U radnoj matrici G, redom poništavamo elemente

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

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 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

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 odvijanja rotacija, usput, još dozvoljava i paralelizaciju algoritma.

Poredak poništavanja (nastavak)

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).

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

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

Parovi su: $(1,2)$ i $(3,4)$, $(1,3)$ i $(2,4)$, a na samom kraju više "ne ide".

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}.
- Zaključak: $G = QR$.
- Produkt ortogonalnih matrica je ortogonalna, pa je $Q^{-1} = Q^T$. Dakle, Q se lako računa iz Q^T.

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

Puni i skraćeni Q

U punoj QR faktorizaciji, kvadratnu matricu Q, reda m, dobivamo akumulacijom inverza rotacija slijeva, na početnu jediničnu matricu I_m reda m, ali u obrnutom poretku

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

Pravokutnu matricu Q_0 iz skraćene QR faktorizacije

- dobivamo trivijalno — radeći na prvih n stupaca!

Dovoljno je startati s matricom $I_m(:,1:n)$ koja sadrži prvih n stupaca jedinične matrice I_m

$$Q_0 = R(1,2,-\varphi_{12}) \cdots R(n,m,-\varphi_{nm})\, I_m(:,1:n).$$

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

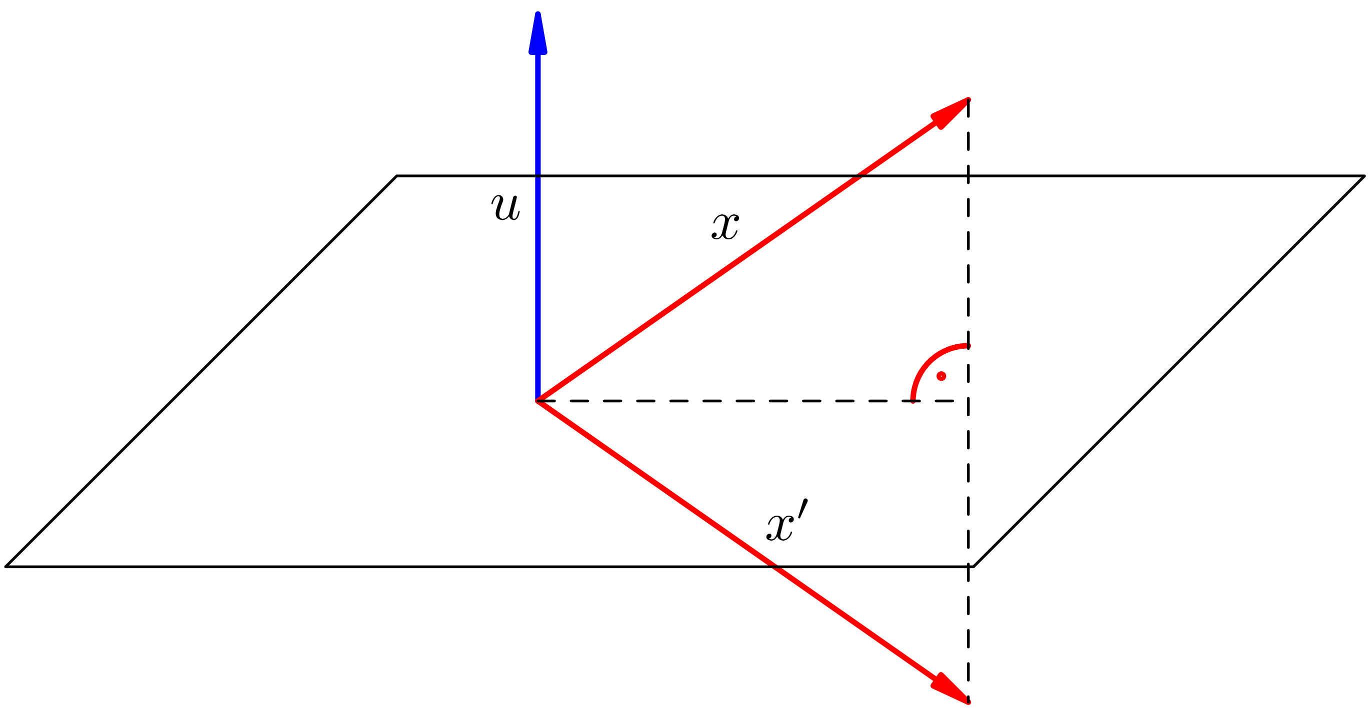
- simetrična,
- i ortogonalna, jer je

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

Zašto baš ime reflektor?

Promatrajmo hiperravninu koja je okomita na vektor u.

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



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

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

(u^Tx je broj — skalarni produkt!)

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

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

Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

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

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

$$Hx = ce_1,$$

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

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

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

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

tj. oba su pribrojnika istog znaka.

Drugi način definicije H

Napomena. Računanje u se može izbjeći, ako definiramo

$$H(\widetilde{u}) = I - \gamma \widetilde{u}\, \widetilde{u}^T \qquad \text{gdje je } \gamma = \frac{2}{\widetilde{u}^T \widetilde{u}}.$$

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:

$$Hz = (I - \gamma \widetilde{u}\widetilde{u}^T) z = z - \gamma (\widetilde{u}^T z) \widetilde{u}.$$

Dakle, treba izračunati skalarni produkt $\widetilde{u}^T z$, 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 $\bar{H}_2$.

  Ortogonalna matrica kojom smo djelovali na radnu matricu je onda

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & \bar{H}_2 \end{bmatrix}.$$

QR faktorizacija korištenjem reflektora (nast.)

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
$$H_k = \begin{bmatrix} I & \\ & \bar{H}_k \end{bmatrix},$$
s tim da je I reda $k - 1$, a $\bar{H}_k$ reda $m - k + 1$.

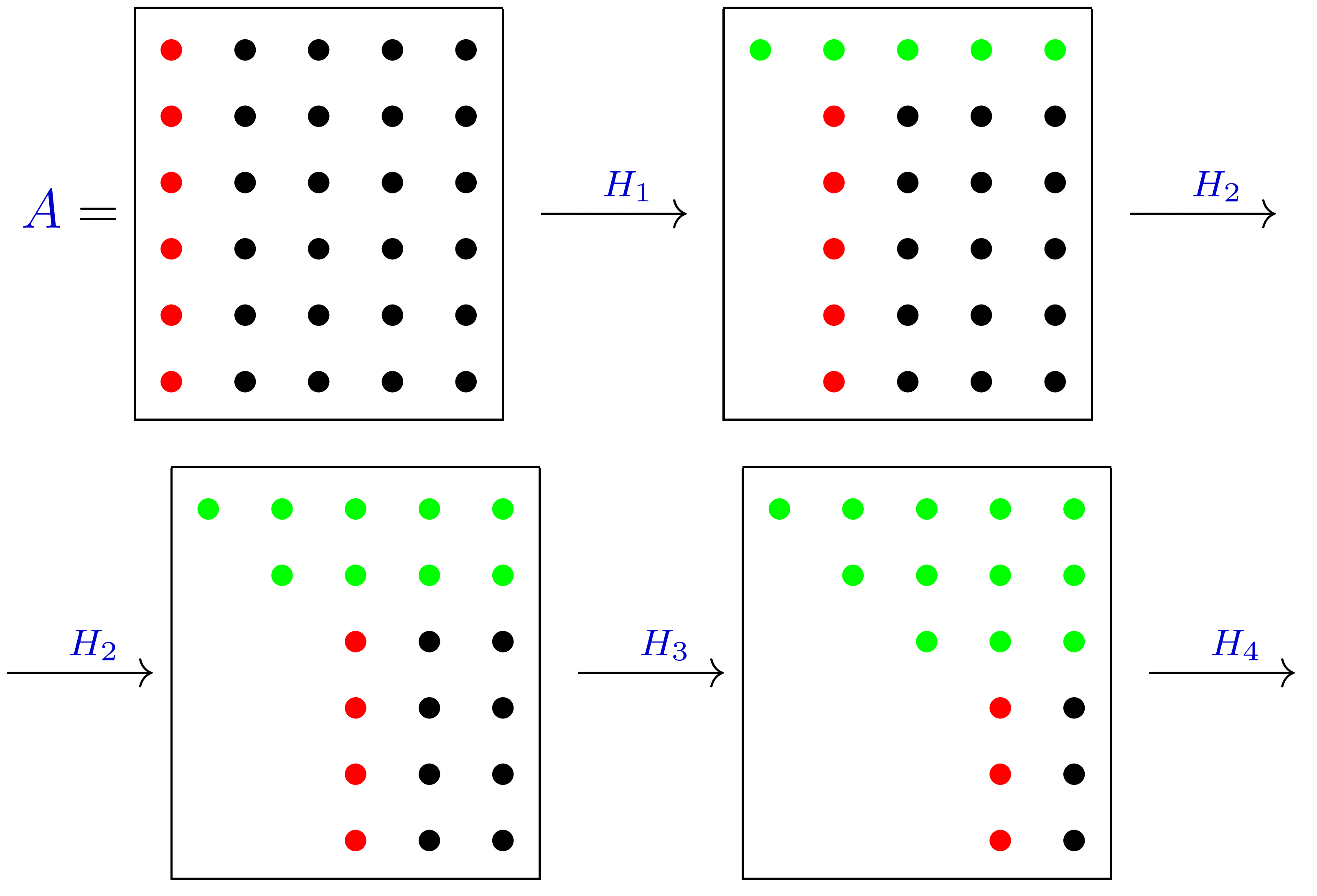
Ako želimo formirati matricu Q, onda je

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

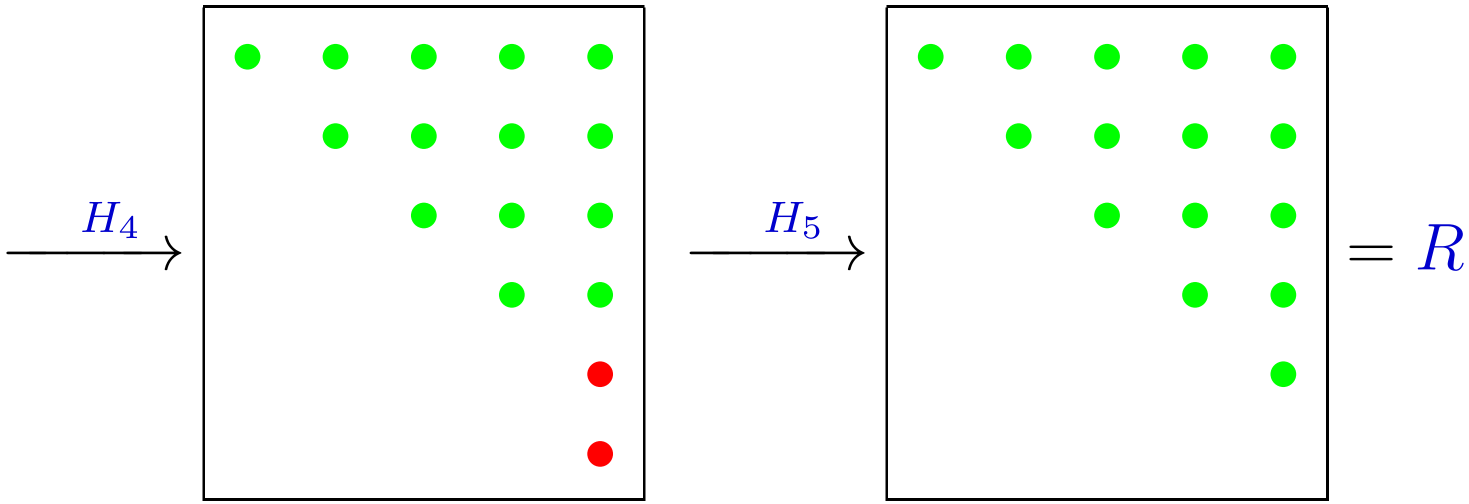
ili

$$Q = (H_n H_{n-1} \cdots H_1)^T = H_1 \cdots H_{n-1} H_n.$$

QR faktorizacija korištenjem reflektora (nast.)



QR faktorizacija korištenjem reflektora (nast.)



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 (nastavak)

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 (nastavak)

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 $x_\ell = [r_{k,\ell}^{(k-1)} \ \cdots \ r_{m,\ell}^{(k-1)}]^T$, $\ell = k, \ldots, n$, 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 $r \times n$, tako da vrijedi

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

i

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

Oblik matrice R nakon pivotiranja

Za $r < n$, R ima zapravo trapezni oblik

$$R = \begin{array}{|ccccc|l}
\hline
* & * & * & * & * & \rule{0pt}{0pt} \\
 & * & * & * & * & \bigg\} \, r \\
 & & * & * & * & \\
 & & & & & \\
 & & & & & \\
 & & & & & \\
\hline
\end{array}$$

pri čemu su dijagonalni elementi u nerastućem poretku.

Rješenje matrične formulacije problema najmanjih kvadrata korištenjem QR faktorizacije

Korištenje QR faktorizacije — puni rang

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

Prisjetimo se, ako je A punog stupčanog ranga (tj. vrijedi $\mathrm{rang}(A) = n$), 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 — puni rang (nast.)

Za Q uzmimo ortogonalnu matricu iz QR faktorizacije, pa je

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

Korištenje QR faktorizacije — puni rang (nast.)

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 — puni rang

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 $A^T A$ 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 — puni rang (nastavak)

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

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

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang

- U ovom slučaju prvo trebamo odrediti rang matrice A i zbog toga se koristi QR faktorizacija sa stupčanim pivotiranjem.
- Ako matrica A ima rang $r < n$, onda njena QR faktorizacija sa pivotiranjem ima oblik

$$
AP = QR = Q \begin{array}{cc}
\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} r \\ n-r \\ m-n \end{array} \\
\begin{array}{cc} r & n-r \end{array} &
\end{array},
$$

gdje je R_{11} regularna reda r, R_{12} neka $r \times (n-r)$ matrica, a matrica P je $n \times n$ matrica permutacija.

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Kod rješavanja problema najmanjih kvadrata tada imamo

$$\begin{aligned} \|b - Ax\|_2^2 &= \|Q^T b - (Q^T A P)(P^T x)\|_2^2 \\ &= \left\| \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \|(c - R_{12} z) - R_{11} y\|_2^2 + \|d\|_2^2, \end{aligned}$$

gdje je

$$P^T x = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array}, \quad i \quad Q^T b = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} r \\ m-r \end{array}.$$

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Prema tome, ako tražimo x koji minimizira normu reziduala, tada on mora zadovoljavati

$$x = P \begin{bmatrix} R_{11}^{-1}(c - R_{12}z) \\ z \end{bmatrix}.$$

  ali ovdje je teško odrediti x sa minimalnom normom.

- Ako stavimo da je $z = 0$ tada dobivamo osnovno rješenje

$$x = P \begin{bmatrix} R_{11}^{-1}c \\ 0 \end{bmatrix},$$

  koje samo ne mora imati minimalnu normu u skupu svih rješenja, ali ga je jednostavno izračunati i ima najviše r elemenata različitih od nule.

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Do rješenja problema najmanjih kvadrata sa minimalnom normom možemo, s druge strane, doći pomoću potpune ortogonalne dekompozicije.
- U jednakosti $AP = QR$ možemo izvesti još jednu QR faktorizaciju, i to na sljedeći način.
- Trebamo izračunati $n \times n$ ortogonalnu matricu Z takvu da je

$$Z \begin{bmatrix} R_{11}^T \\ R_{12}^T \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} L_{11}^T \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} {\scriptstyle r} \\ {\scriptstyle n-r} \end{array} \quad \text{tj.} \quad \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \end{bmatrix} Z^T = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \end{bmatrix},$$

gdje je L_{11} $r \times r$ regularna donje trokutasta matrica.

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Tada slijedi

$$Q^T A S = L = \begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} L_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right] & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array},$$

  gdje je $S = PZ^T$.
- Primijetimo da je $\mathcal{N}(A) = \mathcal{R}(S(1:n, r+1:n))$.

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Kod rješavanja problema najmanjih kvadrata tada imamo

$$
\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2^2 &= \|(Q^T A S) S^T x - Q^T b\|_2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \|L_{11} w - c\|_2^2 + \|d\|_2^2,
\end{aligned}
$$

gdje je

$$
S^T x = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} r \\ n - r \end{array} \qquad Q^T b = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} \begin{array}{c} r \\ m - r \end{array}.
$$

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Jasno je, da ako x treba minimizirati normu reziduala, tada moramo imati $w = L_{11}^{-1} c$, a da bi x imao minimalnu normu tada mora biti $v = 0$.
- U tom slučaju je

$$\begin{aligned} x &= S \begin{bmatrix} w \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S(:,1:r) & S(:,r+1:n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= S(:,1:r) w. \end{aligned}$$

- Vrijedi da je

$$x \in \mathcal{R}(S(:,1:r)) \perp \mathcal{R}(S(:,r+1:n)) = \mathcal{N}(A),$$

što smo pokazali da mora vrijediti za jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata sa minimalnom normom.

Korištenje QR faktorizacije — defektni rang (n.)

- Dakle, konačno rješenje problema najmanjih kvadrata sa minimalnom normom glasi

$$x = PZ^T \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} Q(:, 1:r)^T b \\ 0 \end{bmatrix}.$$