Znanstveno računanje 1

4. dio vježbi
Problem najmanjih kvadrata

Nela Bosner

Problem najmanjih kvadrata

- Pretpostavimo da imamo skup mjerenih podataka (t_k, y_k), $k = 1, \ldots, m$, i želimo taj model aproksimirati funkcijom oblika $\varphi(t)$.
- Ako je $\varphi(t)$ linearna, tj. ako je

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

onda bismo željeli pronaći parametre x_j tako da mjereni podaci (t_k, y_k) zadovoljavaju

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

- Ako označimo

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

  onda prethodne jednadžbe možemo u matričnom obliku pisati kao

$$Ax \approx b,$$

  pri čemu je $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ i $b = [b_i] \in \mathbb{R}^m$.
- Ako je mjerenih podataka više nego parametara, tj. ako je $m > n$, onda ovaj sustav jednadžbi ima više jednadžbi nego nepoznanica, pa je **preodređen**.

Postoji mnogo načina da se odredi “najbolje” rješenje,

- zbog statističkih razloga to je često metoda najmanjih kvadrata.
- Funkcija φ određuje se iz uvjeta da euklidska norma (norma 2) vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije bude najmanja moguća, tj. tako da minimiziramo S,

$$S = \sum_{k=0}^{m} (y_k - \varphi(t_k))^2 \to \min .$$

- tj. određujemo x tako da minimizira rezidual $r = Ax - b$

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

- Ako je $\mathrm{rang}(A) < n$, onda rješenje x ovog problema očito **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 $\|x\|_2$.

- Iz geometrijske interpretacije problema najmanjih kvadrata odmah vidimo da je za rješenje x, Ax ortogonalna projekcija vektora b na $\mathrm{Im}(A)$.
- To se lako može provjeriti ako definiramo diferencijabilnu funkciju

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

i izjednačimo $\nabla\phi(x) = 0$ (ekvivalentno traženju minimuma $\min_x \|Ax - b\|_2$).
- Vrijedi

$$\nabla\phi(x) = A^T Ax - A^T b,$$

a iz $\nabla\phi(x) = 0$ slijedi

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

- Da se zaista radi o minimumu, provjerimo Hessian

$$H\phi = A^T A$$

i on je

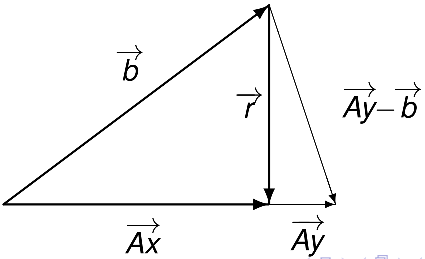
  - pozitivno definitan u slučaju da je matrica A punog stupčanog ranga, pa tada postoji jedinstveni minimum, i on je rješenje sustava

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

  - pozitivno semidefinitan u slučaju da matrica A nema puni stupčani rang, pa se tada minimum postiže na čitavom afinom potprostoru

$$x + \mathrm{Ker}(A), \text{ gdje je } x \text{ neko rješenje.}$$

- Sada, ako sa $\overrightarrow{b}$, $\overrightarrow{Ax}$ i $\overrightarrow{r}$ označimo vektore u vektorskom prostoru $\mathbb{R}^m$, pri čemu je x je rješenje problema najmanjih kvadrata, tada imamo da je
  - $\overrightarrow{b} = \overrightarrow{Ax} - \overrightarrow{r}$,
  - $(Ay)^T r = 0$ za svaki $y \in \mathbb{R}^n$, odnosno $\overrightarrow{r} \perp \mathrm{Im}(A)$.
- Na kraju možemo zaključiti da je $\overrightarrow{Ax}$ dobiven iz $\overrightarrow{b}$, tako što mu se oduzela komponenta okomita na $\mathrm{Im}(A)$, pa je $\overrightarrow{Ax}$ zaista ortogonalna projekcija od $\overrightarrow{b}$ na $\mathrm{Im}(A)$.



Matrični problem najmanjih kvadrata može se riješiti na više načina, koji uključuju neke istaknute faktorizacije matrice A:

- dekompoziciju singularnih vrijednosti (SVD)
- QR faktorizaciju

Rješavanje problema najmanjih kvadrata pomoću SVD-a

- Ako A ima puni stupčani rang, onda je rješenje problema najmanjih kvadrata

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

jednako

$$x = V\Sigma_+^{-1} U(:, 1:n)^T b,$$

i vrijednost minimuma je

$$\min_x \|Ax - b\|_2 = \|U(:, n+1:m)^T b\|_2.$$

- Ako A nema puni stupčani rang (rang je $r < n$), tada se sva rješenja problema najmanjih kvadrata mogu napisati u obliku

$$x = V(:, 1:r)\Sigma_+^{-1} U(:, 1:r)^T b + V(:, r+1:n)z,$$

gdje je $z \in \mathbb{R}^{n-r}$ proizvoljni vektor, a $V(:, r+1:n)z$ predstavlja jedan vektor iz $\mathrm{Ker}(A)$.

- Rješenje x koje ima minimalnu 2-normu je ono za koje je $z = 0$, tj.

$$x = V(:, 1:r)\Sigma_+^{-1}U(:, 1:r)^T b,$$

i vrijedi ocjena

$$\|x\|_2 \leq \frac{\|b\|_2}{\sigma_{min}(A)}.$$

Zadaci

Zadatak

Zadane su točke u ravnini

$$(1,3.5),\ (2,4.9),\ (3,6.8)\ (4,9.3),\ (5,10.9),\ (6,13.4),\ (7,15.1),$$

$$(8,16.7),\ (9,19)\ (10,21.2)$$

koje treba aproksimirati pravcem

$$f(x) = a_0 + a_1 x,$$

koristeći metodu najmanjih kvadrata pomoću SVD-a. Iz ovih podataka možemo zaključiti da se radi o malo perturbiranim točkama sa pravca $p(x) = 2x + 1$.

Napomena

Podsjetimo se, matrica i desna strana problema su oblika

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 5 \\ 1 & 6 \\ 1 & 7 \\ 1 & 8 \\ 1 & 9 \\ 1 & 10 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 3.5 \\ 4.9 \\ 6.8 \\ 9.3 \\ 10.9 \\ 13.4 \\ 15.1 \\ 16.7 \\ 19 \\ 21.2 \end{bmatrix}.$$

Sada računamo SVD dekompoziciju matrice A.

Napomena (nastavak)

Dobit ćemo

$$U(:,1:2) = \begin{bmatrix} 0.0571 & -0.5850 \\ 0.1070 & -0.4869 \\ 0.1570 & -0.3887 \\ 0.2069 & -0.2906 \\ 0.2569 & -0.1925 \\ 0.3068 & -0.0944 \\ 0.3567 & 0.0037 \\ 0.4067 & 0.1019 \\ 0.4566 & 0.2000 \\ 0.5065 & 0.2981 \end{bmatrix},$$

$$\Sigma_+ = \begin{bmatrix} 19.8217 & 0 \\ 0 & 1.4491 \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 0.1422 & -0.9898 \\ 0.9898 & 0.1422 \end{bmatrix},$$

Napomena (nastavak)

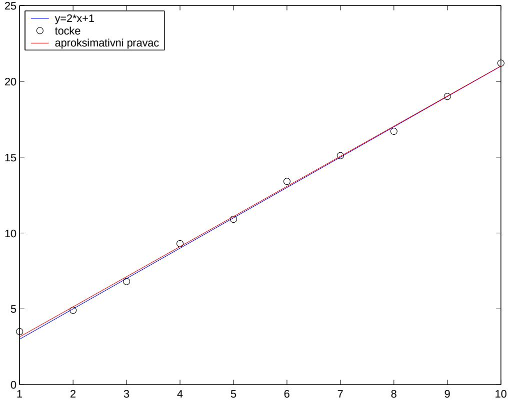
a rješenje problema najmanjih kvadrata je dano sa

$$x = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = V\Sigma_+^{-1}U(:,1:2)^T b = \begin{bmatrix} 1.1667 \\ 1.9842 \end{bmatrix},$$

odnosno, ovime smo izračunali tražene koeficijente pravca

$$a_0 = 1.1667 \qquad a_1 = 1.9842.$$

Dakle aproksimativni pravac je $\hat{p}(x) = 1.1667 + 1.9842x$.



Slika: Aproksimativni pravac za točke iz prethodnog zadatka, dobiven kao rezultat problema najmanjih kvadrata.

Rješavanje problema najmanjih kvadrata pomoću QR faktorizacije

Teorem (QR dekompozicija)

Neka je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, uz $m \geq n$. Tada postoji ortogonalna matrica $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ takva da je

$$Q^T A = R = \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

gdje je $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$, a $R_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gornjetrokutasta matrica s nenegativnim dijagonalnim elementima. Tada je

$$A = QR.$$

QR faktorizaciju možemo izračunati na više načina:

- ortogonalna matrica Q dobiva se uzastopnim množenjem elementarnih ortogonalnih matrica,
- kao što su: reflektori ili rotacije.

- Ako A ima puni stupčani rang, onda je rješenje problema najmanjih kvadrata
$$x = R_1^{-1} Q(:, 1:n)^T b.$$
  - Preciznije, da bismo našli x, rješavamo trokutasti linearni sustav
$$R_1 x = Q(:, 1:n)^T b.$$
- Ako A nema puni stupčani rang, tada prvo trebamo odrediti rang matrice A koristeći QR faktorizaciju sa stupčanim pivotiranjem.
  - Ako matrica A ima rang $r < n$, onda njena QR faktorizacija ima oblik
$$AP = QR = Q \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} r \\ n-r \\ m-n \end{array} \\ \begin{array}{cc} \;\; r \quad & \quad n-r \end{array} & \end{array},$$

- gdje je R_{11} regularna reda r sa nerastućom dijagonalom, R_{12} neka $r \times (n-r)$ matrica, a matrica P je $n \times n$ matrica permutacija.
- Kad se nakon pivotiranja u tekućem koraku, i poništavanja ispoddijagonalnih elemenata u tekućem stupcu, na dijagonali nađe 0, tada znamo da je donji desni $(n-r) \times (n-r)$ blok matrice R_1 jednak nulmatrici.
- Sva se rješenja problema najmanjih kvadrata mogu napisati u obliku

$$x = P \begin{bmatrix} R_{11}^{-1}(Q(:,1:r)^T b - R_{12} z) \\ z \end{bmatrix}.$$

  gdje je $z \in \mathbb{R}^{n-r}$ proizvoljni vektor.
- Do rješenja problema najmanjih kvadrata sa minimalnom 2-normom možemo doći pomoću **potpune ortogonalne dekompozicije**.

- Možemo izvesti još jednu QR faktorizaciju, i to na sljedeći način: trebamo izračunati $n \times n$ ortogonalnu matricu Z takvu da je

$$Z \begin{bmatrix} R_{11}^T \\ R_{12}^T \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} L_{11}^T \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array}$$

gdje je L_{11}^T $r \times r$ gornjetrokutasta matrica.

- Tada slijedi

$$Q^T AS = L = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array},$$

gdje je $S = PZ^T$, a $\mathrm{Im}(S(:, r+1:n)) = \mathrm{Ker}(A)$.

- Rješenje problema najmanjih kvadrata sa minimalnom normom onda glasi

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

QR faktorizacija pomoću Householderovih reflektora

- Za zadani vektor $a \in \mathbb{R}^m$, $a \neq 0$, tražimo ortogonalnu matricu $H \in \mathbb{R}^{m \times m}$ takvu da je

$$Ha = -\alpha e, \text{ gdje je } e \in \mathbb{R}^m, \ \|e\|_2 = 1 \text{ zadani vektor.}$$

- Za $a = 0$ je $H = I$ i nužno je $\alpha = 0$.
- Za H zahtijevamo da je oblika

$$H = I - \frac{1}{\gamma} v v^T, \qquad \text{gdje je } \gamma > 0, \ v \neq 0.$$

- Matrica H je **Householderov reflektor.**

Svojstva Householderovog reflektora:

- H simetrična matrica, tj. $H^T = H$.
- Za $\gamma = \frac{\|v\|_2^2}{2}$ je H ortogonalna matrica.
- Zbog ortogonalnosti od H mora biti $\|a\|_2 = |\alpha|$, pa definiramo

$$\alpha = \begin{cases} \|a\|_2, & e^T a \geq 0 \\ -\|a\|_2, & e^T a < 0 \end{cases}$$

  Predznak se bira zbog stabilnosti metode, da izbjegnemo fatalno kraćenje.
- Da bi vrijedila tražena svojstva matrice H, moramo definirati sljedeće:

$$\begin{aligned} v &= a + \alpha e \\ \gamma &= \|a\|_2(\|a\|_2 + |e^T a|) \end{aligned}$$

Napomena

- *Da bismo računali sa Householderovim reflektorom H uopće ga ne trebamo posebno računati kako bismo dobili njegov matrični oblik.*
- *Za $x \in \mathbb{R}^m$ je:*

$$Hx = \left(I - \frac{1}{\gamma} vv^T \right) x = x - \frac{v^T x}{\gamma} v.$$

- *Dakle, potrebno je izračunati samo skalarni produkt $v^T x$ i $\mu = \frac{v^T x}{\gamma} \in \mathbb{R}$, odakle je*

$$Hx = x - \mu v,$$

što je manje operacija nego generirati matricu H i množiti je vektorom.

- Householderove reflektore možemo primijeniti na traženje QR faktorizacije matrice A.
- Radimo direktno nad stupcima matrice, i to od dijagonale na dolje.
- Neka je $A = [\ a_1^{(1)} \quad \cdots \quad a_n^{(1)}\ ] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ za $m \geq n$.
- Ako je $a_1^{(1)} \neq 0$, stavimo li

$$e^{(1)} = e_1 \in \mathbb{R}^m,$$

znamo naći Householderov reflektor H_1 takav da je

$$H_1 a_1^{(1)} = -\alpha_1 e^{(1)}.$$

- Ako je $a_1^{(1)} = 0$, stavimo $H_1 = I$.

- Tada je

$$A^{(2)} = H_1 A^{(1)} = \left[\ H_1 a_1^{(1)} \quad \cdots \quad H_1 a_n^{(1)}\ \right] =$$

$$= \begin{bmatrix} -\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & & & & \\ \vdots & a_2^{(2)} & a_3^{(2)} & \cdots & a_n^{(2)} \\ 0 & & & & \end{bmatrix}.$$

- Ako je $a_2^{(2)} \neq 0 \in \mathbb{R}^{m-1}$, postoji Householderova matrica $\bar{H}_2 \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(m-1)}$ takva da je

$$\bar{H}_2 a_2^{(2)} = -\alpha_2 e_1,$$

uz $e_1 \in \mathbb{R}^{m-1}$.
- Za

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{H}_2 \end{bmatrix}$$

imamo

$$H_2A^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{H}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & & & & \\ \vdots & a_2^{(2)} & a_3^{(2)} & \cdots & a_n^{(2)} \\ 0 & & & & \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} -\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & -\alpha_2 & & & \\ \vdots & \vdots & \bar{H}_2a_3^{(2)} & \cdots & \bar{H}_2a_n^{(2)} \\ 0 & 0 & & & \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} -\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & -\alpha_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & a_3^{(3)} & \cdots & a_n^{(3)} \\ 0 & 0 & & & \end{bmatrix}$$

- Nastavljamo tako dalje, svaki puta smanjujući dimenziju problema i radeći sa

$$A^{(k)}(k:m,k:n) \quad \text{i} \quad \bar{H}_k \in \mathbb{R}^{(m-k+1)\times(m-k+1)},$$

a $H_k \in \mathbb{R}^{m\times m}$ definiramo sa

$$H_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \bar{H}_k \end{bmatrix}.$$

Na kraju imamo

$$H_n H_{n-1} \cdots H_1 A = \begin{bmatrix} -\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & -\alpha_2 & * & \cdots & * \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & & & -\alpha_n \\ 0 & 0 & & & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & & & 0 \end{bmatrix} = R,$$

- Dakle $A = QR$, gdje je $Q = H_1 \cdots H_n$.
- Želim li u R nenegativnu dijagonalu, prethodnu jednakost slijeva još pomnožimo matricom

$$H_{n+1} = \mathrm{diag}(-\mathrm{sign}(\alpha_1), \ldots, -\mathrm{sign}(\alpha_n), 1, \ldots, 1),$$

koja je ortogonalna.

Napomena

- *I kod QR faktorizacije se može* ***pivotirati*** *i to tako da se stupac najveće norme (od dijagonale na dolje* $a_k^{(k)}, \ldots, a_n^{(k)}$*) dovede na pivotno mjesto i njega se poništi ispod dijagonale.*
- *To se koristi kad želimo naći rang matrice, jer su dijagonalni elementi matrice R sortirani padajuće po apsolutnim vrijednostima.*
- *Imamo*

$$H_n(\cdots H_2((H_1(AI_{1,j_1}))I_{2,j_2})\cdots I_{n,j_n}) = R,$$

tj.

$$Q^T AP = R, \quad \Longrightarrow \quad AP = QR.$$

Računanje QR faktorizacije pomoću Householderovih reflektora implementira CLAPACK-ov potprogram `dgeqrf_()`.

- Poziv potprograma je

```
int dgeqrf_(integer *m, integer *n,
doublereal *a, integer * lda, doublereal
*tau, doublereal *work, integer *lwork,
integer *info);
```

`m`	(ulaz) broj redaka matrice A
`n`	(ulaz) broj stupaca matrice A
`a`	(ulaz) matrica A; (izlaz) elementi iznad i na dijagonali sadrže R_1; elementi ispod dijagonale sadrže Householderove vektore
`lda`	(ulaz) vodeća dimenzija polja `a` ($lda \geq m$)

`tau`	(izlaz) skalarni faktori γ_i Householderovih reflektora
`work`	pomoćno polje dimenzije *ldw*
`ldw`	(ulaz) vodeća dimenzija polja `work`, $ldw \geq n$
`info`	(izlaz) informacija o izvršavanju potprograma (0=OK)

Računanje QR faktorizacije s pivotiranjem pomoću Householderovih reflektora implementira CLAPACK-ov potprogram `dgeqp3_()`.

- Poziv potprograma je

```
int dgeqp3_(integer *m, integer *n,
doublereal *a, integer * lda, integer
*jpvt, doublereal *tau, doublereal
*work, integer *lwork, integer *info);
```

`m`	(ulaz) broj redaka matrice A
`n`	(ulaz) broj stupaca matrice A
`a`	(ulaz) matrica A; (izlaz) elementi iznad i na dijagonali sadrže R_1; elementi ispod dijagonale sadrže Householderove vektore
`lda`	(ulaz) vodeća dimenzija polja `a` ($lda \geq m$)
`jpvt`	cjelobrojno polje dimenzije n; (ulaz) ako je `jpvt`$[j] \neq 0$, j-ti stupac od A je permutiran u prvi stupac od AP; ako je `jpvt`$[j] = 0$, j-ti stupac od A je slobodan stupac; (izlaz) ako je `jpvt`$[j] = k$, tada je j-ti stupac od AP bio k-ti stupac od A

`tau`	(izlaz) skalarni faktori γ_i Householderovih reflektora
`work`	pomoćno polje dimenzije *ldw*
`ldw`	(ulaz) vodeća dimenzija polja `work`, $ldw \geq 3n + 1$
`info`	(izlaz) informacija o izvršavanju potprograma (0=OK)

- Za generiranje matrice Q koristite potprogram `dorgqr_()`, a za množenje s matricom Q koristite `dormqr_()`.

Mnogo točnije je raditi QR faktorizaciju pomoću Givensovih rotacija, iako taj postupak zahtijeva više operacija.

QR faktorizacija pomoću Givensovih rotacija

- **Givensove rotacije** su kvadratne matrice koje su dobivene ulaganjem dvodimenzionalnih rotacija u veću jediničnu matricu.

$$
R(p,q;\phi) = \begin{array}{c c}
\left[\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & \vdots & & & & \vdots & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & & \vdots & & 0 & \\
 & & 1 & \vdots & & & & \vdots & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & c & \cdots & \cdots & \cdots & -s & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & \vdots & 1 & & & \vdots & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & \vdots & & & & \\
 & & & \vdots & & & 1 & \vdots & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & s & \cdots & \cdots & \cdots & c & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & \vdots & & & & \vdots & 1 & & \\
 & 0 & & \vdots & & & & \vdots & & \ddots & \\
 & & & \vdots & & & & \vdots & & & 1
\end{array}\right] & \begin{array}{c} \\ \\ \\ p \\ \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \\ \end{array} \\
\begin{array}{ccccccccccc} & & & p & & & & q & & & \end{array} &
\end{array}
$$

gdje su

$$
\begin{aligned}
R(p,q) = R(p,q;\phi) &\in \mathbb{R}^{n\times n}\\
c &= \cos\phi\\
s &= \sin\phi\\
\phi &\in [0,2\pi\rangle,
\end{aligned}
$$

a p i q su pivotni indeksi i smatramo da je $p < q$.

- Matrica $R(p,q;\phi)$ je očito ortogonalna i vrijedi

$$R(p,q;\phi)^{-1} = R(p,q;\phi)^T = R(p,q;-\phi).$$

- Pomnožimo li matricu $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ slijeva sa $R(p,q;\phi)^T$, u A se promijeni samo p-ti i q-ti redak, a sve ostalo ostaje isto.

- Zato umjesto velike matrice možemo gledati pripadnu ravninsku rotaciju

$$\bar{R} = \bar{R}(p, q; \phi) = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$$

i samo p-ti i q-ti redak od A.

- Neka su

$$[a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_n] \quad i \quad [b_1 \ b_2 \ \cdots \ b_n]$$

p-ti i q-ti redak od A i neka je $\tilde{A} = R^T A$.

- Zapravo mijenjamo samo ovo:

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_1 & \tilde{a}_2 & \cdots & \tilde{a}_n \\ \tilde{b}_1 & \tilde{b}_2 & \cdots & \tilde{b}_n \end{bmatrix}.$$

- ϕ ćemo odabrati tako da se u A poništi element na mjestu (q, r), tj. tako da je $\tilde{b}_r = 0$.

- Imamo:

$$\begin{aligned} ca_i + sb_i &= \tilde{a}_i \\ -sa_i + cb_i &= \tilde{b}_i, \qquad i = 1, \ldots, n \end{aligned}$$

- Iz uvjeta $\tilde{b}_r = 0$, je

$$cb_r = sa_r,$$

$$\bar{R}^T \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_r \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Budući da je $\bar{R}$ ortogonalna vrijedi

$$|\tilde{a}_r| = \left\| \begin{bmatrix} \tilde{a}_r \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \bar{R}^T \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} \right\|_2 = \sqrt{a_r^2 + b_r^2}.$$

- $\tilde{a}_r$ biramo tako da bude pozitivan:

$$\tilde{a}_r = \sqrt{a_r^2 + b_r^2} > 0.$$

- Ako je $a_r = b_r = 0$ tada $\bar{R} = I$.
- Napokon, dobivamo

$$c = \frac{a_r}{\tilde{a}_r}, \qquad s = \frac{b_r}{\tilde{a}_r}.$$

Napomena

Zbog točnijeg računanja u aritmetici konačne preciznosti, c i s se često računaju kao

- $|b_r| > |a_r|$

$$\tau = \frac{a_r}{b_r}, \quad s = \frac{sign(b_r)}{\sqrt{1+\tau^2}}, \quad c = s\tau,$$

- $|b_r| \leq |a_r|$

$$\tau = \frac{b_r}{a_r}, \quad c = \frac{sign(a_r)}{\sqrt{1+\tau^2}}, \quad s = c\tau.$$

- Givensove rotacije poništavaju element po element matrice A.
- Za dobivanje QR faktorizacije potrebno je poništiti sve elemente donjeg trokuta matrice A, i to tako da se jednom poništeni element (jednak nuli) više ne mijenja.
- Način na koji biramo kojim redom ćemo ih poništavati zove se **pivotna strategija**.
- Najčešća pivotna strategija je poništavanje po stupcima:

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 5 & * & * & * & * \\ 4 & 9 & * & * & * \\ 3 & 8 & 12 & * & * \\ 2 & 7 & 11 & 14 & * \\ 1 & 6 & 10 & 13 & 15 \end{bmatrix},$$

i to tako da se na poziciji (i, j) element poništi Givensovom rotacijom $R_j(i-1, i)$.

- Na kraju, za $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ dobivamo da je

$$R_n(n, n+1)^T \cdots R_n(m-2, m-1)^T R_n(m-1, m)^T \cdots R_2(2, 3)^T \cdots R_2(m-2, m-1)^T \cdot$$
$$\cdot R_2(m-1, m)^T \cdot R_1(1, 2)^T \cdots R_1(m-2, m-1)^T R_1(m-1, m)^T A = R,$$

tj. $A = QR$, gdje se matrica Q tada dobiva kao produkt odgovarajućih Givensovih rotacija

$$Q = R_1(m-1, m) \cdots R_1(1, 2) R_2(m-1, m) \cdots R_2(2, 3) \cdots R_n(m-1, m) \cdots R_n(n, n+1).$$

- Definiramo

$$\bar{R}_j(i-1, i) = \begin{bmatrix} c_j^{(i-1,i)} & -s_j^{(i-1,i)} \\ s_j^{(i-1,i)} & c_j^{(i-1,i)} \end{bmatrix}$$

Algoritam (QR faktorizacija pomoću Givensovih rotacija)

$\boldsymbol{for}\ (j = 0; j < n; j++)\{$

$\quad \boldsymbol{for}\ (i = m-1; i > j; i--)\{$

$\quad\quad \boldsymbol{if}\ (fabs(a[i][j]) > fabs(a[i-1][j]))\{$

$$\tau = \frac{a[i-1][j]}{a[i][j]};$$

$$s_j^{(i-1,i)} = \frac{sign(a[i][j])}{\sqrt{1+\tau^2}};$$

$$c_j^{(i-1,i)} = s_j^{(i-1,i)}\tau;$$

$\quad\quad \}$

$\quad\quad \boldsymbol{else}\{$

$$\tau = \frac{a[i][j]}{a[i-1][j]};$$

$$c_j^{(i-1,i)} = \frac{sign(a[i-1][j])}{\sqrt{1+\tau^2}};$$

$$s_j^{(i-1,i)} = c_j^{(i-1,i)}\tau;$$

$\quad\quad \}$

Algoritam (QR faktorizacija pomoću Givensovih rotacija)

$a[i-1][j] = \sqrt{a[i-1][j]^2 + a[i][j]^2};$

$a[i][j] = 0;$

$\textbf{for}\ (k = j+1;\ k < n;\ k++)\{$

$\quad pom = a[i-1][k];$

$\quad a[i-1][k] = c_j^{(i-1,i)} \cdot a[i-1][k] + s_j^{(i-1,i)} \cdot a[i][k];$

$\quad a[i][k] = -s_j^{(i-1,i)} \cdot pom + c_j^{(i-1,i)} \cdot a[i][k];$

$\}$

$\}$

$\}$

$R = A;$

Zadaci

Zadatak

Napišite potprogram `givens_qr()` *koji računa QR faktorizaciju pomoću Givensovih rotacija. Ulazni parametri neka su*

- *dimenzije problema* m *i* n
- *matrica* A

a na izlazu neka se u gornjem trokutu matrice A *nalazi* R_1 *iz QR faktorizacije. Za rad sa Givensovim rotacijama koristite BLAS 1 potprograme*

- `rotg_()` *— generira rotaciju*
- `rot_()` *— primijenjuje rotaciju*

Zadatak

Svoj potprogram testirajte na matrici

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -2 & 0 & 3 \\ 6 & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Napomena

Rješenje bi trebalo biti

$$R = \begin{bmatrix} 6.7082 & 0.5963 & 1.3416 \\ 0 & 4.5436 & 0.7043 \\ 0 & 0 & 3.9628 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Zadatak

Ponovo su zadane točke u ravnini

$$(1, 3.5),\ (2, 4.9),\ (3, 6.8)\ (4, 9.3),\ (5, 10.9),\ (6, 13.4),\ (7, 15.1),$$

$$(8, 16.7),\ (9, 19)\ (10, 21.2)$$

koje treba aproksimirati pravcem

$$f(x) = a_0 + a_1 x,$$

koristeći metodu najmanjih kvadrata, ali ovaj puta pomoću QR faktorizacije. Koristite CLAPACK-ov potprogram `dgeqrf_()`.

Napomena

Dobit ćemo

$$R_1 = \begin{bmatrix} -3.1623 & -17.3925 \\ 0 & 9.0830 \end{bmatrix},$$

$$Q(:,1:2) = \begin{bmatrix} -0.3162 & -0.4954 \\ -0.3162 & -0.3853 \\ -0.3162 & -0.2752 \\ -0.3162 & -0.1651 \\ -0.3162 & -0.0550 \\ -0.3162 & 0.0550 \\ -0.3162 & 0.1651 \\ -0.3162 & 0.2752 \\ -0.3162 & 0.3853 \\ -0.3162 & 0.4954 \end{bmatrix},$$

Napomena (nastavak)

a rješenje problema najmanjih kvadrata je dano sa

$$x = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = R_1^{-1} Q(:, 1:2)^T b = \begin{bmatrix} 1.1667 \\ 1.9842 \end{bmatrix},$$

odnosno, ovime smo izračunali tražene koeficijente pravca

$$a_0 = 1.1667 \qquad a_1 = 1.9842.$$

Dakle aproksimativni pravac je $\hat{p}(x) = 1.1667 + 1.9842x$

Zadatak

Pretpostavimo da želimo riješiti problem najmanjih kvadrata, pri čemu je matrica $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{21\times 21}$ zadana kao u primjeru o procesiranju slike:

- *Definirana je funkcija*

$$f(x,y) = \frac{1}{250}(x^2y - x^2 - y^2 + 175) \qquad (x,y) \in [-5,5] \times [-5,5].$$

- *Definiramo točke*(x_i, y_j)*,* $i,j = 0,\ldots,20$*, sa*

$$x_i = -5 + 0.5i, \;\; y_j = -5 + 0.5j.$$

- $a_{ij} = f(x_i, y_j)$.

Vektor b je zadan sa

$$b = \begin{bmatrix} 10 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T.$$

Zadatak (nastavak)

- *Znamo da matrica A nema puni rang, zato ćemo morati koristiti potpunu ortogonalnu dekompoziciju za dobivanje rješenja sa minimalnom normom.*
- *Nakon izvođenja QR faktorizacije s pivotiranjem, koristite automatsko određivanje ranga tako da nađete prvi element na dijagonali matrice R koji je u ovom slučaju po apsolutnoj vrijednosti manji od* $21 \cdot 10^{-16}$.
- *Za drugu faktorizaciju koristite CLAPACK-ov potprogram za računanje LQ faktorizacije* `dgelqf_()`.
- *Koristite* `dorglq_()` *i* `dormlq_()` *za generiranje i množenje sa ortogonalnom matricom iz LQ faktorizacije.*
- *Za računanje* $S = PZ^T$ *koristite polje* `jpvt` *koje vraća potprogram* `dgeqp3_()`.

Napomena

Rješenje problema najmanjeg kvadrata iz prethodnog primjera sa najmanjom normom bi trebalo biti:

$$x = \begin{bmatrix} -0.6603 \\ -0.5875 \\ -0.5152 \\ -0.4434 \\ -0.3721 \\ -0.3013 \\ -0.2311 \\ -0.1614 \\ -0.0922 \\ -0.0235 \\ 0.0447 \\ 0.1124 \\ 0.1795 \\ 0.2462 \\ 0.3123 \\ 0.3779 \\ 0.4430 \\ 0.5075 \\ 0.5716 \\ 0.6351 \\ 0.6981 \end{bmatrix}.$$

Primjeri iz primjene: Integralne jednadžbe

Definicija

Neka je $\Delta = [a, b] \subseteq \mathbb{R}$ *segment u* $\mathbb{R}$ *i neka* $C(\Delta)$ *označava Banachov prostor neprekidnih realnih funkcija na* Δ, *s normom definiranom kao*

$$\|x\| = \max\{|x(t)| \ : \ t \in \Delta\}.$$

Neka je $k : \Delta' \times \Delta \longrightarrow \mathbb{R}$ *neprekidna funkcija, gdje je* Δ' *segment ne nužno jednak* Δ. *Tada, za svaki* $x \in C(\Delta)$, *funkcija* $t \longmapsto k(s, t)x(t)$ *je integrabilna u Riemannovom smislu i funkcija*

$$y(s) = \int_a^b k(s, t)x(t)dt, \qquad s \in \Delta' \tag{1}$$

je neprekidna na Δ'.

Definicija (nastavak)

Jednadžba (1) predstavlja ***Fredholmovu integralnu jednadžbu prve vrste****.*
Jednadžba (1) također definira i preslikavanje $K : C(\Delta) \longrightarrow C(\Delta')$ *takvo da* $x \longmapsto y$*, i ona se može zamijeniti jednadžbom*

$$y = Kx. \tag{2}$$

Operator K *zove se* ***Fredholmov integralni operator****, a funkcija* k *je* ***jezgra Fredholmovog integralnog operatora*** K*.*

Najčešći problem vezan uz Fredholmov integralni operator je za zadani $y \in C(\Delta')$ naći funkciju $x \in C(\Delta)$ takvu da jednakost (2) vrijedi.

Korolar

Ako je jezgra k operatora K neprekidna na $\Delta' \times \Delta$, tada je operator K iz Hilbertovog prostora $L_2(\Delta)$ u unitarni prostor $C(\Delta')$ kompaktan.

Teorem

Neka su $\mathcal{X}$ i $\mathcal{Y}$ Hilbertovi prostori i neka je $K : \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{Y}$ kompaktan operator beskonačnog ranga. Tada postoje ortonormalni nizovi $\{e_i\}$ u $\mathcal{X}$ i $\{f_i\}$ u $\mathcal{Y}$, te nizovi realnih brojeva $\{\boldsymbol{\sigma}_i\}$ gdje su

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \geq \boldsymbol{\sigma}_2 \geq \cdots \geq \boldsymbol{\sigma}_i \geq \cdots > 0, \qquad \lim_{i\to\infty} \boldsymbol{\sigma}_i = 0,$$

takvi da se svaki $x \in \mathcal{X}$ može izraziti kao

$$x = x_0 + \sum_{i=1}^{\infty} \langle x, e_i \rangle e_i, \qquad \text{pri čemu} \quad Kx_0 = 0,$$

i

$$Kx = \sum_{i=1}^{\infty} \boldsymbol{\sigma}_i \langle x, e_i \rangle f_i. \tag{3}$$

Teorem (nastavak)

Jednadžba (3) je ***Schmidtova reprezentacija operatora*** K. *Skalari* $\sigma_i > 0$ *označavaju singularne vrijednosti operatora* K

Napomena

- *Prethodni rezultati pokazuju da je Fredholmov integralni operator kompaktan i da njegove singularne vrijednosti teže ka nuli.*
- *Prema tome, rješavanje Fredholmove integralne jednadžbe predstavlja loše uvjetovani problem, i njegovo rješenje je ekstremno osjetljivo na greške u mjerenju kod ulaznih parametara.*

Numeričko rješavanje integralnih jednadžbi

- Fredholmova integralna jednadžba obično se koristi u fizici za modeliranje distorzije instrumenta kod mjerenja nepoznate funkcije $x(t)$.
- **Prvi korak** diskretizacije Fredholmove integralne jednadžbe je zamjena jednadžbe (1) sustavom jednadžbi

$$y_i = \int_a^b k(s_i, t)x(t)dt + \xi_i, \quad i = 1, \ldots, m,$$

gdje su

  - $k(s_i, t)$ dobro poznata očitovanja instrumenta,
  - $y_i = y(s_i)$ su izmjerene vrijednosti u čvorovima diskretne mreže $s_1, s_2, \ldots, s_m$,
  - ξ_i su slučajne greške mjerenja s očekivanjem nula.

- **Drugi korak** je diskretizacija integrala pomoću neke od metoda za numeričko integriranje, pri čemu bi greška diskretizacije trebala biti manja od grešaka mjerenja.
- Početni beskonačno dimenzionalni problem (1) se transformira u konačno dimenzionalni problem

$$\bar{y} = \bar{K}\bar{x} + \xi, \tag{4}$$

gdje su
  - $\bar{y} = [y_i] \in \mathbb{R}^m$ je vektor izmjerenih veličina,
  - $\bar{K} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je poznata matrica sa $m \geq n$,
  - $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ vektor nepoznanica čije su komponente ili aproksimacije od $x(t)$ u diskretnim čvorovima mreže $t_1, t_2, \ldots, t_n$, ili nepoznati koeficijenti u razvoju $x(t)$ po nekim baznim funkcijama.

- $\xi = [\xi_i] \in \mathbb{R}^m$ je vektor slučajnih grešaka mjerenja koji zadovoljava

$$E(\xi) = 0, \qquad E(\xi\xi^T) = S^2,$$

  gdje su
  - E je operator očekivanja, a $0 \in \mathbb{R}^m$,
  - $S^2 \in \mathbb{R}^{m \times m}$ je pozitivno definitna matrica kovarijance za ξ.
- Kod većine problema pretpostavlja se da su greške mjerenja statistički nezavisne, pa je

$$S^2 = \mathrm{diag}(\varsigma_1^2, \ldots, \varsigma_m^2),$$

  gdje su $\varsigma_1, \ldots, \varsigma_m$ poznate standardne devijacije greške.

Napomena

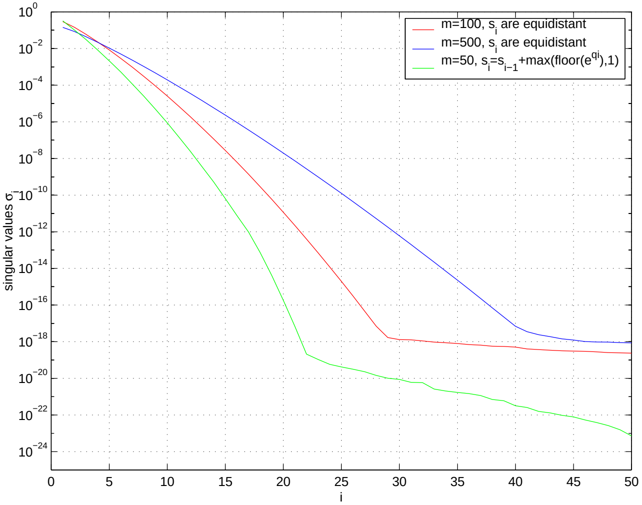
- *Diskretizacija loše uvjetovanog Fredholmove integralne jednadžbe rezultirat će loše uvjetovanim linearnim sustavom.*
- *To znači da singularne vrijednosti matrice $\bar{K}$ brzo teže ka nuli, i njen broj uvjetovanosti je veliki.*
- *Rješavanje problema najmanjih kvadrata $\min_{\bar{x}} \|\bar{K}\bar{x} - \bar{y}\|$ tada postaje ekstremno nestabilno, i izračunato rješenje $\bar{x}$ je beskorisno.*

Primjer

Za računanje distribucije veličina čestica u spektroskopiji fotonske korelacije potrebno je riješiti Fredholmovu integralnu jednadžbu prve vrste, kod koje je

$$k(s,t) = e^{-st}.$$

Kada se Fredholmov integralni operator diskretizira, dobivene singularne vrijednosti distribuirane su kao na sljedećoj slici.


m=100, s_i are equidistant
m=500, s_i are equidistant
m=50, s_i=s_{i−1}+max(floor(e^{qi}),1)
singular values σ_i
i
10^0
10^−2
10^−4
10^−6
10^−8
10^−10
10^−12
10^−14
10^−16
10^−18
10^−20
10^−22
10^−24
0
5
10
15
20
25
30
35
40
45
50

Primjer

Mjerenje gravitacije je također vezano uz Fredholmovu integralnu jednadžbu.

- *Varijacija gustoće podzemnih stijena rezultira varijacijama polja gravitacije na zemljinoj površini.*
- *Zbog toga, na temelju mjerenja polja gravitacije na zemljinoj površini možemo izračunati gustoće podzemnih stijena.*
- *Varijacija vertikalne komponente polja gravitacije $g(s)$ duž pravca s na površini povezana je sa varijacijom gustoće mase $f(t)$ duž segmenta pravca t ($0 \leq t \leq 1$) na dubini d ispod površine pomoću Fredholmove integralne jednadžbe prvog reda*

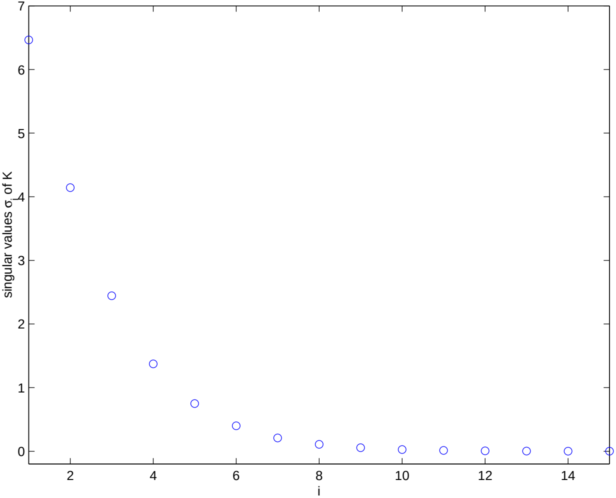
Primjer (nastavak)

$$g(s) = \int_0^1 k(s,t)f(t)dt$$

sa jezgrom

$$k(s,t) = \frac{d}{(d^2 + (s-t)^2)^{3/2}}.$$

- *Singularne vrijednosti matrice* $\bar{K} \in \mathbb{R}^{15\times 15}$ *dobivene diskretizacijama na ekvidistantnim mrežama jednog konkretnog problema prikazane su na sljedećoj slici.*
- *Rješenje problema* $\bar{f} = \bar{K}^{-1}\bar{g}$ *jako oscilira i neupotrebljivo je.*


singular values σ_i of K
i
0
1
2
3
4
5
6
7
2
4
6
8
10
12
14

- Obično se pretpostavlja da greške imaju normalnu distribuciju:
$$\xi \sim N(0, S^2).$$
- Zbog toga je iz vjerojatnosnih razloga korisno skalirati diskretni linearni sustav sa matricom S^{-1}. Tada je
$$b = S^{-1}\bar{y}, \quad A = S^{-1}\bar{K}, \quad \eta = S^{-1}\xi.$$
- Diskretni linearni sustav se tada transformira u
$$b = A\bar{x} + \eta, \qquad \eta \sim N(0, I_m),$$
gdje je $I_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ identiteta.
- Ako je $\tilde{x}$ aproksimacija od $\bar{x}$, tada njezin rezidual $\tilde{r} = b - A\tilde{x}$ mora aproksimirati $\eta = b - A\bar{x}$, odnosno aproksimacija $\tilde{x}$ je prihvatljiva samo ako je $\tilde{r}$ prihvatljiv uzorak iz distribucije $N(0, I_m)$.

Rješavanje problema najmanjih kvadrata

- Tražimo rješenje $\tilde{x}_{NK}$ problema
$$\min_x \|Ax - b\|_2$$
- Matrica A ima puni stupčani rang ali je loše uvjetovana, zato su komponente od $\tilde{x}_{NK}$ vrlo osjetljive na male perturbacije u komponentama od b.
- Zbog grešaka mjerenja dobiveno rješenje je često nerealno.
- Kod nekih fizikalnih mjerenja očekuje se vrlo glatko rješenje, dok izračunata aproksimacija rješenja divlje oscilira oko rješenja.
- Zbog toga se provodi regularizacija.

Regularizacija

- Najčešće korištena metoda za stabiliziranje oscilirajućih rješenja problema najmanjih kvadrata je uvođenje uvjeta na rješenje $\tilde{x}$ oblika
$$\|Q(\tilde{x}-\tilde{x}_0)\|_2^2 \leq \beta^2.$$
Ovdje su
  - $\tilde{x}_0$ opcionalna inicijalna aproksimacija od $\bar{x}$,
  - Q je matrična reprezentacija linearnog operatora uvjeta,
  - β^2 je konstanta koja određuje jačinu uvjeta.
- Aproksimacija $\tilde{x}_\lambda$ dobiva se rješavanjem problema
$$\min_x \left(\|b-Ax\|_2^2+\lambda\|Q(x-\tilde{x}_0)\|_2^2\right),$$
gdje je parametar λ Lagrangeov multiplikator čija vrijednost ovisi o β^2.
- Rješenje je oblika
$$\tilde{x}_\lambda=(A^TA+\lambda^2Q^TQ)^{-1}(A^Tb+\lambda^2Q^TQ\tilde{x}_0).$$

- Uspjeh regularizacije ovisi o izboru parametra λ, a za to postoje nekoliko načina.
- Najčešći izbor za Q je identiteta $I_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$.
- U tom slučaju problem se može izraziti kao prošireni problem

$$\begin{bmatrix} b \\ \lambda \tilde{x}_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda I_n \end{bmatrix} \bar{x} + \begin{bmatrix} \eta \\ \lambda \gamma \end{bmatrix},$$

sa

$$\begin{bmatrix} \eta \\ \gamma \end{bmatrix} \sim N(0, I_{m+n}).$$

- Parametar λ postaje težinska konstanta koja bi trebala biti dovoljno velika da bi prigušila oscilacije aproksimativnog rješenja $\tilde{x}_\lambda$ tako da ga drži blizu $\tilde{x}_0$, a s druge strane dovoljno mala da ne prouzroči rast norme kvadrata $\|A\tilde{x}_\lambda - b\|_2^2$.

Primjer

- *Diskretizirat ćemo dobro poznati problem* ***Phillipsove jednadžbe***

$$y(s) = \int_{-3}^{3} k(s,t)x(t)dt, \qquad s \in [-6,6],$$

gdje je

$$k(s,t) = \begin{cases} \frac{1}{6}\left[1+\cos\left(\frac{\pi(t-s)}{3}\right)\right], & |t-s| \leq 3 \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

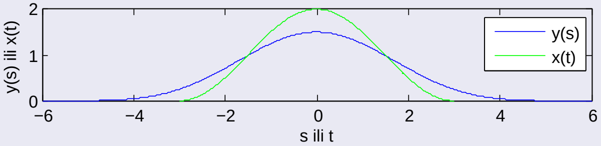
i

$$y(s) = \frac{1}{6}\left\{(6-|s|)\left[1+\frac{1}{2}\cos\left(\frac{\pi s}{3}\right)\right] + \frac{9}{2\pi}\sin\left(\frac{\pi|s|}{3}\right)\right\}.$$

Primjer (nastavak)

- *Rješenje ovog problema je poznato i glasi*

$$x(t) = 1 + \cos\left(\frac{\pi t}{3}\right), \qquad t \in [-3, 3].$$



Primjer (nastavak)

Ovaj problem diskretizirat ćemo na sljedeći način.

- $m = 150$, $s_i = -5.925 + (i-1) \cdot h_s$ *za* $i = 1, \ldots, m$, *gdje je* $h_s = 11.85/(m-1)$ *(ekvidistantna mreža na segmentu* $[-5.925, 5.925]$ *sa m točaka).*
- $n = 121$, $t_j = -3 + (j-1) \cdot h_t$ *za* $i = 1, \ldots, n$, *gdje je* $h_t = 6/(n-1)$ *(ekvidistantna mreža na segmentu* $[-3, 3]$ *sa n točaka).*
- *Integral se diskretizira pomoću trapezne formule*

$$\int_a^b k(s_i,t)x(t)dt \approx \frac{b-a}{2(n-1)} (k(s_i,t_1)x(t_1) + 2k(s_i,t_2)x(t_2) + \\ + \cdots + 2k(s_i,t_{n-1})x(t_{n-1}) + k(s_i,t_n)x(t_n))$$

Primjer (nastavak)

$$\int_{-3}^{3} k(s_i,t)x(t)dt \approx$$

$$\frac{3}{n-1}\begin{bmatrix} k(s_i,t_1) & 2k(s_i,t_2) & \cdots & 2k(s_i,t_{n-1}) & k(s_i,t_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x(t_1) \\ x(t_2) \\ \vdots \\ x(t_{n-1}) \\ x(t_n) \end{bmatrix}$$

- *Dakle, ovime smo odredili:*

$$\bar{x} = [x_j] \in \mathbb{R}^n,\ \text{gdje je } x_j = x(t_j)$$

$$\bar{K} = [k_{ij}] \in \mathbb{R}^{m\times n},\ \text{gdje je } k_{ij} = \begin{cases} \frac{3}{n-1}k(s_i,t_j), & j = 1, n \\ \frac{6}{n-1}k(s_i,t_j), & j = 2,\ldots,n-1 \end{cases}$$

$$\hat{y} = [\hat{y}_i] \in \mathbb{R}^m,\ \text{gdje je } \hat{y} = \bar{K}\bar{x}$$

Primjer (nastavak)

- *Dalje definiramo*

$$S = \mathrm{diag}(\varsigma_1, \ldots, \varsigma_m), \quad \varsigma_i = 10^{-4}\hat{y}_i,$$

što znači da će greške u y_i biti u 4 znamenci.

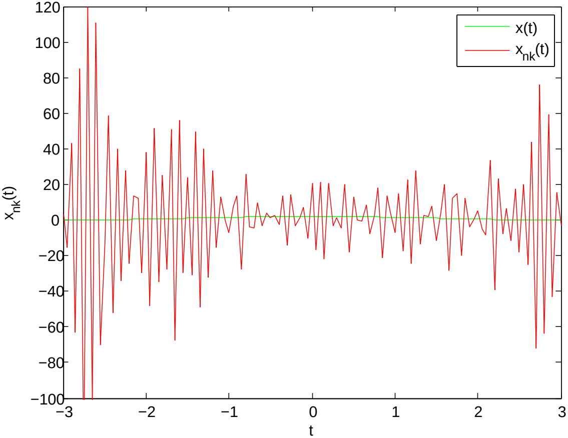
- *Sada uzimamo $\eta = [\eta_i] \in \mathbb{R}^m$ gdje su η_i slučajni brojevi iz normalne distribucije, i konačno definiramo*

$$A = S^{-1}\bar{K}, \quad b = S^{-1}\hat{y} + \eta.$$

- *Uvjetovanost matrice A je velika: $\kappa(A) = 2.8877 \cdot 10^9$.*
- *$\bar{y} = \hat{y} + S\eta$ predstavljaju vektor izmjerenih veličina koje uključuju i grešku.*

Primjer (nastavak)

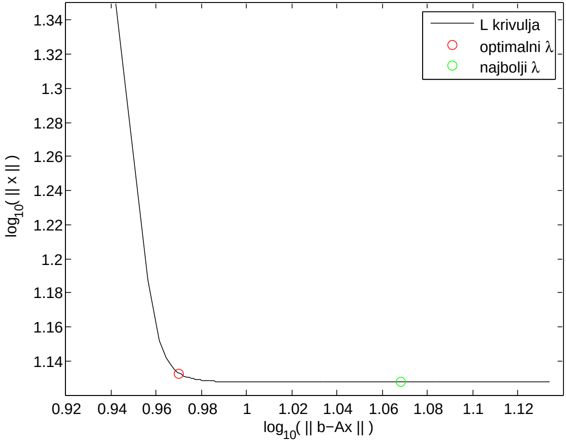
- *Prvo ćemo riješiti problem najmanjih kvadrata* $\min_x \|Ax - b\|_2$*, koristeći ili SVD ili QR faktorizaciju.*
- *Za rješenje* $\tilde{x}_{NK}$ *ovog problema treba izračunati*
  1. $\|A\tilde{x}_{NK} - b\|_2$ (≈ 4.9512)
  2. $\|\tilde{x}_{NK} - \bar{x}\|_2$ (≈ 311.7771)
- *U ovom slučaju imamo minimalnu normu reziduala, ali greška je ogromna.*



Slika: Egzaktno rješenje i rješenje najmanjih kvadrata.

Primjer (nastavak)

- *Sada ćemo uključiti regularizaciju.*
- *Možemo uzeti* $\tilde{x}_0 = 0$, *ali za naš primjer bolje je uzeti vrijednosti* $\tilde{x}_0 = [y(t_j)]$, $j = 1, \ldots, n$.
- *Najčešći način za odabir optimalnog parametra* λ *bazira se na L krivulji.*
- *Koordinate točake na L krivulji predstavljaju* $\log_{10} \|\tilde{x}_\lambda\|_2$ *i* $\log_{10} \|A\tilde{x}_\lambda - b\|_2$.
- *Odabire se ona vrijednost* λ *za koju je* $\|\tilde{x}_\lambda\|_2$ *ograničen na najbolji mogući način, dok istovremeno* $\|A\tilde{x}_\lambda - b\|_2$ *nije prevelik.*
- *Takav* λ *odgovara točci u uglu L krivulje.*
- *Za naš primjer optimalni* λ *je* $\lambda_{opt} = 0.748$.



Slika: L krivulja za $0.1 \leq \lambda \leq 100$ sa točkama koje odgovaraju λ_{opt} i λ_{naj}.

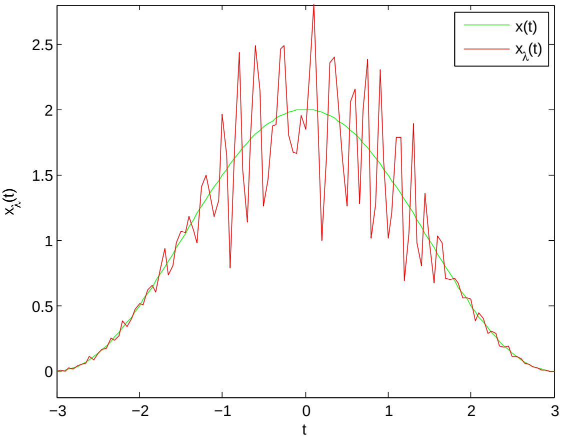
Primjer (nastavak)

- *Dakle, riješit ćemo problem najmanjih kvadrata* $\min_x \|\mathbf{A}x - \mathbf{b}\|_2$, *gdje su*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda_{opt} I_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b \\ \lambda_{opt} \tilde{x}_0 \end{bmatrix},$$

koristeći ili SVD ili QR faktorizaciju.

- *Za rješenje* $\tilde{x}_{\lambda opt}$ *ovog problema treba izračunati*
  1. $\|A\tilde{x}_{\lambda opt} - b\|_2$ $\quad(\approx 8.8121)$
  2. $\|\tilde{x}_{\lambda opt} - \bar{x}\|_2$ $\quad(\approx 2.9042)$
- *U ovom slučaju norma reziduala je malo narasla, ali greška je puno bolja nego kod rješenja najmanjih kvadrata.*



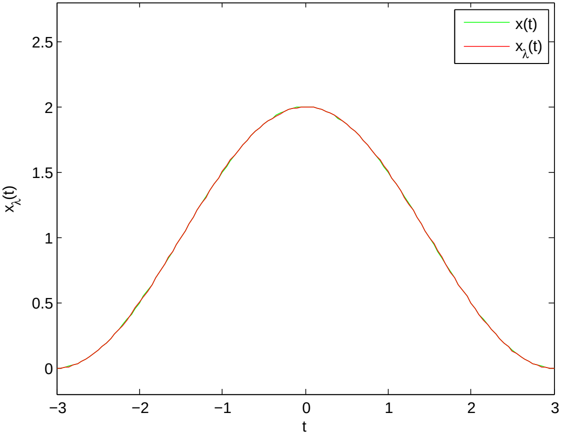
Slika: Egzaktno rješenje i rješenje regularizacije za λ_{opt}.

Primjer (nastavak)

- *Nekim statističkim metodama može se pokazati da aproksimaciju s najboljom greškom možemo dobiti za* $\lambda_{naj} = 77.5$.
- *Zato ćemo na kraju riješiti problem najmanjih kvadrata* $\min_x \|\mathbf{A}x - \mathbf{b}\|_2$, *za*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda_{naj} I_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b \\ \lambda_{naj} \tilde{x}_0 \end{bmatrix},$$

  koristeći ili SVD ili QR faktorizaciju.
- *Za rješenje* $\tilde{x}_{\lambda naj}$ *ovog problema treba izračunati*
  1. $\|A\tilde{x}_{\lambda naj} - b\|_2 \qquad (\approx 11.7861)$
  2. $\|\tilde{x}_{\lambda naj} - \bar{x}\|_2 \qquad (\approx 0.0195)$
- *U ovom slučaju norma reziduala je još malo narasla, ali greška je prihvatljivo mala.*



Slika: Egzaktno rješenje i rješenje regularizacije za λ_{naj}.