Numerička matematika
8. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata (nastavak):
  - QR faktorizacija.
    - Gram–Schmidtov postupak ortonormalizacije.
    - Givensove rotacije.
    - Householderovi reflektori.
  - QR faktorizacija i pivotiranje.
  - Rješenje matrične formulacije QR faktorizacijom.
  - Neprekidni problem najmanjih kvadrata.
    - Jednostavni primjer. Složeniji primjer.
  - Ortogonalne familije funkcija, primjeri.
    - Trigonometrijske funkcije i Fourierov red.
- Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR.

QR faktorizacija

Definicija QR faktorizacije

Napomena. U ovom dijelu mijenjamo oznake $m \leftrightarrow n$, na uobičajene za matrice: $m =$ broj redaka, a $n =$ broj stupaca.

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

Ako postoji, prethodna faktorizacija može se napisati i u jednostavnijoj — tzv. skraćenoj formi.

- Prvih n stupaca matrice Q označimo s Q_0, tako da matrica Q_0 ima isti tip kao i G,
- a preostale stupce, koji su okomiti na Q_0, označimo s $Q_0^\perp$.

Onda je

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

Ostaje samo pokazati da takva faktorizacija postoji.

Napomena. Ako je $m > n$, onda $Q_0^\perp$ možemo izabrati na više načina $\Longrightarrow$ "puna" QR faktorizacija sigurno nije jedinstvena.

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$, za $m \geq n$, i neka je $\mathrm{rang}(G) = n$. Tada postoji jedinstvena “skraćena” QR faktorizacija, oblika

$$G = Q_0 R_0,$$

gdje je Q_0 matrica tipa $m \times n$, s ortonormiranim stupcima, tj. vrijedi

$$Q_0^T Q_0 = I_n,$$

a R_0 je gornja trokutasta matrica s pozitivnim dijagonalnim elementima (dovoljno je fiksirati predznake na dijagonali u R).

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

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Dokaz. Najjednostavniji dokaz ide tako da stupce matrice

$$G = [\; g_1 \; g_2 \; \dots \; g_n \;]$$

ortonormiramo korištenjem Gram-Schmidtovog postupka.

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

$$q_1' = g_1, \qquad q_1 = \frac{q_1'}{\|q_1'\|_2}.$$

j-ti korak: Već imamo ortonormirane vektore $q_1, \dots, q_{j-1}$, koji razapinju isti potprostor kao i stupci $g_1, \dots, g_{j-1}$ matrice G. Onda definiramo novi vektor q_j' i normiramo ga

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

Egzistencija i jedinstvenost QR faktorizacije

Stupci matrice G su linearno nezavisni, što osigurava $q_j' \neq 0$. Stavljanjem

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

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

Uz oznaku za skalarne produkte i norme iz prethodne formule

$$r_{ij} = \langle g_j, q_i \rangle = q_i^T g_j, \qquad r_{jj} = \|q_j'\|_2,$$

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

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

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

Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije

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

- vektore g_j ortogonalizira obzirom na prethodne originalne vektore g_i.
- Zbog toga je nestabilan kad su stupci od G skoro linearno zavisni, tj. kad je G loše uvjetovana.

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

- koji ortogonalizira vektore g_j obzirom na prethodno ortogonalizirane vektore q_i, pa je mnogo stabilniji.
- No, i kod njega se može dogoditi da je izračunati Q_0 vrlo daleko od ortogonalnog, tj. $\|Q_0^T Q_0 - I_n\| \gg u$, kad je G vrlo loše uvjetovana.

Gram–Schmidtov algoritam

Klasični i modificirani Gram–Schmidtov algoritam:

```
za j = 1 do n radi {
  /* Nađi j-ti stupac od Q_0 i R_0 */
  q'_j = g_j;

  za i = 1 do j - 1 radi {
    /* Oduzmi komponentu od g_j u smjeru q_i */

      /* kod CGS-a je */
    r_ij = q_i^T * g_j;

      /* kod MGS-a je */
    r_ij = q_i^T * q'_j;

    q'_j = q'_j - r_ij * q_i;
  };
```

Gram–Schmidtov algoritam (nastavak)

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

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

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

Pokažite da su dvije formule za r_{ij}, ona iz CGS i ona iz MGS, matematički ekvivalentne. Numerički, naravno, nisu (greške).

Gram–Schmidtov algoritam — komentari

Gram–Schmidtov algoritam daje skraćenu QR faktorizaciju $G = Q_0 R_0$. Ako je $m > n$ (matrica Q_0 nije kvadratna), onda nam za "punu" faktorizaciju, tj. za kvadratni Q,

- fali ortogonalni komplement $Q_0^{\perp}$,

kojeg nemamo iz čega izračunati — "fale" stupci u G.

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

$$r_{jj} = \pm \|q_j'\|_2.$$

Dakle, bilo kojim fiksiranjem predznaka na dijagonali od R_0,

- opet dobivamo jedinstvenu skraćenu QR faktorizaciju.

Drugi algoritmi

U praksi, kad želimo ortogonalni Q, koristimo

- ili Givensove rotacije,
- ili Householderove reflektore,

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

Bitna razlika među ta dva algoritma:

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

Oba algoritma mogu dati punu i skraćenu QR faktorizaciju.

Givensove rotacije

Givensove rotacije

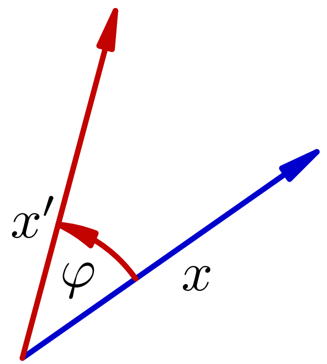
Matrica oblika

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

zove se Givensova rotacija u ravnini.

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

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



Givensove rotacije u (i, j) ravnini

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

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

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

Matrica $R(i,j,\varphi)$ je ortogonalna. 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 jednadžbi je

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

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

Za $x_i = x_j = 0$, mora biti $x_i' = 0$ i možemo uzeti $R(i,j,\varphi) = I$.

Poništavanje korištenjem Givensovih rotacija

U nastavku uzimamo da je $x_i^2 + x_j^2 > 0$, tj. bar jedan nije nula.

Drugi redak u matričnoj jednadžbi opisuje poništavanje

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

Ako je $x_j = 0$ (tj. nemamo što poništavati), onda je $\sin\varphi = 0$.
U suprotnom, izlazi

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

Odavde, korištenjem trigonometrijskog identiteta

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

slijedi

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

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

Sustavnim poništavanjem elemenata, konstruirat ćemo QR faktorizaciju matrice G.

- Postoji puno redosljeda kako napraviti nule u matrici G.
- U sljedećem primjeru uzet je “standardni” redosljed: redom, po stupcima ($\rightarrow$), odozgo nadolje ($\downarrow$) u stupcu.

Poništavanje.

- Počinjemo s prvim stupcem i poništavamo redom elemente $g_{21}, \ldots, g_{m1}$.
- 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

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

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

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

Sustavno poništavanje — primjer (nastavak)

2. stupac:

- U radnoj matrici G, redom poništavamo elemente

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

  rotacijama $R(2, i, \varphi_{2i})$, koje "nabacuju" normu drugog stupca (od dijagonale nadolje) na drugi element u stupcu.
- To neće "pokvariti" već sređene nule u prvom stupcu.
- Prvi redak (i stupac) se više ne mijenja.

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

Sustavno poništavanje — primjer (kraj)

3. stupac:

- U radnoj matrici G, redom poništavamo elemente

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

  rotacijama $R(3, i, \varphi_{3i})$, koje "nabacuju" normu trećeg stupca (od dijagonale nadolje) na treći element u stupcu.
- To neće "pokvariti" već sređene nule u prva dva stupca.
- Prva dva retka (i stupca) se više ne mijenjaju.

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

Poredak poništavanja i ocjena greške

Drugi rasporedi poništavanja.

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

Nezavisne rotacije — paralelno poništavanje

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

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

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

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

Parovi su: $(1, 2)$ i $(3, 4)$, $(1, 3)$ i $(2, 4)$. Na samom kraju, u zadnja dva retka, više “ne ide” paralelno. Plave 0 su konačne.

Kako doći do Q?

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

Do matrice Q dolazi se nakupljanjem primijenjenih rotacija, na pr.

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

Matricu G smo slijeva pomnožili

- produktom ortogonalnih matrica, kojeg označimo s Q^{-1}.
- Produkt ortogonalnih matrica je opet ortogonalna, pa i regularna. Isto vrijedi i za njezin inverz $(Q^{-1})^{-1} = Q$.
- Zaključak: $G = QR$, gdje je Q ortogonalna.
- Ako znamo $Q^{-1} = Q^T$, onda se Q lako računa iz Q^T.

Matrica $Q^{-1} = Q^T$ dobiva se primjenom istih rotacija, samo na početnu matricu I_m, reda m — "što na G, to na I_m".

Alternativa za Q, puni i skraćeni Q

Kvadratnu matricu Q, u punoj QR faktorizaciji, možemo dobiti i bez transponiranja — akumulacijom produkta

- inverznih rotacija zdesna, na početnu matricu I_m.

Inverzna rotacija = rotacija za suprotni kut (tj. $\varphi \mapsto -\varphi$). Na pr.,

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

Pravokutnu matricu Q_0 iz skraćene QR faktorizacije dobivamo tako da uzmemo prvih n stupaca od završne matrice Q,

$$Q_0 = Q(1:n).$$

A obratno? Napravimo punu QR faktorizaciju matrice Q_0!

Householderovi reflektori

Householderovi reflektori

Za zadani jedinični vektor $u \in \mathbb{R}^m$, matrica H definirana s

$$H = H(u) := I - 2uu^T, \qquad \|u\|_2 = 1,$$

zove se Householderov reflektor.

Matrica H je

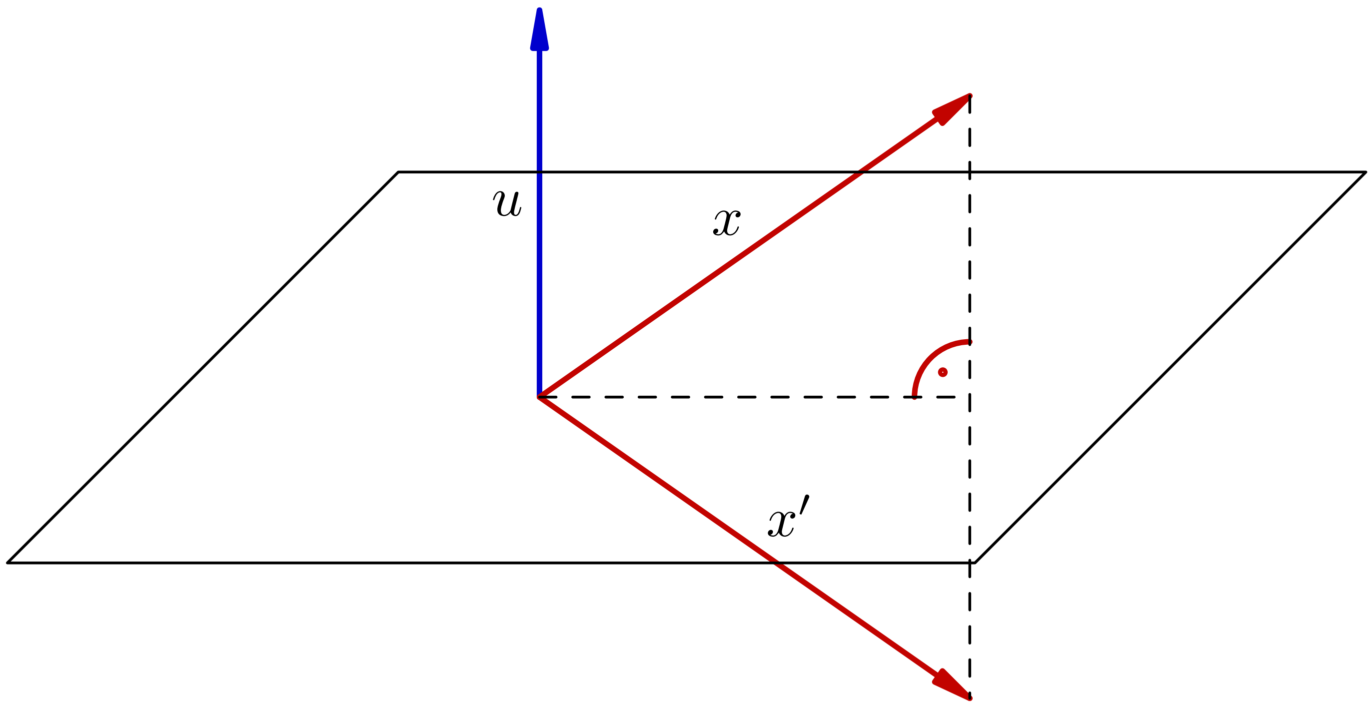
- simetrična,
- i ortogonalna, jer je

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

Zašto baš ime reflektor?

Promatrajmo hiperravninu koja je okomita na vektor u.

- Reflektor H sve vektore x preslikava u simetrične obzirom na tu hiperravninu, $x' = Hx$.



Usput, $P(u) := I - uu^T$ je projektor na tu hiperravninu.

Poništavanje Householderovim reflektorima

Neka je zadan vektor x. Treba naći Householderov reflektor H koji poništava sve komponente vektora x, osim prve. Dakle, treba naći jedinični vektor u koji definira takav reflektor H.

Tražimo da je

$$Hx = \begin{bmatrix} c \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = c \cdot e_1, \quad c \in \mathbb{R}.$$

Za početak, H je unitarna matrica, pa čuva normu vektora,

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

odakle slijedi da je $c = \pm\|x\|_2$.

Poništavanje Householderovim reflektorima

Napišimo traženu jednadžbu preko nepoznatog vektora u

$$Hx = (I - 2uu^T)x = x - 2u(u^T x) = \pm \|x\|_2 \, e_1.$$

Uočimo da je $u^T x$ broj $=$ skalarni produkt dva vektora.

Zanemarimo na trenutak mogućnost da je $u^T x = 0$. Onda je

$$u = \frac{1}{2(u^T x)} \, (x \mp \|x\|_2 \, e_1).$$

Obzirom na to da $u^T x$ ne znamo, možemo zaključiti da je

$$u = \alpha(x \mp \|x\|_2 \, e_1), \quad \text{za neki } \alpha \in \mathbb{R},$$

tj. da je u paralelan s vektorom $\widetilde{u} = x \mp \|x\|_2 e_1$. Konačno, konstantu α nalazimo normiranjem vektora $\widetilde{u}$ na normu 1.

Poništavanje Householderovim reflektorima

Prema tome,

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

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

Uočite da oba izbora predznaka $(\mp)$ u definiciji $\widetilde{u}$ uvijek daju

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

Ako je $x = 0$, onda je $\widetilde{u} = 0$, a to znači da je $H = I$. Tada možemo uzeti bilo koji u, jer je $H \cdot 0 = 0$ za svaki H.

U protivnom je i $\|x\|_2 \neq 0$, pa barem jedan izbor predznaka $(\mp)$ u formuli za $\widetilde{u}$ daje $\widetilde{u} \neq 0$. Ako drugi izbor daje $\widetilde{u} = 0$, onda je $x = \pm\|x\|_2 \, e_1$. Dakle, oba reflektora su korektna.

Izbor predznaka za u

Ranija mogućnost da je $u^T x = 0$ ne pravi nikakve poteškoće. Onda je $Hx = x = \pm\|x\|_2\, e_1$ i samo tada bar jedan izbor predznaka daje $\widetilde{u} = 0$. Dobiveni $H(u)$ je i tada korektan!

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

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

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

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

To znači da je $c = -\operatorname{sign}(x_1)$, što ponekad zbunjuje u praksi.

- Na primjer, za $x = e_1$ dobivamo $Hx = -e_1$!

Stvarno, uz pažljiviji poredak računanja, to nije potrebno!

Drugi način definicije H, primjena H na vektor

Napomena. Normiranje $\widetilde{u} \mapsto u$ se, formalno, može izbjeći, ako definiramo

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

Kako djelovati s H na ostale stupce (ili neki vektor)?

Kad smo izračunali u, ne treba računati cijelu matricu H. Dovoljno je pogledati kako ona djeluje na neki vektor z:

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

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

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

QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- Prvo se reflektorom H_1 ponište svi elementi prvog stupca (do na prvi), a na ostale stupce se djeluje reflektorom H_1.
- Zatim se ponište elementi dijela drugog stupca od dijagonale nadolje (osim dijagonalnog elementa). To se radi "skraćenim" reflektorom H_2'.

  Na cijelu radnu matricu onda djelujemo reflektorom

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

  U pripadnom vektoru u, prva komponenta je $u_1 = 0$.

QR faktorizacija korištenjem reflektora

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

- reflektorom H'_k se poništava k-ti “skraćeni” stupac u radnoj matrici — od dijagonale nadolje.
- Na cijelu radnu matricu onda djelujemo reflektorom

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

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

Ako želimo formirati ortogonalnu matricu Q, onda je

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

ili

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

QR faktorizacija i pivotiranje

Računanje QR faktorizacije

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

Računanje QR faktorizacije matrice G

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

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

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

- 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 — radna matrica

Izgled radne matrice $R^{(k-1)}$ na početku k-tog koraka:

$$\left[\begin{array}{cccc:ccc} r_{1,1}^{(1)} & r_{1,2}^{(2)} & \cdots & r_{1,k-1}^{(k-1)} & r_{1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{1,n}^{(k-1)} \\ & r_{2,2}^{(2)} & \cdots & r_{2,k-1}^{(k-1)} & r_{2,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{2,n}^{(k-1)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & r_{k-1,k-1}^{(k-1)} & r_{k-1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k-1,n}^{(k-1)} \\ & & & & r_{k,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k,n}^{(k-1)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & r_{m,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{m,n}^{(k-1)} \end{array}\right].$$

Računanje QR faktorizacije — k-ti korak

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

- poništavamo sve elemente k-tog stupca ispod dijagonale, nekom ortogonalnom transformacijom Q_k.
- Tako dobivamo novu radnu 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

Kod QR faktorizacije, također, možemo koristiti pivotiranje, slično kao kod LR faktorizacije ili faktorizacije Choleskog.

- Uobičajeno se koristi pivotiranje (= zamjene) stupaca

$$GP = QR,$$

  gdje je P matrica permutacije.

Pivotiranje stupaca u k-tom koraku algoritma ($k = 1, \ldots, n$):

- Ako su x_ℓ, za $\ell = k, \ldots, n$, skraćeni stupci (od k-tog do m-tog reda), na "prvo" (tj. k-to) mjesto dovodi se onaj s najvećom normom, tj. tako da $\|x_k\|_2$ bude maksimalna.
- Zamjene se rade s cijelim stupcima, a ne sa skraćenim!

U zadnjem koraku više nema zamjena (samo jedan stupac).

Svrha pivotiranja

Svrha?

- Ako matrica G ima (skoro) linearno zavisne stupce, onda se QR faktorizacijom s pivotiranjem numerički određuje rang matrice G — "rez" kad dijagonala u R_0 "padne".

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrica ranga r. Tada postoje $n \times n$ matrica permutacije P, ortogonalna matrica Q reda m, te gornja trokutasta matrica R_0 ranga r, tipa $\min\{m, n\} \times n$, tako da vrijedi

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

i

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

Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

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

Matrica G ima jedinstvenu skraćenu QR faktorizaciju, pa je puni QR oblika

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

gdje je R_0 jedinstvena gornja trokutasta matrica reda n, s pozitivnim dijagonalnim elementima, a Q je unitarna matrica.

S druge strane, neka je $H := G^*G$ Gramova matrica skalarnih produkata stupaca matrice G.

Znamo da je onda H pozitivno definitna matrica. Zato H ima jedinstvenu faktorizaciju Choleskog ...

Veza QR faktorizacije i faktorizacije Choleskog

$$H = R^* R,$$

gdje je R gornja trokutasta s pozitivnom dijagonalom.

Tvrdnja. Ovi trokutasti faktori su jednaki, tj. vrijedi $R = R_0$.

Dokaz. U $H = G^* G$ uvrstimo QR faktorizaciju od G i "skratimo" $Q^* Q = I$. Jedinstvenost faktora R daje tvrdnju. ■

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

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

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

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

Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije

Korištenje QR faktorizacije

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

Prisjetimo se, ako je A $(n \times m)$ punog stupčanog ranga (tj. vrijedi $\mathrm{rang}(A) = m$), 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 (zbog A), 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 rješenjima 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

Napravimo skraćenu QR faktorizaciju matrice A

$$A = Q_0 R_0.$$

Uvrštavanjem u rješenje x, izlazi

$$\begin{aligned} x &= (A^T A)^{-1} A^T b = ((Q_0 R_0)^T Q_0 R_0)^{-1} (Q_0 R_0)^T b \\ &= (R_0^T Q_0^T Q_0 R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b = (R_0^T R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b \\ &= R_0^{-1} (R_0^T)^{-1} R_0^T Q_0^T b = R_0^{-1} Q_0^T b, \end{aligned}$$

pa je x, očito, rješenje sustava

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

Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR.

Neprekidni problem najmanjih kvadrata

Još jednom o najmanjim kvadratima

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

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

gdje je $e(x) = f(x) - \varphi(x)$ funkcija greške na nekoj domeni.

Da bismo mogli naći minimalnu normu greške u neprekidnom slučaju, moramo definirati

- skalarni produkt za neprekidne funkcije (ili još širu klasu) na odgovarajućem intervalu $[a, b]$.

Definicija norme nije dovoljna!

- Već u diskretnom slučaju, rješenje je bila ortogonalna projekcija na potprostor, a za to treba skalarni produkt.

Definicija norme i skalarnog produkta

Definicija. Zadana funkcija w je težinska funkcija na intervalu $[a, b]$, ako je $w(x) \geq 0$ na $[a, b]$, s tim da

- $w(x)$ može biti jednako 0 samo u izoliranim točkama x.

Težinska L_2-norma (ili samo 2-norma) funkcije u na $[a, b]$ je

$$\|u\|_2 = \left(\int_a^b w(x) \, |u(x)|^2 \, dx \right)^{1/2}.$$

Za funkcije u i v, ako taj integral postoji i norma je konačna, onda možemo definirati težinski skalarni produkt tih funkcija

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

Svojstva integralnog skalarnog produkta

Ovako definirana vrijednost $\langle u, v\rangle$ je sigurno konačna, jer vrijedi Cauchy–Schwarzova nejednakost

$$|\langle u, v\rangle| \leq \|u\|_2 \cdot \|v\|_2.$$

Iz svojstava integrala (linearnost) odmah dobivamo da vrijede sljedeći zahtjevi (ili aksiomi) iz definicije skalarnog produkta:

2. simetrija: $\langle u, v\rangle = \overline{\langle v, u\rangle}$ nad $\mathbb{C}$, ili $\langle u, v\rangle = \langle v, u\rangle$ nad $\mathbb{R}$,
3. linearnost u prvom argumentu:
$$\langle \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2, v\rangle = \alpha_1 \langle u_1, v\rangle + \alpha_2 \langle u_2, v\rangle,$$

a onda vrijedi i (anti)linearnost ($\mathbb{C}/\mathbb{R}$) u drugom argumentu:

$$\langle u, \beta_1 v_1 + \beta_2 v_2\rangle = \bar{\beta}_1 \langle u, v_1\rangle + \bar{\beta}_2 \langle u, v_2\rangle.$$

Pozitivna definitnost skalarnog produkta

Do korektnosti definicije skalarnog produkta, fali još samo

1. pozitivna definitnost:
   $\langle u, u \rangle \geq 0$, a jednakost vrijedi ako i samo ako je $u = 0$.

Prvi dio (= nenegativnost) isto odmah slijedi iz $w|u|^2 \geq 0$. Međutim, drugi dio je problem i to u ovom smjeru:

- $\langle u, u \rangle = 0 \implies u = 0$, ili $u \neq 0 \implies \langle u, u \rangle > 0$.

To ovisi o težini w i vektorskom prostoru za funkcije u.

Ako još pretpostavimo da su w i u neprekidne funkcije na $[a, b]$, onda to vrijedi! Opravdanje za to je sljedeća tvrdnja:

- Ako je f neprekidna funkcija i u nekoj točki x vrijedi $f(x) > 0$, onda je $f > 0$ i na nekom intervalu (pozitivne duljine) oko točke x.

Pozitivna definitnost za neprekidne funkcije

Teorem. Ako je w neprekidna funkcija na $[a, b]$, onda je integralni skalarni produkt $\langle u, v\rangle$ pozitivno definitan na vektorskom prostoru $C[a, b]$ svih neprekidnih funkcija na $[a, b]$.

Dokaz. Neka je u neprekidna i neka je $u \neq 0$, tj. postoji točka $x \in [a, b]$, za koju je $u(x) \neq 0$. Zbog $|u(x)|^2 > 0$, postoji interval I oko točke x, sadržan u $[a, b]$, na kojem je $|u|^2 > 0$.

Težinska funkcija $w \geq 0$ može imati samo izolirane nultočke, tj. ne može poništiti $|u|^2$ na cijelom I. Dakle, sigurno postoji točka $x' \in I$ u kojoj je $w(x')|u(x')|^2 > 0$.

Sad iskoristimo da je w neprekidna, pa to vrijedi i za produkt $w|u|^2$. To znači da postoji interval I' oko x', sadržan u $[a, b]$ i pozitivne duljine, na kojem je $w|u|^2 > 0$. Onda integral te funkcije mora biti pozitivan, tj. vrijedi $\langle u, u\rangle > 0$. ■

Unitarni prostori i pretpostavke za nastavak

Ako je interval $[a, b]$ konačan, a w neprekidna na cijelom $[a, b]$,

- onda je $C[a, b]$ unitarni prostor — neprekidne funkcije na segmentu su integrabilne, tj. norma $\|u\|_2$ je konačna.

Možemo uzeti i nešto blaže pretpostavke (bitno u praksi):

- težina w je neprekidna na otvorenom intervalu (a, b), a može imati singularitete u rubovima, ili
- interval $[a, b]$ je beskonačan (jedan ili oba ruba).

Za pripadni unitarni prostor onda možemo uzeti potprostor

- svih kvadratno integrabilnih funkcija iz $C[a, b]$.

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

Proširenje — integral po mjeri

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

Skalarni produkt funkcija u i v onda možemo definirati ovako

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

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

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

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

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

Proširenje — integral po mjeri, posebne mjere

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

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

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

Za tzv. diskretne mjere μ, koje imaju "gustoću" koncentriranu na diskretnom skupu točaka $x_1, \ldots, x_n$, integral prelazi u sumu

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

Ovo je diskretni skalarni produkt funkcija u i v.

$\Longrightarrow$ Zapis integralom pokriva i diskretne najmanje kvadrate!

Oprez kod diskretnog skalarnog produkta

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

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

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

Primjer. Ako uzmemo polinom čvorova za zadane točke

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

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

Najmanji kvadrati — kvadrat norme greške

Kvadrat norme greške izrazimo preko skalarnih produkata

$$S := \|e\|_2^2 = \|f - \varphi\|_2^2 = \langle f, f\rangle - 2\langle f, \varphi\rangle + \langle \varphi, \varphi\rangle.$$

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

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

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

Najmanji kvadrati — nužni uvjet minimuma

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

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

Dakle, mora vrijediti

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

$$- 2 \int_a^b w(x)\, f(x) \varphi_i(x)\, dx,$$

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

Sustav normalnih jednadžbi

Dobivamo linearni sustav jednadžbi za nepoznate koeficijente

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \int_a^b w(x)\,\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx = \int_a^b w(x)\,f(x)\varphi_i(x)\,dx,$$

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

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

Uvedimo sljedeće oznake za koeficijente u sustavu

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

Sustav normalnih jednadžbi

Na kraju, neka je

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

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

$$Ma = t.$$

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

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

Dodatno, ako su funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne na $[a, b]$, onda je M pozitivno definitna matrica. Dokažimo to.

Pozitivna (semi)definitnost matrice M

Pozitivna (semi)definitnost izlazi iz definicije elemenata m_{ij}. Za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^{m+1}$ vrijedi

$$x^T M x = \sum_{i=0}^{m} x_i \sum_{j=0}^{m} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle x_j = \sum_{i=0}^{m} \sum_{j=0}^{m} \langle x_i \varphi_i, x_j \varphi_j \rangle$$

$$= \left\langle \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i, \sum_{j=0}^{m} x_j \varphi_j \right\rangle = \left\| \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \right\|_2^2 \geq 0.$$

Zbog pozitivne definitnosti skalarnog produkta, ovo je $= 0$, ako i samo ako je

$$\sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \equiv 0.$$

Ako su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne, odavde slijedi i $x = 0$. ■

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Simetrična pozitivno definitna matrica M je regularna. To dokazuje sljedeću tvrdnju.

Teorem. Neka su funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ linearno nezavisne na $[a, b]$. Onda postoji jedinstveno rješenje problema $Ma = t$. ■

Hesseova matrica H drugih parcijalnih derivacija je, također, pozitivno definitna. To slijedi iz

$$h_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial a_i \partial a_j} = 2 \int_a^b w(x)\, \varphi_i(x) \varphi_j(x)\, dx = 2m_{ij},$$

tj. vrijedi $H = 2M$. Dakle, dobiveni vektor parametara a je jedinstveni minimum za linearni problem najmanjih kvadrata.

Najmanji kvadrati — završne napomene

U neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata,

- kad tražimo aproksimaciju φ na intervalu $[a, b]$,

nema matrične formulacije i QR pristupa, kao kod diskretnog problema. Za matričnu formulaciju problema

- trebalo bi napisati jednadžbe u svakoj točki x iz intervala $[a, b]$, a njih je beskonačno (i to neprebrojivo) mnogo.

Dakle, to ne ide. Ostaje samo sustav normalnih jednadžbi.

- I ovdje je rješenje ortogonalna projekcija funkcije f na potprostor razapet funkcijama $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$,

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

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

Jednostavni primjer — početak

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite polinom stupnja 1, koji aproksimira funkciju

$$f(x) = e^x$$

na intervalu $[-1, 1]$, uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Rješenje. Zapišimo traženi polinom p_1 u obliku

$$p_1(x) = a_1 x + a_0.$$

Treba minimizirati

$$S = \int_{-1}^{1} (e^x - a_1 x - a_0)^2 \, dx \to \min .$$

Jednostavni primjer — normalne jednadžbe

Deriviranjem dobivamo

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

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

Uz standardne oznake

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

dobivamo sustav normalnih jednadžbi (v. sljedeća stranica).

Jednostavni primjer — integrali za matricu

Treba riješiti sljedeći linearni sustav

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

Izračunajmo integrale s lijeve strane

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

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

Jednostavni primjer — integrali desne strane

Za integrale s desne strane dobivamo

$$t_0 := \int_{-1}^{1} e^x \, dx = e^x \Big|_{-1}^{1} = e - e^{-1},$$

$$t_1 := \int_{-1}^{1} x e^x \, dx = \left\{ \begin{array}{ll} u = x & du = dx \\ dv = e^x \, dx & v = e^x \end{array} \right\}$$

$$= x e^x \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} e^x \, dx$$

$$= e + e^{-1} - (e - e^{-1}) = 2e^{-1}.$$

Jednostavni primjer — rješenje

Linearni sustav onda glasi

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

a njegovo rješenje je

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1) \approx 1.1752011936, \\ a_1 &= \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.1036383235. \end{aligned}$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

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

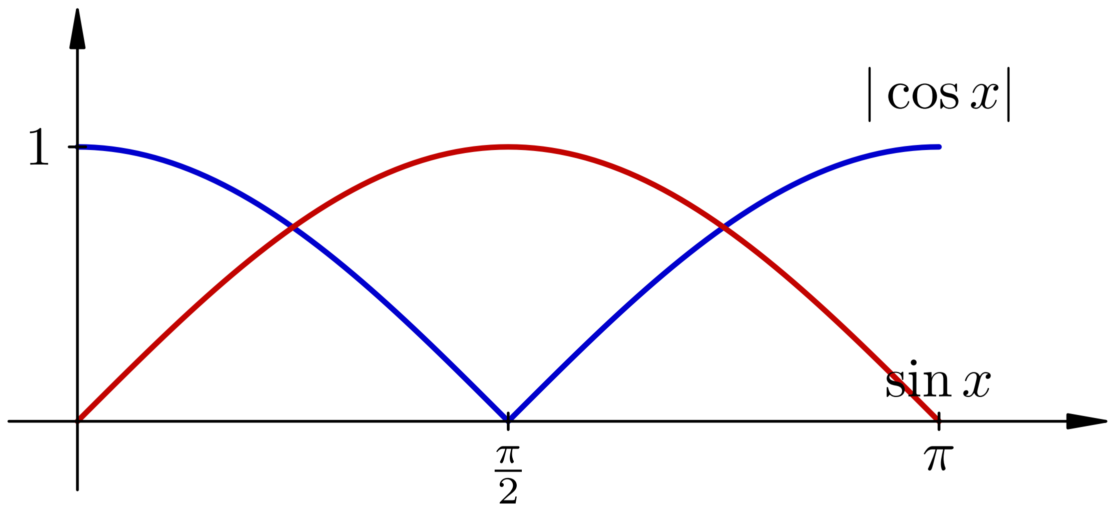
Složeniji primjer — početak

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite polinome stupnjeva 1, 2 i 3, koji aproksimiraju funkciju

$$f(x) = \sin x$$

na intervalu $[0, \pi]$, uz težinsku funkciju $w(x) = |\cos x|$.

Rješenje. Skicirajmo prvo funkcije f (crveno) i w (plavo).



Složeniji primjer — simetrija problema

Budući da su obje funkcije simetrične oko točke $\frac{\pi}{2}$, polinome se isplati pisati u bazi $\varphi_j(x) = (x - \frac{\pi}{2})^j$.

Ključna je "parnost" težinske funkcije w oko $\frac{\pi}{2}$, jer u matrici sustava dobivamo hrpu nula (oko polovine elemenata).

Neka je p_n polinom stupnja n, zapisan u toj "par–nepar" bazi

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_{nj} \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^j.$$

Za fiksni n, treba minimizirati

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

Složeniji primjer — normalne jednadžbe

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

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

dobivamo linearni sustav za koeficijente, općeg oblika

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

Kad uvrstimo sve što treba, sustav glasi

$$\sum_{j=0}^{n} a_{nj} \int_0^{\pi} |\cos x| \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^{i+j} dx = \int_0^{\pi} |\cos x| \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^{i} \sin x \, dx,$$

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

Složeniji primjer — integrali za matricu

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

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

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

Napomena. Neparni koeficijenti su nula, jer je baza pogodno odabrana, tako da koristi činjenicu da je $w(x)$ parna funkcija obzirom na $\frac{\pi}{2}$. Baza sadrži samo “parne” i “neparne” funkcije.

Složeniji primjer — integrali za matricu

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

$$s_k = 2\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y\, dy = \left\{\begin{matrix} u = y^k & du = ky^{k-1}\, dy \\ dv = \sin y\, dy & v = -\cos y \end{matrix}\right\}$$

$$= 2\left(-y^k \cos y\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + k\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos y\, dy\right)$$

$$= \left\{\begin{matrix} u = y^{k-1} & du = (k-1)y^{k-2}\, dy \\ dv = \cos y\, dy & v = \sin y \end{matrix}\right\}$$

$$= 2ky^{k-1} \sin y\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - k(k-1)\left(2\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2} \sin y\, dy\right)$$

$$= 2k\left(\frac{\pi}{2}\right)^{k-1} - k(k-1)\, s_{k-2}.$$

Složeniji primjer — integrali za matricu

Još treba izračunati početni integral, za $k = 0$:

$$s_0 = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin y \, dy = -2 \cos y \,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 2.$$

Onda je, redom:

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

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

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

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

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

Složeniji primjer — integrali desne strane

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

$$t_k = \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y)\,dy = \left\{ \begin{matrix} u = y^k & du = ky^{k-1}\,dy \\ dv = \sin(2y)\,dy & v = -\cos(2y)/2 \end{matrix} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2}\,y^k \cos(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{k}{2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1}\cos(2y)\,dy$$

$$= \left\{ \begin{matrix} u = y^{k-1} & du = (k-1)y^{k-2}\,dy \\ dv = \cos(2y)\,dy & v = \sin(2y)/2 \end{matrix} \right\}$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\frac{\pi}{2}\Big)^k + \frac{k}{2}\left[\frac{1}{2}\,y^{k-1}\sin(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{k-1}{2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2}\sin(2y)\,dy\right]$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\frac{\pi}{2}\Big)^k - \frac{k(k-1)}{4}\,t_{k-2}.$$

Složeniji primjer — integrali desne strane

Još treba izračunati

$$t_0 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(2y)\,dy = -\frac{1}{2}\cos(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 1.$$

Onda je

$$t_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 - \frac{1}{2}\,t_0 = \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} = \frac{\pi^2 - 4}{8}.$$

Linearni sustav za koeficijente polinoma p_n onda ima oblik

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

Složeniji primjer — rješenje za $n = 1$

Za $n = 1$, sustav je

$$\begin{aligned} s_0 a_{10} + s_1 a_{11} &= t_0 \\ s_1 a_{10} + s_2 a_{11} &= t_1. \end{aligned}$$

Kad uvrstimo izračunate s_k i t_k, izlazi

$$\begin{aligned} 2 \cdot a_{10} + 0 \cdot a_{11} &= 1 \\ 0 \cdot a_{10} + (2\pi - 4) \cdot a_{11} &= 0. \end{aligned}$$

Rješenje sustava je $a_{10} = 1/2$, $a_{11} = 0$, pa je aproksimacijski polinom

$$p_1(x) = \frac{1}{2}.$$

U polinomu p_1 nema linearnog člana i još je $p_1 = p_0$.

Složeniji primjer — sustav za $n = 2$

Za $n = 2$, sustav je

$$\begin{aligned} s_0 a_{20} + s_1 a_{21} + s_2 a_{22} &= t_0 \\ s_1 a_{20} + s_2 a_{21} + s_3 a_{22} &= t_1 \\ s_2 a_{20} + s_3 a_{21} + s_4 a_{22} &= t_2. \end{aligned}$$

Kad uvrstimo izračunate vrijednosti, sustav glasi

$$\begin{aligned} 2 \cdot a_{20} + {} & 0 \cdot a_{21} + {} & (2\pi - 4) \cdot a_{22} &= 1 \\ 0 \cdot a_{20} + {} & (2\pi - 4) \cdot a_{21} + {} & 0 \cdot a_{22} &= 0 \\ (2\pi - 4) \cdot a_{20} + {} & 0 \cdot a_{21} + {} & (\pi^3 - 24\pi + 48) \cdot a_{22} &= \frac{\pi^2 - 4}{8}. \end{aligned}$$

Uočite 4 nule u matrici sustava i još jednu na desnoj strani.

Složeniji primjer — rješenje za $n = 2, 3$

Rješenje tog sustava je

$$a_{20} \approx 0.9649095515, \quad a_{21} = 0, \quad a_{22} \approx -0.4072464465,$$

pa je aproksimacijski polinom

$$p_2(x) \approx -0.4072464465 \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^2 + 0.9649095515.$$

Za $n = 3$, dobije se rješenje $p_3 = p_2$ (provjerite sami).

Uočite bitna olakšanja, uz izbor "par–nepar" baze $(x - \frac{\pi}{2})^j$:

- Zbog parne simetrije težine i zadane funkcije oko točke $\frac{\pi}{2}$,
- u svim polinomima p_n ostaju samo "parni" članovi, tj. koeficijenti uz neparni dio baze su jednaki nula!

Još jedan primjer — Hilbertova matrica

Primjer. Funkciju f aproksimiramo polinomom p_n, stupnja n, po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata, na intervalu $[0, 1]$, uz težinu $w(x) = 1$. U bazi potencija $\{1, x, x^2, \ldots\}$, matrica M sustava je

$$M = \begin{bmatrix} s_0 & s_1 & \cdots & s_n \\ s_1 & s_2 & \cdots & s_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_n & s_{n+1} & \cdots & s_{2n} \end{bmatrix},$$

pri čemu su

$$s_k := \int\limits_0^1 x^k \, dx = \frac{x^{k+1}}{k+1} \Big|_0^1 = \frac{1}{k+1}.$$

Matrica linearnog sustava je Hilbertova matrica reda $n + 1$!

Komentari primjera

Iz posljednja dva primjera možemo zaključiti sljedeće:

- Ako za bazu biramo funkcije $1, x, x^2, \ldots$, matrica sustava može biti vrlo loše uvjetovana.
- U složenijem primjeru, podizanjem stupnja n polinoma mijenjaju se koeficijenti polinoma p_n.
  Na primjer, a_{n0} ovisi o stupnju n (jer je $a_{10} \neq a_{20}$).

Prethodna dva problema otklanjaju se (= potpuno nestaju!),

- ako se za bazu funkcija uzmu ortogonalne funkcije, obzirom na zadani skalarni produkt.

Ortogonalne funkcije

Ortogonalne funkcije

Neka je $\langle\ ,\ \rangle$ zadani skalarni produkt na nekom (unitarnom) prostoru funkcija, na nekoj domeni. U nastavku, taj

- skalarni produkt može biti neprekidan ili diskretan.

Za funkcije u i v kažemo da su ortogonalne ili okomite, ako je

$$\langle u, v\rangle = 0.$$

Ako su u i v ortogonalne, onda vrijedi

$$\begin{aligned} \|u+v\|^2 &= \langle u,u\rangle + \langle u,v\rangle + \langle v,u\rangle + \langle v,v\rangle \\ &= \|u\|^2 + 2\langle u,v\rangle + \|v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2. \end{aligned}$$

Pitagorin poučak!

Ortogonalni sustav funkcija, nezavisnost

Definicija. Funkcije $u_0, \ldots, u_m$ tvore ortogonalni sustav funkcija, ako je $\|u_k\|_2 > 0$, za $k = 0, \ldots, m$, i bilo koje dvije funkcije su međusobno ortogonalne, tj. vrijedi

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

Generalizacijom Pitagorinog poučka, za takve funkcije vrijedi

$$\left\| \sum_{k=0}^{m} \alpha_k u_k \right\|_2^2 = \sum_{k=0}^{m} |\alpha_k|^2 \|u_k\|_2^2.$$

Teorem. Ortogonalni sustav funkcija je linearno nezavisan.

Dokaz. Ako je lijeva strana jednaka nula, mora biti i desna. Zbog $\|u_k\|_2 > 0$, za $k = 0, \ldots, m$, to je moguće samo tako da je $\alpha_k = 0$, za $k = 0, \ldots, m$. $\blacksquare$

Ortogonalni sustav funkcija i najmanji kvadrati

Linearni sustav za linearni problem najmanjih kvadrata je

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

Ako φ_i, $i = 0, \ldots, m$, tvore ortogonalni sustav funkcija, onda je

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \quad \text{za } j \neq i, \quad \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = \|\varphi_i\|^2 > 0.$$

Uvrštavanjem u linearni sustav, izlazi da je matrica sustava dijagonalna. Rješenje tog sustava je (namjerno piše j, a ne i)

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

Uočite da koeficijenti a_j (u aproksimaciji φ) više ne ovise o m!

Variranje m — niz sve boljih aproksimacija

Neka je Φ_m prostor razapet ortogonalnim sustavom funkcija $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$, uz neki zadani skalarni produkt $\langle\ ,\ \rangle$.

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

U početnom zapisu (za MLS), $\varphi^{(m)}$ je linearna kombinacija funkcija baze

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

Zbog ortogonalnosti baze, koeficijenti a_j ne ovise o m, pa je

$$\varphi^{(m)}(x) = \varphi^{(m-1)}(x) + a_m \varphi_m(x), \quad \text{za } m > 0.$$

To sugerira povećavanje m, dok ne dobijemo dovoljno dobru aproksimaciju za f. Oprez: Uvjet da to "ide" je $\|\varphi_m\|_2 > 0$.

Problemi kod ortogonalnih baza

Ovim oblikom koeficijenata a_j nismo izbjegli sve probleme.

- Tipično, norme $\|\varphi_j\|_2^2$ blago variraju, kad j raste.
- Za koeficijente a_j se očekuje da rapidno padaju (v. dalje).
- Zbog toga se očekuju greške nastale kraćenjem, pri računanju skalarnog produkta $\langle \varphi_j, f \rangle$ u brojniku za a_j.

Alternativna forma za računanje a_j je

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

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

Algoritam računanja koeficijenata

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

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

Računanje koeficijenata i aproksimacija

```
s[-1] = 0;
za j = 0 do m radi {
  a[j] = ⟨f - s[j - 1], phi[j]⟩ / ‖phi[j]‖₂²;
  s[j] = s[j - 1] + a[j] * phi[j];
};
```

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

Ortogonalna projekcija je uvijek rješenje

Teorem. Greška aproksimacije $f - \varphi^{(m)}$ je okomita na sve linearne kombinacije funkcija $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$, tj. na prostor Φ_m.

Dokaz. Dovoljno je pokazati da je greška okomita na svaki φ_i,

$$\begin{aligned}
\langle f - \varphi^{(m)}, \varphi_i \rangle &= \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \varphi_i \right\rangle = \langle f - a_i \varphi_i, \varphi_i \rangle \\
&= \langle f, \varphi_i \rangle - a_i \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle \\
&= \langle f, \varphi_i \rangle - \frac{\langle \varphi_i, f \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle} \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Dobiveni rezultat ima jednostavno geometrijsko značenje.

- Aproksimacija $\varphi^{(m)}$ je ortogonalna projekcija funkcije f na prostor Φ_m, razapet funkcijama $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$. ∎

Opći dokaz = normalne jednadžbe

Mala digresija. Prethodni teorem "Projekcija je rješenje" vrijedi uvijek, a ne samo za ortogonalne sustave funkcija.

Aproksimaciju $\varphi^{(m)}$ možemo prikazati u bilo kojoj drugoj bazi $\widehat{\varphi}_0, \ldots, \widehat{\varphi}_m$ prostora Φ_m.

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

Dokaz onda ide izravno iz normalnih jednadžbi za koeficijente:

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \widehat{\varphi}_i \rangle = \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \widehat{\varphi}_j, \widehat{\varphi}_i \right\rangle = \langle f, \widehat{\varphi}_i \rangle - \sum_{j=0}^{m} a_j \langle \widehat{\varphi}_j, \widehat{\varphi}_i \rangle$$

$$= \{ \, i\text{-ta normalna jednadžba} \, \} = 0.$$

Upravo zato i naziv "normalne" jednadžbe. ■

Projekcija je rješenje — norma funkcije i greške

Aproksimacija $\varphi^{(m)}$ funkcije f, naravno, pripada prostoru Φ_m. Iz prethodnog teorema onda slijedi da je greška okomita i na funkciju $\varphi^{(m)}$

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \varphi^{(m)} \rangle = 0.$$

Prema Pitagorinom poučku, onda možemo pisati

$$\begin{aligned}
\|f\|_2^2 = \|\,(f - \varphi^{(m)}) + \varphi^{(m)}\|_2^2 &= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \|\varphi^{(m)}\|_2^2 \\
&= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \left\| \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j \right\|_2^2 \\
&= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2.
\end{aligned}$$

Norma greške rješenja, kad m raste

Iz te relacije slijedi da se norma greške aproksimacije $\varphi^{(m)}$ može zapisati kao

$$\|f - \varphi^{(m)}\|_2 = \left(\|f\|_2^2 - \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2 \right)^{1/2}.$$

Neka je zadan niz uklopljenih prostora Φ_m, za $m = 0, 1, \ldots$ (?), tako da je

$$\Phi_0 \subset \Phi_1 \subset \Phi_2 \subset \cdots .$$

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

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

Greška rješenja — konvergencija?

Ako je prostora Φ_m beskonačno mnogo ($m \in \mathbb{N}$), onda je

- niz normi grešaka monotono padajući i odozdo ograničen s 0, pa mora konvergirati.

Pitanje: Mora li norma greške aproksimacije konvergirati u 0?

Odgovor je ne — ovisi o f i o prostorima Φ_m!

Iz oblika greške (prošla stranica), nužni i dovoljni uvjet da bi norma greške konvergirala u nulu je (Besselova jednakost)

$$\|f\|_2^2 = \sum_{j=0}^{\infty} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2.$$

To je tzv. konvergencija po normi. Ni tada, ne mora vrijediti obična ili uniformna konvergencija (v. Fourierov razvoj).

Neortogonalni sustavi — ortogonalizacija

Ako je zadan skalarni produkt $\langle\ ,\ \rangle$ i skup funkcija $\widehat{\varphi}_j$, koje su linearno nezavisne, ali nisu ortogonalne u tom produktu,

- $\widehat{\varphi}_j$ ortogonaliziramo korištenjem Gram–Schmidtovog procesa ortogonalizacije (klasičnog ili modificiranog).
- Dobivene ortogonalne funkcije φ_j ne treba normirati!

Ortogonalizacija započinje s:

$$\varphi_0 := \widehat{\varphi}_0.$$

Zatim, za $j = 1, 2, \ldots$, stavimo $\varphi_j := \widehat{\varphi}_j - \widehat{\varphi}_j^{(j-1)}$, ili

$$\varphi_j := \widehat{\varphi}_j - \sum_{k=0}^{j-1} a_{jk}\varphi_k, \qquad a_{jk} = \frac{\langle \widehat{\varphi}_j, \varphi_k \rangle}{\|\varphi_k\|_2^2}.$$

Tada je φ_j ortogonalan na sve prethodne φ_k, $k = 0, \ldots, j-1$.

Ortogonalizacija funkcija

Početni dio jednog i drugog sustava razapinje isti prostor

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

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

Iz sustava potencija $\widehat{\varphi}_j(x) = x^j$, ortogonalizacijom dobivamo

- ortogonalne polinome $\varphi_j = p_j$.

Zbog $\Phi_j = \mathcal{P}_j$, stupanj polinoma p_j je baš jednak j.

Više o ortogonalnim polinomima — na sljedećem predavanju.

Primjer ortogonalizacije — početak

Primjer. Nađite ortogonalnu bazu za prostor Φ_2 razapet funkcijama $1, x, x^2$, u integralnom skalarnom produktu na intervalu $[-1, 1]$, s težinskom funkcijom $w(x) = 1$.

Rješenje. Skalarni produkt funkcija u i v definiran je s

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^{1} w(x)\, u(x) v(x)\, dx = \int_{-1}^{1} u(x) v(x)\, dx.$$

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

Prva funkcija u ortogonalnoj bazi jednaka je prvoj zadanoj funkciji, tj.

$$\varphi_0(x) = 1.$$

Primjer ortogonalizacije — funkcija φ_1

Računamo φ_1

$$\langle x, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot 1 \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot 1 \, dx = x \Big|_{-1}^{1} = 2,$$

pa je

$$a_{10} = \frac{\langle x, \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{0}{2} = 0.$$

Odatle dobivamo

$$\varphi_1(x) = x - a_{10} \cdot 1 = x.$$

Primjer ortogonalizacije — funkcija φ_2

Za ortogonalni polinom stupnja 2 treba izračunati a_{20} i a_{21}

$$\langle x^2, \varphi_0 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x^2 \cdot 1 \, dx = \frac{x^3}{3} \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3},$$

$$\langle x^2, \varphi_1 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x^2 \cdot x \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int\limits_{-1}^{1} x \cdot x \, dx = \frac{2}{3},$$

pa je

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

Primjer ortogonalizacije i primjena

Odatle je

$$\varphi_2(x) = x^2 - a_{21} \cdot x - a_{20} \cdot 1 = x^2 - \frac{1}{3}.$$

Uočite da je

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

Primjer. Korištenjem ortogonalnih polinoma iz prethodnog primjera, po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata nađite polinome stupnjeva 0 i 1, koji aproksimiraju funkciju

$$f(x) = e^x$$

na intervalu $[-1, 1]$, uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Jednostavni primjer — ortog. najmanji kvadrati

Rješenje problema najmanjih kvadrata su funkcije

$$\varphi^{(m)} = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \quad m = 0, 1, \quad \text{uz} \quad a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}, \quad j = 0, 1.$$

Za nalaženje koeficijenata a_j, moramo izračunati

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

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

Jednostavni primjer — rješenja

Odatle odmah izlazi

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

Aproksimacija konstantom je

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

Aproksimacija polinomom stupnja 1 je

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

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

Primjeri ortogonalnih familija funkcija

Trigonometrijske funkcije

Trigonometrijske funkcije

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

čine ortogonalnu familiju funkcija na intervalu $[0, 2\pi]$, obzirom na integralni skalarni produkt s težinskom funkcijom $w(x) = 1$.

Pokažimo da je to zaista tako. Neka su $k, \ell \in \mathbb{N}_0$. Tada vrijedi (produkt trigonometrijskih funkcija pretvaramo u zbroj)

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

Sad gledamo posebne slučajeve — je li $k = \ell > 0$ ili ne.

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Ako je $k = \ell > 0$, onda je prethodni integral jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - x\right)\Big|_0^{2\pi} = \pi.$$

Ako je $k \neq \ell$, onda je jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - \frac{\sin(k-\ell)x}{k-\ell}\right)\Big|_0^{2\pi} = 0.$$

Drugim riječima, vrijedi ortogonalnost sinusa

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

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Na sličan način, možemo pokazati da je

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

kao i

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

Potrebne formule za pretvaranje produkta u zbroj su

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

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

Fourierov red i koeficijenti

Periodičku funkciju f, osnovnog perioda duljine 2π, možemo aproksimirati (u smislu najmanjih kvadrata) redom oblika

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

Izraze za koeficijente dobivamo množenjem odgovarajućim trigonometrijskim funkcijama i integriranjem,

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos kx \, dx, \qquad b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin kx \, dx.$$

Prethodni red poznat je pod imenom Fourierov red (ili razvoj) funkcije f, a koeficijenti kao Fourierovi koeficijenti.

Fourierov red i najmanji kvadrati

Ako Fourierov red odsiječemo za $k = m$, onda dobijemo tzv. trigonometrijski polinom

$$f_m(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{m} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

Taj polinom je

- najbolja aproksimacija u smislu najmanjih kvadrata za f, u klasi trigonometrijskih polinoma "stupnja" manjeg ili jednakog m (prostor dimenzije $2m + 1$).

Uz ortogonalnost trigonometrijskih funkcija obzirom na integralni skalarni produkt), postoji i diskretna ortogonalnost (integral se zamijeni sumom, po odgovarajućim točkama).

Dodatak: Primjer za najmanje kvadrate, Cholesky i QR

Primjer

Primjer. Diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata nađite funkciju oblika

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

koja aproksimira slijedeći skup podataka (točaka):

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

.

Nađite

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

Primjer — linearizacija

Rješenje nađite korištenjem:

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

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

1. Pomnožimo oblik funkcije φ s $bx + c$ i dobivamo

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

odnosno,

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

Primjer — linearizacija

2. Ovu jednadžbu $-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x$ 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

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

gdje je $w = w(u, v)$, uz odgovarajuće supstitucije za u, v, w.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Prvo riješimo problem korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog.

Za 1. slučaj, metoda najmanjih kvadrata ima oblik

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

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 (1)

Deriviranjem po sva tri parametra izlaze jednadžbe

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

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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav normalnih jednadžbi

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

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

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

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

$$R \approx \begin{bmatrix} 2.2360679775 & -3.3049084707 & -2.3165664247 \\ & 2.0737598704 & -1.0149391114 \\ & & 0.4858174557 \end{bmatrix}.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

Moramo još riješiti dva trokutasta sustava

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

Rješenja prvog, pa drugog sustava su

$$y \approx \begin{bmatrix} -4.4721359550 \\ 3.1295812465 \\ 0.4247159232 \end{bmatrix}, \quad x \approx \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix}.$$

Prema tome, rješenje za parametre u 1. slučaju je

$$a = 1.7685862981,$$

$$b = 1.9369990502,$$

$$c = 0.8742294419.$$

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (1)

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

$$\varphi(x_i) = \frac{x_i + 1.7685862981}{1.9369990502 x_i + 0.8742294419},$$

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

$$S_0 = \sum_{i=0}^{4} (f_i - \varphi(x_i))^2 = 0.0010995831.$$

Napomena. Ovaj S_0 dobijemo uvrštavanjem parametara u polazni nelinearni model — to je ono što nas zanima!

- Dakle, ovo nije najmanji S za linearizirani model, nego pripadni S_0 za polazni model.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (2)

Za 2. slučaj treba uvesti supstitucije za varijable

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

i vrijednosti varijabli u čvorovima

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

Metoda najmanjih kvadrata ima isti oblik

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

ali s drugačijim značenjem varijabli i parametara.

Primjer — sustav normalnih jednadžbi (2)

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

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

Rješenje za parametre u 2. slučaju je

$$\begin{aligned} a &= 1.7522057170, \\ b &= 1.9387446017, \\ c &= 0.8534831289. \end{aligned}$$

Ova rješenja se donekle razlikuju od prethodnih! Na kraju, dobivamo da je $S_0 = 0.0022172135$ $(\approx 2 \cdot \text{prethodni } S_0)$.

Primjer — QR faktorizacija (1)

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

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

dobivamo

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

Matrice A i b iz problema minimizacije reziduala su jednake

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

Primjer — QR faktorizacija (1)

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

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} -0.4472135955 & -0.7127151128 & 0.5364927787 \\ -0.4472135955 & -0.2449656815 & -0.6476203098 \\ -0.4472135955 & 0.0781189772 & -0.2814102151 \\ -0.4472135955 & 0.2999382951 & -0.0650056784 \\ -0.4472135955 & 0.5796235221 & 0.4575434246 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 2.2360679775 & -3.3049084707 & -2.3165664247 \\ & 2.0737598704 & -1.0149391114 \\ & & 0.4858174557 \end{bmatrix}.$$

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

Primjer — QR faktorizacija (1)

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

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} -4.4721359550 \\ 3.1295812465 \\ 0.4247159232 \end{bmatrix}.$$

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

$$x \approx \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix},$$

a minimalna norma reziduala je $\|Ax - b\|_2 = 0.1591779081$.

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem (1)

Ako napravimo QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca, dobit ćemo $AP = Q_0R_0$, gdje je poredak stupaca $p = [2, 3, 1]$,

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} 0.0000000000 & 0.9409894604 & 0.3321538334 \\ 0.2486125437 & 0.2870820614 & -0.7315708741 \\ 0.4203346099 & 0.1033900358 & -0.3129274676 \\ 0.5382333419 & -0.0306530483 & -0.0596152612 \\ 0.6868882649 & -0.1431559168 & 0.5029913595 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 3.9016534956 & 1.4228070243 & -1.8940687604 \\ & 2.1466765410 & -1.1576525926 \\ & & 0.2689684102 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem (1)

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

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} 5.4515348490 \\ -0.1707206788 \\ 0.4756938448 \end{bmatrix}.$$

Dobiveno rješenje trokutastog sustava $R_0 x' = Q_0^T b$ je

$$x' \approx \begin{bmatrix} 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \\ 1.7685862981 \end{bmatrix}.$$

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem (1)

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

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

Pravo rješenje x dobit ćemo kao rješenje sustava $P^T x = x'$, tj.

$$x = Px' = \begin{bmatrix} 1.7685862981 \\ 1.9369990502 \\ 0.8742294419 \end{bmatrix}.$$

Zadatak. Napravite to isto za drugu linearizaciju.