Poglavje 6

Problemi najmanjših kvadratov, predoločeni sistemi

Radi bi rešili sistem $Ax = b$, kjer je $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ matrika polnega ranga, $x \in \mathbb{C}^n$, $b \in \mathbb{C}$ ter $m \geq n$. Sistem v splošnem ni rešljiv, zato minimiziramo normo ostanka $||Ax - b||_2$. Izkaže se, da je tak x ravno rešitev **normalnega sistema** $A^T Ax = A^T b$.

Naloga 6.1 *Merili smo tir delca, ki naj bi se gibal po paraboli.*

i	x_i	$f(x_i)$
1	-1	$\frac{11}{4}$
2	0	$\frac{7}{4}$
3	1	$\frac{1}{4}$
4	2	$\frac{13}{4}$

V bližini teh točk bi radi potegnili parabolo. Določi njene koeficiente po metodi najmanjših kvadratov. Uporabi normalni sistem in ga reši z Gaussovo eliminacijo (po metodi Choleskega).

Rešitev. Parabola naj bo $a + bx + cx^2$. Dobimo

$$\begin{array}{ccccccc} a & - & b & + & c & = & \frac{11}{4} \\ a & + & 0b & + & 0c & = & \frac{7}{4} \\ a & + & b & + & c & = & \frac{1}{4} \\ a & + & 2b & + & 4c & = & \frac{13}{4} \end{array} \qquad \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}}^{A} \overbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}}^{x} = \overbrace{\begin{bmatrix} \frac{11}{4} \\ \frac{7}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{13}{4} \end{bmatrix}}^{z},$$

kar je predoločen sistem $Ax = z$. Iz tega dobimo normalni sistem $\overbrace{A^T A}^{B} x = A^T z = v$. Izračunamo

$$B = A^T A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{bmatrix} \text{ in } v = A^T z = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 16 \end{bmatrix}.$$

Sistem rešimo z Gaussovo eleminacijo

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & 2 & 6 & 8 \\ 2 & 6 & 8 & 4 \\ 6 & 8 & 18 & 16 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 6 & 8 & 4 \\ 0 & -10 & -10 & 0 \\ 0 & -10 & -6 & 4 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 6 & 8 & 4 \\ 0 & -10 & -10 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 4 \end{array}\right]$$

Lahko uporabimo razcep Choleskega. Najprej izračunamo razcep Choleskega matrike $B = VV^T$ in dobimo

$$V = \begin{bmatrix} 2 & & \\ 1 & \sqrt{5} & \\ 3 & \sqrt{5} & 2 \end{bmatrix}.$$

Dobimo sistem $V\overbrace{(V^T x)}^{y} = z$. Iz

$$\begin{bmatrix} 2 & & \\ 1 & \sqrt{5} & \\ 3 & \sqrt{5} & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 16 \end{bmatrix}, \quad \begin{array}{ccccccc} 2y_1 & + & 0y_2 & + & 0y_3 & = & 8 \\ y_1 & + & \sqrt{5}y_2 & + & 0y_3 & = & 4 \\ 3y_1 & + & \sqrt{5}y_2 & + & 2y_3 & = & 16 \end{array}, \text{ dobimo } \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Rešiti moramo še sistem $V^T x = y$, kar je

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & \sqrt{5} & \sqrt{5} \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Rešimo sistem in dobimo $a = 1$, $b = -1$, $c = 1$. Parabola je $1 - x + x^2$. ■

Naloga 6.2 *Podjetje ima na voljo podatke*

Območje	*Prodaja (y_i)*	*Populacija (a_i)*	*Zaslužek na prebivalca (b_i)*
1	*162*	*274*	*850*
2	*120*	*180*	*1120*
3	*223*	*375*	*740*
4	*131*	*205*	*970*
5	*67*	*86*	*1032*

.

Za napovedovanje prodaje uporabljajo model $y_i = x_i + a_i x_2 + b_i x_3$, kjer so x_1, x_2, x_3, ki jih izračunajo po metodi najmanjših kvadratov. Določi x_1, x_2, x_3, in napovej prodajo na območju z populacijo $a = 60$ in zaslužkom $b = 1050$. Nalogo reši v Matlabu.

Rešitev. Sistem modelnih enačb prepišemo v matrično obliko

$$\begin{bmatrix} 1 & a_1 & b_1 \\ 1 & a_2 & b_2 \\ 1 & a_3 & b_3 \\ 1 & a_4 & b_4 \\ 1 & a_5 & b_5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix}.$$

Za rešitev v Matlabu glej priloženo datoteko `prodaja.m` ■

Izrek 6.1 *Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, kjer je $m \geq n$ in $rang(A) = n$. Potem obstaja enolični QR razcep $A = QR$, kjer je Q pravokotna matrika dimenzije $m \times n$ z ortogonalnimi stolpci, R pa zgornje trikotna matrika s pozitivnimi diagonalnimi elementi.*

Pri reševanju predoločenega sistema si lahko pomagamo s QR razcepom. Boljša je različica z MGS. Dobimo, da moramo rešiti sistem $Rx = Q^T b$. Boljše je narediti razširjen QR razcep:

$$Ax - b = \begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q & q_{n+1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} R & z \\ 0 & \rho \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = Q(Rx - z) - \rho q_{n+1}.$$

Iz česar dobimo, da moramo rešiti sistem $Rx = z$, maksimum pa je enak ρ.

for $k = 1, \ldots, n$ **do**
    $q_k = a_k$;
    for $i = 1, \ldots, k-1$ **do**
        $r_{ik} = q_i^T a_k(CGS)$ ali $r_{ik} = q_i^T q_k(MGS)$;
        $q_k = q_k - r_{ik} q_i$;
    end
    $r_{kk} = ||q_k||_2$;
    $q_k = \frac{q_k}{r_{kk}}$;
end

Naloga 6.3 *Poišči normalni sistem za reševanje naslednjih dveh problemov najmanjših kvadratov, kjer je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ in $rang(A) = n$.*

(i). Uteženi problem najmanjših kvadratov. Iščemo

$$\min_x ||D(Ax-b)||_2,$$

kjer je D nesingularna diagonalna.

(ii). Iščemo

$$\min_x ||Ax-b||_C,$$

kjer je C simetrična pozitivno definitna, ki generira normo

$$||x||_C = (x^T C x)^{\frac{1}{2}}.$$

Rešitev. (i)
Izračunajmo

$$\min_x ||D(Ax-b)|| = \min_x ||DAx - Db||,$$

matrika $F = DA$ je spet dimenzije $m \times n$. Označimo še $Db = \widehat{b}$, tako dobimo predoločen sistem $Fx = \widehat{b}$, iz česar dobimo

$$F^T F x = (DA)^T (DA) x = F^T \widehat{b} = (DA)^T (Db).$$

Razpisano je to enako

$$A^T D^2 A x = A^T D^2 b.$$

(ii)
Matrika C je simetrična pozitivno definitna, zato zanjo obstaja razcep Choleskega $C = V^T V$, kjer V zgornje trikotna. Izračunajmo

$$\min_x ||Ax-b||_C = \min_x \left((Ax-b)^T C (Ax-b)\right)^{\frac{1}{2}} = \min_x \left((Ax-b)^T V^T \overbrace{V(Ax-b)}^{y}\right)^{\frac{1}{2}},$$

uvedemo novo neznanko $y = U(Ax-b)$, dobimo

$$\min_x (y^T y)^{\frac{1}{2}} = \min_x < y, y >^{\frac{1}{2}} = \min_x ||y||_2 = \min_x ||V(Ax-b)||_2.$$

Torej iščemo

$$\min_x ||VAx - Vb||_2,$$

to je predoločen sistem

$$VAx = Vb \ \ /(VA)^T,$$

kar da

$$A^TV^TVAx = A^TV^TVb.$$

Z upoštevanjem $C = V^TV$ dobimo

$$A^TCAx = A^TCb.$$

■

Givensova rotacija R_{ik} je matrika enaka identiteti povsod razen v i-ti in k-ti vrstici in preslika i-to in k-to komponento vektorja x v vektorja y, ki ima k-to komponento enako 0.

$$R_{ik}^T([i,k],[i,k]) = \begin{bmatrix} \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2+x_k^2}} & \frac{x_k}{\sqrt{x_i^2+x_k^2}} \\ -\frac{x_k}{\sqrt{x_i^2+x_k^2}} & \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2+x_k^2}} \end{bmatrix}.$$

Householderjevo zrcaljenje je matrika oblike $H = I - \frac{2}{w^Tw}ww^T$ in predstavlja zrcaljenje prek ravnine določene z normalo w. Če hočemo preslikati vektor x v $\pm ke_1$, lahko to naredimo s Householderjevim zrcaljenjem določenim z $w = x + sign(x_1)||x||_2e_1$.

Naloga 6.4 *Izračunaj QR razcep matrike*

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

na različne načine:

- *s pomočjo MGS,*
- *s pomočjo Givensovih rotacij,*
- *s pomočjo Householderjevih zrcaljenj.*

Rešitev.

- Najprej normiramo prvi stolpec A, $||a_1|| = \sqrt{1+4+1} = \sqrt{6}$. Torej je

$$q_1 = a_1/||a_1|| = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{bmatrix}$$

in $r_{11} = ||a_1|| = \sqrt{6}$. V drugem koraku ortogonaliziramo drugi stolpec A a_2 glede na q_1. Izračunamo $a_2 = a_2 - \langle q_1, a_2\rangle\, q_1$. Velja $\langle q_1, a_2\rangle = \frac{3}{\sqrt{6}}$. Tako dobimo $a_2 = \begin{bmatrix} -5/2 & 0 & 5/2 \end{bmatrix}^T$ in $r_{12} = \frac{3}{\sqrt{6}}$. Izračunamo $q_2 = a_2/||a_2|| = \begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}^T$ in $r_{22} = ||a_2|| = 5/\sqrt{2}$. Na koncu izračunamo še $a_3 = a_3 - \langle q_1, a_3\rangle\, q_1 - \langle q_2, a_3\rangle\, q_2$. Dobimo $r_{13} = \langle q_1, a_3\rangle = 2\sqrt{\frac{2}{3}}$, $r_{23} = \langle q_2, a_3\rangle = 0$, $r_{33} = ||a_3|| = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $a_3 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}^T$.

- S pomočjo Givensove rotacije

$$R_{12}^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

uničimo 2. element v prvem stolpcu:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 3/\sqrt{5} \\ 0 & \sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix}.$$

Z Givensovo rotacijo

$$R_{13}^T = \begin{bmatrix} \sqrt{5/6} & 0 & 1/\sqrt{6} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{6} & 0 & \sqrt{5/6} \end{bmatrix}$$

uničimo 3. element v dobljeni matriki. Dobimo

$$\begin{bmatrix} \sqrt{5/6} & 0 & 1/\sqrt{6} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{6} & 0 & \sqrt{5/6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 3/\sqrt{5} \\ 0 & \sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{6} & \sqrt{3/2} & \sqrt{3/2} + 1/\sqrt{6} \\ 0 & \sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \\ 0 & \sqrt{15/2} & -\sqrt{3/10} + \sqrt{5/6} \end{bmatrix}.$$

Uporabimo še rotacijo

$$R_{23}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2/5} & \sqrt{3/5} \\ 0 & -\sqrt{3/5} & \sqrt{2/5} \end{bmatrix}$$

in dobimo isto matriko kot pri MGS, matrika $Q = R_{12}R_{13}R_{23}$.

■

Naloga 6.5 *S Householderjevimi zrcaljenji in QR razcepom reši linearni sistem*

$$\begin{array}{ccccccc} x_1 & + & 6x_2 & + & -2x_3 & = & -7 \\ 2x_1 & + & x_2 & + & -2x_3 & = & -1 \\ 2x_1 & + & 2x_2 & + & 6x_3 & = & 6 \end{array}.$$

Rešitev. Najprej transformiramo prvi stolpec

$$w = \begin{bmatrix} 1 + 1 \cdot (3 = ||A_1||_2) \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix},\ w^T w = 24,\ P_1 = I - \frac{1}{12} w w^T = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & -2 & -2 \\ -2 & 2 & -1 \\ -2 & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

$$P_1 \begin{bmatrix} 1 & 6 & -2 & -7 \\ 2 & 1 & -2 & -1 \\ 2 & 2 & 6 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & -4 & -2 & -1 \\ 0 & -4 & -2 & 2 \\ 0 & -3 & 6 & 9 \end{bmatrix}.$$

Izračunajmo P_2:

$$k = || \begin{bmatrix} -4 \\ -3 \end{bmatrix} || = 5,\ w_1 = \begin{bmatrix} -4 - 5 \\ -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -9 \\ -3 \end{bmatrix},\ w_1^T w_1 = 90,$$

$$P_2 = I - \frac{1}{45} w_1 w_1^T = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} -4 & -3 \\ -3 & 4 \end{bmatrix}.$$

Izračunajmo

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-4}{5} & \frac{-3}{5} \\ 0 & \frac{-3}{5} & \frac{4}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3 & -4 & -2 & -1 \\ 0 & -4 & -2 & 2 \\ 0 & -3 & 6 & 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & -4 & -2 & -1 \\ 0 & 5 & -2 & -7 \\ 0 & 0 & 6 & 6 \end{bmatrix}.$$

Iz česar dobimo $x_3 = 1$, $x_2 = \frac{-7+2}{5} = -1$, $x_1 = \frac{-1+2-4}{-3} = 1$. ■

Naloga 6.6 *Naj bo A zgornja Hessenbergova matrika ($a_{ik} = 0,\ i > k+1$). Zapiši algoritem za QR razcep s pomočjo Givensovih rotacij in z njegovo pomočjo reši sistem $Ax = b$. Poleg tega še preštej število operacij (korenjenja, seštevanja, množenja). Matrike Q ti ni potrebno izračunati. Kakšna je oblika matrike Q?*

Rešitev. Givensova rotacija R_{ik} spremeni samo i-to in k-to vrstico. Poglejmo si primer, ko je matrika dimenzije 4:

$$A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \end{bmatrix} \overset{R_{12}^T}{\rightarrow} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \end{bmatrix} \overset{R_{23}^T}{\rightarrow} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \\ & & \times & \times \end{bmatrix} \overset{R_{34}^T}{\rightarrow} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times \\ & & \times & \times \\ & & & \times \end{bmatrix}$$

---

for $i = 1, \ldots, n-1$ **do**
- $r = \sqrt{a_{ii}^2 + a_{i+1,i}^2}$ -|- $n-1\ \surd,\ 2n-2\ *,\ n-1\ +$;
- $c = \frac{a_{ii}}{r}$ -|- $n-1\ *$;
- $s = \frac{a_{i+1,i}}{r}$ -|- $n-1\ *$;
- $a_{ii} = r$;
- $z_1 = b_i$;
- $z_2 = b_{i+1}$;
- $b_i = cz_1 + sz_2$ -|- $2n-2\ *,\ n-1\ +$;
- $b_{i+1} = -sz_1 + cz_2$ -|- $2n-2\ *,\ n-1\ +$;
- **for** $k = i+1, \ldots, n-1$ **do**
  - $aik = a_{ik}$;
  - $a_{ik} = ca_{ik} + sa_{i+1,k}$ -|- $2\sum_{i=1}^{n-1}(n-i-1)\ *,\ \sum_{i=1}^{n-1}(n-i-1)\ +$;
  - $a_{i+1,k} = -s \cdot aik + ca_{i+1,k}$ -|- $2\sum_{i=1}^{n-1}(n-i-1)\ *,\ \sum_{i=1}^{n-1}(n-i-1)\ +$;
- **end**

end

Reši zgornje trikotni sistem $Rx = b$.

Vsota je enaka

$$6\sum_{i=1}^{n-1}(n-i-1) + 12(n-1) = 6\sum_{k=1}^{n-2} k + 12(n-1) = 6\frac{(n-2)(n-1)}{2} + 12(n-1) = 3n^2 + 3n - 6.$$

Matrika Q je zgornja Hessenbergova. ■

Naloga 6.7 *Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$ in $rang(A) = n$. Podana je še matrika $C \in \mathbb{R}^{p\times n}$, $p \leq n$, $rang(C) = p$. Zapiši algoritem za reševanje predoločenega sistema $Ax = b$, pri pogoju $Cx = d$.*

Rešitev. Iščemo $\min_{Cx=d} ||Ax - b||_2$, poglejmo si oblike matrik. Pomagajmo si z razširjenim

$Q \begin{array}{c} p \\ n-p \end{array} \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$ razcepom matrike C^T. Rešujemo problem

$$\min_{Cx=d} ||Ax - b||_2 = \min_{CQQ^Tx=d} ||AQQ^Tx - b||_2.$$

Izračunajmo $CQ = (C^T)^TQ = (QR)^TQ = R^TQ^TQ = R^T = \begin{bmatrix} R_1^T & 0 \end{bmatrix}$, uvedemo še nove neznanke

$Q^Tx = \begin{array}{c} p \\ n-p \end{array} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$ in $AQ = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} p & n-p \end{array} \\ \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \end{bmatrix} \end{array}$. Nadaljujemo z

$$\min_{\begin{bmatrix} R_1^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = d} || \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} - b||_2 = \min_{R_1^T y = d} ||A_1y + A_2z - b||_2.$$

Z $R^Ty = d$ je y enolično določen. Torej nam

$$\min_{R_1^T y=d} ||A_2z - (b - \overbrace{A_1y}^{\text{znano}})||_2$$

predstavlja predoločeni sistem $A_2z = b - A_1y$.

$C^T = QR$;
$R_1^Ty = d$ (rešimo sistem, dobimo y);
$AQ = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} p & n-p \end{array} \\ \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \end{bmatrix} \end{array}$;
$\min_z ||A_2z - (b - A_1y)||_2$ (rešimo predoločen sistem, dobimo z) ;
$x = Q \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$;

■

Naloga 6.8 *Dana je funkcija* $f(x) = sin(\pi x)\exp(x/5)$. *Na intervalu* $[0, 4]$ *ekvidistantno izberite točke,* $x_i = ih, i = 0, 1, \ldots, 16, h = \frac{1}{4}$ *in izračunajte vrednosti* $y_i = f(x_i)$. *Poiščite polinom* p *stopnje* 5, *ki zadošča*

$$p(1) = 0, \quad p(4) = 1$$

in aproksimira točke (x_i, y_i) *po metodi najmanjših kvadratov. Problem prevedite na iskanje*

$$min_{Cx=d}||Ax - b||_2,$$

in ga rešite z metodo opisano v prejšnji nalogi. Izpišite koeficiente polinoma ter narišite sliko, na kateri so označene točke, funkcija f *ter izračunan polinom* p.

Rešitev. Polinom zapišemo v obliki $a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^5 + a_5x^5$. Pogoji nam dajo sistem $Cx = d$

$$\begin{array}{ccccccccccccc} a_0 & + & a_1 & + & a_2 & + & a_3 & + & a_4 & + & a_5 & = 0 \\ a_0 & + & 4a_1 & + & 16a_2 & + & 64a_3 & + & 256a_4 & + & 1024a_5 & = 1, \end{array}$$

kjer je

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 16 & 64 & 256 & 1024 \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 \end{bmatrix}^T \text{ in } d = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Zapišimo še predoločen sistem $Ax = b$. Matrika bo dimenzije 17×6, saj imamo sedemnajst interpolacijskih točk, njeni elementi so $a_{ij} = x_i^{j-1}$. Oglejte si demonstracijsko datoteko v Matlabu. ∎

Naloga 6.9 *Dan imamo naslednji zvezni problem najmanjših kvadratov, kjer je* $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ *in* $f(x) = e^x$,

$$\min_{p \text{ je parabola}} \int_{-1}^{1} (f(x) - p(x))^2 .$$

Polinom p *je linearna kombinacija baznih polinomov* $1, x, x^2, x^3$. *Tisti polinom* p, *ki predstavlja rešitev, je pravokotna projekcija funkcije* f *na prostor vseh poli- nomov stopnje* 3, *torej mora veljati*

$$\left\langle f(x) - p(x), x^k \right\rangle = 0 \text{ za } k = 0, 1, 2, 3,$$

kjer je skalarni produkt dveh funkcij definiran z

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)dx.$$

Denimo, da na intervalu $[a, b]$ *iščemo najboljšo aproksimacijo po metodi najmanjših kvadratov funkcije* f *z linearno kombinacijo baznih funkcij* $p_1, \ldots, p_n$. *Potem je rešitev* $p(x) = \alpha_1 p_1(x) + \ldots + \alpha_n p_n(x)$, *kjer so* $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ *rešitve linearnega sistema*

$$\begin{bmatrix} \langle p_1, p_1 \rangle & \langle p_1, p_2 \rangle & \cdots & \langle p_1, p_n \rangle \\ \langle p_2, p_1 \rangle & \langle p_2, p_2 \rangle & \cdots & \langle p_2, p_n \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle p_n, p_1 \rangle & \langle p_n, p_2 \rangle & \cdots & \langle p_n, p_n \rangle \end{bmatrix}$$

Matriko skalarnih produktov iz zgornjega sistema imenujemo ***Gramova matrika***. *Če so bazne funkcije ortogonalne, kar lahko npr. dosežemo z uporabo Gram-Schmidtove orto- gonalizacije, potem je Gramova matrika diagonalna.*

Rešitev. Oglejte si demonstracijsko datoteko v Matlabu. ∎

Naloga 6.10 *Naj bo* $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, *kjer je* $m \geq n$ *in* $rang(A) = n$. *Dokaži, da ima sistem*

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} m & n \end{array} \\ \begin{array}{c} m \\ n \end{array} & \begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

rešitev, ki ustreza rešitvi predoločenega sistema $Ax = b$ *po metodi najmanjših kvadratov.*

Rešitev. Poglejmo kaj mora veljati za rešitev sistema. Po blokih dobimo $r + Ax = b$ in $A^T r = 0$. Iz prve enačbe dobimo $r = b - Ax$, kar vstavimo v drugo enačbo. Iz tega sledi

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

Dobili smo ravno normalni sistem. ∎

Naloga 6.11 *Dokaži, da za matriko X z najmanjšo normo $||X||_F$, ki minimizira $||XA - I_n||_F$ velja $X = A^+$. Matika A je dimenzije $m \times n$, kjer je $m \geq n$ in $rang(A) = r$.*

Rešitev. Naj bo podan singularni razcep matrike $A = U\Sigma V^T$ dimenzije $m \times n$ in ranga r. Tukaj sta U in V ortogonalni matriki dimenzij $m \times m$ in $n \times n$. Psevdoinverz matrike A je enak $A^+ = V\Sigma^+ U^T$, kjer je

$$\Sigma = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ m-r \end{array} & \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array}, \quad \Sigma^+ = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ m-r \end{array} & \begin{bmatrix} S^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

in $S = diag(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r)$. Lotimo se reševanja. Najprej zapišemo X kot $X = VDU^T$, potem je $||X||_F = ||D||_F$ in velja

$$||XA - I||_F = ||VD\overbrace{U^T U}^{I}\Sigma V^T - I||_F \overset{\text{V ortogonalna}}{=} ||D\Sigma - I||_F.$$

Zadnji enačaj dobimo tako, da z leve pomnožimo z V^T, z desne pa z V. Matrika V je ortogonalna, tako se Frobeniusova norma ne spremeni. Matriko D predstavimo v bločni obliki

$$D = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} r & m-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array} & \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix} \end{array}.$$

Potem je $D\Sigma$ oblike

$$D\Sigma = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array} & \begin{bmatrix} D_{11}S & 0 \\ D_{21}S & 0 \end{bmatrix} \end{array}.$$

Če želimo, da bo $||D\Sigma - I||_F^2 = ||D_{11}S - I_r||_F^2 + ||D_{21}S||_F^2 + || - I_{n-r}||_F^2$ minimalna, moramo izbrati $D_{11} = S^{-1}$ in $D_{21} = 0$. Radi bi tudi, da je $||D||_F = ||X||_F$ čim manjša, torej je očitno najbolje izbrati $D_{12} = D_{22} = 0$. Velja namreč $||D||_F^2 = ||D_{11}||_F^2 + ||D_{21}||_F^2 + ||D_{12}||_F^2 + ||D_{22}||_F^2$. Dobili smo, da mora veljat $D = \Sigma^+$, kar nam da $X = V\Sigma^+ U^T = A^+$. ∎

Če A ni polnega ranga, pravimo, da ima defekten rang. V primeru defektnega ranga rešitev, ki minimizira $||Ax - b||_2$ ni enolična, saj lahko x prištejemo poljuben $z \in \ker A$. V takšnem c primeru pravimo, da je izmed vseh vektorjev x, ki minimizirajo $Ax = b$, rešitev tisti, ki ima minimalno normo.

Naloga 6.12 *Če je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, $rang(A) = r < n$ in $A = U\Sigma V^T$ singularni razcep, potem ima izmed vseh vektorjev x, ki minimizirajo normo $||Ax - b||_2$, najmanjšo normo $x = A^+ b$ oziroma*

$$x = \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

in

$$||Ax - b||_2^2 = \sum_{i=r+1}^{m} (u_i^T b)^2.$$

Rešitev. Za poljuben $x \in \mathbb{R}^n$ velja

$$||Ax - b||_2^2 = ||U^T AV(V^T x) - U^T b||_2^2 = ||\Sigma a - U^T b||_2^2 = \sum_{i=1}^{r}(\sigma_i a_i - u_i^T b)^2 + \sum_{i=r+1}^{m}(u_i^T b)^2,$$

kjer je $a = V^T x$. Minimum je očitno dosežen pri $a_i = \frac{u_i^T b}{\sigma_i}$ za $i = 1, \ldots, r$, komponente $a_{r+1}, \ldots, a_m$ pa so poljubne. Da dobimo minimalni $x = Va$ vzamemo $a_{r+1} = \cdots = a_m = 0$. ∎