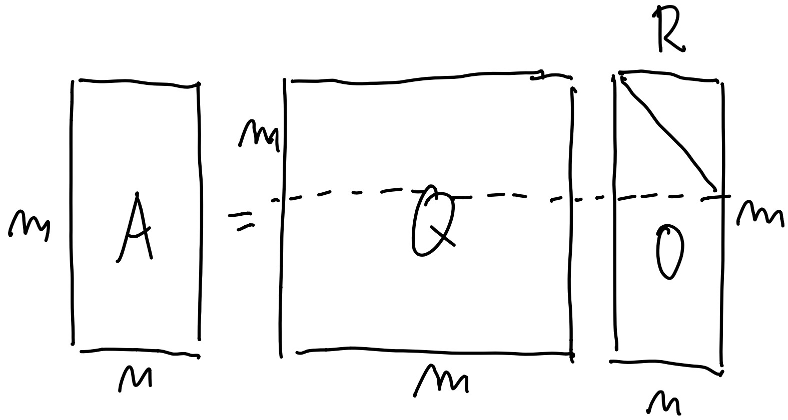
Linearni problem najmanjših kvadratov (nadaljevanje)

$A = QR$, $\quad Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonalna

$\qquad\qquad R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ zgornja trapezna



Rešitev po metodi najmanjših kvadratov je

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

$$(QR)^T (QR) x = (QR)^T b$$

$$R^T (Q^T Q) R x = R^T Q^T b$$

$$R^T R x = R^T Q^T b \quad ?$$

Alternativa:

Iščemo $\min\limits_x \|Ax - b\|_2^2$

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|QRx - b\|_2^2 \overset{!}{=} \|Rx - Q^T b\|_2^2$$

$$\left(= \| Q^T(QRx - b) \|_2^2 \right.$$

Kdaj je $\|Rx - Q^T b\|_2^2$ minimalno?

$$R = \begin{array}{c} n \\ \left[\begin{array}{c} R_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{l} \\ n \\ m-n \end{array} \quad ; \quad Q^T b = \left[\begin{array}{c} c_1 \\ c_2 \end{array}\right] \begin{array}{l} n \\ m-n \end{array}$$

$$\|Rx - Q^T b\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} R_1 x \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} R_1 x - c_1 \\ -c_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 \overset{!}{=} \|R_1 x - c_1\|_2^2 + \|c_2\|_2^2$$

$$\left(\left\| \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ -1 \end{bmatrix} \right\|_2^2 = (2^2 + 3^2) + 1^2 = \left\| \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \right\|_2^2 + \| [1] \|_2^2 \right)$$

$\Rightarrow$ izraz bo minimalen, ko bo $\boxed{R_1 x = c_1}$

uporabimo obratno vstavljanje

Kako izračunati QR razcep?

Gram-Schmidtova ortogonalizacija

Klasični algoritem:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix}}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & \\ 0 & & \ddots & \\ 0 & & & r_{nn} \end{bmatrix}}_{R}$$

$$q_1 = \frac{1}{\|a_1\|} a_1 \; ; \quad a_1 = r_{11} \cdot q_1 \Rightarrow r_{11} = +\|a_1\|$$

$r_{12} q_1 + r_{22} q_2 = a_2$, želimo, da je $q_2^T q_1 = 0$!!

$$\Rightarrow r_{12} \underbrace{q_1^T q_1}_{1} + r_{22} \underbrace{q_1^T q_2}_{0} = q_1^T a_2$$

$$r_{12} = q_1^T a_2$$

$\Rightarrow r_{22} q_2 = a_2 - r_{12} q_1$; normiramo

$$r_{22} = \| a_2 - r_{12} q_1 \|_2$$

$$\Rightarrow \quad q_2 = \frac{1}{r_{22}}\left(a_2 - r_{12}\, q_1\right)$$

$\vdots$ nadaljujemo podobno

Opazimo, da elemente matrike R računamo po stolpcih.

Modificiran Gram-Schmidt:

$$\begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & \cdots & q_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \ddots & \\ 0 & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

Elemente matrike R računamo po vrsticah!

<u>Izrek</u>: Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\operatorname{rang}(A) = n$.

Potem obstaja enolični QR razcep, kjer je $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matrika z ortonormiranimi stolpci, $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$

pa zgornja trikotna matrika s pozitivnimi diagonalnimi elementi.

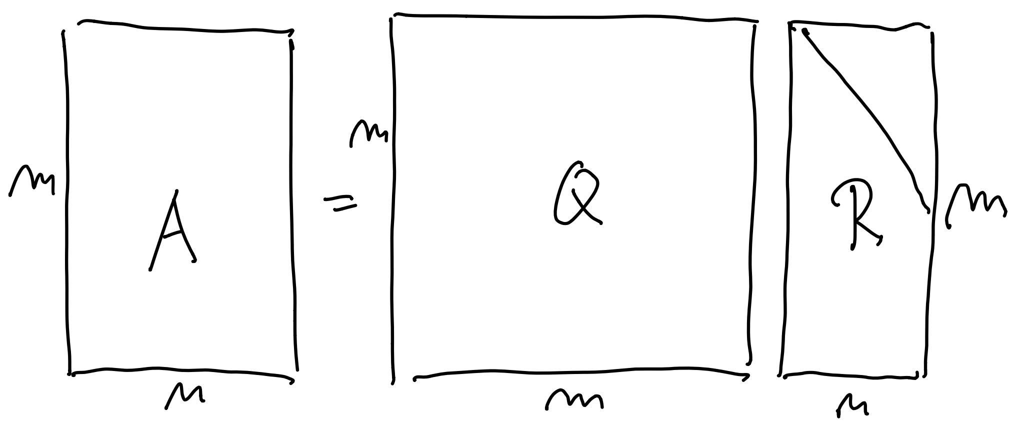
Pri reševanju predoločenega sistema z MGS moramo paziti, da ne izračunamo najprej QR razcepa in potem rešujemo trikotni sistem.

Namesto tega razcepimo matriko $[A\ b]$:

$$[A\ b] = [Q\ q_{n+1}] \begin{bmatrix} R & z \\ 0 & \rho \end{bmatrix} \quad \text{in}$$

rešujemo $Rx = z$!

Givensove rotacije



Ideja:

$$Q_1 A = \left[\begin{array}{c|ccc} x & x & & x \\ \boxed{0} & x & & \vdots \\ x & x & \cdots & \vdots \\ x & \vdots & & \\ \vdots & \vdots & & \\ x & & & x \end{array}\right] \qquad Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} x & x & \\ \boxed{0} & x & \\ \boxed{0} & x & \\ x & & \\ \vdots & & \\ x & & \end{bmatrix}$$

$$\cdots \underbrace{Q_k Q_{k-1} \cdots Q_1}_{Q^T} A = \underbrace{\begin{bmatrix} x & & \\ 0 & x & \\ 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & x \\ \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{R}$$

Lema: Če so Q_i, $i = 1, 2, \ldots, k$, ortogonalne, je taka tudi $Q_k Q_{k-1} \cdots Q_1$.

Dokaz: Indukcija na k:

$k = 2$: Q_1, Q_2 ortogonalni $\Rightarrow$ $Q_2 Q_1$ je ortogonalna

$$(Q_2 Q_1)^T (Q_2 Q_1) = Q_1^T (Q_2^T Q_2) Q_1 = I$$

$k > 2$ sklepamo induktivno!

• Rotacija vektorja $x \in \mathbb{R}^2$ za kot φ v negativni smeri je dana z matriko

$$Q^T = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$$

To posplošimo na rotacijo v ravnini (i,k) prostora $\mathbb{R}^n$

$$Q_{ik}([i,k],[i,k])^T = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix},$$

ostali elementi na diagonali so 1, izven diagonale pa 0 (razen na mestih ik in ki)

$$n=4: \quad Q_{13}^T = \begin{bmatrix} c & 0 & s & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Če je $y = Q_{ik}^T x$, je

$$y_j = x_j \quad j \neq i, k$$

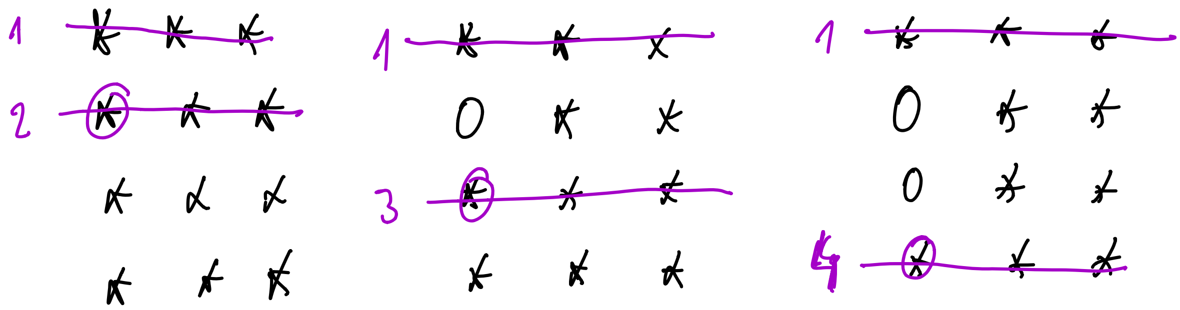
$$y_i = c x_i + s x_k$$

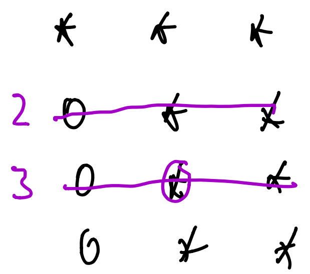
$$y_k = -s x_i + c x_k$$

Ideja je, da c in s izberemo tako, da je $y_k = 0$. Izkaže se, da je (preverite sami)

$$\boxed{\begin{aligned} r &= \sqrt{x_i^2 + x_k^2} \\ c &= x_i / r \\ s &= x_k / r \end{aligned}}$$

Matriko Q_{ik} imenujemo Givensova rotacija.
Z ustreznim vrstnim redom rotacij lahko dosežemo, da bo na desni strani nastala zgornja trapezna matrika.





Število operacij $\approx$

$$3mn^2 - n^3$$

Če potrebujemo Q: $6mn^2 - 3mn^2$