Diskretna metoda najmanjih kvadrata

Kovačević, Korina

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Korina Kovačević

DISKRETNA METODA NAJMANJIH KVADRATA

Diplomski rad

Voditelj rada:
dr. sc. Ivana Šain Glibić

Zagreb, veljača 2023.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana ____________________ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. ____________________________, predsjednik
2. ____________________________, član
3. ____________________________, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _______________.

Potpisi članova povjerenstva:

1. ____________________________
2. ____________________________
3. ____________________________

Veliko hvala obitelji i kolegama na podršci i pomoći tijekom studija te mentorici dr. sc. Ivani Šain Glibić na trudu i savjetima.

Sadržaj

Uvod

U znanosti često želimo izmjerene podatke na nekom skupu $X \in R$ aproksimirati nekom funkcijom. Cilj je što točnije odrediti aproksimacijsku funkciju jer, osim izmjerenih podataka, često je potrebno aproksimirati i podatke koji se nalaze između izmjerenih. Što je više podataka poznato, točnije ćemo moći odrediti parametre aproksimacijske funkcije. Također, aproksimacijska funkcija najčešće mora zadovoljavati jedan od navedenih uvjeta. Prvi uvjet je da prolazi određenim točkama i tada govorimo o interpolaciji. Drugi uvjet je da se minimizira odstupanje izmjerenih podataka od aproksimacije funkcije i tada problem rješavamo metodom najmanjih kvadrata. U radu ćemo se baviti diskretnom metodom najmanjih kvadrata jer su podatci zadani na diskretnom skupu X.
Adrien-Marie Legendre službeno je predstavio metodu 1805. godine u svom radu, ali smatra se kako ju je Carl Friedrich Gauss koristio već krajem 18. stoljeća. Tijekom šezdesetih godina prošlog stoljeća počeo je razvoj modernih numeričkih metoda za rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata koje se stalno unaprijeđuju. Danas ova metoda ima širok raspon primjene tako da se koristi u statistici, geodeziji, astronomiji, financijama...

Poglavlje 1

Osnovne definicije

U prvom poglavlju dat ćemo kratki pregled osnovnih definicija i nekih teorema iz linearne algebre i numeričke matematike koje ćemo koristiti u sljedećim poglavljima. Na ovaj način rad će biti čitljiviji jer nema potrebe za objašnjavanjem svakog pojma koji se uvodi.

1.1 Osnovne definicije

Definicija 1.1.1. *Neka je $A \subseteq \mathbb{R}^n$ otvoren, $f : A \to \mathbb{R}$ i $c \in A$. Ako postoji okolina $U(c)$ od c na kojoj je $f(c)$ minimalna vrijednost od f, tj.*

$$f(c) \leq f(x), \quad \forall x \in U(c),$$

onda je c lokalni minimum, a $f(c)$ vrijednost lokalnog minimuma.

Definicija 1.1.2. *Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{F}$. Skalarni produkt na V je preslikavanje $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{F}$ sa sljedećim svojstvima:*

- $\langle x, x \rangle \leq 0, \ \forall x \in V$
- $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0$
- $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle, \ \forall x_1, x_2, y \in V$
- $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle, \ \forall \alpha \in \mathbb{F}, \forall x, y \in V$
- $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}, \forall x, y \in V.$

Na vektorskom prostoru $\mathbb{R}^n$ skalarni produkt definiramo kao

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Definicija 1.1.3. *Neka je* $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *i neka su* $S_1, \ldots, S_n \in \mathbb{R}^{m\times 1}$ *njeni stupci. Rang matrice A označava se s* $\mathrm{r}(A)$ *i definira kao* $\mathrm{r}(A) = \dim[S_1, \ldots, S_n]$. *Također, kažemo da matrica ima puni stupčani rang ako je* $\mathrm{r}(A) = n$.

Kada se bavimo rangom matrice, bitno je definirati i ekvivalentne matrice.

Definicija 1.1.4. *Neka je* $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. *Elementarne transformacije matrice A su:*

- *zamjena dvaju redaka (stupaca)*
- *množenje retka (stupca) skalarom* $\alpha \neq 0$
- *pribrajanje retku (stupcu) drugog retka (stupca) pomnoženog skalarom* $\alpha \neq 0$.

Definicija 1.1.5. *Matrica* $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *ekvivalentna je matrici* $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *ako se matrica B može dobiti iz matrice A primjenom konačno mnogo elementarnih transformacija redaka ili stupaca.*

Korolar 1.1.6 ([1])**.** *Neka su* $A, B \in R^{m\times n}$. *Tada je matrica A ekvivalentna matrici B ako i samo ako* $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(B)$.

Korolar 1.1.7 ([1])**.** *Matrice* $A, B \in R^{m\times n}$ *su ekvivalentne ako i samo ako postoje regularne matrice* $S \in \mathbb{R}^{m\times m}$ *i* $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *takve da* $B = SAT$.

Teorem 1.1.8 ([1])**.** *(Kronecker-Capelli) Neka je* $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *i* $b \in \mathbb{R}^m$. *Definiramo matricu* $A_p \in \mathbb{R}^{m\times(n+1)}$ *kao*

$$A_p = [A, b].$$

Sustav $Ax = b$ *je rješiv ako i samo ako vrijedi* $r(A) = r(A_p)$.

Definicija 1.1.9. *Hilbertova matrica* $H \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *definirana je kao*

$$H_{ij} = \frac{1}{i + j - 1}$$

za $i = 1, \ldots, m$ *i* $j = 1, \ldots, n$.

Definicija 1.1.10 ([7])**.** *Za simetričnu matricu* $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *kažemo da je:*

- *pozitivno definitna ako je*

$$\langle Hx, x\rangle > 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$$

- *pozitivno semidefinitna ako je*

$$\langle Hx, x\rangle \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

1.2 Ortogonalni komplement i ortogonalni projektor

Za geometrijsku interpretaciju metode, bitni su pojmovi ortogonalni komplement i ortogonalni projektor.

Definicija 1.2.1. *Neka je V unitaran prostor i $S \leqslant V$. Ortogonalni komplement potprostora S je $S^\perp$ takav da*

$$S^\perp = \{x \in V \mid \langle x, s\rangle = 0, \forall s \in S\}.$$

Definicija 1.2.2. *Neka je V konačno-dimenzionalan unitarni prostor i $S \leqslant V$. Tada je $V = S \oplus S^\perp$, tj. svaki vektor $x \in V$ ima jedinstven zapis oblika $x = a + b$, $a \in S$ i $b \in S^\perp$. Operator $P_S \in L(V)$ definiran kao $P_S(x) = a$ zove se ortogonalni projektor.*

Napomena 1.2.3. *Za ortogonalni projektor P_S vrijedi:*

- $\mathrm{Im}(P_S) = S$
- $P_S^2 = P_S$
- $P_S^T = P_S$.

Također, dokažimo da je projektor $I - P_S$ projektor na ortogonalni komplement od P_S. Kao i prije, neka je $x = a + b$, $a \in S$ i $b \in S^\perp$. Tada je

$$\begin{aligned}(I - P_S)(x) &= (I - P_S)(a + b)\\ &= I(a) + I(b) - P_S(a) - P_S(b)\\ &= a + b - a\\ &= b.\end{aligned}$$

Za određivanja skupa rješenja problema najmanjih kvadrata bit će bitan pojam linearna mnogostrukost.

Definicija 1.2.4. *Neka je S potprostor prostora V i $x \in V$. Svaki skup oblika $x + S = \{x + a \mid a \in S\}$, naziva se linearna mnogostrukost u smjeru potprostora S.*

1.3 Matrična 2-norma i uvjetovanost matrice

Prilikom rješavanja problema $Ax = b$ na računalu gdje je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$ i $b \in \mathbb{R}^m$ za neke $m, n \in \mathbb{N}$, zanima nas kakve promjene u rješenju napravi mala promjena ulaznih vrijednosti. Preciznije, što se dogodi s rješenjem x, ako se samo vektor b promijeni za Δb ili ako se samo matrica A promijeni za ΔA ili ako se matrica A promijeni za ΔA i vektor b za Δb? Pokazatelj osjetljivosti rješenja problema sustava na male promjene veličina je

uvjetovanost matrice.
Za definiranja uvjetovanosti matrice, prvo će nam trebati definicija matrične norme.

Definicija 1.3.1. *Neka je $x \in \mathbb{R}^n$. 2-normu $\|\cdot\|_2 : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definiramo kao*

$$\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x\rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}.$$

Neka je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Matrična 2-norma $\|\cdot\|_2 : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$ dana je izrazom:

$$\|A\|_2 = \max_{\substack{x\neq 0\\ x\in\mathbb{R}^n}} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}.$$

Definicija 1.3.2. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regularna i $\|\cdot\|_2 : \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}$ matrična 2-norma. Uvjetovanost matrice definiramo kao*

$$\kappa(A) = \|A\|_2\|A^{-1}\|_2.$$

Uvijek vrijedi da je $\kappa(A) \geq 1$. Ako je $\kappa(A)$ blizu 1, matrica je dobro uvjetovana, tj. male promjene u veličinama A ili b dovode do malih promjena u rješenju x. Ako je $\kappa(A)$ mnogo veći od 1, matrica je loše uvjetovana, tj. male promjene u veličinama A ili b dovode do većih promjena u rješenju x.

1.4 Stabilnost numeričkog računanja

Stabilnost numeričkog algoritma vezana je uz točnost izračunanog rješenja, tj. koliko izračunano rješenje odstupa od pravog zbog grešaka zaokruživanja koje su neizbježne. Neka je f realna funkcija i pretpostavimo da je $y = f(x)$ pravo rješenje, a $\hat{y}$ izračunano u realnoj aritmetici računala. Za koji Δx imamo

$$\hat{y} = f(x + \Delta x)? \tag{1.1}$$

Takvih Δx postojat će više pa će nas zanimati najveći. Greška unaprijed je apsolutna ili relativna greška od $\hat{y}$.

Definicija 1.4.1. *Algoritam je stabilan ako vrijedi*

$$\hat{y} + \Delta y = f(x + \Delta x),\ |\Delta y| \leq \eta|y|,\ |\Delta x| \leq \epsilon|x|$$

za male η i ϵ.

1.5 Matrične faktorizacije

Prilikom numeričkog rješavanja nekog problema, često se koriste razne vrste faktorizacija matrice. U nastavku ćemo definirati neke koje su među najvažnijima, a također se koriste prilikom numeričkog rješavanja diskretne metode najmanjih kvadrata.

1. Faktorizacija Choleskog

U prvoj metodi koju obrađujemo u radu koristi se faktorizacija Cholsekog.

Teorem 1.5.1 ([6])**.** *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična pozitivno definitna. Onda postoji jedinstvena gornje trokutasta matrica $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ s pozitivnim dijagonalnim elemntima takva da je $A = R^T R$. Drugim riječima, A ima jedinstvenu faktorizaciju Choleskog.*

Dokaz. U dokazu će se korisiti princip matematičke indukcije po redu n matrice. Baza indukcije: Za $n = 1$, $A = [a_{11}]$ simetrična i pozitivno definitna matrica. Definiramo matricu R kao $R = \sqrt{a_{11}}$ koja ima pozitivne elemente na dijagonali te vrijedi

$$A = \sqrt{a_{11}}\sqrt{a_{11}} = R^T R.$$

Pretpostavka indukcije: Pretpostavimo da tvrdnja vrijedi za sve matrice reda $n - 1$. Korak matematičke indukcije: Neka je A simetrična pozitivno definitna matrica reda n. Tada je podmatrica $A_{n-1} = A(1 : n-1, 1 : n-1)$ pozitivno definitna i simetrična pa zbog pretpostavke indukcije ima jedinstvenu faktorizaciju Choleskog, tj. $A_{n-1} = R^T_{n-1} R_{n-1}$. Matricu A možemo zapisati kao

$$\begin{aligned} A = \begin{bmatrix} A_{n-1} & c \\ c^T & a_{nn} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} R^T_{n-1} & 0 \\ r^T & r_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{n-1} & r \\ 0 & r_{nn} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} R^T_{n-1} R_{n-1} & R^T_{n-1} r \\ r^T R_{n-1} & r^T r + r^2_{nn} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Iz prethodnog zapisa slijede dvije jednadžbe s nepoznatim vektorom $r \in \mathbb{R}^{n-1}$ i skalarom r_{nn}

$$R^T_{n-1} r = c, \quad r^T r + r^2_{nn} = a_{nn}.$$

Zbog regularnosti matrice R_{n-1} postoji jedinstveno rješenje r prvog sustava. Zapišimo drugu jednadžbu kao

$$r^2_{nn} = a_{nn} - r^T r.$$

Ako je lijeva ili desna strana pozitivna, postoji jedinstveno realno rješenje r_{nn}. Iz Binet-Cauchyjevog teorema slijedi

$$0 < \det(A) = \det(R^T)\det(R) = (\det(R))^2 = (\det(R_{n-1})r_{nn})^2 = (\det(R_{n-1}))^2 r_{nn}^2.$$

Matrica R_{n-1} je regularna i zato je $\det(R_{n-1}))^2 > 0$ pa mora vrijediti i $r_{nn} > 0$, tj. matrica R ima pozitivne elemente na dijagonali. □

2. QR faktorizacija

Definicija 1.5.2. *Neka je zadana matrica $A \in R^{m\times n}$ koja ima puni stupčani rang. QR faktorizacija je rastav matrice A tako da*

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

gdje je $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonalna matrica i $R_0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gornje trokutasta matrica s pozitivnim elementima na dijagonali.

Nekada se koristi skraćena QR faktorizacija koju definiramo kao

$$A = QR = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R_0$$

ako napravimo particiju matrice Q tako da $Q_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$ i $Q_2 \in \mathbb{R}^{m\times(m-n)}$.

U praksi se za numeričko računanje QR faktorizacije najčešće koriste Givensove rotacije ili Householderovi reflektori.

Givensove rotacije

Givensova rotacija u ravnini je matrica oblika

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

koja svaki vektor $x \in \mathbb{R}^2$ rotira za kut φ u pozitivnom smjeru.
U $\mathbb{R}^n$ definiramo Givensovu rotaciju u (i, j) ravnini na sljedeći način

$$G(i, j, \varphi) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & & \\ & & & \cos\varphi & & & & -\sin\varphi & & & \\ & & & & 1 & & & & & & \\ & & & & & \ddots & & & & & \\ & & & & & & 1 & & & & \\ & & & \sin\varphi & & & & \cos\varphi & & & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Množenjem $G(i, j, \varphi)x$ za neki $x \in \mathbb{R}^n$ mijenjamo vektoru x samo i-tu i j-tu komponentu, pa možemo promatrati jednostavniji sustav jednadžbi u kojem su nepoznanice kut φ i $\hat{x}_i$:

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x}_i \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{1.2}$$

Ako je $x_j = 0$, problem je već riješen pa pretpostavimo da je $x_j \neq 0$. Iz (1.2) slijedi

$$\begin{aligned} &\sin\varphi \cdot x_i + \cos\varphi \cdot x_j = 0 \\ &x_i + \cot\varphi x_j = 0 \\ &\cot\varphi = -\frac{x_i}{x_j}. \end{aligned}$$

Korištenjem trigonometrijskog identiteta $1 + \cot^2\varphi = \frac{1}{\sin^2\varphi}$ i $\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$ dobijemo

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

Predznake odaberemo tako da $\hat{x}_i$ bude pozitivan, tj. odaberemo

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

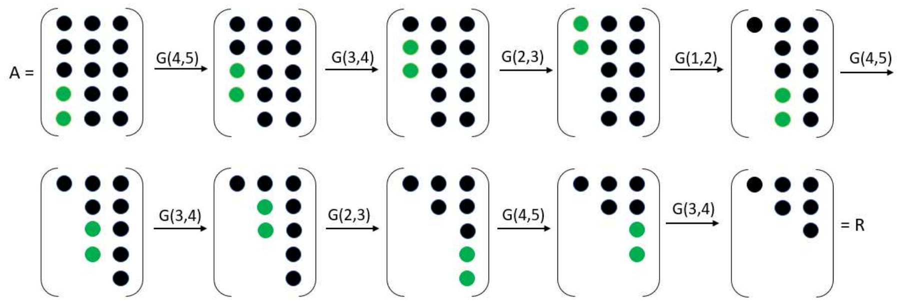
pa iz prve jednadžbe u (1.2) slijedi

$$\begin{aligned}\hat{x}_i &= \cos\varphi x_i - \sin\varphi x_j \\ &= \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_i + \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} x_j \\ &= \sqrt{x_i^2 + x_j^2}.\end{aligned}$$

Za dobivanje QR faktorizacije matrice $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ potrebno je poništiti sve elemente donjeg trokuta matrice, a najčešće se to radi po stupcima. Element na poziciji (i, j) poništava se Givensovom rotacijom $G_j(i-1, i, \varphi_{i,j})$. Dalje nas zanima kako se dobije matrica Q. Množenjem slijeva Givensovim rotacija dobije se matrica R (1.1):

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

Svaka Givensova rotacija je ortogonalna matrica, a produkt ortogonalnih matrica



Slika 1.1: Poništavanje elemenata ispod dijagonale Givensovim rotacijama za $A \in \mathbb{R}^{5\times 3}$

je ortogonalna i regularna matrica. To znači da je matrica koju smo označili s Q^{-1} ortogonalna i regularna. Isto vrijedi i za inverz pa je

$$\begin{aligned}Q &= (Q^{-1})^{-1} \\ &= I_m \cdot G(m-1, m, -\varphi_{m-1,m}) \cdots G(n-1, n, -\varphi_{n-1,n}) G(m-1, m, -\varphi_{m-1,m}) \\ &\cdots G(n, n+1, -\varphi_{n,n+1})\end{aligned}$$

regularna i ortogonalna pa je

$$A = QR$$

QR faktorizacija matrice A.

Householderovi reflektori

Za vektor $u \in R^n$ takav da $\|u\|_2 = 1$ definiramo Householderov reflektor $H \in \mathbb{R}^n$ kao

$$H = H(u) := I - 2uu^T.$$

Matrica H je:

a) simetrična
$$H^T = I - 2(uu^T)^T = I - 2uu^T = H,$$

b) ortogonalna

$$HH^T = (I-2uu^T)(I-2uu^T) = I-4uu^T + 4u(u^T u)u^T = I-4uu^T + 4\|u\|_2^2 uu^T = I.$$

Householderovim refektorom, kao i kod Givensovih rotacija, poništavamo komponente vektora. Za zadani vektor $x \in \mathbb{R}^n$ treba odrediti Householderov reflektor H, tj. jedinični vektor u takav da

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

Matrica H čuva normu vektora pa je

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

Iz toga slijedi

$$Hx = (I - 2uu^T)x = x - 2u(u^T x) = \pm\|x\|_2 e_1 = ce_1.$$

Ako je $u^T x = 0$, onda je $Hx = x = \pm\|x\|_2 e_1$, tj. $H = I$. Pretpostavimo da je $u^T x \neq 0$. Tada

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2(u^T x)}(x \mp \|x\|_2 e_1) \\ &= \alpha(x \mp \|x\|_2 e_1), \quad \textit{za neki } \alpha \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Kako je u jedinični vektor, mora vrijediti

$$u = \frac{\hat{u}}{\|\hat{u}\|_2}$$

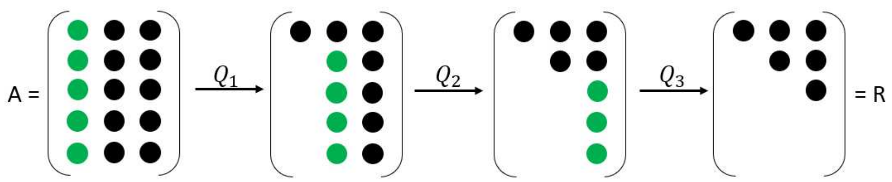
za $\hat{u} = x \mp \|x\|_2 e_1$. Ako je $\|\hat{u}\|_2 = 0$, onda je $u = 0$, tj. $H = I$ jer su vektoru x već poništene komponente ili je $x = 0$.
Pri odabiru predznaka, u praksi se često koristi formula

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

zbog numeričke stabilnosti jer nema kraćenja prilikom računanja prve komponente od $\hat{u}$, tj. oba pribrojnika su istog predznaka.
Kako bi se dobila QR faktorizacija matrice $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, matricu A množimo redom ortogonalnim matrica $Q_1, \ldots, Q_n \in \mathbb{R}^{m\times n}$ tako da svaka matrica Q_k poništi elemente ispod dijagonale u k-om stupcu, a zadrži nule iz prošlih stupaca. Točnije,

$$Q_k = \begin{bmatrix} I_k & 0 \\ 0 & H_k \end{bmatrix}, \quad k = 1, \ldots, n,$$

gdje je I_k identiteta reda $k-1$, a H_k Householderov reflektor reda $m-k+1$ za vektor $x_k = A[k : m, k]$. Svaka matrica Q_k djeluje na cijelu matricu, ali ne utječe na prošle stupce pa su poništene vrijednosti sačuvane. Nakon n-tog koraka dobit ćemo gornje trokutastu matricu $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ (1.2).



Slika 1.2: Poništavanje elementara ispod dijagonale Householderovim reflektorima za $A \in \mathbb{R}^{5\times 3}$

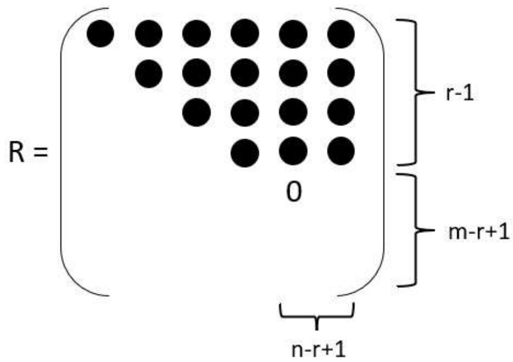
Matricu Q iz QR faktorizacije dobijemo kao

$$Q^T = Q_n \cdots Q_1 \implies Q = Q_1 \cdots Q_n.$$

Kada ne znamo rang matrice A, koristimo QR faktorizaciju s pivotiranjem. Pivotiranje se izvodi tako da u k-tom koraku u matrici $A^{(k)} = A[k : m, k : n]$ stupac najveće norme dovede na pivotno mjesto i provede se postupak poništavanja elemenata. Točnije,

$$\begin{aligned} &Q_n \cdots Q_1 A I_1 \cdots I_{n-1} = R \\ &\implies Q = Q_1 \cdots Q_n, \; P = I_1 \cdots I_{n-1} \\ &\implies AP = QR \end{aligned}$$

gdje je Q_k, $k = 1, \ldots, n$ defininirana kao i prije, a P matrica permutacije. Općenito u k-tom koraku, nakon poništavanja elemenata ispod dijagonale pomoću Givensovih rotacija ili Householderovih reflektora, na dijagonali k-tog stupca nalazi se norma vektora $x_k = A[k : m, k]$. Tako se pivotiranjem dijagonalni elementi matrice R sortiraju padajuće po apsolutnoj vrijednosti.
Ako se nakon pivotiranja i poništavanja ispoddijagonalnih elemenata, na dijagonali, točnije u r-tom stupcu i retku nalazi nula, tada je donji desni $(m - r + 1) \times (n - r + 1)$ blok matrice R nul-matrica. Također, matrice A i R su ekvivalentne pa je rang matrice A isti kao rang matrice R koji se lako odredi.



Slika 1.3: Matrica R nije punog stupčanog ranga

3. Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

Za zadnju numeričku metodu rješavanja problema najmanjih kvadrata koja se obrađuje u ovom radu, potrebno je prvo definirati dekompoziciju singularnih vrijednosti. To je jedna od najkorisnijih metoda koja se koristi u teorijskim istraživanjima i u praksi.

Teorem 1.5.3 ([5])**.** *Ako je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, tada postoje ortogonalne matrice $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ i $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ takve da je*

$$U^T AV = \Sigma, \ \Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_{\min\{m,n\}})$$

pri čemu vrijedi

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \sigma_{\min\{m,n\}} \geq 0.$$

Brojeve $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_{\min\{m,n\}}$ zovemo singularne vrijednosti matrice A. Stupce matrice U zovemo lijevi, a stupce matrice V desni singularni vektori matrice A.

Kada je rang matrice A $r < n$ dekompozicija singularnih vrijednosti može se zapisati u skraćenoj formi kao

$$A = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix}$$
$$\implies A = U_1 \Sigma_+ V_1^T$$

gdje je

$$U = \begin{bmatrix} \underset{r}{U_1} & \underset{m-r}{U_2} \end{bmatrix} \quad V = \begin{bmatrix} \underset{r}{V_1} & \underset{n-r}{V_2} \end{bmatrix}.$$

Generalizirani inverz

Za regularnu matricu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ postoji jedinstvena matrica A^{-1} koju zovemo inverz i za koju vrijedi

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I.$$

Generaliziranim inverzom proširujemo definiciju inverza na matrice koje nisu regularne ili kvadratne, zahtjevajući neke oslabljene uvjete. Također, generalizirani inverz koristi se u linearnom problemu najmanjih kvadrata, a za njegovo računanje bit će potrebna dekompozicija singularnih vrijednosti koju smo malo prije objasnili. Najpoznatiji generalizirani inverz je Moore-Penroseov inverz.

Definicija 1.5.4. *Neka je $A \in R^{m \times n}$. Matrica $X \in R^{n \times m}$ je Moore-Penroseov inverz ako vrijedi:*

a) $AXA = A$

b) $XAX = X$

c) $(AX)^T = AX$

d) $(XA)^T = XA.$

Navedeni uvjeti nazivaju se Penroseovi uvjeti.

Matrica koja zadovoljava navedena četiri uvjeta Moore-Penroseovog inverza je jedinstvena, označava se s $A^\dagger$ te se može eksplicitno izraziti.

Teorem 1.5.5. *[5] Neka je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Tada postoji jedinstvena matrica $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ koja zadovoljava Penroseove uvjete. Ta matrica ima oblik*

$$A^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$$

pri čemu je

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$$

singularna dekompozicija matrice A.

Za kraj ćemo navesti neka svojstva generaliziranog inverza.

Teorem 1.5.6. *Za proizvoljnu matricu $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ vrijedi:*

a) $(A^\dagger)^\dagger = A$

b) $(A^T)^\dagger = (A^\dagger)^T$

c) $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(A^\dagger) = \mathrm{r}(AA^\dagger) = \mathrm{r}(A^\dagger A)$

d) $(AA^T)^\dagger = (A^T)^\dagger A^\dagger, (A^T A)^\dagger = A^\dagger (A^T)^\dagger$

e) $(AA^T)^\dagger AA^T = AA^\dagger, (A^T A)^\dagger A^T A = A^\dagger A$

f) Ako je A ranga n, tada je $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$ *i* $A^\dagger A = I_n$

g) Ako je A ranga m, tada je $A^\dagger = A^T (AA^T)^{-1}$ *i* $AA^\dagger = I_m$

h) Ako su $X \in \mathbb{R}^{p\times m}$ *i* $Y \in \mathbb{R}^{n\times q}$ *ortogonalne matrice, tada je*

$$(XAY)^\dagger = Y^T A^\dagger X^T.$$

Dokaz. a) Za matricu $A = U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$ generalizirani inverz je $A^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$.

Neka je $B = A^\dagger$ te je tada

$$\begin{aligned} B^\dagger &= (U^T)^T \begin{bmatrix} (\Sigma_+^{-1})^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T \\ &= U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T = A. \end{aligned}$$

b) Za $A = U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$ vrijedi da je

$$A^T = V \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$$

gdje je $\begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times m}$. Tada je generalizirani inverz od A^T jednak

$$(A^T)^\dagger = U \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T.$$

Za $A^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$ vrijedi da je

$$(A^\dagger)^T = U \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$$

gdje je $\begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times m}$.

c) Neka je A matrica ranga $r \leq n$. Matrice A i $\begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ su ekvivalentne pa imaju isti rang. Matrica Σ_+^{-1} je dijagonalna s r elemenata na dijagonali koji nisu 0 pa je njen rang isto r. Matrica $\begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ sastoji se od nul-blokova i matrice ranga r pa je i njen rang jednak r. Matrice $A^\dagger$ i $\begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ su ekvivalentne i zato je $\mathrm{r}(A^\dagger) = r$.
Pomnožimo matrice A i $A^\dagger$:

$$AA^\dagger = U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T V \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T \tag{1.3}$$

$$= U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T \tag{1.4}$$

$$= U \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T. \tag{1.5}$$

Matrice $AA^\dagger$ i $\begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ su ekvivalentne i rang matrice $\begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ jednak je r pa je i $\mathrm{r}(AA^\dagger) = r$. Analogno se dokazuje $\mathrm{r}(A^\dagger A) = r$.

d) Raspišimo lijevu i desnu stranu prve tvrdnje.

$$(AA^T)^\dagger = (U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T V \begin{bmatrix} \Sigma_+^T & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T)^\dagger \tag{1.6}$$

$$= (U \begin{bmatrix} \Sigma_+^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T)^\dagger \tag{1.7}$$

$$= U \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-2} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T \tag{1.8}$$

pri čemu druga jednakost vrijedi jer je Σ_+ dijagonalna matrica. Dalje,

$$\begin{aligned}
(A^T)^\dagger A^\dagger &= (V\begin{bmatrix}\Sigma_+^T & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T)^\dagger V\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= U\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^T V\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= U\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-2} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T.
\end{aligned}$$

Analogno se dokazuje druga tvrdnja.

e) Raspišimo opet lijevu i desnu stranu tvrdnje. Iz 1.7 i 1.8 dobije se

$$\begin{aligned}
(AA^T)^\dagger AA^T &= U\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-2} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T U\begin{bmatrix}\Sigma_+^{2} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= U\begin{bmatrix}I_r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T.
\end{aligned}$$

Dalje, u 1.5 dokazali smo

$$AA^\dagger = U\begin{bmatrix}I_r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^T.$$

Analogno se dokazuje druga tvrdnja.

f) Neka je A ranga n. Njena singularna dekompozicija jednaka je

$$A = U\begin{bmatrix}\Sigma_+\\ 0\end{bmatrix}V^T$$

pri čemu je Σ_+ dijagonalna matrica reda n. Tada je njen generalizirani inverz jednak

$$A^\dagger = V\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-1} & 0\end{bmatrix}U^T.$$

Dalje vrijedi

$$\begin{aligned}
(A^TA)^{-1}A^T &= (V\begin{bmatrix}\Sigma_+ & 0\end{bmatrix}U^T U\begin{bmatrix}\Sigma_+\\ 0\end{bmatrix}V^T)^{-1}V\begin{bmatrix}\Sigma_+ & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= (V\Sigma_+^2V^T)^{-1}V\begin{bmatrix}\Sigma_+ & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= V\Sigma_+^{-2}V^TV\begin{bmatrix}\Sigma_+ & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= V\begin{bmatrix}\Sigma_+^{-1} & 0\end{bmatrix}U^T\\
&= A^\dagger.
\end{aligned}$$

g) Dokazuje se analogno kao prethodna tvrdnja.

h) Za matricu $A = U \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$ generalizirani inverz je $A^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$. Ako matrica $Y^T A \dagger X^T$ zadovoljava Penroseove uvjete, onda je ona prema teoremu 1.5.5 jedinstveni generalizirani inverz za matricu XAY.

- Prvi Penroseov uvjet:

$$\begin{aligned}(XAY)(Y^T A^\dagger X^T)(XAY) &= XAA^\dagger AY \\ &= XAY.\end{aligned}$$

- Drugi Penroseov uvjet:

$$\begin{aligned}(Y^T A^\dagger X^T)(XAY)(Y^T A^\dagger X^T) &= Y^T A^\dagger A A^\dagger X^T \\ &= Y^T A^\dagger X^T.\end{aligned}$$

- Treći Penroseov uvjet:

$$\begin{aligned}(XAYY^T A^\dagger X^T)^T &= (XAA^\dagger X^T)^T \\ &= (XU \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T X^T)^T \\ &= XU \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T X^T\end{aligned}$$

pri čemu druga jednakost vrijedi zbog 1.8. Dalje,

$$\begin{aligned}XAYY^T A^\dagger X^T &= XAA^\dagger X^T \\ &= XU \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T X^T.\end{aligned}$$

- Četvrti Penroseov uvjet:

$$\begin{aligned}(Y^T A^\dagger X^T XAY)^T &= (Y^T A^\dagger AY)^T \\ &= (Y^T \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} Y)^T \\ &= Y^T \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} Y\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Y^T A^\dagger X^T XAY &= Y^T A^\dagger AY \\ &= Y^T \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} Y.\end{aligned}$$

Dokazali smo da je $(XAY)^\dagger = Y^T A^\dagger X^T$.

$\square$

Poglavlje 2

Diskretna metoda najmanjih kvadrata

U uvodu smo spomenuli kako je u znanosti često potrebno aproksimirati podatke koji su zadani na skupu $X \subset \mathbb{R}$ nekom funkcijom. Izmjerenih podataka je uvijek više nego parametara aproksimacijske funkcije. Tako dobijemo preodređen sustav koji se može riješiti na način da rješenje mora minimizirati euklidsku normu vektora pogrešaka, tj. metodom najmanjih kvadrata. Točnije, neka su poznate vrijednosti funkcije $f : X \to \mathbb{R}$ koju želimo aproksimirati funkcijom φ na tom skupu $X \subset \mathbb{R}$. Često nije najbolji pristup da aproksimacijska funkcija prolazi svim točakama jer kod nekih funkcija povećanje stupnja polinoma može dovesti do povećanja greške pa u ovom radu promatramo kriterij minimizacije pogreške prilikom određivanja parametara aproksimacijske funkije. Neka je funkcija f zadana na diskretnom skupu $x_0, \dots, x_n$ te neka je φ aproksimacijska funkcija s m nepoznatih parametara $a_0, \dots, a_m$ takvih da $m << n$. Parametre aproksimacijske funkcije φ određujemo minimiziranjem euklidske norme vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije $x_0, \dots, x_n$, tj.

$$S = \sum_{k=0}^{n} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2 \to \min .$$

Funkcija S je funkcija nepoznatih parametara $a_0, \dots, a_m$ čije vrijednosti su uvijek pozitivne i koja se treba minimizirati. Funkcija S je dovoljno glatka pa je nužni uvjet minimuma

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, k = 0, \dots, m.$$

Tako dobijemo sustav normalnih jednadžbi koji ćemo objasniti detaljnije u nastavku.

U radu ćemo promatrati slučaj kada funkcija φ linearno ovisi o parametrima pa se dobije linearni sustav jednadžbi koji se relativno lako rješava. Postoje i slučajevi kada funkcija φ nelinearno ovisi o parametrima pa se dobije nelinearni sustav jednadžbi. Nelinearni sustav jednadžbi se nekad može transformirati u linearni sustav, ali ako to nije moguće, sustav je puno kompliciranije riješiti pa to neće biti tema ovog rada. U prvom potpoglavlju na jednostavnim primjerima prikazat ćemo metodu najmanjih kvadrata, a u drugom ćemo uvesti matričnu formulaciju, reći što je skup rješenja problema i objasniti geometrijsku interpretaciju.

2.1 Linearni problem i linearizacija

Problem je najlakše razumijeti na najjednostavnijem primjeru kada je aproksimacijska funkcija pravac.

Primjer 2.1.1 ([5]). *Dane su točke* $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$ *koje aproksimiramo pravcem*

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x$$

pomoću diskretne metode najmanjih kvadrata. Tada je funkcija S *jednaka*

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2.$$

Zbog nužnog uvjeta za minimum funkcije izjednačavamo parcijalne derivacije s nulom:

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} x_k (f_k - \varphi(x_k)).$$

Sređivanjem dobijemo sustav

$$a_0(n+1) + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k = \sum_{k=0}^{n} f_k$$

$$a_0 \sum_{k=0}^{n} x_k + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k^2 = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k.$$

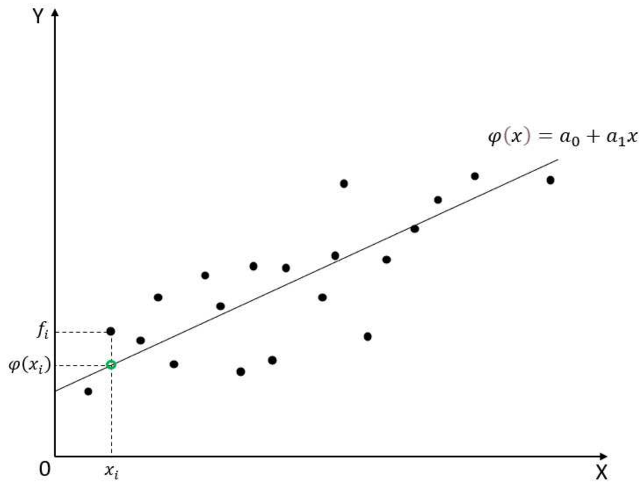
Determinanta sustava D *je* $(n+1) \sum_{k=0}^{n} x_k^2 - (\sum_{k=0}^{n} x_k)^2$*. Iz Cauchy-Schwarzove nejednakosti* [1] *primijenjene na vektore* $[1, ...1]^T$ *i* $[x_0, ..., x_n]^T$ *slijedi da je determinanta* $D \geq 0$*. Jednakost se postiže samo ako su vektori linearno zavisni. Pretpostavljamo da su barem dvije apscise*

[1] Za detalje pogledajte u [1].

polaznih točaka različite pa vrijedi stroga nejednakost. Tada je determinanta D regularna i postoji jedinstveno rješenje sustava. Rješavanjem sustava dobije se

$$a_0 = \frac{t_0 s_2 - s_1 t_1}{s_0 s_2 - s_1^2}, \; a_1 = \frac{s_0 t_1 - t_0 s_1}{s_0 s_2 - s_1^2}$$

uz $s_l = \sum_{k=0}^{n} x_k^l$ *i* $t_l = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k^l$.
Preostaje pokazati kako je dobiveno rješenje minimum. To se može dokazati korištenjem drugih parcijalnih derivacija te provjerom pozitivne definitnosti Hesseove matrice (dovoljan uvjet za minimum). Lakše je zaključiti kako je S paraboloid s otvorom prema gore pa ima minimum.



Slika 2.1: Grafički prikaz

Za funkciju φ možemo uzeti i opću linearnu funkciju

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \ldots + a_m\varphi_m(x)$$

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ poznate funkcije. U primjeru je prikazana primjena na općoj linearnoj funkciji s dva parametra.

Primjer 2.1.2 ([5]). *Poznate su funkcije* φ_0 *i* φ_1 *te točke* $(x_o, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$ *koje aproksimiramo funkcijom* φ *oblika*

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x).$$

Slijedimo ideju prošlog primjera i minimiziramo kvadrat euklidske norme vektora pogreška aproksimacije u čvorovima

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))^2 \to \min .$$

Parcijalno deriviramo po parametrima a_0 i a_1 i rezultat izjednačimo s nulom:

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))\varphi_0(x_k)$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0\varphi_0(x_k) - a_1\varphi_1(x_k))\varphi_1(x_k).$$

Kako bi se olakšao zapis, uvode se oznake

$$s_0 = \sum_{k=0}^{n} \varphi_0^2(x_k),\ \ s_1 = \sum_{k=0}^{n} \varphi_0(x_k)\varphi_1(x_k),\ \ s_2 = \sum_{k=0}^{n} \varphi_1^2(x_k)$$

$$t_0 = \sum_{k=0}^{n} f_k\varphi_0(x_k),\ \ t_1 = \sum_{k=0}^{n} f_k\varphi_1(x_k)$$

te se dobije isti oblik linearnog sustava kao u prošlom primjeru

$$s_0 a_o + s_1 a_1 = t_0$$

$$s_1 a_o + s_2 a_1 = t_1.$$

Determinanta D opet je jednaka $s_0 s_2 - s_1^2$ te zbog Cauchy-Schwarzove nejjednakosti primijenjene na vektore $v_1 = [\varphi_0(x_0), \dots, \varphi_0(x_n)]^T$ i $v_2 = [\varphi_1(x_0), \dots, \varphi_1(x_n)]^T$ vrijedi $D \geq 0$. Opet zbog pretpostavke o postojanju barem dvije različite apscise polaznih točaka x_k, vektori v_1 i v_2 su linearno nezavisni pa je determinanta D strogo veća od 0. Zbog prijašnjih zapažanja matrica sustava je regularna i postoji jedinstveno rješenje sustava koje je oblika

$$a_0 = \frac{t_0 s_2 - s_1 t_1}{s_0 s_2 - s_1^2},\ \ a_1 = \frac{s_0 t_1 - t_0 s_1}{s_0 s_2 - s_1^2}.$$

Kako bi se dokazalo da je dobiveno rješenje minimum, opet je dovoljno primijetiti da je S paraboloid s otvorom prema gore te ima minimum.

2.2 Matrična formulacija i skup rješenja

Matrična formulacija

Uobičajeno je označavati nepoznanice s $x_1, x_2, \dots, x_m$, a ne s $a_1, a_2, \dots, a_m$ pa uvodimo preimenovanje nepoznanica kako bi matrični zapis linearnog problema najmanjih kvadrata bio u standardnoj formi.
Zadan je skup mjerenih podataka (t_k, y_k), $k = 1, \dots, n$ koje aproksimiramo funkcijom $\varphi(t)$. Pretpostavljamo da je funkcija $\varphi(t)$ linearna, tj.

$$\varphi(t) = x_1\varphi_1(t) + \dots + x_m\varphi_m(t)$$

i cilj je pronaći nepoznate parametre $x_1, \dots, x_n$ tako da vrijedi

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

Sustav jednadžbi može se zapisati u matričnom obliku kao

$$Ax = b$$

uz $a_{kj} = \varphi_j(t_k),\ b_k = y_k$.
Parametara uobičajeno ima manje nego mjerenih podataka, tj. $m < n$ pa sustav jednadžbi ima manje nepoznanica nego jednadžbi i zato je preodređen.
Aproksimacijska funkcija može se dobiti na razne načine tako da se zadovoljavaju neki uvjeti, a u ovom radu koristi se metoda najmanjih kvadrata koja je među najčešćima u praksi. Kao što se spomenulo prije, traži se rješenje x tako da se greška $r = Ax - b$ (r se često naziva rezidual) minimizira, tj.

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

Ako je $\mathrm{r}(A) < m$, rješenje problema nije jedinstveno pa se među svim rješenjima uzima rješenje x koje je najmanje norme, tj. koje minimizira $\|x\|_2$. Takvo rješenje je jedinstveno.

Karakterizacija rješenja

U prošlom potpoglavlju rekli smo kako rješenje problema najmanjih kvadrata ne mora biti jedinstveno pa idući teorem karakterizira skup svih rješenja S.

Teorem 2.2.1 ([5]). *Neka je S skup svih rješenja problema najmanjih kvadrata, tj.*

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

Tada je $x \in S$ ako i samo ako x zadovoljava relaciju ortogonalnosti definiranu kao

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

Dokaz. Pretpostavimo da neki $\hat{x} \in \mathbb{R}^m$ zadovoljava

$$A^T(b - A\hat{x}) = 0 \tag{2.1}$$

te neka je $\hat{r} = b - A\hat{x}$.
Za svaki $x \in \mathbb{R}^m$ vrijedi

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

Neka je

$$e = x - \hat{x}$$

i onda vrijedi

$$\begin{aligned}
||r||_2^2 &= r^T r \\
&= (\hat{r} - Ae)^T(\hat{r} - Ae) \\
&= \hat{r}^T\hat{r} \ - \hat{r}^T Ae - e^T A^T \hat{r} + ||Ae||_2^2 \\
&= \hat{r}^T\hat{r} \ + ||Ae||_2^2 \\
&= ||\hat{r}||_2^2 + ||Ae||_2^2.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

pri čemu četvrta jednakost vrijedi zbog 2.1. Kako je norma uvijek pozitivna, minimalna vrijednost za $||r||_2$ jednaka je $||\hat{r}||_2$ kada $x = \hat{x}$. Zbog toga je $\hat{x} \in S$.
Neka je sada $\hat{x} \in S$ i pretpostavimo da je

$$A^T\hat{r} = z \neq 0.$$

Za neki $\epsilon > 0$ uzmemo

$$x = \hat{x} + \epsilon z$$

te je tada

$$r = \hat{r} - \epsilon Az.$$

Za mali ϵ vrijedi

$$\begin{aligned}
||r||_2^2 &= r^T r \\
&= \hat{r}^T\hat{r} - \hat{r}^T\epsilon Az - (\epsilon Az)^T\hat{r} + \epsilon^2(Az)^T(Az) \\
&= \hat{r}^T\hat{r} - 2\epsilon z^T z + \epsilon^2(Az)^T(Az) \\
&< \hat{r}^T\hat{r} = ||\hat{r}||_2^2
\end{aligned}$$

pa $\hat{x}$ ne može biti rješenje u smislu najmanjih kvadrata, tj. nije u skupu S što je kontradikcija s početnom pretpostavkom pa smo dokazali i drugi smjer implikacije.

□

Prošli teorem kaže kako je skup svih rješenja problema najmanjih kvadrata S isti kao skup rješenja sustava normalnih jednadžbi

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

Matrica $A^T A$ je simetrična i pozitivno semidefinitna jer za $\forall x \in \mathbb{R}^m$ vrijedi

$$x^T A^T Ax = (Ax)^T (Ax) = \|Ax\|_2^2 \geq 0.$$

Napomena 2.2.2. *Dokažimo da je* $\mathrm{Im}(A^T) = \mathrm{Im}(A^T A)$. *Ako je* $x \in \mathrm{Im}(A^T)$, *postoji* $y \in \mathbb{R}^n$ *takav da* $x = A^T y$. *Vrijedi da je* $\mathbb{R}^n = \mathrm{Im}(A) \oplus \mathrm{Ker}(A^T)$ *i da se* y *može prikazati kao* $y = Av + w$ *za* $v \in \mathbb{R}^m$ *i* $w \in \mathrm{Ker}(A^T)$. *Tada je*

$$x = A^T y = A^T (Av + w) = A^T Av + A^T w = A^T Av \in \mathrm{Im}(A^T A),$$

tj. $x \in \mathrm{Im}(A^T)$. *Obrnuta implikacija je skoro očita jer primjenom* A^T *na* $\mathrm{Im}(A) \subseteq \mathbb{R}^n$ *dobije se* $\mathrm{Im}(A^T A) \subseteq \mathrm{Im}(A^T)$ *pa je* $x \in \mathrm{Im}(A^T)$.

Zbog prošle napomene vrijedi

$$A^T b \in \mathrm{Im}(A^T) = \mathrm{Im}(A^T A)$$

pa primjenom Kronecker-Capellijevog teorema 1.1.8 znamo da uvijek postoji rješenje sustava normalnih jednadžbi.
Nakon što smo dokazali da rješenje postoji, zanima nas pitanje jedinstvenosti.

Teorem 2.2.3 ([10])**.** *Problem najmanjih kvadrata ima jedinstveno rješenje ako vrijedi barem jedna od ovih tvrdnji:*

1. *A ima puni stupčani rang, tj.* $\mathrm{r}(A) = m$.
2. *Stupci matrice A su linearno nezavisni.*
3. $A^T A$ *je pozitivno definitna matrica.*

Dokaz. Prvo dokazujemo ekvivalentnost tvrdnji 1., 2. i 3.
Očito 1. $\iff$ 2.
Dokažimo 2. $\implies$ 3., tj. pretpostavimo da su stupci matrice $A = [a_1, \ldots, a_m]$ linearno nezavisni. Tada za $\forall x = (x_1, \ldots, x_m) \in \mathbb{R}^m$ koji je različit od 0 vrijedi

$$Ax = x_1 a_1 + \ldots + x_m a_m \neq 0.$$

Koristeći definiciju pozitivne definitnosti matrice, za takav x dobije se

$$x^T (A^T A)x = (Ax)^T (Ax) = \|Ax\|_2^2 > 0,$$

tj. matrica $A^T A$ je pozitivno definitna.
Na kraju se dokazuje 3. $\implies$ 2. Neka je $A^T A$ pozitivno definitna matrica i pretpostavimo da su stupci matrice linearno zavisni, tj. postoji $\hat{x}$ takav da

$$A\hat{x} = \hat{x}_1 a_1 + \ldots + \hat{x}_m a_m = 0.$$

Tada je

$$\hat{x}^T (A^T A)\hat{x} = (A\hat{x})^T (A\hat{x}) = \|A\hat{x}\|_2^2 = 0,$$

tj. matrica nije pozitivno definitna.
Dokažimo sada da je rješenje jedinstveno ako matrica A ima puni stupčani rang. Tada je matrica $A^T A \in M_m$ punog ranga pa postoji njen jedinstven inverz. U tom slučaju jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata jednako je

$$\begin{aligned} A^T(b - Ax) &= 0 \\ A^T Ax &= A^T b \\ x &= (A^T A)^{-1} A^T b, \end{aligned} \tag{2.3}$$

a pripadni rezidual

$$r = b - A(A^T A)^{-1} A^T b.$$

□

Geometrijska interpretacija općeg rješenja

Zapišimo izraz za rezidual na malo drugačiji način kao

$$b = Ax + r$$

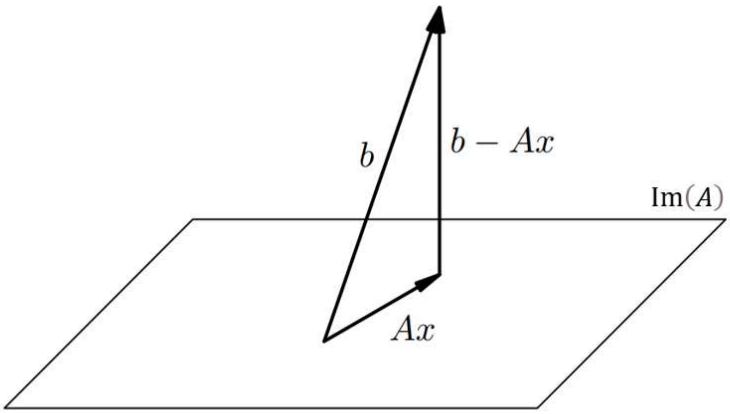
pri čemu je x rješenje problema najmanjih kvadrata. Očito je $Ax \in \mathrm{Im}(A)$ i vrijedi

$$(Ax)^T r = (x^T A^T) r = x^T (A^T r) = x^T 0 = 0$$

pri čemu treća jednakost vrijedi iz sustava normalnih jednadžbi. Iz ovih jednakosti zaključuje se kako je $r \perp \mathrm{Im}(A)$ pa definiramo ortogonalni projektor na $\mathrm{Im}(A)$ kao $P_{\mathrm{Im}(A)}(b) = Ax$, $b \in \mathbb{R}^n$.

Sada možemo definirati i $I - P_{\mathrm{Im}(A)}$ kao ortogonalni projektor na ortogonalni komplement od $\mathrm{Im}(A)$ i za njega vrijedi:

$$r = (I - P_{\mathrm{Im}(A)})b.$$



Slika 2.2: Geometrijska interpretacija

Ortogonalna projekcija $P_{\mathrm{Im}(A)}(b)$ je jedinstvena i zato rješenje problema najmanjih kvadrata x mora biti rješenje linearnog sustava $Ax = P_{\mathrm{Im}(A)}(b)$. Ako je matrica A punog ranga, rješenje je jedinstveno i tada je

$$P_{\mathrm{Im}(A)} = A(A^T A)^{-1} A^T.$$

Ako A nije punog stupčanog ranga, rješenje nije jedistveno i A ima netrivijalni nul-prostor pa nam je zato bitan sljedeći korolar.

Korolar 2.2.4. *Neka je x rješenje problema najmanjih kvadrata, tj. $x \in S$. Tada je $\hat{x} \in S$ ako i samo ako je $\hat{x} - x \in \mathrm{Ker}(A)$, tj. skup S je linearna mnogostrukost u $\mathbb{R}^m$.*

Dokaz. Znamo da je $\hat{x} \in S$ ako i samo ako $\|\hat{r}\|_2 = \|r\|_2$. Iz (2.2) slijedi

$$\begin{aligned}
&\|\hat{r}\|_2^2 = \|r\|_2^2 + \|A(\hat{x} - x)\|_2^2 \\
&A(\hat{x} - x)\|_2^2 = 0 \\
&A(\hat{x} - x) = 0,
\end{aligned}$$

□

tj. $\hat{x} - x \in \mathrm{Ker}(A)$.

Kao što smo prije rekli, ako skup rješenja nije jednočlan, uvijek postoji jedinstveno rješenje koje minimizira i $\|x\|_2$.

Napomena 2.2.5. *Neka je rješenje* $\hat{x} \perp \mathrm{Ker}(A)$ *i* $x = \hat{x} + w$, $w \in \mathrm{Ker}(A)$. *Tada je*

$$\begin{aligned} \|x\|_2^2 &= x^T x \\ &= (\hat{x} + w)^T (\hat{x} + w) \\ &= \hat{x}^T \hat{x} + w^T w \\ &= \|\hat{x}\|_2^2 + \|w\|_2^2 \end{aligned}$$

pa je $\hat{x}$ *jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata koje ima minimalnu* 2*-normu.*

Poglavlje 3

Numeričke metode

U ovom poglavlju objasnit ćemo četiri numeričke metode pomoću kojih se rješava problem najmanjih kvadrata. Za svaku metodu navest ćemo prednosti i mane te koji uvjeti moraju biti zadovoljeni za korištenje u praksi.
Na početku ćemo se dotaknuti teme uvjetovanosti matrice koju smo spomenuli u prvom poglavlju. Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ punog stupčanog ranga, možemo definirati generalizirani inverz kao

$$A^{\dagger} = (A^T A)^{-1} A^T.$$

Tada se uvjetovanost matrice definira kao

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{\dagger}\|.$$

Ako izraz za jedinstveno rješenje problema najmanjih kvadrata (2.3) izrazimo pomoću $A^{\dagger}$ dobije se $x = A^{\dagger} b$.
Neka je x rješenje i $\hat{x}$ rješenje dobiveno nekom numeričkom metodom. Tada su greška i rezidual jednaki

$$e = x - \hat{x}, \; r = b - A\hat{x} = b - \hat{b}.$$

Nadalje, vrijedi

$$\begin{aligned} \|e\|_2 &= \|x - \hat{x}\|_2 \\ &= \|A^{\dagger}(b - \hat{b})\|_2 \\ &\leq \|A^{\dagger}\|_2 \|b - \hat{b}\|_2 \\ &= \|A^{\dagger}\|_2 \|r\|_2. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Koristeći (3.1) dobije se

$$
\begin{aligned}
||e||_2 &\leq ||A^\dagger||_2 ||r||_2 \frac{||Ax||_2}{||b||_2} \\
&\leq ||A^\dagger||_2 ||A||_2 ||x||_2 \frac{||r||_2}{||b||_2}
\end{aligned}
$$

i iz toga slijedi

$$
\frac{||e||_2}{||x||_2} \leq \kappa(A) \frac{||r||_2}{||b||_2}.
$$

Ako je matrica loše uvjetovana, a mala norma reziduala, greška ne mora biti mala i možemo imati netočnu aproksimaciju rješenja.
Postoji više metoda za rješavanje problema najmanjih kvadrata, a najčešće se koriste:

- rješavanje sustava normalnih jednadžbi
- transformacija u linearni sustav većih dimenzija i rješavanje
- rješavanje pomoću QR faktorizacije
- rješavanje pomoću dekompozicije singularnih vrijednosti (SVD).

3.1 Sustav normalnih jednadžbi

U Teoremu 2.2.1 dokazali smo kako se traženje rješenja problema najmanjih kvadrata može svesti na rješavanje sustava normalnih jednadžbi

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

Metoda se koristi kada matrica A ima puni stupčani rang (ili kada je matrica $A^T A$ pozitivno definitna) i kada je matrica $A^T A$ dobro uvjetovana. Prije smo pokazali kako se tada matrica $A^T A$ može rastaviti faktorizacijom Choleskog.

Napomena 3.1.1. *U svojoj knjizi [2] Bjorck pokazao je da može biti slučajeva kada je matrica $A^T A$ loše uvjetovana, a dobije se dobar rezultat jer ograda u kojoj se koristi uvjetovanost matrice $A^T A$ nije dovoljno oštra. U nastavku daje oštriju ogradu koja ovisi o uvjetovanosti matrice A.*

Algorithm 1 Faktorizacija Choleskog

for $i = 1, 2, ..., m$ **do**
  $r_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i} r_{ki}^2}$
  for $j = i + 1, ..., m$ **do**
    $r_{ij} = \frac{1}{r_{ii}}(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} r_{kj})$
  end for
end for

Redoslijed operacija potrebnih za rješavanje problema najmanjih kvadrata pomoću sustava normalnih jednadžbi:

1. Izračunati $C = A^T A$.
2. Faktorizacija Choleskog $C = R^T R$.
3. Izračunati $d = A^T b$.
4. Riješiti $R^T z = d$.
5. Riješiti $Rx = z$.

Ukupan broj aritmetičkih operacija je $m^2 n + \frac{1}{3} m^3 + O(m^2)$ pri čemu je za računanje $C = A^T A$ potrebno $\approx m^2 n$,a za faktorizaciju Choleskog potrebno $\approx \frac{1}{3} m^3$ operacija. Za naš problem vrijedi da je $m \leq n$ pa je dominantan prvi član, tj. najveći broj aritmetičkih operacija dolazi od formiranja $A^T A$.
Iako je metoda jednostavna i relativno brza (pokazat će se da je brža od ostalih navedenih metoda), koristi se samo kada su uvjeti zadovoljeni jer se može dobiti rješenje koje odstupa od pravog rješenja. Naime, vrijedi da je $\kappa(A^T A) = [\kappa(A)]^2$ pa je uvjetovanost problema pogoršana i metoda je nestabilna.
Na primjeru ćemo prikazati problem koji se može dogoditi prilikom izračuna $A^T A$.

Primjer 3.1.2. *Želimo riješiti problem najmanjih kvadrata* $\min_{x \in \mathbb{R}^3} \|Ax - b\|$ *uz*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} \ i \ b = (1, 0, 0, 0)^T.$$

Tada je

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 + \epsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 + \epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 + \epsilon^2 \end{pmatrix}, \ A^T b = (1, 1, 1)^T, x = \frac{1}{3 + \epsilon^2}(1, 1, 1)^T.$$

Ako uzmemo $\epsilon = 10^{-4}$*, tada je* $1 + \epsilon^2 = 1.00000001$ *što će računalo zaokružiti na 1 i matrica* $A^T A$ *će biti singularna.*

3.2 Transformacija u linearni sustav većih dimenzija i rješavanje

Ova metoda koristi se kada matrica A ima puni stupčani rang. Problem najmanjih kvadrata transformiramo u linearni sustav koji je različit od sustava normalnih jednadžbi. Simetrični linearni sustav

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.2}$$

ekvivalentan je sustavu normalnih jednadžbi jer imaju isti broj nepoznanica i skup rješenja im je isti jer iz (3.2) slijedi

$$r + Ax = b, \quad A^T r = 0,$$

a uvrštavanjem dobije se

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

Prednost metode u odnosu na sustav normalnih jednadžbi je bitno manji raspon elemenata, bolja uvjetovanost i stabilnost, a nedostatak veća dimenzija.

3.3 Korištenje QR faktorizacije

Jedna od najčešće korištenih metoda je rješavanje problema najmanjih kvadrata pomoću QR faktorizacije koja koristeći ortogonalne transformacije reducira problem najmanjih kvadrata u trokutasti sustav.

Matrica A ima puni stupčani rang

Teorem 3.3.1 ([8])**.** *Neka je* $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ *punog stupčanog ranga,* $A = Q_0 R_0$ *skraćena QR faktorizacija matrice* A *i* $b \in \mathbb{R}^n$*. Tada je* $x \in S$ *gdje je* S *skup rješenja problema najmanjih kvadrata ako i samo ako* x *zadovoljava*

$$x = R_0^{-1} Q_0^T b.$$

Dokaz. Matrica A je punog stupčanog ranga pa je matrica $A^T A$ pozitivno definitna. Iz sustava nominalnih jednadžbi (2.3) dobili smo da je

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Uvrstimo QR faktorizaciju u rješenje:

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

□

Prvo se odredi skraćena QR faktorizacija matrice A, zatim se izračuna $d = Q^T b$ i na kraju riješi trokutasti linearni sustav $Rx = d$. Ukupna cijena računanja QR faktorizacije je $2m^2 n - \frac{2}{3}m^3$. U svakom koraku $k \leq m$ za izračun QR faktorizacije potrebno je $4(m-k)(n-k)$ aritmetičkih operacija pa je zato $\sum_{k=1}^{m} 4(m-k)(n-k) \approx 2m^2 n - \frac{2}{3}m^3$. Ako je $n \gg m$, problem se riješi s dvostruko manjih brojem aritmetičkih operacija pomoću sustava normalnih jednadžbi, a ako je $m = n$, cijene računanja su približne.
Ako vektor pomnožimo ortogonalnom matricom, norma mu se ne mijenja. Zbog očuvanja norme nema pojačavanje greške pa je jedna od najvećih prednosti ove metode njena stabilnost.

Matrica A nema puni stupčani rang

Kako postupamo u slučaju kada A nema puni stupčani rang? U tom slučaju, također, možemo koristiti QR faktorizaciju, ali sa stupčanim pivotiranjem. Neka je matrica A ranga $r < n$. Tada je njena QR faktorizacija

$$
AP = QR = Q \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}
$$

gdje je P matrica permutacija, R_{11} gornjetrokutasta matrica s pozitivnim elementima na dijagonali i R_{12} neka $r \times (n-r)$ matrica.

Iz toga slijedi

$$\begin{aligned}
||Ax-b||_2^2 &= ||Q^T(Ax-b)||_2^2 \\
&= ||Q^TQRP^Tx - Q^Tb||_2^2 \\
&= ||\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} P^Tx - Q^Tb||_2^2 \\
&= ||\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}||_2^2 \\
&= ||R_{11}y + R_{12}z - c||_2^2 + ||d||_2^2.
\end{aligned}$$

Odabere se bilo koji $z \in \mathbb{R}^{n-r}$ i tada je

$$y = R_{11}^{-1}(c - R_{12}z)$$

jer je R_{11} regularna. Za rješenje x tada vrijedi

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

Ako je $z = 0$ dobije se osnovno rješenje

$$x = P\begin{bmatrix} R_{11}^{-1}c \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

koje ne mora imati minimalnu normu u skupu svih rješenja, ali ga je jednostavno izračunati.

Numeričko određivanje ranga

Tijekom rješavanja problema najmanjih kvadrata bitno je odrediti je li matrica A punog stupčanog ranga. Ako se tijekom QR faktorizacije u egzaktnoj aritmetici na dijagonali pojavi nula, znamo da matrica A nema puni stupčani rang. Kada problem najmanjih kvadrata rješavamo na računalu, često ćemo umjesto nule dobiti neki vrlo mali broj koji je rezultat grešaka zaokruživanja i računskih operacija. Probleme također mogu stvarati i ulazni podatci koji su u egzaktnoj aritmetici jako mali. U tim slučajevima, najbolje rješenje je poistovjetiti broj s nulom kako bismo smanjili grešku.
Kod QR faktorizacije uvodimo pivotiranje kako bi na dijagonali bili elementi sortirani

padajuće po apsolutnim vrijednostima te odredimo prag ispod kojeg ćemo brojeve poistovjetiti s nulom. Ako tijekom QR faktorizacije s pivotiranjem na dijagonali dobijemo broj koji je manji od praga, na to mjesto stavljamo nulu te je onda donji desni blok matrice R nul-matrica.
Prikažimo na primjeru koje probleme može stvoriti matrica koja je skoro singularna.

Primjer 3.3.2 ([9]). *Definirajmo matricu A kao*

$$A = \begin{bmatrix} 0.70000 & 0.70711 \\ 0.70001 & 0.70711 \end{bmatrix}.$$

Matrica A ima puni rang, ali QR faktorizacijom dobijemo matricu Q

$$Q = \begin{bmatrix} 0.70710 & 0.70711 \\ 0.70711 & -0.70710 \end{bmatrix}$$

koja nije ortogonalna. Kada bismo koristili ovu matricu Q za daljnje korake u metodi, izračunano rješenje bi se znatno razlikovano od egzaktnog.

3.4 Dekompozicija singularnih vrijednosti i rješavanje

Dekompozicija singularnih vrijednosti koristi ortogonalne transformacije, ali za razliku od QR faktorizacije, problem svodi na rješavanje sustava s dijagonalnom matricom.
Prvo promatramo slučaj kada je A punog stupčanog ranga.

Matrica A ima puni stupčani rang

Teorem 3.4.1 ([5]). *Neka je matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ punog stupčanog ranga i $A = U_1\Sigma_+V_1^T$ njena skraćena dekompozicija singularnih vrijednosti. Tada se rješenje problema najmanjih kvadrata*

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

dobije primjenom "invertiranog" skraćenog SVD-a od A na b, tj.

$$x = V_1\Sigma_+^{-1}U_1^Tb. \tag{3.4}$$

Dokaz. Neka je

$$A = U_1\Sigma_+V_1^T$$

SVD matrice A. Postoji inverz od Σ_+ jer je A punog stupčanog ranga. Tada vrijedi

$$\begin{aligned}
||Ax - b||_2^2 &= ||U_1\Sigma_+ V_1^T x - b||_2^2 \\
&= ||\begin{bmatrix} U_1^T \\ U_2^T \end{bmatrix}(U_1\Sigma_+ V_1^T x - b)||_2^2 \\
&= ||\begin{bmatrix} \Sigma_+ V_1^T x - U_1^T b \\ -U_2^T b \end{bmatrix}||_2^2 \\
&= ||\Sigma_+ V_1^T x - U_1^T b||_2^2 + ||U_2^T b||_2^2.
\end{aligned}$$

Minimum se postiže ako je $||\Sigma_+ V_1^T x - U_1^T b||_2^2 = 0$, tj. ako

$$\begin{aligned}
&\Sigma_+ V_1^T x - U_1^T b = 0 \\
&\Sigma_+ V_1^T x = U_1^T b \\
&x = V_1 \Sigma_+^{-1} U_1^T b.
\end{aligned}$$

Također, u dokazu se dobije vrijednost minimuma

$$\min_x ||Ax - b||_2 = ||U_2^T b||_2.$$

□

Matrica A nema puni stupčani rang

U metodi najmanjih kvadrata SVD se najčešće primjenjuje kada matrica A nema puni stupčani rang pa promotrimo detaljnije taj slučaj. Tada "pravi" inverz matrice Σ ne postoji pa se koristi generalizirani inverz $\Sigma^\dagger$ koji smo definirali u prvom poglavlju.

Propozicija 3.4.2 ([5])**.** *Neka je matrica A ranga $r < m$ i neka su*

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \end{bmatrix} = U_1 \Sigma_1 V_1^T$$

njen SVD i skraćeni SVD. Neka je

$$\sigma := \sigma_{min}(\Sigma_1)$$

najmanja ne-nul singularna vrijednosti od A. Tada se sva rješenja problema najmanjih kvadrata mogu napisati kao

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b + V_2 z$$

gdje je z neki proizvoljni vektor. Ako je $z = 0$, tada je

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b, \tag{3.5}$$

rješenje x ima minimalnu 2−normu i vrijedi

$$\|x\|_2 \leq \frac{\|b\|_2}{\sigma}.$$

Dokaz. Nadopunimo matricu $U = [U_1, U_2]$ stupcima matrice U_3 tako da se dobije ortogonalna matrica $\hat{U} = [U_1, U_2, U_3]$. Tada je

$$\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2^2 &= \|\hat{U}^T(Ax - b)\|_2^2 \\
&= \|\begin{bmatrix} U_1^T \\ U_2^T \\ U_3^T \end{bmatrix} (U_1\Sigma_1 V_1^T x - b)\|_2^2 \\
&= \|\begin{bmatrix} U_1^T(U_1\Sigma_1 V_1^T x - b) \\ U_2^T(U_1\Sigma_1 V_1^T x - b) \\ U_3^T(U_1\Sigma_1 V_1^T x - b) \end{bmatrix}\|_2^2 \\
&= \|\begin{bmatrix} \Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b \\ -U_2^T b \\ -U_3^T b \end{bmatrix}\|_2^2 \\
&= \|\Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b\|_2^2 + \|U_2^T b\|_2^2 + \|U_3^T b\|_2^2.
\end{aligned}$$

Minimum se postiže kada je $\|\Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b\|_2^2 = 0$, tj. ako je

$$\begin{aligned}
&\Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b = 0 \\
&\Sigma_1 V_1^T x = U_1^T b \\
&x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b.
\end{aligned}$$

Matrica V je ortogonalna pa su stupci matrica V_1 i V_2 međuusobno ortogonalni te vrijedi $V_1^T V_2 z = 0$ za svaki vektor z. Tada je opći oblik rješenja

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b + V_2 z.$$

Zbog toga je

$$\|x\|_2^2 = \|V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2^2 + \|V_2 z\|_2^2$$

te se rješenje minimalne 2−norme postiže za $z = 0$. Također, vrijedi

$$\|x_{min}\|_2 = \|V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2 = \|\Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2 \leq \frac{\|U_1^T b\|_2}{\sigma} = \frac{\|b\|_2}{\sigma}.$$

□

Rješenje problema najmanjih kvadrata koje ima minimalnu normu može se dobiti pomoću sljedećih koraka:

1. Odrediti SVD matrice A, $A = U\Sigma V^T = U_1\Sigma_1 V_1^T$.
   a) Svesti matricu A na bidijagonalnu formu pomoću Householderovih reflektora.
   b) Odrediti SVD bidijagonalne matrice iterativnim metodama.
2. Izračunati $u = U^T b$.
3. Riješiti dijagonalni sustav $\Sigma w = u$.
4. Izračunati $x = Vw$.

Dekompozicija singlularnih vrijednosti često se koristi jer se može odrediti za svaku matricu, neovisno je li regularna ili kvadratna, te je najstabilnija. Naime, izračunani SVD bit će dobro uvjetovan jer ortogonalne matrice čuvaju 2−normu i male pertubacije matrice A neće utjecati na SVD zbog $|\delta A\|_2 = \|\delta\Sigma\|_2$. Ako je $n \gg m$, trajanje je približno kao i kod rješavanja problema pomoću QR faktorizacije. Ako je n manji, trajanje je približno $4nm^2 - \frac{4}{3}m^3 + O(m^2)$.

Numeričko određivanje ranga

Kao i kod QR faktorizacije, za metodu je bitno ima li matrica A puni stupčani rang. Na početku odredimo prag ispod kojeg ćemo broj poistovjetiti s nulom i ako je izračunana singularna vrijednost ispod praga, poistovjećujemo ju s nulom.

Poglavlje 4

Primjeri

4.1 Procjena vrijednosti CROBEX indeksa

Na kraju rada procijenit ćemo vrijednost CROBEX indeksa pomoću dionica koje su u njegovom sastavu. Svi programi napisani su u programskom jeziku Octave verzija 6.2.0. CROBEX [4] je osnovni indeks Zagrebačke burze koji se sastoji od minimalno 15, a maksimalno 25 dionica s najvećim rangom. Dionice moraju biti uvrštene na uređeno tržište i njima se treba trgovati više od 75% ukupnog broja trgovinskih dana u šestomjesečnom razdoblju prije revizije. Rang se određuje na osnovi udjela u free float tržišnoj kapitalizaciji i na osnovi udjela u prometu ostvarenom unutar knjige ponuda u prethodim šest mjeseci. Free float tržišna kapitalizacija je jedan od načina izračuna udjela tržišne kapitalizacije kada se uzima samo tzv. slobodni dio tržišne kapitalizacije. Za procjenu vrijednosti CROBEX indeksa, uzet ćemo cijene pet dionica s najvećom težinom u razdoblju od 12.1.2022. do 12.1.2023. Poduzeća čije dionice zadovoljavaju ovaj kriterij su: Podravka (PODR), Končar (KOEI), Ericsson Nikola Tesla (ERNT), HT (HT) i Adris grupa (ADRS2). Podatke o cijenama dionica i vrijednostima indeksa uzeli smo sa stranica Zagrebačke burze. Dionice nisu imale izražene cijene na iste dane pa smo uzeli podatke samo na dane koji su zajednički svim dionicama. Također, cijene dionica u 2022. godini bile su izražene u kunama, a u 2023. u eurima pa smo napravili konverziju cijena iz 2022. godine pomoću fiksnog tečaja 1 € = 7.53450 HRK. Na taj način dobili smo vektore $ADRS2, ERNT, HT, KOEI, PODR, CBX \in \mathbb{R}^{180}$ pa imamo točke (t_i, y_i), $i = 1, \ldots, 180$, $t_i = (ADRS2_i, ERNT_i, HT_i, KOEI_i, PODR_i) \in \mathbb{R}^5$, $y_i = CBX_i \in \mathbb{R}$ koje želimo aproksimirati linearnom funkcijom $\varphi : \mathbb{R}^5 \to \mathbb{R}$. Tada je aproksimacijska funkcija φ jednaka

$$\begin{aligned}\varphi(ADRS2_i, ERNT_i, HT_i, KOEI_i, PODR_i) = x_1 ADRS2_i + x_2 ERNT_i \\ + x_3 HT_i + x_4 KOEI_i + x_5 PODR_i, \ i = 1, \ldots, 180.\end{aligned}$$

pri čemu su $x_1, \dots, x_5$ nepoznati parametri. Ovaj problem riješit ćemo metodom najmanjih kvadrata na četiri načina koja su objašnjena u radu i na kraju usporediti rješenja. Točnije, metodom najmanjih kvadrata želimo riješiti sustav

$$Ax = b$$

pri čemu je $A = [ADRS2, ERNT, HT, KOEI, PODR] \in \mathbb{R}^{180\times 5}$ i $b = CBX \in \mathbb{R}^{180}$. Svi brojevi su long formata kako bi se vidjele razlike u rješenjima. Prije smo spomenuli problem ranga u metodama pa ćemo ga prvo odrediti, a prag ispod kojeg broj poistovjećujemo s nulom je 10^{-8}. Odredit ćemo QR faktorizaciju s pivotiranjem pomoću funkcije `qr()` i iz matrice R odrediti rang matrice A. Rang je broj dijagonalnih elemenata koji su veći od praga. U ovom slučaju dobili smo da matrica A ima puni stupčani rang pa možemo koristiti sve četiri metode, tj. $\mathrm{r}(A) = 5$. Grafički ćemo usporediti pravu i procijenjenu vrijednost CROBEX indeksa pomoću funkcije `plot()` i što su točke bliže pravcu $y = x$, procijenjene vrijednosti su točnije.

Sustav normalnih jednadžbi

Matrica A ima puni stupčani rang i dobro je uvjetovana ($\kappa(A) = 338.162603$) pa su zadovoljena oba uvjeta za korištenje metode.
Potrebno je riješiti sustav

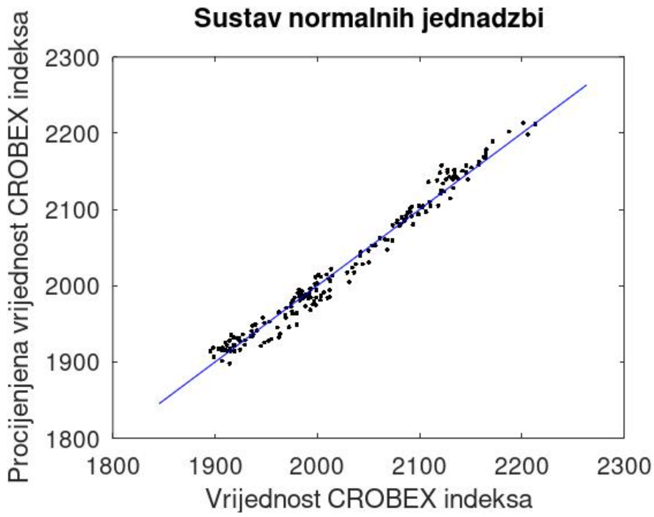
$$A^T A x = A^T b.$$

Prvo smo dobili faktorizaciju Choleskog matrice $A^T A$ pomoću funkcije `chol()`. Nakon toga smo riješili dva linearna sustava matričnim dijeljenje jer je matrica R koja se dobije u faktorizaciji Choleskog punog ranga. Kod u Octaveu glasi:

```
function [x, R] = mnk_snj(A,b)

  C = A'*A;
  [R] = chol(C);
  d = A'*b;
  z = R'\d;
  x = R\z;

  endfunction
```

Tako smo dobili prvo rješenje x^1 koje je jednako

$$x^1 = \begin{bmatrix} 13.4883020843976 \\ 0.9958855353658022 \\ 11.64815864199095 \\ 3.790694789598736 \\ 4.30676037061732 \end{bmatrix}.$$



Iz grafa zaključujemo kako je procijenjena vrijednost približna pravoj vrijednosti (4.1).

Transformacija u linearni sustav većih dimenzija

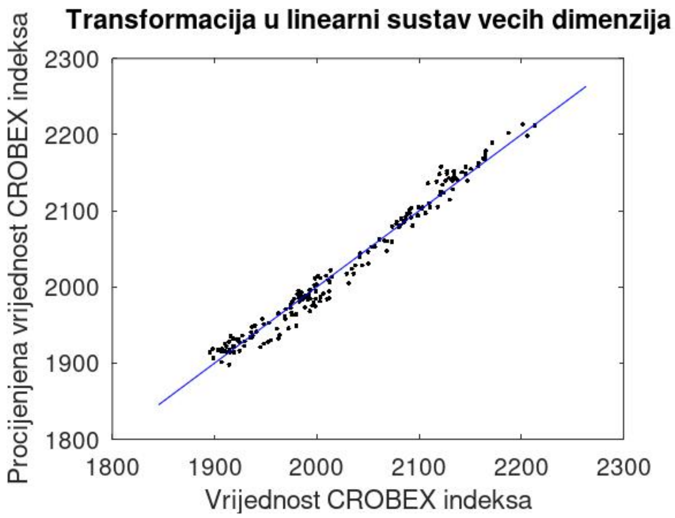
Problem možemo riješiti ovom metodom jer smo pokazali da matrica A ima puni stupčani rang. Prvo smo definirali proširenu matricu $M \in \mathbb{R}^{185\times185}$ i vektor $z \in \mathbb{R}^{185}$ kao u 3.2 te riješili linearni sustav pomoću matričnog dijeljenja. Rješenje u smislu najmanjih kvadrata x^2 jednako je $x^2 = pom(181 : 185)$ pri čemu je pom rješenje proširenog linearnog sustava. Kod u Octaveu glasi:

```
function[x] = mnk_tls(A, b, m, n)

  M = [eye(n,n),A;A',zeros(m,m)];
  z = [b;zeros(m,1)];
  pom = M\z;
  x = pom((n+1):(n+m),1:1);

  endfunction
```

Točne vrijednosti su

$$x^2 = \begin{bmatrix} 13.48830208441405 \\ 0.9958855353665521 \\ 11.64815864201623 \\ 3.790694789583815 \\ 4.306760370618501 \end{bmatrix}.$$

Koeficijenti aproksimacijske funkcije slični su koeficijentima koje smo izračunali sustavom normalnih jednadžbi (razlikuju se tek u desetoj decimali). Iz grafa zaključujemo kako je procijenjena vrijednost približna pravoj vrijednosti (4.1).



QR faktorizacija

Prije smo naveli dva slučaja u koracima tijekom rješavanja koji ovise o stupčanom rangu matrice A. Matrica A ima puni stupčani rang pa problem rješavamo na način koji je opisan u prvom slučaju. Iskoristit ćemo QR faktorizaciju koju smo izračunali prilikom računanja ranga matrice A i riješiti sustav. Kod u Octaveu glasi:

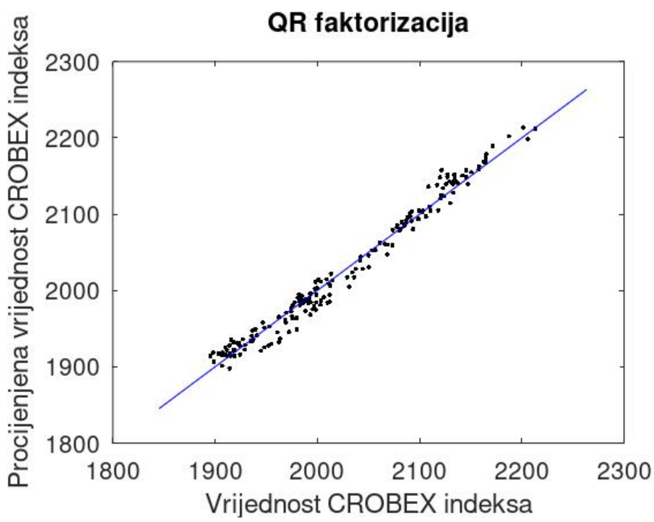
```
function[x, Q, R, P]=mnk_qr(A, b, rang)

[m,n] = size(A);
[Q,R,P]=  qr(A);

if rang==n
  [Q_bez,R_bez] = qr(A);
```

```
  x = R_bez(1:n,1:n)\(Q_bez(:,1:n)'*b);
  return;
endif

if rang<n
  R1 = R(1:rang,1:rang);
  pom = Q'*b;
  c = pom(1:rang);
  pom2 = R1\c;
  pom3 = [pom2;zeros(n-rang,1)];
  x = P*pom3;
endif

endfunction
```

Koeficijenti aproksimacijske funkcije izračunani pomoću QR faktorizacije su

$$x^3 = \begin{bmatrix} 13.48830208441437 \\ 0.9958855353665133 \\ 11.64815864201534 \\ 3.790694789583851 \\ 4.306760370618614 \end{bmatrix}.$$

Koeficijenti su slični koeficijentima koje smo dobili u prve dvije metode i iz grafa možemo zaključiti kako je procijenjena vrijednost približna pravoj vrijednosti (4.1).



SVD

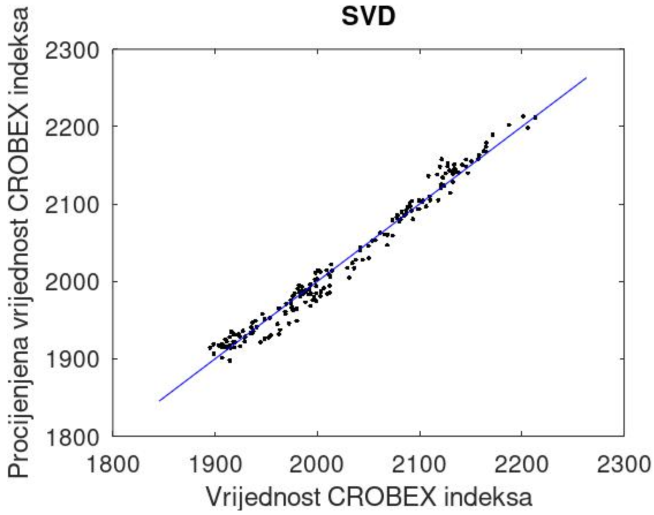
Kao i kod QR faktorizacije, problem rješavamo na način opisan u prvom slučaju jer matrica A ima puni stupčani rang. Dekompozicija singularnih vrijednosti dobije se pozivanjem funkcije `svd()` i uvršavanjem u 3.4. Kod u Octaveu glasi:

```
function[x] = mnk_svd(A, b, rang)

 [U,SIGMA,V] = svd(A);
 d = size(A);
 U1 = U(:,1:rang);
 S_PLUS = SIGMA(1:rang,1:rang);

  if (rang == d(2))
    x = V*(S_PLUS\(U1'*b));
  endif

  if (rang<d(2))
    V1 = V(:,1:rang);
    x = V1*(S_PLUS\(U1'*b));
  endif
endfunction
```

Koeficijenti izračunani pomoću dekompozicije singularnih vrijednosti su

$$x^4 = \begin{bmatrix} 13.48830208441433 \\ 0.9958855353664993 \\ 11.64815864201524 \\ 3.790694789583922 \\ 4.306760370618618 \end{bmatrix}.$$

Koeficijenti su slični koeficijentima koje smo dobili u prve tri metode i iz grafa možemo zaključiti kako je procijenjena vrijednost približna pravoj vrijednosti (4.1).



Zaključak

Rješavanjem problema pomoću četiri različite metode nismo dobili razlike u rješenjima i iz grafova možemo zaključiti kako svaka metoda dobro procijenjuje vrijednost CROBEX indeksa. Takav ishod je bio očekivan jer nakon numeričkog određivanja ranga, izračunali smo da je matrica A punog stupčanog ranga i da je dobro uvjetovana. Aproksimacijska funkcija u kojoj su koeficijenti short formata je

$$\begin{aligned}\varphi(ADRS2_i, ERNT_i, HT_i, KOEI_i, PODR_i) &= 13.488ADRS2_i + 0.99589ERNT_i \\ &\quad + 11.648HT_i + 3.7907KOEI_i + 4.3068PODR_i\end{aligned}$$

za $i = 1, \dots, 180$.

4.2 Osjetljivost numeričkog rješavanja problema najmanjih kvadrata

Kada smo procijenjivali vrijednost CROBEX indeksa, izračunana rješenja su se poklapala s egzaktnim. U ovom primjeru riješit ćemo problem najmanjih kvadrata u kojem matrica A nema puni stupčani rang i loše je uvjetovana te vidjeti poklapa li se izračunano rješenje s egzaktnim.
Hilbertova matrica H koju smo definirali u prvom poglavlju primjer je loše uvjetovane matrice. Definirat ćemo matricu $A \in \mathbb{R}^{50\times 10}$ kao

$$A_{ij} = 200 + H_{ij},\ i = 1, \dots, 50,\ j = 1, \dots, 10.$$

Kako bismo numerički odredili rang matrice A, prvo smo odredili QR faktorizaciju s pivotiranjem pomoću funkcije `qr()`. Tako se na dijagonali matrice R nalaze padajuće sortirani elementi po apsolutnoj vrijednosti. Prag s kojim broj poistovjećujemo s nulom je, kao i u prošlom primjeru, 10^{-8}. Rang je broj dijagonalnih elemenata čija je apsolutna vrijednost veća od praga i tako smo izračunali da matrica nema puni stupčani rang, tj. $\mathrm{r}(A) = 8$. Kod u Octaveu glasi:

```
function[rang]= rang_qr(A, tol)
[m,n] = size(A);
[Q,R,P] = qr(A);
rang = n;

for i = 1:n
  if abs(R(i,i))<tol
    rang = rang-1;
  endif
endfor
endfunction
```

Također smo izračunali i uvjetovanost koja je jednaka $\kappa(A) = 70747955202452$ pa je matrica loše uvjetovana. Vektor $x \in R^{10}$ definirali smo kao

$$x = \begin{bmatrix} 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \\ 500 \end{bmatrix}.$$

Vektor $b \in \mathbb{R}^{50}$ dobili smo kao $Ax = b$. Malo ćemo perturbirati vektor b i tako dobiti vektor $\hat{b} \in \mathbb{R}^{50}$ na način

$$\hat{b} = b + \mu$$

pri čemu je $\mu \in \mathbb{R}^{50}$ slučajni uzorak iz normalne distribucije. Zbog loše uvjetovanosti matrice A očekujemo veliku grešku prilikom rješavanja sustava $A\hat{x} = \hat{b}$.

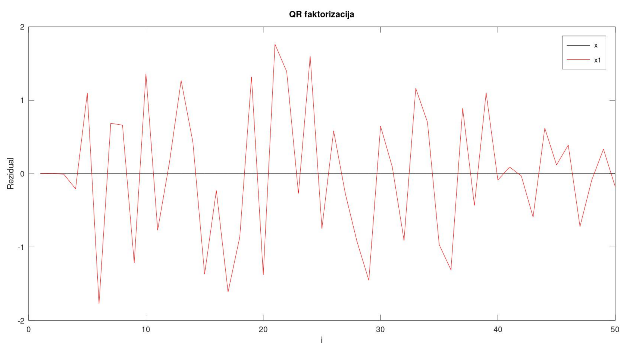
QR faktorizacija

Prvo ćemo problem riješiti pomoću QR faktorizacije na način koji je opisan u slučaju kada A nema puni stupčani rang. Izračunali smo QR faktorizaciju s pivotiranjem pomoću funkcije `qr()` i uvrstili dobivene rezultate u formulu 3.3 kako bismo dobili osnovno rješenje $\hat{x}^1$

$$\hat{x}^1 = \begin{bmatrix} 13306.36454199977 \\ -445172.2018782179 \\ 3831803.000351291 \\ -12919483.21148372 \\ 17246423.00759194 \\ 0 \\ -21118193.3061948 \\ 15652772.57450062 \\ 0 \\ -2256456.240605196 \end{bmatrix}.$$

Odmah možemo zaključiti kako imamo veliku grešku u rješenju. Napomenimo samo da algoritmom dobijemo osnovno rješenje koje ne mora biti rješenje minimalne norme. Izračunali smo normu reziduala i normu greške te dobili:

$$\|A\hat{x}^1 - \hat{b}\|_2 = 6.408240133646277$$
$$\|\hat{x}^1 - x\|_2 = 34282826.49729160.$$



Slika 4.1: Egzaktno rješenje i rješenje najmanjih kvadrata dobiveno pomoću QR faktorizacije

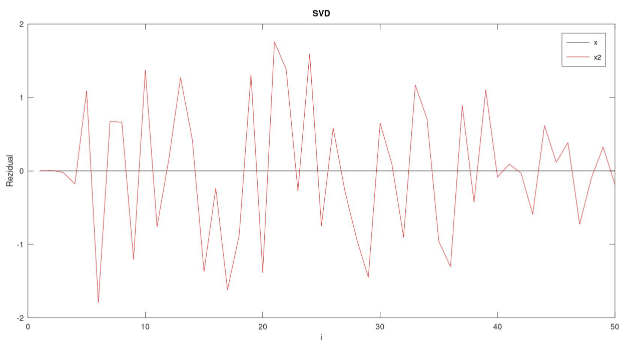
SVD

Rješavanje problema pomoću dekompozicije singularnih vrijednosti je druga metoda koju koristimo u ovom primjeru. Ponovno promatramo slučaj kada A nema puni stupčani rang. Pomoću funkcije `svd()` dobili smo SVD matrice A i vrijednosti uvrstili u 3.5 kako bismo dobili rješenje $\hat{x}^2$ minimalne norme

$$\hat{x}^2 = \begin{bmatrix} 12125.24833399573 \\ -392703.7117461984 \\ 3250095.520883124 \\ -10312902.70615848 \\ 12261987.99316914 \\ 1302462.085122369 \\ -10606681.18001214 \\ -2220961.185229072 \\ 11950479.64714872 \\ -5238901.725518947 \end{bmatrix}.$$

Opet imamo velika odstupanja od egzaktnog rješenja. Izračunali smo normu reziduala i normu greške te dobili:

$$\|A\hat{x}^2 - \hat{b}\|_2 = 6.410977939492244$$
$$\|\hat{x}^2 - x\|_2 = 23597046.64155072.$$



Slika 4.2: Egzaktno rješenje i rješenje najmanjih kvadrata dobiveno pomoću dekompozicije singularnih vrijednosti

Zaključak

Na ovom primjeru možemo vidjeti kakav utjecaj na rješenje može imati loša uvjetovanost matrice A. Malim perturbiranjem vektora b, zbog loše uvjetovanosti matrice A, dobili smo oscilirajuće rješenje koje jako odstupa od egzaktnog. Kada se u praksi radi s loše uvjetovanom matricom, koriste se dvije tehnike koje se koriste za stabiliziranje oscilirajućih rješenja - regularizacije i krnja dekompozicija singularnih vrijednosti. Više o tim metodama možemo naći u [3].

Bibliografija

[1] Damir Bakic, *Linearna algebra*, Školska knjiga, Zagreb (2008).

[2] A. Bjorck i A. Bjõrck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, Handbook of Numerical Analysis, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996, ISBN 9780898713602, https://books.google.hr/books?id=ZecsDBMz5-IC.

[3] Nela Bosner, *Prezentacije iz kolegija Numeričke metode financijske matematike*, 2021., https://moodle.srce.hr/2020-2021/pluginfile.php/4972401/mod_resource/content/3/nmfm_najmanji_kvadrati.pdf.

[4] Zagrebačka burza, *Odluka o indeksu CROBEX*, 2020., https://zse.hr/UserDocsImages/index_documents/CROBEX_20200120153335-2020-CROBEX-Odluka.pdf.

[5] Zlatko Drmac, Vjeran Hari, Miljenko Marušic, Mladen Rogina, Sanja Singer i Saša Singer, *Numericka analiza*, PMF-Matematicki odjel, Sveucilište u Zagrebu (2003).

[6] Zlatko Drmac, Vjeran Hari, Miljenko Marušic, Mladen Rogina, Sanja Singer i Saša Singer, *Numericka matematika*, 2010.

[7] Josip Tambača Ilja Gogić, Pavle Pandžić, *Diferencijalni račun funkcija više varijabli*, 2021., https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/difraf/dif/Diferencijalni_racun.pdf.

[8] Michael Kern, *Numerical methods for inverse problems*, 2016., https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/9781119136941.app1.

[9] Do Q Lee, *Numerically efficient methods for solving least square problems*, 2012., https://math.uchicago.edu/~may/REU2012/REUPapers/Lee.pdf.

[10] Nela Bosner Saša Singer, *Prezentacije iz kolegija Numerička matematika*, 2022., https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/unm/materijali/predavanja-2021/nm_07.pdf.

Sažetak

Diskretna metoda najmanjih kvadrata statistička je metoda koju koristimo za određivanje koeficijenata aproksimacijske funkcije kada je poznata vrijednost realne funkcije f u točkama $t_1, \ldots, t_n$ definirane na skupu $T \in \mathbb{R}$ koju želimo aproksimirati funkcijom φ na tom skupu. U radu promatramo slučaj kada je funkcija φ linearna, tj. $\varphi(t) = x_1\varphi_o(t) + \ldots + x_m\varphi_m(t)$ pri čemu su $\varphi_1, \ldots, \varphi_m$ poznate funkcije. Čvorova aproksimacije je više nego nepoznatih parametara aproksimacijske funkcije pa rješavamo preodređen sustav na način da minimiziramo euklidsku normu vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije $t_1, \ldots, t_n$. Točnije, tražimo nepoznate parametre $x_1, \ldots, x_m$ takve da vrijedi $\sum_{k=0}^{n}(f(t_k) - \varphi(t_k))^2 \to \min$. Ako zapišemo ovaj sustav u matričnom obliku, dobije se sustav $Ax = b$ uz $a_{kj} = \varphi_j(t_k)$ i $b_k = y_k = \sum_{j=1}^{m} x_j\varphi_j(t_k)$ za $k = 1, \ldots, n$, $j = 1, \ldots, m$. Objasnit ćemo kako se ovaj sustav numerički rješava na četiri načina, tj. pomoću sustava normalnih jednadžbi, transformacije u linerani sustav većih dimenzija, QR faktorizaicije i dekompozicije singularne vrijednosti. U radu ćemo na dva primjera primijeniti navedene metode. U prvom primjeru procijenjuje se vrijednost CROBEX indeksa s pet dionica koje imaju najveću težinu. U drugom primjeru pokazat ćemo nedostatke metoda u slučaju kada je matrica A loše uvjetovana i nema puni stupčani rang.

Summary

Discrete least square method is a statistical method which is used to determine coefficients of approximation function when values of real function f are given at points $t_1, \dots, t_n$ defined on set $T \in \mathbb{R}$ which we approximate with function φ on that set. We observe case when φ is linear function, i.e., $\varphi(t) = x_1\varphi_o(t) + \dots + x_m\varphi_m(t)$ where $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ are given functions. There are more approximation nodes then unknown parameters of approximation function so we solve an overdetermined system by minimizing Euclid norm of residual vector at approximation nodes $t_1, \dots, t_n$. More accurate, we want to find unknown parameters $x_1, \dots, x_m$ so that $\sum_{k=0}^{n}(f(t_k) - \varphi(t_k))^2 \to \min$. We can write this system in matrix form as $Ax = b$ where $a_{kj} = \varphi_j(t_k)$ and $b_k = y_k = \sum_{j=1}^{m} x_j\varphi_j(t_k)$ for $k = 1, \dots, n,\ j = 1, \dots, m$. We will explain how to numerically solve this system in four ways, i.e. by normal equation method, transforming in larger system of linear equations, QR decomposition and singular value decomposition. We will apply these methods in two examples. In first example we estimate value of CROBEX index with prices of five stocks with highest share. In second example we will show deficiencies of methods when matrix A is ill-conditioned and rank-deficient.

Životopis

Korina Kovačević rođena je 23.06.1998. u Zagrebu. U Velikoj Gorici završila je osnovnu (OŠ Jurja Habdelića) i srednju (Gimnazija Velika Gorica) školu. Već tijekom osnovne škole, kroz razna natjecanja i dodatnu nastavu pokazala je afinitet prema matematici, a najveći uspjeh je bilo sudjelovanje na dva državnom natjecanju tijekom srednje škole. Iako je pohađala program opće gimnazije, odlučila je u ljeto 2017. godine upisati preddiplomski sveučilišni studij Matematike na Prirodoslovno-Matematičkom fakultetu u Zagrebu. Završetkom preddiplomskog studija 2020. postaje prvostupnica matematike i nastavlja obrazovanje na diplomskom sveučilišnom studiju Financijska i poslovna matematika.