Linearni problem najmanjih kvadrata

Terzić, Marina

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Marina Terzić

Linearni problem najmanjih kvadrata

Završni rad

Osijek, 2020.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Marina Terzić

Linearni problem najmanjih kvadrata

Završni rad

Voditelj: prof.dr.sc.Kristian Sabo

Osijek, 2020.

Sažetak

U ovom završnom radu upoznat ćemo se s linearnim problemom najmanjih kvadrata kao i s metodama za njegovo rješavanje. U uvodnom dijelu detaljno ćemo opisati problem najmanjih kvadrata za unaprijed zadani skup podataka. U nastavku rada, definirat ćemo linearni problem najmanjih kvadrata i opisati njegovo rješavanje pomoću sustava normalnih jednadžbi, QR-dekompozicije i dekompozicije na singularne vrijednosti. Svaku od navedenih metoda testirat ćemo na istom primjeru kako bi zaključili da daju isti rezultat.

Ključne riječi: problem najmanjih kvadrata, linearni problem najmanjih kvadrata, sustav normalnih jednadžbi, QR-dekompozicija, dekompozicija na singularne vrijednosti

Abstract

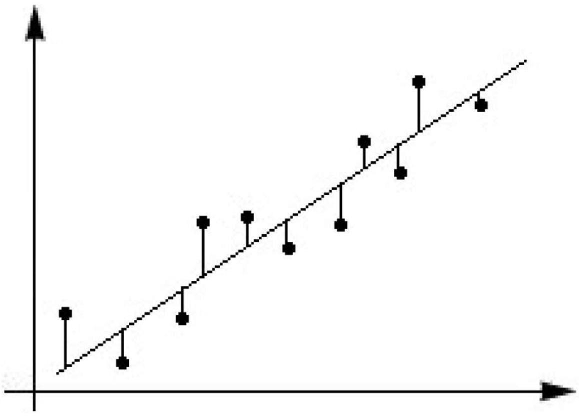
In this final paper, linear least squares problem will be introduced along with some methods for solving it. In the introduction we will detail the least square problem for a predefined data set. After that, we will explain three methods which can help us solve the mentioned problem: system of normal equations, QR-decomposition and singular value decomposition. Also, each of these methods will be tested on the same example to conclude that they give the same result.

Key words: least square problem, linear least square problem, system of normal equations, QR-decomposition, singular value decomposition

Sadržaj

1 Uvod

Za većinu kvantitativnih eksperimenata, metoda najmanjih kvadrata je najbolja tehnika za vizualiziranje prikupljenih podataka. Prikupljene podatke najčešće prikazujemo grafički, kao točke (tj. kao parove brojeva) i iz tog grafičkog prikaza želimo odrediti odnos između prikupljenih podataka. Drugim riječima, želimo odrediti parametre koji će opisivati vezu između prikupljenih podataka. Problem najmanjih kvadrata određuje te parametre tako da dobivamo reprezentant oko kojega su ti podaci raspodijeljeni s najmanjim mogućim odstupanjima.

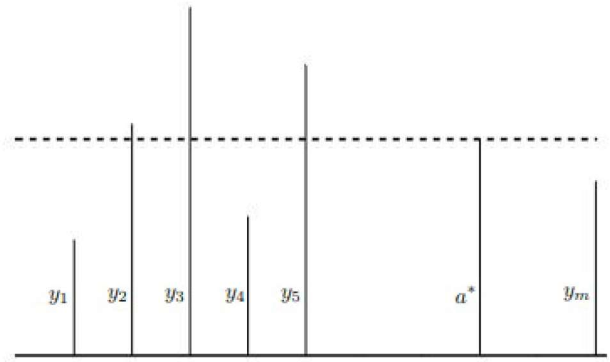


Slika 1: Pravac kao reprezetant podataka u smislu najmanjih kvadrata

U sklopu ovog završnog rada nastojat ćemo na jednostavan način objasniti metode za određivanje takvih parametara.
U točki 2 opisat ćemo motivaciju i matrični zapis problema najmanjih kvadrata, definirat ćemo vektor odstupanja i uvesti pojam model-funkcije. U točki 3 promatramo linearni problem najmanjih kvadrata te detaljno opisujemo njegovo rješavanje pomoću sustava normalnih jednadžbi, QR-dekompozicije i dekompozicije na singularne vrijednosti. Navedene metode testirat ćemo na istom primjeru te na kraju kratko opisati kompresiju slike uz pomoć programskog jezika *MatLab*.

2 Problem najmanjih kvadrata

Pretpostavimo da su $y_1, y_2, \ldots, y_m$ rezultati mjerenja neke veličine A. Treba odrediti reprezentant a^* veličine A na način da poznate vrijednosti $y_1, y_2, \ldots, y_m$ budu „što bliže" reprezentantu a^*.



Slika 2: Aritmetička sredina izmjerenih podataka

Pod pojmom „što bliže" podrazumijevamo da suma kvadrata odstupanja rezultata mjerenja od nekoga a bude najmanja, odnosno promatramo optimizacijski problem

$$a^* = \underset{a \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} F(a), \tag{1}$$

pri čemu funkciju F definiramo na sljedeći način:

$$F(a) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - a)^2 .$$

Primijetimo da je $F(a) = \|a \cdot \mathbf{1} - \mathbf{y}\|_2^2$, gdje je $y \in \mathbb{R}^m$, a $\mathbf{1} = (1, \ldots, 1)^\top \in \mathbb{R}^m$. Ovaj princip poznat je pod nazivom princip najmanjih kvadrata ili metoda najmanjih kvadrata, dok problem određivanja aproksimacije a^* u smislu najmanjih kvadrata, nazivamo problem najmanjih kvadrata.

Nužan uvjet za postojanje ekstrema funkcije F glasi

$$\frac{dF}{da} = 0 .$$

Deriviranjem funkcije F dobivamo

$$\frac{dF}{da} = -2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - a)$$

što nakon izjednačavanja s nulom i sređivanja možemo pisati u obliku

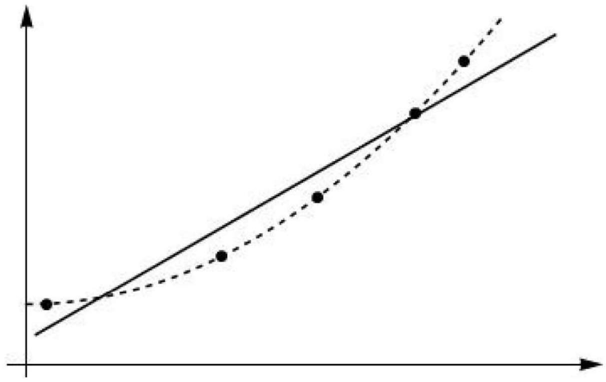
$$ma = \sum_{i=1}^{m} y_i .$$

Budući da je funkcija F strogo konveksna na skupu $\mathbb{R}$ ona postiže jedinstveni globalni minimum pa je očito da je rješenje problema (1) aritmetička sredina izmjerenih podataka tj.

$$a^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} y_i \, .$$

Dakle, aritmetička sredina izmjerenih podataka $y_1, y_2, \ldots, y_m$ ima svojstvo da je suma kvadrata odstupanja do mjerenja $y_1, y_2, \ldots, y_m$ minimalna.

Pretpostavimo sada da su vrijednosti neke funkcije poznate u konačno mnogo točaka. Neka su $x_1, x_2, \ldots, x_m$ dane točke te neka su $y_1, y_2, \ldots, y_m$ pripadne vrijednosti funkcije u tim točkama. Među svim pravcima, želimo odrediti pravac $g(x) = ax + b$ koji najbolje aproksimira tu funkciju u smislu najmanjih kvadrata.



Slika 3: Pravac koji predstavlja aproksimaciju funkcije (nacrtana iscrtkano) u smislu najmanjih kvadrata

Drugim riječima, želimo odrediti parametre a, b tako da bude $y_i \approx ax_i + b$, $i = 1, \ldots, m$, pri čemu „$\approx$" znači minimalno kvadratno odstupanje.

Pretpostavimo li da postoji pravac koji se u zadanim točkama podudara s funkcijskim vrijednostima tj. s $y_1, y_2, \ldots, y_m$, onda taj pravac mora zadovoljavati sustav

$$\begin{aligned} ax_1 + b &= y_1 \\ ax_2 + b &= y_2 \\ &\vdots \\ ax_m + b &= y_m \, . \end{aligned}$$

Navedeni sustav možemo zapisati i u matričnom obliku

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y} \, ,$$

gdje su

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_m & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 2} , \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 1} , \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 1} \, .$$

Gornji sustav općenito ne mora imati rješenje, stoga promatrani pravac određujemo tako da odredimo $\mathbf{x}$ za koji će $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - y\|_2$ biti najmanja. Općenito, funkcija $t \mapsto t^2$ je strogo monotona na $[0, \infty\rangle$ pa je problem minimizacije $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ ekvivalentan minimizaciji $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

Definiramo odstupanja

$$r_i = y_i - ax_i - b, \quad i = 1, \dots, m$$

i označimo

$$F(a, b) = \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 \ .$$

Očito je da desna strana prethodne jednakosti predstavlja sumu kvadrata odstupanja r_i, $i = 1, \dots, m$ tj.

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^{m} (y_i - ax_i - b)^2 = \sum_{i=1}^{m} r_i^2 = \|\mathbf{r}\|_2^2 \, ,$$

pri čemu je $\mathbf{r} = (r_1, r_2 \dots r_m)^\top$ vektor odstupanja.

Budući da želimo minimalna kvadratna odstupanja mi zapravo promatramo problem globalne optimizacije

$$\operatorname*{argmin}_{(a,b) \in \mathbb{R}^2} F(a, b) \ .$$

Nužan uvjet za postojanje ekstrema funkcije F glasi

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0, \qquad \frac{\partial F}{\partial b} = 0 \ .$$

Odredimo parcijalne derivacije funkcije F

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - ax_i - b) x_i$$

i

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^{m} (y_i - ax_i - b) \ .$$

Nakon izjednačavanja s nulom i sređivanja dobivamo

$$\begin{aligned} a \sum_{i=1}^{m} x_i^2 + b \sum_{i=1}^{m} x_i &= \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^{m} x_i + m\, b &= \sum_{i=1}^{m} y_i \ . \end{aligned} \tag{2}$$

Sada iz sustava (2) izračunamo a i b. Kako je funkcija F strogo konveksna na skupu $\mathbb{R}^2$, postiže jedinstveni globalni minimum pa tako izračunati parametri a i b zaista daju najbolju aproksimaciju početne funkcije.

Općenito, pretpostavimo da zavisna varijabla y ovisi o nezavisnoj varijabli x po funkcionalnom zakonu

$$y = f(x; \mathbf{a}),$$

gdje je $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ vektor parametara s komponentama a_i, $i = 1, \ldots, n$. Također, neka su zadane točke

$$(x_i, y_i), \;\; i = 1, \ldots, m, \;\; m \geq n$$

te neka su komponente vektora odstupanja $\mathbf{r}$ oblika

$$r_i(\mathbf{a}) = f(x_i; \mathbf{a}) - y_i \,. \tag{3}$$

Definiramo funkciju $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$,

$$F(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i^2(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \big\| r(\mathbf{a}) \big\|_2^2 , \qquad \mathbf{a} \in \mathbb{R}^n \,. \tag{4}$$

Tražimo točku $\mathbf{a}^\star = (a_1^\star, a_2^\star, \ldots, a_n^\star) \in \mathbb{R}^n$ u kojoj funkcija F, definirana na ovaj način, postiže globalni minimum, odnosno rješavamo sljedeći problem globalne optimizacije

$$\underset{\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \, F(\mathbf{a}) \,.$$

Funkcija f se naziva model-funkcija, vektor $\mathbf{r}$ vektor odstupanja ili reziduala, a brojevi $a_1^\star, a_2^\star, \ldots, a_n^\star$ se nazivaju optimalni parametri. Problem određivanja brojeva $a_1^\star, a_2^\star, \ldots, a_n^\star$ nazivamo problem najmanjih kvadrata.

Kako bi jednostavnije analizirali ekstreme funkcije F iskoristit ćemo njezin specijalni oblik. Izračunajmo sada gradijent funkcije F

$$\begin{array}{c} \frac{\partial F}{\partial a_1} = r_1 \frac{\partial r_1}{\partial a_1} + r_2 \frac{\partial r_2}{\partial a_1} + \cdots + r_m \frac{\partial r_m}{\partial a_1} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \frac{\partial F}{\partial a_n} = r_1 \frac{\partial r_1}{\partial a_n} + r_2 \frac{\partial r_2}{\partial a_n} + \cdots + r_m \frac{\partial r_m}{\partial a_n} \end{array} .$$

Gradijent funkcije možemo zapisati i u matričnom obliku kao

$$\operatorname{grad} F = \mathbf{J}^T \mathbf{r} \,,$$

pri čemu je

$$\operatorname{grad} F = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial a_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial a_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial a_1} & \cdots & \frac{\partial r_1}{\partial a_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_m}{\partial a_1} & \cdots & \frac{\partial r_m}{\partial a_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix}.$$

Matrica $\mathbf{J}$ je poznata Jacobijeva matrica ili Jacobijan funkcije F.

Kako bismo pronašli stacionarne točke funkcije (3) gradijent funkcije F izjednačimo s nulom. Time dobivamo sustav od n jednadžbi s n nepoznanica $a_1, a_2, \ldots, a_n$

$$\mathbf{J}^T \mathbf{r} = \mathbf{0} \quad \text{ili} \quad \begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{m} r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_1} = 0, \\ \qquad \vdots \\ \sum\limits_{i=1}^{m} r_i \frac{\partial r_i}{\partial a_n} = 0 \,. \end{cases} \tag{5}$$

Sustav jednadžbi (5) će biti linearan ako su sve funkcije $r_i = r_i(a_1, \ldots, a_n)$ linearne u svakom od argumenata $a_1, \ldots, a_n$, odnosno ako je model-funkcija f linearna u svim parametrima $a_1, \ldots, a_n$ te tada govorimo o linearnom problemu najmanjih kvadrata. U slučaju kada model-funkcija f nije linearna u svim parametrima $a_1, \ldots, a_n$ govorimo o nelinearnom problemu najmanjih kvadrata i tada je (5) sustav nelinearnih jednadžbi.

3 Linearni problem najmanjih kvadrata

Pretpostavimo da je model-funkcija f linearna u svim parametrima $a_1, \ldots, a_n$ te neka je ona oblika

$$f(x; a_1, \ldots, a_n) = a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x), \qquad x \in \mathbb{R} \tag{6}$$

pri čemu su φ_i neprekidne funkcije.

Jacobijeva matrica za model-funkciju (6) ne ovisi o vektoru parametara $\mathbf{a}$, dok minimizirajuća funkcija (3) u ovom slučaju glasi

$$r_i(\mathbf{a}) = a_1\varphi_1(x_1) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) - y_i$$

pa imamo

$$\mathbf{J}_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial a_j} = \varphi_j(x_i), \quad i = 1, \ldots, m, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Vektor odstupanja $\mathbf{r}$ s komponentama $r_i = a_1\varphi_1(x_1) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) - y_i$ možemo zapisati u obliku

$$\mathbf{r} = \mathbf{J}\mathbf{a} - \mathbf{y}, \tag{7}$$

pri čemu je $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_m)^\top$. Rješavamo sljedeći optimizacijski problem

$$\underset{\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}}\, F(\mathbf{a}),$$

gdje je

$$F(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\left\|\mathbf{r}(\mathbf{a})\right\|_2^2 = \frac{1}{2}\|\mathbf{J}\mathbf{a} - \mathbf{y}\|_2^2. \tag{8}$$

Linearni problem najmanjih kvadrata se često zapisuje i kao

$$\mathbf{J}\mathbf{a} \simeq \mathbf{y}.$$

3.1 Sustav normalnih jednadžbi za linearni problem najmanjih kvadrata

Stacionarne točke funkcije F dobivamo rješavajući jednadžbu

$$\text{grad } F = \mathbf{J}^\top\mathbf{r} = 0\,. \tag{9}$$

Lema 3.1. *Neka je $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m > n$. Matrica $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$ pozitivno je definitna onda i samo onda ako je $\mathbf{J}$ punog ranga po stupcima* (rang $\mathbf{J} = n$).

Dokaz. (Nužnost) Neka je $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$ pozitivno definitna. Pretpostavimo da je rang $\mathbf{J} < n$, tj. da su stupci od $\mathbf{J}$ linearno zavisni. Tada bismo za neki $\mathbf{a}_0 \neq \mathbf{0}$ imali $\mathbf{J}\mathbf{a}_0 = \mathbf{0}$, odakle bi slijedilo $\mathbf{a}_0^T\mathbf{J}^T\mathbf{J}\mathbf{a}_0 = 0$, što bi značilo da $\mathbf{J}^T\mathbf{J}$ nije pozitivno definitna.

(Dovoljnost) Pretpostavimo da je rang $\mathbf{J} = n$, tj. da su stupci od $\mathbf{J}$ linearno nezavisni. Tada za $\mathbf{a} \neq \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{J}\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$, pa je

$$(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \mathbf{a}^T(\mathbf{J}^T\mathbf{J}\mathbf{a}) = (\mathbf{J}\mathbf{a})^T(\mathbf{J}\mathbf{a}) = \|\mathbf{J}\mathbf{a}\|_2^2 > 0\,.$$

□

U slučaju kada su uvjeti leme zadovoljeni linearni problem najmanjih kvadrata je rješiv i postoji jedinstveno rješenje, koje možemo dobiti tako da pronađemo kritične točke funkcije F. Uvrstimo li (7) u (9) dobivamo jednadžbu

$$\mathbf{J}^T\mathbf{J}\mathbf{a} - \mathbf{J}^T\mathbf{y} = 0\,. \tag{10}$$

Očito je da je rješenje ove jednadžbe

$$\mathbf{a}^\star = \mathbf{J}^\dagger\mathbf{y}\,,$$

gdje je

$$\mathbf{J}^\dagger = (\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\mathbf{J}^T\,.$$

Jednadžbu (10) nazivamo sustav normalnih jednadžbi, a matricu $\mathbf{J}^\dagger$ pseudoinverzna matrica ili Moore-Penroseov generalizirani inverz matrice $\mathbf{J}$.

Rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata pomoću sustava normalnih jednadžbi je jedna od najbržih metoda, ali u slučaju kada je matrica $\mathbf{J}$ loše uvjetovana ova metoda daje vrlo nepouzdano rješenje.

Algoritam za linearni problem najmanjih kvadrata pomoću sustava normalnih jednadžbi.
ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad m > n, \quad \operatorname{rang}(\mathbf{A}) = n, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
izlaz: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ koji minimizira $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$
1: izračunaj $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ i $\mathbf{A}^T\mathbf{b}$
2: riješi $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$

Napomena 1. *U radu su u svim primjerima brojevi zaokruženi na 4 decimale.*

Primjer 3.2. *Neka su*

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -4 & 3 \\ 8 & 3 \\ 8 & 12 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

dane matrice. Pomoću sustava normalnih jednadžbi odrediti $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$ koji minimizira $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2$.

Rješenje. Matrica $\mathbf{A}$ je pozitivno definitna jer je rang $\mathbf{A} = 2$ pa takav $\mathbf{x}$ postoji i jedinstven je. Računamo

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 144 & 108 \\ 108 & 162 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad \mathbf{A}^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 52 \\ 51 \end{bmatrix}.$$

Rješavanjem sustava $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$ dobivamo

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.25 \\ 0.1481 \end{bmatrix}.$$

3.2 Rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata pomoću QR-dekompozicije

QR-dekompozicija je rastav matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ na produkt $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, pri čemu je $\mathbf{Q}$ ortogonalna, a $\mathbf{R}$ gornja trokutasta matrica. Na taj način sustav $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ prelazi u trokutasti sustav

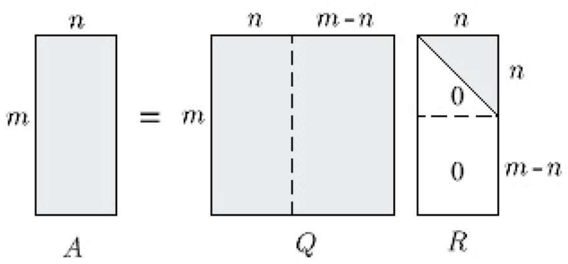
$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T\mathbf{b}\,,$$

koji se na jednostavan način rješava pomoću povratnih supstitucija (engl.: *Back Substitution*):

$$x_n = \frac{b_n}{u_{nn}}\,, \qquad x_i = \frac{1}{u_{ii}}(b_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k)\,, \qquad i = n-1, \ldots, 1\,.$$

Označimo li stupce matrice $\mathbf{A}$ s $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{R}^m$, a s $q_1, \ldots, q_m \in \mathbb{R}^m$ stupce matrice $\mathbf{Q}$, konstrukciju matrica $\mathbf{Q}$ i $\mathbf{R}$ možemo prikazati sljedećim algoritmom:

1: $q_1 = a_1/\|a_1\|_2, \qquad r_{11} = \|a_1\|_2$
2: **for** $j = 2, \ldots, n$ **do**
3: $\hat{q}_j = a_j$
4: **for** $k = 1, \ldots, j-1$ **do**
5: $r_{kj} = \langle q_k, a_j \rangle$
6: $\hat{q}_j = \hat{q}_j - r_{kj}q_k, \qquad (\hat{q}_j = a_j - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj}q_k)$
7: **end for** 8: $r_{jj} = \left\|\hat{q}_j\right\|_2$
9: **if** $r_{jj} > 0$ **then**
10: $q_j = \hat{q}_j/r_{jj}$
11: **else** 12: izaberimo q_j tako da je okomit na $q_1, \ldots, q_{j-1}$
13: **end if**
14: **end for** 15: izaberimo $q_{n+1}, \ldots, q_m$ tako da $q_1, \ldots, q_m$ čine ortonormirani sustav



Slika 4: QR-dekompozicija matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$

Navedeni algoritam izračunava stupce $q_1, \ldots, q_m$ matrice $\mathbf{Q}$ i elemente matrice $\mathbf{R}$ koji se nalaze iznad i na glavnoj dijagonali, dok su svi elementi ispod glavne dijagonale jednaki nuli.

Slično kao i do sada, tražimo minimum funkcije $F(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{Ja}-\mathbf{y}\|_2^2$ iz (8). Prethodno opisanim algoritmom načinimo QR-dekompoziciju matrice $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ tj. $\mathbf{J} = \mathbf{QR}$, gdje je $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonalna, a $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ gornja trokutasta matrica. Vektor odstupanja (7) sada možemo zapisati kao

$$\mathbf{r} = \mathbf{QRa} - \mathbf{y}\,.$$

S obzirom na to da ortogonalna matrica čuva normu, možemo pisati

$$\|\mathbf{r}\|_2 = \|\mathbf{QRa}-\mathbf{y}\|_2 = \left\|\mathbf{Q}(\mathbf{Ra}-\mathbf{Q}^T\mathbf{y})\right\|_2 = \left\|\mathbf{Ra}-\mathbf{Q}^T\mathbf{y}\right\|\,. \tag{11}$$

Budući da je matrica $\mathbf{J}$ punog ranga po stupcima (rang $\mathbf{J}$=$r_\mathbf{J}$), ali ne mora biti kvadratna, za nju računamo reduciranu QR-dekompoziciju

$$\mathbf{J} = \mathbf{QR} = \begin{bmatrix}\hat{\mathbf{Q}} & \hat{\hat{\mathbf{Q}}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\mathbf{R}}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix} = \hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{R}}\,.$$

Za matricu $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$ smo dobili $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{R}}$, gdje je $\hat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ortogonalna (sadrži prvih n stupaca matrice $\mathbf{Q}$), a $\hat{\mathbf{R}} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gornje trokutasta matrica (sadrži prvih n redaka matrice $\mathbf{R}$).

Zapišimo vektor $\mathbf{Q}^T\mathbf{y}$ na sljedeći način

$$\mathbf{Q}^T\mathbf{y} = \begin{bmatrix}\mathbf{y_1}\\ \mathbf{y_2}\end{bmatrix}\,,$$

gdje je $\mathbf{y_1}$ $r_\mathbf{J}$-dimenzionalni vektor tj. $\mathbf{y_1} = \hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{y}$. Sada (11) možemo pisati kao

$$\left\|\mathbf{Ra}-\mathbf{Q}^T\mathbf{y}\right\|_2^2 = \left\|\begin{bmatrix}\hat{\mathbf{R}}\mathbf{a}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\mathbf{y_1}\\ \mathbf{y_2}\end{bmatrix}\right\|_2^2 = \left\|\hat{\mathbf{R}}\mathbf{a}-\mathbf{y_1}\right\|_2^2 + \|\mathbf{y_2}\|_2^2$$

iz čega zaključujemo da će odstupanje biti minimalno kada je $\hat{\mathbf{R}}\mathbf{a} = \mathbf{y_1} = \hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{y}$. Zato se minimum funkcije F postiže za vektor $\mathbf{a}^\star \in \mathbb{R}^n$, za koji je

$$\hat{\mathbf{R}}\mathbf{a}^\star = \mathbf{y}_1\,,$$

pri čemu je

$$F(\mathbf{a}^\star) = \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{a}^\star)\|_2^2 = \frac{1}{2}\|\mathbf{y_2}\|_2^2\,.$$

Algoritam za linearni problem najmanjih kvadrata pomoću QR-dekompozicije.
ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\quad m > n$, $\quad \text{rang}(\mathbf{A}) = n$, $\quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
izlaz: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ koji minimizira $\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|_2$
1: izračunaj reduciranu QR-dekompoziciju $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{R}}$
2: izračunaj $\hat{\mathbf{Q}}\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$
3: riješi $\hat{\mathbf{R}}\mathbf{x} = \hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{b}$ koristeći supstitucije unatrag

Primjer 3.3. *Linearni problem najmanjih kvadrata iz Primjera* (3.2) *riješit ćemo primjenom QR-dekompozicije.*

Rješenje. Primjenom nekih od matematičkih alata (npr. $MatLab$, $Mathematica$) odredimo reduciranu QR-dekompoziciju

$$\hat{\mathbf{Q}} = \begin{bmatrix} -0.3333 & 0.6667 \\ 0.6667 & -0.3333 \\ 0.6667 & 0.6667 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} 12 & 9 \\ 0 & 9 \end{bmatrix}.$$

Nadalje, računamo vektor $\hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{b}$

$$\hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 4.3333 \\ 1.3333 \end{bmatrix}.$$

Rješavanjem sustava $\hat{\mathbf{R}}\mathbf{x} = \hat{\mathbf{Q}}^T\mathbf{b}$ dobivamo

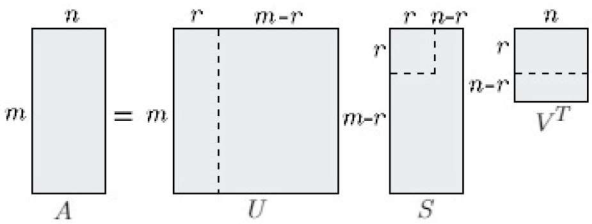
$$x = \begin{bmatrix} 0.25 \\ 0.1481 \end{bmatrix}.$$

3.3 Rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata pomoću dekompozicije na singularne vrijednosti

Dekompozicija na singularne vrijednosti je rastav matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ na produkt $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$, gdje su $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonalne matrice, a $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ dijagonalna matrica,

$$\mathbf{S} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\min(m,n)}), \qquad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0\,.$$

Brojeve $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\min(m,n)}$ nazivamo singularne vrijednosti matrice $\mathbf{A}$ dok stupce matrice $\mathbf{U}$ zovemo lijevi, a stupce matrice $\mathbf{V}$ desni singularni vektori matrice A.



Slika 5: Dekompozicija na singularne vrijednosti matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$

Linearni problem najmanjih kvadrata rješavamo pomoću dekompozicije na singularne vrijednosti u slučaju kada je Jacobijeva matrica $\mathbf{J}$ loše uvjetovana. Kao što smo pokazali u prethodnim poglavljima linearni problem najmanjih kvadrata svodi se na problem minimizacije (8) funkcije

$$F(\mathbf{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{r}(\mathbf{a})\|_2^2\,, \qquad \text{gdje je } \mathbf{r} = \mathbf{Ja} - \mathbf{y}\,.$$

Pretpostavimo da je $\mathrm{rang}(\mathbf{J}) = k \leq n < m$ i neka je $\mathbf{J} = \mathbf{USV}^T$ dekompozicija na singularne vrijednosti matrice $\mathbf{J}$, gdje su $\mathbf{U}$, $\mathbf{S}$ i $\mathbf{V}$ gore definirane matrice, pri čemu je

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_k & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{S}_k = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k)\,,$$

i $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_k > 0$.

S obzirom na to da ortogonalna matrica čuva normu, možemo pisati

$$\|\mathbf{r}\|_2 = \|\mathbf{Ja} - \mathbf{y}\|_2 = \left\|\mathbf{USV}^T\mathbf{a} - \mathbf{y}\right\|_2 = \left\|\mathbf{U}(\mathbf{SV}^T\mathbf{a} - \mathbf{U}^T\mathbf{y})\right\|_2 = \left\|\mathbf{SV}^T\mathbf{a} - \mathbf{U}^T\mathbf{y}\right\|_2 . \tag{12}$$

Sada uz oznake $\mathbf{z} = \mathbf{V}^T\mathbf{a}$ i $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{U}^T\mathbf{y}$, (12) možemo pisati u obliku

$$\|\mathbf{Sz} - \hat{\mathbf{y}}\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{S}_k & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{z_1} \\ \mathbf{z_2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1} \\ \hat{\mathbf{y}}_\mathbf{2} \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{S}_k\mathbf{z_1} - \hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1} \\ -\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{2} \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \|\mathbf{S}_k\mathbf{z_1} - \hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1}\|_2^2 + \|\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{2}\|_2^2 ,$$

pri čemu su $\mathbf{z_1}$, $\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1} \in \mathbb{R}^k$, a $\mathbf{z_2} \in \mathbb{R}^{n-k}$, $\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{2} \in \mathbb{R}^{m-k}$. Minimum funkcije F postiže se na vektoru $\mathbf{z}^\star \in \mathbb{R}^n$, za koji je

$$\mathbf{S}_k\mathbf{z}^\star = \hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1}$$

iz čega slijedi da je

$$\mathbf{z}^\star = (\mathbf{S}_k)^{-1}\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{1} .$$

Na taj način odredili smo prvih k komponenti vektora $\mathbf{z}^\star$,

$$z_i^\star = \frac{u_i^T y}{\sigma_i} , \quad i = 1, \ldots, k ,$$

gdje su $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k$ prvih k stupaca matrice $\mathbf{U}$. Preostalih $n-k$ komponenti $z_{k+1}^\star, \ldots, z_n^\star$ vektora $\mathbf{z}^\star$ biramo tako da rješenje $\mathbf{a}^\star$ ima minimalnu normu. Dakle,

$$\mathbf{a}^\star = \mathbf{Vz}^\star = \sum_{i=1}^{k} \frac{u_i^T y}{\sigma_i} v_i , \quad \|\mathbf{a}^\star\|_2 = \min_{\mathbf{Ja}-\mathbf{y}=\mathbf{r}} \|\mathbf{a}\|_2 ,$$

gdje su $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_k$ prvih k stupaca matrice $\mathbf{V}$. Minimalna vrijednost funkcije F je

$$F(\mathbf{a}^\star) = \frac{1}{2}\|\hat{\mathbf{y}}_\mathbf{2}\|_2^2 = \sum_{i=k+1}^{m} (\mathbf{u}_i^T\mathbf{y})^2 .$$

Algoritam za linearni problem najmanjih kvadrata pomoću dekompozicije na singularne vrijednosti.

ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\quad m \geq n, \quad \text{rang}(\mathbf{A}) = n, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
izlaz: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ koji minimizira $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$
1: izračunaj reduciranu SVD dekompoziciju $\mathbf{A} = \hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{V}}^T$
2: izračunaj $\hat{\mathbf{U}}^T\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$
3: riješi $\hat{\mathbf{S}}\mathbf{y} = \hat{\mathbf{U}}^T\mathbf{b}$
4: vrati $\mathbf{x} = \mathbf{Vy}$

Primjer 3.4. *Kao i u prethodnom primjeru, linearni problem najmanjih kvadrata iz Primjera (3.2) riješit ćemo primjenom dekompozicije na singularne vrijednosti.*

Rješenje. Najprije primjenom nekih matematičkih alata odredimo reduciranu SVD dekompoziciju matrice $\mathbf{A}$.

$$\hat{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} -0.0310 & -0.7447 \\ 0.4716 & 0.5772 \\ 0.8813 & -0.3351 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 16.1671 & 0 \\ 0 & 6.6802 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} 0.6771 & 0.7359 \\ 0.7359 & -0.6771 \end{bmatrix}.$$

Nadalje, računamo vektor $\hat{\mathbf{U}}^T\mathbf{b}$

$$\hat{\mathbf{U}}^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 4.4992 \\ 0.5589 \end{bmatrix}$$

i rješavamo sustav $\hat{\mathbf{S}}\mathbf{y} = \hat{\mathbf{U}}^T\mathbf{b}$, pri čemu dobivamo

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.2783 \\ 0.0837 \end{bmatrix}.$$

Traženi $\mathbf{x}$ računamo kao $\mathbf{x} = \mathbf{V}\mathbf{y}$ te dobivamo

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.25 \\ 0.1481 \end{bmatrix}.$$

3.3.1 Kompresija slike

Pretpostavimo da je rang $\mathbf{A} = k$, gdje je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Dijagonalnu matricu $\mathbf{S}$ iz dekompozicije na singularne vrijednosti matrice $\mathbf{A}$, možemo pisati kao

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{k} \mathbf{S}_i \,,$$

gdje je $\mathbf{S}_i$ dijagonalna matrica koja na mjestu (i,i) ima element σ_i, a sve ostale nule. Zbog toga, dekompoziciju na singularne vijednosti matrice $\mathbf{A}$ možemo pisati kao

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T = \mathbf{U}(\sum_{i=1}^{k} \mathbf{S}_i) = \sum_{i=1}^{k} \mathbf{U}\mathbf{S}_i\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \,.$$

Navedena činjenica može se upotrijebiti u kompresiji slike.

Kompresija slike je postupak sažimanja prilikom kojeg nova slika zauzima manji prostor uz lošiju kvalitetu, ali svi bitni dijelovi i dalje su uočljivi. Kompresiju slike možemo definirati i kao smanjenje broja pixela[1] koji služe za predstavljanje slike, a njena važnost se očituje u uštedi prostora.

Kao testni primjer dajemo rezultate kompresije crno-bijele slike kupole muzeja u Figueresu. Slika je zapisana u obliku matrice veličine 200×200, a provedena je pomoću programa implementiranog u programskom jeziku *MatLab*.

[1]eng. picture element

(a) Original

(b) 5% podataka

(c) 15% podataka

(d) 30% podataka

(e) 50% podataka

(f) 75% podataka

Slika 6: Kompresija slike

Literatura

[1] R.SCITOVSKI, *Numerička matematika*, Odjel za matematiku, Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku, Osijek, 2015.

[2] N.TRUHAR, *Numerička linearna algebra*, Odjel za matematiku, Sveučilište J.J. Strossmayera, Osijek, 2010.

[3] M. UGRICA, *QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije*, Diplomski rad, Osijek, 2013.

[4] S. JELIĆ, T. IVANČEVIĆ, *Primjena SVD rastava matrice u dohvatu informacija i kompresiji slike*, Osiječki matematički list 16, 2016., 49.-65. str