Ivan Slapničar

Metoda najmanjih kvadrata i QR rastav

http://www.fesb.hr/mat2/ls

Sadržaj

Popis slika

1.

PROBLEM NAJMANJIH KVADRATA

U ovom poglavlju dat ćemo kratki uvod u matrični problem najmanjih kvadrata. Metoda najmanjih kvadrata se koristi kod preodređenih sustava $Ax = b$ u slučaju kada imamo više jednadžbi nego nepoznanica i kada sustav nije rješiv po Kronecker-Capellijevom teoremu.

Problem najmanjih kvadrata se često koristi u raznim tehničkim primjenama kao i u ekonomiji (linearna regresija).

1.1 Linearna regresija

Linearnu regresiju ćemo najbolje objasniti na primjeru. Neka je zadano pet točaka u ravnini

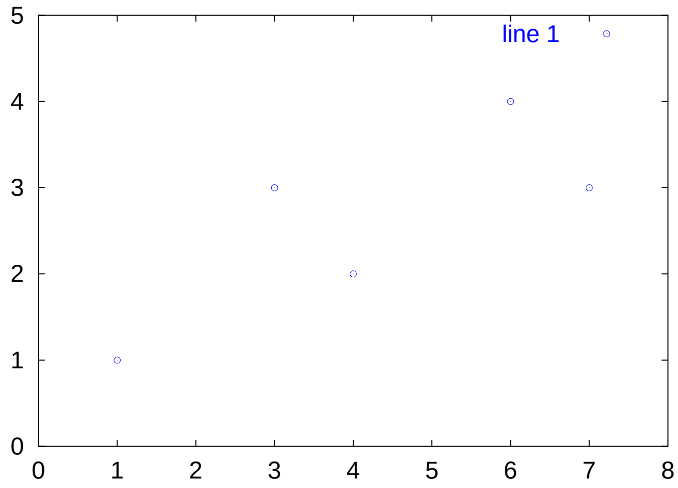
x	1	3	4	6	7
y	1	3	2	4	3

kao na slici 1.1. Ukoliko bi pravac $y = kx + l$ prolazio kroz sve zadane točke, tada bi za svaku točku (x_1, y_i), $i = 1, 2, \ldots, 5$ vrijedilo

$$k\, x_i + l = y_i.$$

U našem slučaju to daje sustav linearnih jednadžbi

$$\begin{aligned} k + l &= 1 \\ 3k + l &= 3 \\ 4k + l &= 2 \\ 6k + l &= 4 \\ 7k + l &= 3. \end{aligned}$$



Slika 1.1: Pet točaka u ravnini

Ovo je sustav s pet jednadžbi i dvije nepoznanice k i l. Matrični oblik sustava glasi

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 6 & 1 \\ 7 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix},$$

odnosno $Ax = b$ gdje je

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 6 & 1 \\ 7 & 1 \end{bmatrix}, \qquad x = \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix}, \qquad b = y = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Ako bi ovaj sustav bio rješiv, tada bi vrijedilo $Ax-b = 0$ odnosno $\|Ax-b\| = 0$. Međutim, zadani sustav očito nije rješiv, pa se postavlja pitanje što možemo napraviti. Prirodan zahtjev je da izraz $Ax - b$ bude što bliži nul-stupcu, odnosno da norma $\|Ax-b\|$ bude što manja moguća. Taj zahtjev matematički zapisujemo kao

$$\|Ax - b\| \to \min .$$

Ako je x rješenje ovog problema, tada je x također i rješenje problema

$$\|Ax - b\|^2 \to \min$$

pa naziv *problem najmanjih kvadrata* slijedi iz definicije norme vektora.

Postupak za rješavanje problema najmanjih kvadrata je u ovom slučaju jednostavan: rješenje x dobit ćemo kao rješenje sustava od dvije jednadžbe i dvije nepoznanice

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

Kako je

$$A^T A = \begin{bmatrix} 111 & 21 \\ 21 & 5 \end{bmatrix}, \qquad A^T b = \begin{bmatrix} 63 \\ 13 \end{bmatrix},$$

rješenje x dobijemo rješavanjem sustava

$$\begin{bmatrix} 111 & 21 \\ 21 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 63 \\ 13 \end{bmatrix}.$$

Ovaj sustav možemo lako rješiti Gaussovom eliminacijom ili, još jednostavnije, Cramerovim pravilom, pa je

$$k = \frac{\begin{vmatrix} 63 & 21 \\ 13 & 5 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 111 & 21 \\ 21 & 5 \end{vmatrix}} = \frac{42}{114}, \qquad l = \frac{\begin{vmatrix} 111 & 63 \\ 21 & 13 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 111 & 21 \\ 21 & 5 \end{vmatrix}} = \frac{120}{114}.$$

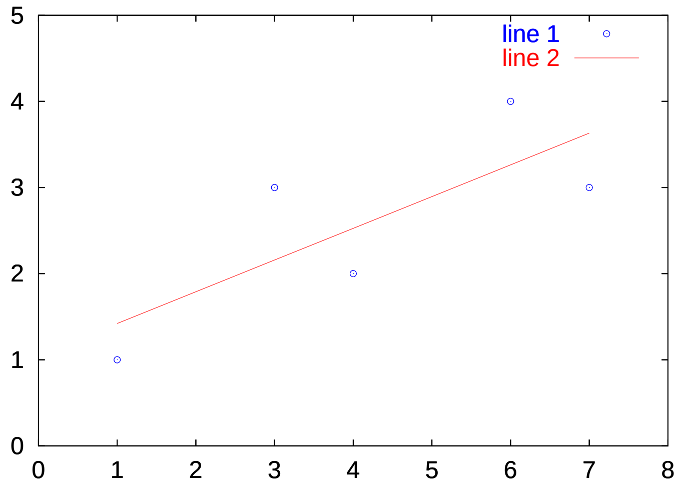
Geometrijska interpretacija rješenja je slijedeća (slika 1.2): pravac $y = kx+l$ "najbolje" prolazi točkama (x_i, y_i), $i = 1, 2, \ldots, 5$ i smislu da je suma kvadrata udaljenosti između zadanih točaka (x_i, y_i) i točaka na pravcu (x_i, kx_i+l) minimalna. Drugim riječima,

$$\sum_{i=1}^{5} [y_i - (kx_i + l)]^2 \to \min.$$

Napomena 1.1 Ravninski problem najmanjih kvadrata zove se *linearna regresija*, a pravac $y = kx + l$ zove se *regresijski pravac.*

Rješenje prethodnog problem i slike 1.1 i 1.2 mogu se dobiti pomoću slijedećeg Matlab (Octave) programa

```
x=[1 3 4 6 7]
y=[1 3 2 4 3]
plot(x,y,"b*")
A=[x' ones(5,1)]
b=y'
xLS=(A'*A)\(A'*b)
```



Slika 1.2: Rješenje problema najmanjih kvadrata

```
k=xLS(1)
l=xLS(2)
yLS=k*x+l
plot(x,y,'b*',x,yLS,'r')
```

U Matlabovoj sintaksi `A'` je transponirana matrica matrice A, `ones(5,1)` je vektor dimenzije 5×1 sa svim elementima jednakim 1, dok izraz oblika `x=A\b` daje rješenje sustava $Ax = b$. Štoviše, u slučaju preodređenog sustava kao u našem primjeru, Matlabova naredba `xLS=A\b` će automatski dati rješenje problema najmanjih kvadrata. Zamijenite liniju `xLS=(A'*A)\(A'*b)` s `xLS=A\b` i uvjerite se da su rješenja ista!

Zadatak 1.1 Prema podacima Državnog zavoda za statistiku (`http://www.dzs.hr`) prosječna bruto plaća u listopadu kroz protekle tri godine bila je slijedeća

Listopad	2000	2001	2002
Prosječna bruto plaća (kn)	4921	5051	5447

Izračunajte i nacrtajte regresijski pravac i predvidite kolika će biti bruto plaća u listopadu 2003. Rješenje provjerite pomoću Matlaba ili programa Octave On-line.

Zadatak 1.2 Kroz točke

x	-1	1	2	3	5
y	1	0	1	2	3

provucite najbolji pravac u smislu najmanjih kvadrata. Nacrtajte zadane točke i dobiveni pravac te provjerite rješenje pomoću Matlaba ili programa Octave On-line.

1.2 Metoda najmanjih kvadrata

Postupak iz prethodnog poglavlja primjenjiv je i na višedimenzionalne probleme. U ovom poglavlju pokazat ćemo da je postupak primjenjiv uvijek kada matrica sustava A ima linearno nezavisne stupce te je u tom slučaju rješenje problema najmanjih kvadrata jedinstveno.

Neka je zadan preodređeni sustav $Ax = b$ od m jednadžbi s n nepoznanica, pri čemu je $m > n$. Kako za normu vektora x vrijedi $\|x\|^2 = x^T x$, problem najmanjih kvadrata

$$\|Ax - b\|^2 \to \min$$

možemo zapisati kao

$$(Ax - b)^T (Ax - b) \to \min .$$

Uvedimo oznaku

$$\begin{aligned} Q(x) &= \|Ax - b\|^2 = (Ax - b)^T (Ax - b) \\ &= x^T A^T A x - b^t A x - x^t A^t b + b^T b \\ &= x^T B x - 2x^T c + \beta \end{aligned} \tag{1.1}$$

gdje je

$$B = A^T A, \qquad c = A^T b, \qquad \beta = \|b\|^2.$$

Ideju za postupak rješavanja daje nam jednodimenzionalni slučaj: ako su x, B, c i β realni brojevi, tada je $Q(x) = Bx^2 - 2xc + \beta$ kvadratna parabola čiji se minimum nalazi u točki

$$x = \frac{c}{B}.$$

U višedimenzionalnom slučaju tome odgovara

$$x = B^{-1} c$$

pa je x rješenje sustava

$$Bx = c,$$

odnosno

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

Ova jednadžba zove se *normalna jednadžba*. Dokažimo sada da ovaj intuitivni postupak zaista daje rješenje.

Teorem 1.1 *Neka su stupci matrice A linearno nezavisni, odnosno* $\mathrm{rang}(A) = n$. *Tada je rješenje x problema najmanjih kvadrata $Q(x) \to \min$ ujedno i jedinstveno rješenje normalne jednadžbe $A^T Ax = A^T b$.*

Dokaz. Neka je y bilo koji n-dimenzionalni vektor i neka je $h = y - x$. Tada je prema (1.1)

$$\begin{aligned} Q(y) &= y^T By - 2y^T c + \beta \\ &= (x+h)^T B(x+h) - 2(x+h)^T c + \beta \\ &= x^T Bx + h^T Bx + x^T Bh + h^T Bh - 2x^T c - 2h^T c + \beta. \end{aligned}$$

Kako je $Bx = c$, to je

$$h^T Bx = h^T c,$$

a kako se radi o matricama dimenzije 1, to je zbog $B^T = (A^T A)^T = B$ i

$$x^T Bh = (x^T Bh)^T = h^T B^T x = h^T Bx = h^T c.$$

Uvrštavanje u $Q(y)$ daje

$$Q(y) = x^T Bx + h^T Bh - 2x^T c + \beta = Q(x) + h^T Bh.$$

Izraz $h^T Bh$ je veći ili jednak od nule:

$$h^T Bh = h^T A^T Ah = (Ah)^T Ah = \|Ah\|^2.$$

Dakle, uvijek je

$$Q(y) \geq Q(x),$$

odnosno vrijednost $Q(x)$ je zaista najmanja moguća.

Dokažimo sada da je rješenje x jedinstveno. Ako je

$$Q(y) = Q(x), \qquad x \neq y,$$

tada je $\|Ah\| = 0$. No, tada je i $Ah = 0$ (samo nul-vektor ima normu jednaku nula), što zajedno s $h = y - x \neq 0$ znači da su stupci matrice A linearno zavisni. To je kontradikcija pa je teorem dokazan. ∎

Primjetimo da su vektori Ax i $Ax - b$ međusobno okomiti:

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

Geometrijski to znači da je vektor Ax ortogonalna projekcija vektora b na skup $\{Ay : \ y \text{ proizvoljan}\}$. Nadalje, vektori Ax, b i $Ax - b$ tvore pravokutni trokut s hipotenuzom b.

Rješenje problema najmanjih kvadrata x zove se još i *kvadratična prilagodba* sustavu $Ax = b$ u smislu najmanjih kvadrata. Kvalitetu prilagodbe mjerimo s

$$q = \sqrt{\frac{Q(x)}{(Q(0)}} = \frac{\|Ax - b\|}{\|b\|}.$$

Iz činjenice da je b hipotenuza pravokutnog trokuta sa stranicama Ax, $Ax - b$ i b slijedi da je q uvijek je između 0 i 1. Ukoliko je $q = 0$ tada je prilagodba najbolja moguća, odnosno x je točno rješenje suatava $Ax = b$. Ukoliko je q mali, prilagodba je dobra, a ukoliko je q blizu jedan, prilagodba je loša.

Primjer 1.1 Riješimo sustav

$$\begin{aligned} x + y &= 0 \\ y + z &= 1 \\ x + z &= 0 \\ -x + y + z &= 1 \\ -x - z &= 0 \end{aligned}$$

u smislu najmanjih kvadrata. U matričnom obliku sustav glasi

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Normalna jednadžba glasi

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

pa je rješenje dano s

$$x = -\frac{10}{29}, \qquad y = \frac{12}{29}, \qquad z = \frac{11}{29}.$$

Kvaliteta prilagodbe je

$$q = 0.1857$$

Odgovarajući Matlab program glasi

```
A = [1 1 0;
     0 1 1;
     1 0 1;
    -1 1 1;
    -1 0 -1]
b=[0 1 0 1 0]'
B=A'*A
c=A'*b
x=B\c
% ili krace x=A\b
q=norm(A*x-b)/norm(b)
```

Primjer 1.2 Kroz točke

x	1	2	4	5	6
y	0	1	4	8	14

provucimo kvadratnu parabolu

$$y = ax^2 + bx + c$$

koja ima najbolju kvadratičnu prilagodbu. Dakle, moramo naći koeficijente parabole tako da je

$$\sum_{i=1}^{5} (y_i - axi^2 - bx_i - c)^2 \to \min .$$

Ovaj problem možemo zapisati kao problem najmanjih kvadrata

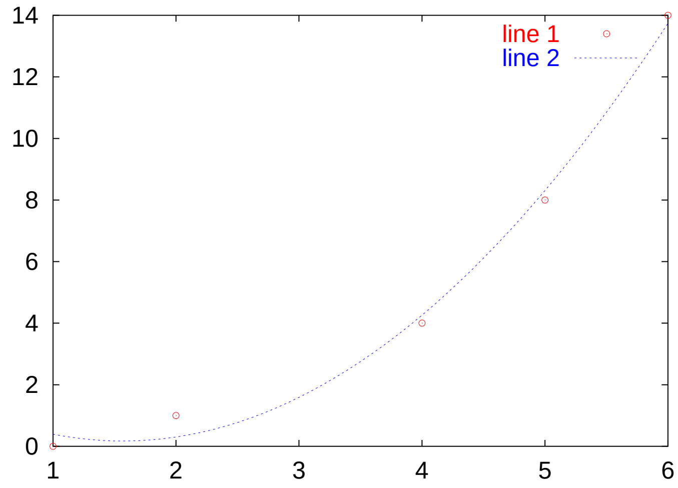
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \\ 36 & 6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 8 \\ 14 \end{bmatrix} .$$

Rješavanje normalne jednadžbe daje

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.68994 \\ -2.16071 \\ 1.86364 \end{bmatrix} ,$$

a kvaliteta prilagodbe iznosi $q = 0.0562$. Zadane točke i dobivena parabola prikazane su na slici 1.3.

Parabola i slike mogu se dobiti slijedećim Matlab programom



Slika 1.3: Parabola s najboljom prilagodbom

```
A = [1 1 1
     4 2 1
    16 4 1
    25 5 1
    36 6 1]
y = [0 1 4 8 14]'
% rjesenje
xLS=A\y
% kvaliteta prilagodbe
q=norm(A*xLS-y)/norm(y)
% slike
x=[1 2 4 5 6]'
plot(x,y,'r*')
hold
% gusca mreza radi bolje slike parabole
x1=1:0.1:6
y1=xLS(1)*x1.^2+xLS(2)*x1+xLS(3)
plot(x1,y1,'b')
```

Napomena 1.2 Vidimo da je puni stupčani rang matrice A nužan za funkcioniranje metode normalnih jednadžbi jer bi u protivnom matrica $B = A^T A$ bila singularna. Ukoliko matrica A nema puni stupčani rang tada rješenje problema najmanjih kvadrata nije jedinstveno i za rješavanje problema ne može se koristiti normalna jednadžbe. U tom slučaju od svih mogućih (beskonačno) rješenja, zanima nas ono koje samo po sebi ima najmanju normu. Za rješavanje takvih problema koristimo ili *QR rastav* s pivotiranjem po stupcima ili *rastav singularnih vrijednosti* (*SVD* ili *singular value decomposition*). Nadalje, ove dvije metode je zbog njihovih svojstava (numeričke stabilnosti) poželjno koristiti i kada su stupci matrice A gotovo linearno zavisni. Detaljna analiza ovih slučajeva izlazi izvan okvira kolegija, pa je izostavljamo.

2.

QR RASTAV

U ovom poglavlju dat ćemo definiciju QR rastava (QR dekompozicije) te njegova osnovna svojstva i opisati primjenu na rješavanje problema najmanjih kvadrata. Slično kao u prethodnom poglavlju, ograničit ćemo se na slučaj kada je zadana matrica A tipa $m \times n$, gdje je $m \geq n$. QR rastav je također podloga za metode koje računaju svojstvene vrijednosti i vektore.

Definicija 2.1 Neka je A tipa $m \times n$, $m \geq n$. *QR rastav* matrice a glasi

$$A = QR,$$

pri čemu je Q *ortogonalna* matrica dimenzije $m \times m$, odnosno

$$Q^T Q = QQ^T = I,$$

a R je $m \times n$ gornje trokutasta matrica.

Ako je, na primjer, matrica A tipa 5×3, tada rastav $A = QR$ možemo shematski prikazati na sljedeći način:

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

Korištenje QR rastava za rješavanje problema najmanjih kvadrata temelji se na slijedećem važnom svojstvu ortogonalne matrice: za svaki vektor x dimenzije $m \times 1$ vrijedi

$$\|x\| = \|Qx\|. \tag{2.2}$$

Zaista,

$$\|Qx\|^2 = (Qx)^T Qx = x^T Q^T Qx = x^T x = \|x\|^2.$$

Slično je i $\|Q^T x\| = \|x\|$.

Osnovna svojstava QR rastava su slijedeća:

QR1. QR rastav je jedinstven do na predznake stupaca matrice Q i predznake redaka matrice R.

Neka je J dijagonalna matrica reda m s dijagonalnim elementima $J_{ii} \in \{-1, 1\}$. Matrica J je očito simetrična i ortogonalna. Ako je $\bar{Q} = QJ$ i $\bar{R} = JR$, tada je

$$\bar{Q}\bar{R} = QJJR = QR = A$$

također QR rastav matrice A.

QR2. Vrijedi $\mathrm{rang}(A) = \mathrm{rang}(R)$.

Ovo svojstvo slijedi iz teorema [M1 2.11].

QR3. Posebno, ako je $\mathrm{rang}\, A = n$, tada su zbog svojstva QR2. svi dijagonalni elementi matrice R različiti od nule,

$$r_{ii} \neq 0, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Zadatak 2.1 Matlabova naredba za računanje QR rastava matrice A glasi `[Q,R]=qr(A)`. Izračunajte QR rastav matrice A iz primjera 1.2 te provjerite da ja zaista $A - QR = 0$ te da je matrica Q ortogonalna.

2.1 QR rastav vektora i Householderov reflektor

U ovom i sljedećem poglavlju opisat ćemo detalje QR algoritma.

Neka je zadan m-dimenzionalni vektor

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

i neka je

$$x = Qr$$

njegov QR rastav. Tada je zbog svojstva (2.2) $\|r\| = \|x\|$ pa vrijedi

$$r = \begin{bmatrix} \|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{ili} \quad r = \begin{bmatrix} -\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Nalaženje matrice Q je složenije. U ovom slučaju matrica Q jednaka je *Householderovom reflektoru*. Householderov reflektor je simetrična matrica definirana s

$$H = I - \frac{2}{v^T v} v v^T, \qquad v = \begin{bmatrix} x_1 \pm \|x\| \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}. \tag{2.3}$$

Uvrštavanjem se može provjeriti da za ovaj izbor matrice H vrijedi

$$Hx = r = \begin{bmatrix} \mp\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Ortogonalnosti i simetričnosti matrice H povlači

$$x = H^T(Hx) = H^T r = Hr$$

pa smo dobili QR rastav vektora x.

Primjer 2.1 Ako je $x = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix}^T$, tada je $\|x\| = 6$,

$$v = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad H = \frac{1}{54} \begin{bmatrix} -27 & -9 & -45 & -9 \\ -9 & 53 & -5 & -1 \\ -45 & -5 & 29 & -5 \\ -9 & -1 & -5 & 53 \end{bmatrix}, \quad Hx = \begin{bmatrix} -6 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Napomena 2.1 U prethodnom primjeru uzeli smo da je $v_1 = x_1 + \|x\|$. U praksi se često zbog numeričke stabilnosti (izbjegavanje oduzimanja) uzima

$$v_1 = x_1 + \operatorname{sign}(x_1)\|x\|.$$

2.2 QR rastav matrice

QR rastave matrice nalazimo rekurzivnom primjenom QR rastava vektora. Postupak ćemo ilustrirati na matrici tipa 5×3. Neka je a_1 prvi stupac matrice $A \equiv A$ i neka je

$$H_1 a_1 = \begin{bmatrix} \pm\|a_1\| \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

QR rastav vektora a_1 izračunat prema postupku opisanom uz prethodnom poglavlju. Stavimo $Q_1 = H_1$. Tada je (matrica Q_1 je simetrična)

$$Q_1 A = \left[\begin{array}{c|cc} \pm\|a_1\| & \times & \times \\ \hline 0 & & \\ 0 & \multicolumn{2}{c}{A_2} \\ 0 & & \\ 0 & & \end{array}\right].$$

Neka je a_2 prvi stupac matrice A_2 koja je tipa 4×2 i neka je

$$H_2 a_2 = \begin{bmatrix} \pm\|a_2\| \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

QR rastav vektora a_2. Stavimo

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_2 \end{bmatrix}.$$

Tada je

$$Q_2 Q_1 A = \left[\begin{array}{cc|c} \pm\|a_1\| & \times & \times \\ 0 & \pm\|a_2\| & \times \\ \hline 0 & 0 & \\ 0 & 0 & A_3 \\ 0 & 0 & \end{array}\right]$$

pri čemu je matrica A_3 tipa 3×1. Konačno, neka je $a_3 = A_3$ i neka je

$$H_3 a_3 = \begin{bmatrix} \pm\|a_3\| \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

QR rastav matrice (vektora) a_3. Stavimo

$$Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & H_3 \end{bmatrix}.$$

Tada je

$$Q_3Q_2Q_1A = \begin{bmatrix} \pm\|a_1\| & \times & \times \\ 0 & \pm\|a_2\| & \times \\ 0 & 0 & \pm\|a_3\| \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = R.$$

Zbog ortogonalnosti i simetričnosti matrica Q_i, $i = 1, 2, 3$, za matricu $Q = Q_1Q_2Q_3$ vrijedi

$$QQ_3Q_2Q_1A = A = QR$$

pa sam tako dobili QR rastav matrice A.

Ovaj postupak se lako može poopćiti na matricu bilo koje dimenzije.

2.3 Numeričko računanje QR rastava

Za formiranje Householderove matrice H potrebno je $O(n^2)$ računskih operacija. Za množenje nekog vektora x Householderovom matricom također je potrebno $O(n^2)$ računskih operacija. No, umnožak Hx može se izračunati i bez formiranja matrice H:

$$Hx = \left(I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}\right) x = x - v\frac{2(v^Tx)}{v^Tv}.$$

Za računanje produkta pomoću druge jednakosti potrebno je samo $O(6n)$ računskih operacija. Slično, produkt HA se u praksi računa pomoću formula:

$$\begin{aligned} \beta &= -\frac{2}{v^Tv}, \\ w &= \beta A^T v \\ HA &= A + vw^T. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Koristeći prethodna poboljšanja možemo napisati potprograme za računanje QR rastava. Prvi potprogram računa vektor v iz zadanog vektora x prema formuli (2.3) i napomeni 2.1:

```
function v=House(x)
% racuna Householderov vektor v iz vektora x
```

```
sig=sign(x(1)); if sig==0, sig=1; end
v=x;
v(1)=v(1)+sig*norm(v);
end
```

Slijedeći potprogram računa umnožak HA bez formiranja matrice H prema formulama (2.4):

```
function B=mnozi_House(v,A)
% racuna produkt HA=(I-2*v*v'/(v'*v))*A
% bez formiranja matrice H
beta=-2/(v'*v);
w=beta*A'*v;
B=A+v*w';
end
```

Konačno, slijedeći program računa QR rastav matrice A oprema postupku opisanom u prethodnom poglavlju:

```
function [Q,R]=moj_QR(A)
% QR rastav A=Q*R. A je m x n i mora biti rank(A)n.
[m,n]=size(A);
Q=eye(m);
for i=1:min(m-1,n)
   v=House(A(i:m,i));
   A(i:m,i:n)=mnozi_House(v, A(i:m,i:n));
   Q(i:m,:)=mnozi_House(v, Q(i:m,:));
end
R=A;
Q=Q';
end
```

Zadatak 2.2 Izračunajte QR rastav matrice A iz primjera 1.2 pomoću prethodnih potprograma i usporedite rješenje s onim koje daje Matlabova naredba `[Q,R]=qr(A)`.

2.4 Rješavanje problema najmanjih kvadrata pomoću QR rastava

Koristeći svojstvo ortogonalne matrice Q da je $\|Qx\| = \|x\|$ možemo lako riješiti problem najmanjih kvadrata. Neka je A matrica tipa $m \times n$, $m > n$, neka je rang $A = n$ i neka je $A = QR$ rastav matrice A. Tada je

$$\|Ax - b\|^2 = \|QRx - QQ^T b\|^2 = \|Q(Rx - Q^T b)\|^2 = \|Rx - Q^T b\|^2.$$

Matricu R možemo zapisati kao

$$R = \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{2.5}$$

gdje je R_0 gornje trokutasta kvadratna matrica reda n, a vektor $Q^T b$ možemo zapisati kao

$$Q^T b = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix},$$

gdje je c dimenzije $n \times 1$ i d dimenzije $(m-n) \times 1$. Sada imamo

$$\|Ax - b\|^2 = \|Rx - Q^T b\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} R_0 x - c \\ -d \end{bmatrix} \right\|^2 = \|R_0 x - c\|^2 + \|d\|^2.$$

Kako je rang $A = n$, iz svojstva QR3. zaključujemo da trokutasti sustav $R_0 x = c$ ima jedinstveno rješenje x za koje je $\|R_0 x - c\| = 0$. Kako d ne ovisi o x vrijednost $\|Ax - b\|$ se ne može više smanjiti pa je x upravo (jedinstveno) rješenje problema najmanjih kvadrata. Očito je

$$\min_x \|Ax - b\| = \|d\|.$$

Slijedeći Matlab potprogram rješava problem najmanjih kvadrata pomoću QR rastava:

```
function x=LS(A,b)
% Rjesava problem najmanjih kvadrata || Ax-b || --> min
% za matricu punog stupcanog ranga A koristeci QR rastav.
[m,n]=size(A);
[Q,R]=moj_QR(A);
b1=Q'*b;
c=b1(1:n);
x=R(1:n,1:n)\c;
end
```

Zadatak 2.3 Riješite problem najmanjih kvadrata iz primjera 1.2 pomoću prethodnog potprograma i usporedite rješenje s rješenjima dobivenim korištenjem normalne jednadžbe i Matlabove naredbe `x=A\b`.

Napomena 2.2 Vidjeli smo da problem najmanjih kvadrata možemo rješavati na dva načina: pomoću normalne jednadžbe i pomoću QR rastava. Rješavanje problema najmanjih kvadarata pomoću QR rastava je otprilike dva puta sporije ali zato ima bolja numerička svojstva odnosno u određenim situacijama daje točnije rješenje.

2.5 Ekonomični QR rastav

Iz prikaza (2.1) vidimo da zadnjih $m-n$ stupaca matrice Q ne sudjeluje kod računanja produkta QR jer se množe s nulom. Stoga QR rastav $A = QR$ možemo u ekonomičnom obliku zapisati kao

$$A = Q_0 R_0,$$

gdje su stupci matrice Q_0 prvih n stupaca matrice Q, a matrica R_0 je definirana s (2.5). Za matricu Q_0 vrijedi

$$Q_0^T Q_0 = I_n,$$

ali

$$Q_0 Q_0^T \neq I_m.$$

Važno je napomenuti da stupci matrice Q_0 tvore ortogonalnu bazu potprostora razapetog stupcima matrice A. Analogno prikazu (2.1), ekonomični QR rastav matrice dimenzije 5×3 možemo shematski prikazati na sljedeći način:

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

Zadatak 2.4 Matlabova naredba `[Q,R]=qr(A,0)` daje ekonomični QR rastav matrice A. Usporedite "obični" i ekonomični QR rastav matrice A iz prethodnog zadatka.

2.6 QR rastav s pivotiranjem po stupcima

U nekim primjenama kao rješavanje problema najmanjih kvadrata kada matrica A nema puni rang, $\operatorname{rang} A < n$, koristi se QR rastav s pivotiranjem stupaca. QR rastav s pivotiranjem matrice A glasi

$$AP = QR,$$

gdje je P matrica permutacija odabrana tako da su dijagonalni elementi matrice R složeni padajući po apsolutnim vrijednostima,

$$|r_{ii}| \geq |r_{i+1,i+1}|.$$

Matlab naredba za QR rastav s pivotiranjem matrice A glasi `[Q,R,P]=qr(A)`.

Zadatak 2.5 Izračunajte QR rastav matrice

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}$$

bez pivotiranja i s pivotiranjem i provjerite da je u drugom slučaju zaista $AP - QR = 0$.