

Appunti di Calcolo Numerico

Capitolo 4

Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

Maurizio Ciampa

Dipartimento di Matematica - Università di Pisa

Gli esercizi contrassegnati dal simbolo ★ sono leggermente più astratti rispetto agli altri. Quelli contrassegnati dal simbolo ♠ richiedono direttamente, o comunque riguardano, l'uso del calcolatore. A chi legge si raccomanda di riprodurre al calcolatore i “dialoghi” con *Scilab* proposti e di prendere spunto da essi per crearne di nuovi (per ottenere *Scilab* visitare la pagina <https://www.scilab.org/>).

4 Approssimazione nel senso dei minimi quadrati

In questo Capitolo si affrontano due problemi che richiedono di determinare un vettore che rende *minimo* il valore di una *somma di quadrati*: il problema di determinare la soluzione di un sistema di equazioni lineari *nel senso dei minimi quadrati* ed il problema di determinare la funzione che meglio approssima dati assegnati *nel senso dei minimi quadrati*.

4.1 Definizione (Soluzione di un sistema nel senso dei minimi quadrati)

Siano $A \in \mathbb{R}^{n \times k}$ e $b \in \mathbb{R}^n$. Un vettore $x^* \in \mathbb{R}^k$ è una *soluzione del sistema* $Ax = b$ *nel senso dei minimi quadrati* se verifica una delle tre proprietà *equivalenti*:

(A) Per ogni $y \in \mathbb{R}^k$ si ha: $\|Ax^* - b\|_2 \leq \|Ay - b\|_2$;

(B) Per ogni $y \in \mathbb{R}^k$ si ha: $\|Ax^* - b\|_2^2 \leq \|Ay - b\|_2^2$;

(C) Il vettore x^* è un *minimo assoluto* della funzione $n : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$, *norma del residuo*, definita da:

$$n(x) = \|Ax - b\|_2$$

Si osservi che se x^* è soluzione di $Ax = b$ allora è anche soluzione di $Ax = b$ *nel senso dei minimi quadrati*. Infatti: $n(x^*) = 0$ e per ogni $x \in \mathbb{R}^k$ si ha $n(x) \geq 0$.

4.2 Definizione (Funzione che meglio approssima dati assegnati nel senso dei minimi quadrati)

Siano I un intervallo non degenere, F un sottospazio vettoriale *di dimensione finita* dello spazio delle funzioni continue da I in \mathbb{R} , x_0, \dots, x_k numeri reali in I e y_0, \dots, y_k numeri reali. Un elemento f^* di F è una *funzione che meglio approssima i dati* $(x_0, y_0), \dots, (x_k, y_k)$ *nel senso dei minimi quadrati* se: Per ogni $f \in F$ si ha:

$$(f^*(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f^*(x_k) - y_k)^2 \leq (f(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f(x_k) - y_k)^2$$

ovvero se f^* è un *minimo assoluto* della funzione $SQ : F \rightarrow \mathbb{R}$, *scarto quadratico*, definita da:

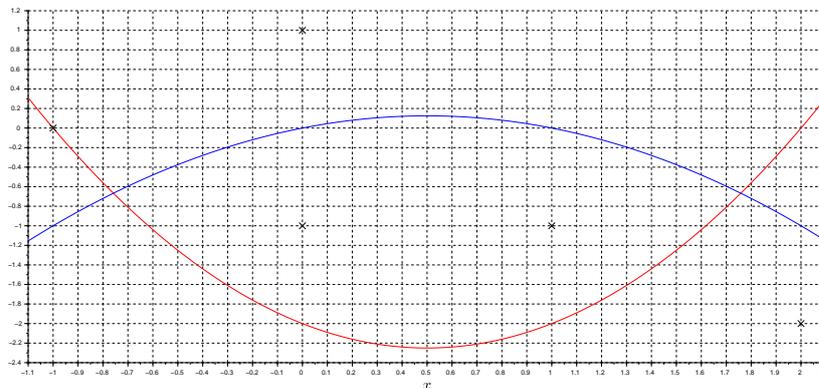
$$SQ(f) = (f(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f(x_k) - y_k)^2$$

Interpretando i dati come coordinate di punti in un piano cartesiano, lo scarto quadratico ha un semplice *significato geometrico*. Il valore $SQ(f)$ è somma di $k + 1$ addendi. Il j -esimo addendo è il quadrato della lunghezza del segmento individuato, sulla retta verticale di ascissa x_j , dal valore $f(x_j)$ e dall'ordinata del j -esimo dato y_j . Il valore $SQ(f)$ è *una misura dello scostamento del grafico di $f(x)$ dai dati*.

Si osservi che, contrariamente a quanto richiesto nei problemi di interpolazione, i numeri reali x_0, \dots, x_k *non* devono necessariamente essere distinti.

Esercizi

E1 Nella figura seguente sono rappresentati i dati (\times), il grafico della funzione f (in rosso) e quello della funzione g (in blu). Determinare $SQ(f)$, $SQ(g)$ e decidere quale funzione tra f e g meglio approssima i dati nel senso dei minimi quadrati.



E2 ★ Dimostrare che $SQ(f) = 0$ se e solo se f interpola i dati.

4.1 Migliore approssimazione in spazi con prodotto scalare

Alla ricerca delle soluzioni di un sistema nel senso dei minimi quadrati e delle funzioni che meglio approssimano i dati nel senso dei minimi quadrati premettiamo la nozione di migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare e la sua ricerca.

Sia V uno spazio vettoriale su \mathbb{R} con *prodotto scalare*. Indicato con $a \cdot b$ il prodotto scalare di a e b , si indica con $\|a\|$ la norma di a indotta dal prodotto scalare:

$$\|a\| = \sqrt{a \cdot a}$$

Siano poi W un sottospazio vettoriale di V di *dimensione finita* e v un elemento di V .

4.3 Definizione (Migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare)

Un elemento w^* di W è una *migliore approssimazione di v in W* se verifica una delle due proprietà *equivalenti*:

(A) Per ogni $w \in W$ si ha: $\|v - w^*\| \leq \|v - w\|$;

(B) Il vettore w^* è un *minimo assoluto* della funzione $d: W \rightarrow \mathbb{R}$, *distanza da v* , definita da:

$$d(w) = \|v - w\|$$

Come vedremo, la nozione di migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare è strettamente connessa a quella di *proiezione ortogonale*:

4.4 Definizione (Proiezione ortogonale)

Un elemento w^* di W è *proiezione ortogonale di v su W* se il vettore $v - w^*$ è ortogonale a W , ovvero se:

$$\text{Per ogni } w \in W \text{ si ha: } (v - w^*) \cdot w = 0 \quad (*)$$

Sia w_1, \dots, w_j un insieme di *generatori* di W . La condizione $(*)$ è *equivalente* a:

$$(v - w^*) \cdot w_i = 0 \quad i = 1, \dots, j$$

Allora una combinazione lineare $a_1 w_1 + \dots + a_j w_j$ è proiezione ortogonale di v su W se e solo se per $i = 1, \dots, j$ si ha: $(v - (a_1 w_1 + \dots + a_j w_j)) \cdot w_i = 0$, ovvero se e solo se:

$$\begin{aligned} v \cdot w_1 &= (a_1 w_1 + \dots + a_j w_j) \cdot w_1 = a_1 (w_1 \cdot w_1) + \dots + a_j (w_j \cdot w_1) \\ &\vdots \\ v \cdot w_j &= (a_1 w_1 + \dots + a_j w_j) \cdot w_j = a_1 (w_1 \cdot w_j) + \dots + a_j (w_j \cdot w_j) \end{aligned} \quad (**)$$

Posto:

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_j \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} w_1 \cdot w_1 & \dots & w_j \cdot w_1 \\ \vdots & & \vdots \\ w_1 \cdot w_j & \dots & w_j \cdot w_j \end{bmatrix}, \quad c = \begin{bmatrix} v \cdot w_1 \\ \vdots \\ v \cdot w_j \end{bmatrix}$$

la condizione $(**)$ si riformula: *una combinazione lineare $a_1 w_1 + \dots + a_j w_j$ è proiezione ortogonale di v su W se e solo se la colonna a è soluzione del sistema $Fx = c$ delle equazioni normali.*

4.5 Teorema (di esistenza ed unicità della proiezione ortogonale)

Esiste un solo elemento di W proiezione ortogonale di v su W .

Dimostrazione. Sia w_1, \dots, w_r una *base ortonormale* di W (sicuramente esistente...). Allora la matrice F del sistema delle equazioni normali è la matrice identica ed il sistema ha una sola soluzione:

$$a = \begin{bmatrix} v \cdot w_1 \\ \vdots \\ v \cdot w_r \end{bmatrix}$$

L'unico elemento di W proiezione ortogonale di v su W è:

$$w^* = v \cdot w_1 w_1 + \cdots + v \cdot w_r w_r$$

Si osservi che il Teorema appena dimostrato prova che *le equazioni normali $Fx = c$ hanno sempre almeno una soluzione*. Infatti: *le componenti di ciascuna soluzione delle equazioni normali sono coordinate, rispetto ai generatori di W , della proiezione ortogonale*. L'esistenza della proiezione ortogonale w^* garantisce l'esistenza di almeno una combinazione lineare dei generatori di W tale che $a_1 w_1 + \cdots + a_j w_j = w^*$. Inoltre, se w_1, \dots, w_j sono generatori *linearmente dipendenti* (e quindi *non* una base) di W allora esistono *infinite* combinazioni lineari che generano lo stesso elemento w^* . In tal caso *il sistema $Fx = c$ ha infinite soluzioni* (in particolare: la matrice F non è invertibile). Se, invece, gli elementi sono generatori *linearmente indipendenti* (e quindi *una base*) di W allora esiste *una sola* combinazione lineare che genera l'elemento w^* . In tal caso *il sistema $Fx = c$ ha una sola soluzione* (in particolare: la matrice F è invertibile).

4.6 Teorema (di esistenza ed unicità della migliore approssimazione)

La proiezione ortogonale w^* di v su W è l'*unica* migliore approssimazione di v in W , ovvero: w^* è l'*elemento di W più vicino a v* .

Dimostrazione. Per ogni $w \in W$ si ha:

$$\|v - w\|^2 = \|(v - w^*) + (w^* - w)\|^2$$

Il primo addendo, per definizione, è ortogonale a W ed il secondo è un elemento di W . Allora, per il Teorema di Pitagora:

$$\|(v - w^*) + (w^* - w)\|^2 = \|v - w^*\|^2 + \|w^* - w\|^2$$

e quindi:

$$\|v - w\|^2 = \|v - w^*\|^2 + \|w^* - w\|^2$$

Poiché $\|w^* - w\|^2 \geq 0$ e si ha $\|w^* - w\|^2 = 0$ se e solo se $w = w^*$, allora:

- (a) $\|v - w\|^2 \geq \|v - w^*\|^2$ ovvero $\|v - w\| \geq \|v - w^*\|$: w^* è una migliore approssimazione;
- (b) $\|v - w\|^2 = \|v - w^*\|^2$, ovvero $\|v - w\| = \|v - w^*\|$, se e solo se $w = w^*$: w^* è l'*unica* migliore approssimazione.

4.7 Esercizio

(1) Siano $V = \mathbb{R}^4$ con prodotto scalare canonico,

$$W = \text{span} \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \quad \text{e} \quad v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Determinare la migliore approssimazione di v in W .

Soluzione: Occorre determinare la proiezione ortogonale w^* di v su W . Poiché si ha *un solo* generatore di W , le equazioni normali si riducono ad *una* equazione in *una* incognita. Si ha:

$$F = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 2 \quad , \quad c = v \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 1$$

e le equazioni normali sono: $2x = 1$. Si ottiene l'unica soluzione $a = \frac{1}{2}$ da cui:

$$w^* = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Per il Teorema di esistenza ed unicità della migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare, la migliore approssimazione di v in W è w^* .

(2) Siano $V = \mathbb{R}^4$ con prodotto scalare canonico,

$$W = \text{span} \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \quad \text{e} \quad v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Determinare la migliore approssimazione di v in W .

Soluzione: Come nel caso precedente, occorre determinare la proiezione ortogonale w^* di v su W . Poiché si hanno *due* generatori di W , le equazioni normali sono un sistema di *due* equazioni in *due* incognite. Poiché i generatori sono *dipendenti*, il sistema ha *infinite* soluzioni. Si ha:

$$F = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix}, \quad c = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

e le equazioni normali sono: $Fx = c$. L'insieme delle soluzioni è:

$$S = \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \lambda \in \mathbb{R} \right\}$$

Tutti gli elementi di S individuano lo *stesso* elemento di W :

$$\left(\frac{1}{2} + 2\lambda\right) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = w^*$$

Si ottiene, come giusto, *lo stesso elemento di W* ottenuto nel punto precedente. Per il Teorema di esistenza ed unicità della migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare, la migliore approssimazione di v in W è w^* .

(3) Siano $I = [0, 2\pi]$ e $V = C(I)$ con prodotto scalare definito da:

$$f \cdot g = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t)g(t) dt$$

Siano infine:

$$W = \text{span} \{ 1, \cos t, \sin t \} \quad \text{e} \quad v = t^2$$

Determinare la migliore approssimazione di v in W .

Soluzione: Come nel caso precedente, occorre determinare la proiezione ortogonale w^* di v su W . Si osservi che in questo esempio lo spazio vettoriale V ha *dimensione infinita*. Poiché si hanno *tre* generatori di W , le equazioni normali sono un sistema di *tre* equazioni in *tre* incognite. Poiché i generatori sono *indipendenti*, il sistema ha *una* soluzione. Si ha:

$$\begin{array}{lll} 1 \cdot 1 = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} dt = 2 & & v \cdot 1 = \frac{8}{3} \pi^2 \\ 1 \cdot \cos t = 0 & \cos t \cdot \cos t = 1 & v \cdot \cos t = 4 \\ 1 \cdot \sin t = 0 & \cos t \cdot \sin t = 0 \quad \sin t \cdot \sin t = 1 & v \cdot \sin t = -4\pi \end{array}$$

e le equazioni normali sono:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} \frac{8}{3} \pi^2 \\ 4 \\ -4\pi \end{bmatrix}$$

L'unica soluzione è:

$$a = \begin{bmatrix} \frac{4}{3} \pi^2 \\ 4 \\ -4\pi \end{bmatrix}$$

da cui:

$$w^* = \frac{4}{3} \pi^2 + 4 \cos t - 4\pi \sin t$$

Per il Teorema di esistenza ed unicità della migliore approssimazione in uno spazio con prodotto scalare, la migliore approssimazione di v in W è w^* .

L'elemento determinato è il *minimo assoluto su W* della funzione $d : C(I) \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$d(f) = \|v - f\| = \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} (t^2 - f(t))^2 dt \right]^{\frac{1}{2}}$$

– Osservazione: *Serie di Fourier*

Sia $g \in C(I)$. Si ricordi che, introdotto in $C(I)$ il prodotto scalare definito nel punto (3) dell'Esercizio, e posto:

$$a_0 = g \cdot 1 \quad , \quad a_k = g \cdot \cos kt \quad , \quad b_k = g \cdot \sin kt \quad k = 1, 2, \dots$$

si chiama *serie di Fourier generata dalla funzione g* la serie:

$$\frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kt + b_k \sin kt)$$

ovvero, introdotte le *somme parziali*:

$$s_0(t) = \frac{1}{2} a_0 \quad , \quad s_j(t) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^j (a_k \cos kt + b_k \sin kt) \quad j = 1, 2, \dots$$

la *successione*: $s_0(t), s_1(t), \dots$

Posto:

$$W_k = \text{span} \{ 1, \cos t, \sin t, \dots, \cos kt, \sin kt \} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

la migliore approssimazione w_k^* di g in W_k , ovvero il minimo assoluto *su W_k* della funzione $d : C(I) \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$d(f) = \|g - f\| = \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} (g(t) - f(t))^2 dt \right]^{\frac{1}{2}}$$

è s_k . Poiché $W_0 \subset W_1 \subset W_2 \subset \dots$, la successione $d(s_0), d(s_1), d(s_2), \dots$ è *non crescente*, dunque *convergente*. Un risultato classico dell'Analisi Matematica mostra che $\lim d(s_k) = 0$, risultato che si esprime anche con l'asserto:

$$g(t) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kt + b_k \sin kt) \quad \text{nel senso della convergenza in media}$$

Si osservi che la sola continuità di $g(t)$ *non assicura* la validità *puntuale* dell'uguaglianza in tutti i punti dell'intervallo I . Si consideri ad esempio il caso $I = [0, 2\pi]$ e $g(t) = t^2$. Per ogni j si ha $s_j(0) = s_j(2\pi)$ perciò se $\lim s_j(0) = g(0)$ allora $\lim s_j(2\pi) = g(0)$ Ma $g(0) \neq g(2\pi)$, dunque la convergenza puntuale della serie *non può sussistere* sull'intero intervallo I .

Lo studio della convergenza della successione $s_0(t), s_1(t), \dots$ — ovvero del *significato* dell'uguaglianza precedente — è argomento vasto e non elementare.¹

Esercizi

E3 ★ Sia $W = \text{span}\{w_1, \dots, w_j\}$ un sottospazio vettoriale di V , spazio vettoriale su \mathbb{R} con prodotto scalare. Dimostrare che $v \in V$ è ortogonale a W se e solo se:

$$v \cdot w_i = 0 \quad i = 1, \dots, j$$

¹Si veda, ad esempio: J.E. Marsden: *Elementary Classical Analysis*, Capitolo 10.

E4 ★ Sia V uno spazio vettoriale su \mathbb{R} con prodotto scalare. Dimostrare il Teorema di Pitagora: Siano a e b due elementi di V . Allora:

$$a \cdot b = 0 \quad \Rightarrow \quad \|a + b\|^2 = \|a\|^2 + \|b\|^2$$

E5 Si consideri un sistema di riferimento cartesiano nello spazio. Siano poi π il piano di equazione $3x_1 - x_2 = 0$ e P il punto di coordinate $(4, 1, 0)$.

(a) Verificare che $P \notin \pi$.

Posto $V = \mathbb{R}^3$ con prodotto scalare canonico, $W = \{x \in \mathbb{R}^3 : 3x_1 - x_2 = 0\}$ e:

$$v = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

(b) Determinare una base di W ;

(c) Determinare la migliore approssimazione w^* di v in W ;

(d) Il punto P^* di coordinate le componenti di w^* è il punto di π più vicino a P . Determinare la distanza di P da π .

4.2 Calcolo delle soluzioni di un sistema nel senso dei minimi quadrati

Siano $A \in \mathbb{R}^{n \times k}$ di colonne $a_1, \dots, a_k \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^n$ e si consideri \mathbb{R}^n con prodotto scalare canonico. Allora:

- Le soluzioni di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati sono le *coordinate* rispetto ad a_1, \dots, a_k della migliore approssimazione di b in $\text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$, ovvero della proiezione ortogonale di b su $\text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$.

Infatti: La migliore approssimazione di b in $\text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$ è il minimo assoluto y^* della funzione $d : \text{span}\{a_1, \dots, a_k\} \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$d(y) = \|b - y\| = \|y - b\|$$

Allora, posto $y^* = Ax^*$, per ogni $x \in \mathbb{R}^k$ si ha $Ax \in \text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$ e quindi:

$$\|Ax - b\|_2 = \|Ax - b\| \geq \|y^* - b\| = \|Ax^* - b\|_2$$

Dunque, per definizione, x^* è una soluzione di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati. Le componenti di x^* sono coordinate rispetto ad a_1, \dots, a_k della migliore approssimazione y^* .

- Le coordinate rispetto ad a_1, \dots, a_k della migliore approssimazione di b in $\text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$, ovvero della proiezione ortogonale di b su $\text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$, sono le *soluzioni* del sistema delle equazioni normali definite dai generatori a_1, \dots, a_k . Ricordando che per ogni $a, b \in \mathbb{R}^n$ si ha $a \cdot b = b^T a$, il sistema delle equazioni normali definite dai generatori a_1, \dots, a_k si scrive:

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

ovvero:

4.8 Teorema

Le soluzioni di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati sono le soluzioni del sistema delle equazioni normali:

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

4.9 Osservazione

Si consideri il sistema delle equazioni normali relative ad $Ax = b$. Come già osservato, il sistema ha sempre *almeno una* soluzione. Si ha inoltre:

- (i) La matrice $A^T A \in \mathbb{R}^{k \times k}$ delle equazioni normali è *simmetrica* e *semidefinita positiva*.² La matrice è poi *definita positiva*, in particolare *invertibile*, se e solo se le colonne di A sono *linearmente indipendenti*.

Infatti: Per ogni $x \in \mathbb{R}^k$ si ha:

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

dunque la matrice $A^T A$ è semidefinita positiva. Inoltre, si ha:

$$A^T A x \cdot x = \|Ax\|^2 = 0 \quad \text{se e solo se} \quad Ax = 0$$

e quindi $A^T A$ è definita positiva se e solo se la condizione $Ax = 0$ è equivalente a $x = 0$, ovvero se e solo se le colonne di A sono linearmente indipendenti.

- (ii) Sia $S(A, b) \subset \mathbb{R}^k$ l'insieme delle soluzioni di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati. Sussistono i risultati seguenti:³

- Esiste *un solo* elemento di minima norma in $S(A, b)$.
- La funzione da \mathbb{R}^n in \mathbb{R}^k che associa a b l'elemento di minima norma in $S(A, b)$ è un'*applicazione lineare*. La matrice $k \times n$ che la definisce si chiama *pseudoinversa* di A e si indica con A^+ .

Se $n \geq k$ e le colonne di A sono linearmente indipendenti allora $S(A, b)$ ha un solo elemento:

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

Dunque x^* è l'elemento di minima norma in $S(A, b)$ e la matrice pseudoinversa di A è:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$$

Se, inoltre, $n = k$ allora $A^+ = A^{-1}$.

La ricerca delle soluzioni del sistema $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati è dunque ricondotta alla costruzione e soluzione delle equazioni normali. Un procedimento *numericamente* preferibile alla determinazione della soluzione delle equazioni normali si ottiene estendendo la nozione di fattorizzazione QR al caso di matrici *non quadrate*.

4.10 Definizione (fattorizzazione QR, caso non quadrato)

Sia $A \in \mathbb{R}^{n \times k}$ con $n \geq k$. La coppia U, T è una *fattorizzazione QR* di A se:

- $A = UT$
- il fattore sinistro U è una matrice $n \times k$ ad elementi reali con *colonne ortonormali* rispetto al prodotto scalare canonico in \mathbb{R}^n ;
- il fattore destro T è una matrice $k \times k$ ad elementi reali *triangolare superiore*.

La ricerca di una fattorizzazione QR può essere effettuata, se le colonne di A sono linearmente indipendenti, con la procedura GS definita nel Paragrafo 2.7 del Capitolo 2. Esistono procedure per la ricerca di una fattorizzazione QR *più generali* di GS e ad essa preferibili da un punto di vista numerico. La funzione predefinita `qr` di *Scilab* realizza una di queste ultime.

- `qr`

Questa *funzione predefinita* restituisce una coppia di matrici che approssima una fattorizzazione QR di una matrice assegnata. Precisamente, se A è una matrice $n \times k$ con $n \geq k$ e:

$$[U, T] = \text{qr}(A, 'e')$$

allora la coppia U, T *approssima* una fattorizzazione QR di A . Come già osservato le colonne di A *possono* essere linearmente dipendenti.

²Si ricordi che una matrice simmetrica $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è *semidefinita positiva* se per ogni $x \in \mathbb{R}^n$ si ha $Mx \cdot x \geq 0$. Se, inoltre, $Mx \cdot x > 0$ per *tutti* gli $x \neq 0$, la matrice è *definita positiva*. Se $x \neq 0$ e $Mx = 0$ allora $Mx \cdot x = 0$ ed M non è definita positiva, ovvero: Se M è definita positiva allora $Mx = 0$ se e solo se $x = 0$, ovvero M è invertibile.

³Si veda, ad esempio: L. Aceto e M. Ciampa: *Complementi di Algebra e Fondamenti di Geometria, Capitolo 4, Decomposizione ai valori singolari* (<http://pagine.dm.unipi.it/~a008363/x-appunti.php>).

4.11 Esempio

Sia:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Una fattorizzazione QR si determina utilizzando opportunamente la procedura GS. Procedendo come nell'Esempio 2.30:

– *Primo passo*

Si cercano $\Omega = (\omega_1, \omega_2) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ a colonne ortogonali e $\Theta \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ triangolare superiore con uno sulla diagonale tali che $\Omega\Theta = A$, ovvero tali che, dette a_1, a_2 le colonne di A :

$$\omega_1 = a_1 \quad , \quad \omega_1\theta_{12} + \omega_2 = a_2$$

Se esistono matrici siffatte allora, *necessariamente*:

$$\omega_1 = a_1 \quad , \quad \theta_{12} = \frac{\omega_1 \cdot a_2}{\omega_1 \cdot \omega_1} = 1$$

e quindi:

$$\omega_2 = a_2 - \omega_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Dunque:

$$\Omega = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad , \quad \Theta = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

– *Secondo passo*

Si *normalizzano* le colonne di Ω lasciando inalterato il risultato del prodotto. Posto:

$$\Delta = \text{diag}(\|\omega_1\|, \|\omega_2\|) = \text{diag}(\sqrt{2}, 1)$$

si pone:

$$U = \Omega\Delta^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad , \quad T = \Delta\Theta = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se A è una matrice a colonne linearmente indipendenti e (U, T) è una fattorizzazione QR di A allora:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = (T^T T)^{-1} T^T U^T = T^{-1} (T^T)^{-1} T^T U^T = T^{-1} U^T$$

Per la matrice in esame si ha allora:

$$A^+ = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Siano A a colonne linearmente indipendenti e U, T una fattorizzazione QR di A . Si ha:

Il sistema delle equazioni normali $A^T A x = A^T b$ è equivalente al sistema $T x = U^T b$

Infatti, tenuto conto che $U^T U = I$, si ricava:

$$A^T A = T^T T \quad \text{e} \quad A^T b = T^T U^T b$$

dunque il sistema delle equazioni normali si riscrive:

$$T^T T x = T^T U^T b$$

L'asserto si ottiene considerando che se le colonne di A sono linearmente indipendenti allora la matrice T , e quindi T^T , è invertibile. Infatti, ragionando per assurdo: Se $Ty = 0$ per qualche $y \neq 0$ allora $Ay = UTy = 0$ per qualche $y \neq 0$, ovvero: le colonne di A sono linearmente dipendenti.

Si ha, inoltre:⁴

$$c_2(A^T A) = (c_2(T))^2$$

ovvero:

Le proprietà di condizionamento di T sono (quasi sempre) migliori di quelle di $A^T A$

Dunque: un procedimento per la ricerca delle soluzioni del sistema $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati *numericamente preferibile* alla costruzione e soluzione delle equazioni normali $A^T Ax = b$ è quello di *calcolare una coppia U, T fattorizzazione QR di A e poi risolvere il sistema $Tx = U^T b$.*

4.12 Osservazione (backslash)

Scilab ha una funzione predefinita per la ricerca delle soluzioni di un sistema di equazioni lineari: `backslash`.

– `backslash`

Questa *funzione predefinita* restituisce un vettore che approssima una soluzione o una soluzione nel senso dei minimi quadrati del sistema di equazioni lineari descritto dai dati di ingresso. Precisamente, detta u la precisione di macchina, dati A matrice $n \times k$ e b colonna ad n componenti, `backslash(A,b)` o, più usualmente, `A\b`, restituisce la colonna a k componenti così determinata:

Se $n = k$ allora:

- `[S,D,P] = EGPP(A)`;
- Se $\det D = 0$ allora: `rcond = 0`; altrimenti: `rcond =` una stima di $c_1(A)^{-1}$;
- Se `rcond > 20u` allora: `A\b = SI(D, SA(S,Pb))`;

Se $n \neq k$ oppure `rcond ≤ 20u` allora:

- `A\b` = una colonna che approssima una soluzione di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati determinata utilizzando opportunamente una fattorizzazione QR di A .

4.13 Esempio

Siano:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

La matrice A non è invertibile ma b è uguale alla prima colonna di A e il sistema ha infinite soluzioni:

$$S(A, b) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Le soluzioni di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati coincidono con le soluzioni.

In *Scilab* si ha:

```
-->A = [1,1;1,1]; b = [1,1]';
```

```
-->x = A \ b
```

```
Warning :
```

```
matrix is close to singular or badly scaled. rcond = 0.0000D+00
computing least squares solution. (see lsq).
```

```
x =
```

```
1.
```

```
0.
```

⁴Si veda, ad esempio: M. Ciampa: *Calcolo Numerico* (<http://pagine.dm.unipi.it/~a008363/x-appunti.php>), Osservazione 5.21 punto (c).

Dopo aver avvisato l'utilizzatore che la stima di $c_1(A)^{-1}$ è inferiore a $20u \approx 2 \cdot 10^{-15}$ (e quindi $c_1(A)$ è maggiore di $(20u)^{-1} \approx 4 \cdot 10^{14}$), *Scilab* assegna ad x un valore che *approssima* una delle soluzioni di $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati:

```
-->x == [1,0]
ans =
```

```
F
T
```

```
-->format(25)
```

```
-->x
x =
```

```
0.9999999999999998889777
0.
```

Si osservi che l'elemento di $S(A, b)$ approssimato da *Scilab* non è quello di minima norma.

4.3 Calcolo delle funzioni che meglio approssimano dati assegnati nel senso dei minimi quadrati

Siano I un intervallo non degenere, F un sottospazio vettoriale di *dimensione finita* dello spazio delle funzioni continue da I in \mathbb{R} , x_0, \dots, x_k numeri reali in I e y_0, \dots, y_k numeri reali. Ricordiamo che un elemento f^* di F è una *funzione che meglio approssima i dati* $(x_0, y_0), \dots, (x_k, y_k)$ nel senso dei minimi quadrati se: Per ogni $f \in F$ si ha:

$$(f^*(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f^*(x_k) - y_k)^2 \leq (f(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f(x_k) - y_k)^2$$

ovvero se f^* è un *minimo assoluto* della funzione *scarto quadratico* $SQ : F \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$SQ(f) = (f(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f(x_k) - y_k)^2$$

Sia f_1, \dots, f_j una *base* di F . Il problema si traduce allora nella ricerca di $a_1, \dots, a_j \in \mathbb{R}$ tali che $a_1 f_1(x) + \dots + a_j f_j(x)$ sia un minimo assoluto della funzione SQ . Poiché per ogni $f \in F$ si ha:

$$SQ(f) = (f(x_0) - y_0)^2 + \dots + (f(x_k) - y_k)^2 = \left\| \begin{bmatrix} f(x_0) - y_0 \\ \vdots \\ f(x_k) - y_k \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

allora:

$$SQ(a_1 f_1(x) + \dots + a_j f_j(x)) = \left\| \begin{bmatrix} a_1 f_1(x_0) + \dots + a_j f_j(x_0) - y_0 \\ \vdots \\ a_1 f_1(x_k) + \dots + a_j f_j(x_k) - y_k \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

Posto:

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_j \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} f_1(x_0) & \dots & f_j(x_0) \\ \vdots & & \vdots \\ f_1(x_k) & \dots & f_j(x_k) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}$$

si riscrive:

$$SQ(a_1 f_1(x) + \dots + a_j f_j(x)) = \|Aa - b\|_2^2$$

Osservato che A e b sono la matrice e colonna del sistema di equazioni che traduce le condizioni di *interpolazione* dei dati con elementi di F e ricordata la definizione di soluzione del sistema $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati si deduce che: *Le coordinate delle funzioni che meglio approssimano i dati nel senso dei minimi quadrati sono le componenti delle soluzioni nel senso dei minimi quadrati del sistema che traduce le condizioni di interpolazione dei dati.*

4.14 Esercizio

Determinare gli elementi di $P_1(\mathbb{R})$ che meglio approssimano i dati:

$$(0, 1) \quad , \quad (0, 2) \quad , \quad (1, 1) \quad , \quad (2, 0)$$

nel senso dei minimi quadrati.

Soluzione. Sia $1, x$ una base di $P_1(\mathbb{R})$. Il sistema che traduce le condizioni di interpolazione dei dati con un elemento di $P_1(\mathbb{R})$ è $Ax = b$ con:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

I coefficienti che individuano gli elementi di $P_1(\mathbb{R})$ che meglio approssimano i dati sono le soluzioni del sistema nel senso dei minimi quadrati. Poiché le colonne di A sono linearmente indipendenti il sistema ha *una sola* soluzione nel senso dei minimi quadrati. Il sistema delle equazioni normali è:

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

da cui:

$$x^* = \begin{bmatrix} \frac{17}{11} \\ -\frac{8}{11} \end{bmatrix}$$

e l'elemento cercato è:

$$p^*(x) = \frac{17}{11} - \frac{8}{11}x$$

Si osservi che, detta b^* la proiezione ortogonale di b sul sottospazio di \mathbb{R}^4 generato dalle colonne di A si ha: $b^* = Ax^*$ e quindi:

$$\|Ax^* - b^*\| = 0$$

Dunque: *l'elemento p^* migliore approssimazione dei dati $(x_i, b_{i+1}), i = 0, \dots, 3$ interpola i dati $(x_i, b_{i+1}), i = 0, \dots, 3$.*

Le nozioni di soluzione di un sistema di equazioni lineari nel senso dei minimi quadrati e di funzione che meglio approssima i dati nel senso dei minimi quadrati possono essere estese modificando le funzioni n e SQ con l'introduzione di un coefficiente positivo, detto *peso*, per ciascun addendo. L'esempio seguente illustra queste estensioni.

4.15 Esercizio

Sia F un sottospazio vettoriale di dimensione due dello spazio delle funzioni continue da I in \mathbb{R} e p_0, p_1, p_2 numeri reali positivi. Determinare gli elementi di F minimi assoluti della funzione SQ: $F \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$\text{SQ}(f) = p_0 (f(x_0) - y_0)^2 + p_1 (f(x_1) - y_1)^2 + p_2 (f(x_2) - y_2)^2$$

Soluzione. Per ogni $f \in F$ si ha:

$$\text{SQ}(f) = p_0 (f(x_0) - y_0)^2 + p_1 (f(x_1) - y_1)^2 + p_2 (f(x_2) - y_2)^2 = \left\| \begin{bmatrix} \sqrt{p_0} (f(x_0) - y_0) \\ \sqrt{p_1} (f(x_1) - y_1) \\ \sqrt{p_2} (f(x_2) - y_2) \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

Procedendo come sopra si ottiene che, detta f_1, f_2 una base di F e posto:

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad , \quad \Delta = \text{diag}(\sqrt{p_0}, \sqrt{p_1}, \sqrt{p_2}) \quad , \quad A = \begin{bmatrix} f_1(x_0) & f_2(x_0) \\ f_1(x_1) & f_2(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

si riscrive:

$$\text{SQ}(a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x)) = \|\Delta Aa - \Delta b\|_2^2$$

Si deduce che: *Le coordinate delle funzioni che meglio approssimano i dati nel senso dei minimi quadrati, con pesi p_0, p_1, p_2 , sono le componenti delle soluzioni nel senso dei minimi quadrati del sistema $\Delta Ax = \Delta b$. Queste ultime sono le soluzioni del sistema delle equazioni normali:*

$$A^T \Delta^2 Ax = A^T \Delta^2 b$$

Esercizi

E6 Siano:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Determinare una fattorizzazione QR di A utilizzando la procedura GS ed utilizzarla per calcolare le soluzioni del sistema $Ax = b$ nel senso dei minimi quadrati.

E7 ♠ Verificare che in *Scilab* dopo gli assegnamenti:

-->A = [1,1,0;1,1,1]';

-->[U,T] = qr(A,'e');

la coppia (U, T) è un'approssimazione della fattorizzazione QR di A :

$$U = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Confrontare la fattorizzazione con quella ottenuta nell'Esempio 4.11.

E8 Siano A e A^+ come nell'Esempio 4.11. Determinare A^+A e AA^+ .

Il primo risultato giustifica il termine "pseudoinversa" utilizzato per la matrice A^+ . Dimostrare che per ogni $B \in \mathbb{R}^{n \times k}$ a colonne linearmente indipendenti si ha:

$$B^+ B = I$$

E9 ♠ Utilizzare la funzione `backslash` per determinare gli elementi di $P_1(\mathbb{R})$ che meglio approssimano i dati:

$$(0, 1), \quad (0, 2), \quad (1, 1), \quad (2, 0)$$

nel senso dei minimi quadrati e disegnare, su uno stesso piano cartesiano, i dati ed il grafico dell'elemento ottenuto.

E10 Sia $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$F(x) = x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + (x_1 - x_2 + x_3 - 1)^2 + (-x_1 - 4x_2 + 2)^2$$

Determinare una matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times 3}$ ed una colonna $b \in \mathbb{R}^n$ tali che per ogni $x \in \mathbb{R}^3$ si abbia:

$$F(x) = \|Ax - b\|_2^2$$

Determinare poi il minimo assoluto di F .

E11 Assegnato un sistema di riferimento cartesiano in un piano π , siano $c_1, \dots, c_j \in \mathbb{R}^2$ i vettori delle coordinate di j punti distinti di π . Si consideri la funzione $\lambda : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$\lambda(x) = \|x - c_1\|^2 + \dots + \|x - c_j\|^2$$

* Dare un'interpretazione geometrica della funzione λ .

* Determinare $A \in \mathbb{R}^{2j \times 2}$ e $b \in \mathbb{R}^{2j}$ tali che per ogni $x \in \mathbb{R}^2$ si abbia:

$$\lambda(x) = \|Ax - b\|_2^2$$

* Siano:

$$c_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad c_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad c_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Determinare il minimo assoluto di λ .

E12 Assegnato un sistema di riferimento cartesiano in un piano π , siano $c_1, \dots, c_j \in \mathbb{R}^2$ i vettori delle coordinate di j punti distinti di π . Assegnati k_1, \dots, k_j numeri reali *positivi*, si consideri la funzione EP : $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definita da:

$$\text{EP}(x) = \frac{1}{2} k_1 \|x - c_1\|^2 + \dots + \frac{1}{2} k_j \|x - c_j\|^2$$

* Dare un'interpretazione meccanica della funzione EP.

* Determinare $A \in \mathbb{R}^{2j \times 2}$ e $b \in \mathbb{R}^{2j}$ tali che per ogni $x \in \mathbb{R}^2$ si abbia:

$$\text{EP}(x) = \frac{1}{2} \|Ax - b\|_2^2$$

* Siano:

$$c_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad c_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad c_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

e $k_1 = k_2 = 1, k_3 = 4$. Determinare il minimo assoluto di EP.
