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*.

4.0.16 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: $\| Ax^* - b \|_2 \leqslant \| Ay - b \|_2$;

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

(C) Il vettore x^* è un *minimo assoluto* della funzione $n : \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$, *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 $n(x) \geqslant 0$.

4.0.17 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 $\mathbb{R}$, $x_0, \ldots, x_k$ numeri reali in I e $y_0, \ldots, y_k$ numeri reali. Un elemento f^* di F è una *funzione che meglio approssima i dati $(x_0, y_0), \ldots, (x_k, y_k)$ nel senso dei minimi quadrati* se: *Per ogni $f \in F$ si ha:*

$$\big(f^*(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f^*(x_k) - y_k \big)^2 \leqslant \big(f(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f(x_k) - y_k \big)^2$$

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

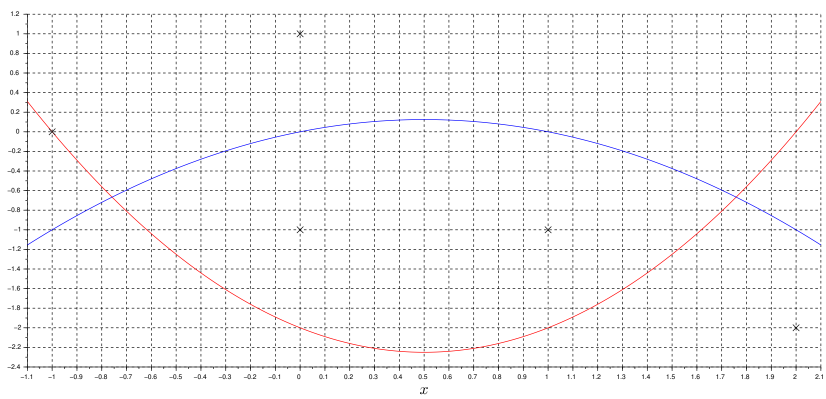
$$\mathrm{SQ}(f) = \big(f(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f(x_k) - y_k \big)^2$$

Interpretando i dati come coordinate di punti in un piano cartesiano, lo scarto quadratico ha un semplice *significato geometrico*. Il valore $\mathrm{SQ}(f)$ 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 $\mathrm{SQ}(f)$ *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 $x_0, \ldots, x_k$ *non* devono necessariamente essere distinti.

Esercizi

E0 Nella figura seguente sono rappresentati i dati (×), il grafico della funzione f (in rosso) e quello della funzione g (in blu). Determinare $\mathrm{SQ}(f)$, $\mathrm{SQ}(g)$ e decidere quale funzione tra f e g meglio approssima i dati nel senso dei minimi quadrati.



E1 ★ Dimostrare che $\mathrm{SQ}(f) = 0$ *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.

4.1.1 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: $\| v - w^* \| \leqslant \| v - w \|$;

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

4.1.2 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:

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

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

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

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

$$\begin{array}{rclcl} v \cdot w_1 & = & (a_1 w_1 + \cdots + a_j w_j) \cdot w_1 & = & a_1 (w_1 \cdot w_1) + \cdots + a_j (w_j \cdot w_1) \\ \vdots & & & \vdots & \\ v \cdot w_j & = & (a_1 w_1 + \cdots + a_j w_j) \cdot w_j & = & a_1 (w_1 \cdot w_j) + \cdots + a_j (w_j \cdot w_j) \end{array} \qquad (**)$$

Posto:

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

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

4.1.3 Teorema (di esistenza ed unicità della proiezione ortogonale)
Esiste un solo elemento di W proiezione ortogonale di v su W.

Dimostrazione. Sia $w_1, \ldots, w_r$ 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 $w_1, \ldots, w_j$ 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).

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

(a) $\| v - w \|^2 \geqslant \| v - w^* \|^2$ ovvero $\| v - w \| \geqslant \| v - w^* \|$: 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.

4.1.5 Esercizio

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

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

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:

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

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

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

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,

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

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:

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

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:

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

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:

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

Siano infine:

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

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:

$$\begin{array}{llll} 1 \cdot 1 = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}t = 2 & & & v \cdot 1 = \frac{8}{3}\pi^2 \\ 1 \cdot \cos t = 0 & \cos t \cdot \cos t = 1 & & v \cdot \cos t = 4 \\ 1 \cdot \operatorname{sen} t = 0 & \cos t \cdot \operatorname{sen} t = 0 & \operatorname{sen} t \cdot \operatorname{sen} t = 1 & v \cdot \operatorname{sen} t = -4\pi \end{array}$$

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:

$$w^* = \tfrac{4}{3}\,\pi^2 + 4\cos t - 4\pi \operatorname{sen} t$$

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 $d : C(I) \to \mathbb{R}$ definita da:

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

– 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:

  $$a_0 = g \cdot 1 \quad , \quad a_k = g \cdot \cos kt \quad , \quad b_k = g \cdot \operatorname{sen} kt \qquad k = 1, 2, \ldots$$

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

  $$\tfrac{1}{2}\, a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \big(\, a_k \, \cos kt + b_k \, \operatorname{sen} kt \,\big)$$

  ovvero, introdotte le *somme parziali*:

  $$s_0(t) = \tfrac{1}{2}\, a_0 \quad , \quad s_j(t) = \tfrac{1}{2}\, a_0 + \sum_{k=1}^{j} \big(\, a_k \, \cos kt + b_k \, \operatorname{sen} kt \,\big) \qquad j = 1, 2, \ldots$$

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

  Posto:

  $$W_k = \operatorname{span}\{\, 1, \cos t, \operatorname{sen} t, \ldots, \cos kt, \operatorname{sen} kt \,\} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

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

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

  è s_k. Poiché $W_0 \subset W_1 \subset W_2 \subset \cdots$, la successione $d(s_0), d(s_1), d(s_2), \ldots$ 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:

  $$g(t) = \tfrac{1}{2}\, a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \big(\, a_k \, \cos kt + b_k \, \operatorname{sen} kt \,\big) \qquad \textit{nel senso della convergenza in media}$$

  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 $s_0(t), s_1(t), \ldots$ — ovvero del *significato* dell'uguaglianza precedente — è argomento vasto e non elementare.[39]

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

E2 ★ 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:

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

E3 ★ 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*:

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

E4 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 $d : \text{span}\{ a_1, \dots, a_k \} \to \mathbb{R}$ 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:

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

  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 $a \cdot b = b^\mathsf{T} a$, il sistema delle equazioni normali definite dai generatori $a_1, \dots, a_k$ si scrive:

  $$A^\mathsf{T} Ax = A^\mathsf{T} b$$

ovvero:

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

$$A^{\mathsf{T}} Ax = A^{\mathsf{T}} b$$

4.2.2 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 $A^{\mathsf{T}} A \in \mathbb{R}^{k \times k}$ delle equazioni normali è *simmetrica* e *semidefinita positiva*.[40] 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:

$$A^{\mathsf{T}} Ax \cdot x = x^{\mathsf{T}} A^{\mathsf{T}} Ax = (Ax)^{\mathsf{T}} Ax = Ax \cdot Ax = \| Ax \|^2 \geqslant 0$$

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

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

e quindi $A^{\mathsf{T}} A$ 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:[41]

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

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

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

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

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*.

4.2.3 Definizione (fattorizzazione QR, caso non quadrato)
Sia $A \in \mathbb{R}^{n \times k}$ con $n \geqslant k$. 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*.

[40] Si 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 $Mx \cdot x \geqslant 0$. 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.

[41] Si 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`).

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 $n \geqslant k$ e:

```
[U,T] = 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.

4.2.4 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:

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

  Se esistono matrici siffatte allora, *necessariamente*:

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

  e quindi:

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

  Dunque:

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

– *Secondo passo*

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

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

  si pone:

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

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

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

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 $A^\mathsf{T} Ax = A^\mathsf{T} b$ *è* equivalente *al sistema* $Tx = U^\mathsf{T} b$

Infatti, tenuto conto che $U^\mathsf{T} U = I$, si ricava:

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

dunque il sistema delle equazioni normali si riscrive:

$$T^\mathsf{T} Tx = T^\mathsf{T} U^\mathsf{T} b$$

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:[42]

$$c_2(A^\mathsf{T} A) = \big(\, c_2(T)\,\big)^2$$

ovvero:

Le proprietà di condizionamento di T *sono* (*quasi sempre*) migliori *di quelle di* $A^\mathsf{T} A$

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 $A^\mathsf{T} Ax = A^\mathsf{T} b$ è quello di *calcolare una coppia* U, T *fattorizzazione QR di* A *e poi risolvere il sistema* $Tx = U^\mathsf{T} b$.

4.2.5 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`:

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

  `Se` $n \neq k$ `oppure` `rcond` $\leqslant 20\,u$ `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.

4.2.6 Esempio

Siano:

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

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

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

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

In *Scilab* si ha:

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

```
-->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.
```

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. Tale elemento, per quanto detto al punto (ii) dell'Osservazione 4.2.2, è A^+b. La funzione predefinita `pinv` di *Scilab* restituisce un'approssimazione della matrice pseudoinversa. Si ha:

```
-->y = pinv(A)*b
 y  =

    0.5
    0.5
```

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 $\mathbb{R}$, $x_0, \ldots, x_k$ numeri reali in I e $y_0, \ldots, y_k$ numeri reali. Ricordiamo che un elemento f^* di F è una *funzione che meglio approssima i dati* $(x_0, y_0), \ldots, (x_k, y_k)$ *nel senso dei minimi quadrati* se: *Per ogni* $f \in F$ *si ha*:

$$\big(f^*(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f^*(x_k) - y_k \big)^2 \leqslant \big(f(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f(x_k) - y_k \big)^2$$

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

$$\mathrm{SQ}(f) = \big(f(x_0) - y_0 \big)^2 + \cdots + \big(f(x_k) - y_k \big)^2$$

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

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

allora:

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

Posto:

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

si riscrive:

$$\mathrm{SQ}\big(a_1 f_1(x) + \cdots + a_j f_j(x)\big) = \| \, Aa - b \, \|_2^2$$

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.*

4.3.1 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:

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

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 $(x_i, b_{i+1}), i = 0, \ldots, 3$ interpola i dati $(x_i, b^*_{i+1}), i = 0, \ldots, 3$.*

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.

4.3.2 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 $\mathrm{SQ} : F \to \mathbb{R}$ definita da:

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

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

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

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

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

si riscrive:

$$\mathrm{SQ}\big(a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x)\big) = \| \Delta A a - \Delta b \|_2^2$$

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* $\Delta A x = \Delta b$. Queste ultime sono le soluzioni del sistema delle equazioni normali:

$$A^{\mathsf{T}} \Delta^2 A x = A^{\mathsf{T}} \Delta^2 b$$

Esercizi

E5 Siano:

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

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.

E6 ♠ 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`:

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

Confrontare la fattorizzazione con quella ottenuta nell'Esempio 4.2.4.

E7 Siano A e A^+ come nell'Esempio 4.2.4. 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:

$$B^+ B = I$$

E8 ♠ Utilizzare la funzione `backslash` per 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 e disegnare, su uno stesso piano cartesiano, i dati ed il grafico dell'elemento ottenuto.

E9 Sia $F : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ 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.

E10 Assegnato un sistema di riferimento cartesiano in un piano π, siano $c_1, \ldots, c_j \in \mathbb{R}^2$ i vettori delle coordinate di j punti distinti di π. Si consideri la funzione $\lambda : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ definita da:

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

* 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:

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

  Determinare il minimo assoluto di λ.

E11 Assegnato un sistema di riferimento cartesiano in un piano π, siano $c_1, \ldots, c_j \in \mathbb{R}^2$ i vettori delle coordinate di j punti distinti di π. Assegnati $k_1, \ldots, k_j$ numeri reali *positivi*, si consideri la funzione $\mathrm{EP} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ definita da:

$$\mathrm{EP}(x) = \tfrac{1}{2}\, k_1 \, \| x - c_1 \|^2 + \cdots + \tfrac{1}{2}\, k_j \, \| x - c_j \|^2$$

* 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:

$$\mathrm{EP}(x) = \tfrac{1}{2} \, \| Ax - b \|_2^2$$

* Siano:

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

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