1 Lezione del 04-04-25

Riprendiamo il discorso dei problemi ai minimi quadrati.

1.1 Esistenza delle soluzioni al sistema delle equazioni normali

Avevamo detto che di sistemi $Ax = b$ con $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $m > n$, cioè *sovradeterminati*, se la soluzione di $Ax = b$ non esiste, ergo $\text{rank}(A|b) > \text{rank}(A)$, potrebbe essere interessante cercare di risolvere il problema diottimizzazione:

$$\min_{x \in \mathbb{C}^n} |Ax - b|_2 = \min_{x \in \mathbb{C}^n} |b - Ax|_2$$

dove il punto p_1 di minimo è lo stesso di quello del problema:

$$\min_{x \in \mathbb{C}^n} |Ax - b|_2^2$$

Avevamo quindi definito la funzione ϕ, assunta per semplicità $\psi : \mathbb{R}^n \to [0, +\infty)$:

$$\psi(x) = |b - Ax|_2^2 = |r(x)|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} r_i(x)^2$$

A questo punto il minimo sarà semplicemente nel punto:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial \psi}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

da cui avevamo visto ricavamo il sistema **lineare** (in quanto ψ è quadratica e quindi deriva ad una lineare):

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

scrivi che vale in C con le hermitiane
Vediamo che vale il seguente teorema:

Teorema 1.1: Esistenza delle soluzioni dei problemi ai minimi quadrati

Il sistema $A^T AxA^T b$ ammette soluzione $\forall A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $\forall b \in \mathbb{C}^m$ (1). Inoltre, la soluzione è unica se e solo se $\text{rank}(A) = n$, $(m > n)$ (2).

Dimostriamo le due tesi in ordine.

1. La prima tesi si dimostra verificando che $A^T b \in I_m(A^T A)$ con I_m *immagine* o **spazio delle colonne** di $A^T A$, cioè verificando che è rispettata la condizione:

   $$\text{rank}(A^T A | A^T b) = \text{rank}(A^T A)$$

   di Rouché-Capelli, per cui esiste una soluzione. Abbiamo quindi:

   $$I_m(A^T A) = \{y \in \mathbb{C}^n \ : \ y = A^T Az, \quad z \in \mathbb{C}^n\}$$

   Il caso buono è $A^T b \in I_m(A)$, cioè:

   $$I_m(A) = \{y \in \mathbb{C}^n \ : \ y = Az, \quad z \in \mathbb{C}^n\}$$

così che:

$$A^T b = A^T A z \in I_m(A)$$

Questo però non è sempre vero. Possiamo allora dire che uno spazio vettoriale è sempre dato dallo spazio delle colonne il suo spazio perpendicolare di una trasformazione A

$$\mathbb{C}^m = I_m(A) \oplus I_m(A)^\perp$$

da cui definiamo lo spazio delle colonne perependicolare:

$$I_m(A)^\perp = \{y : y^H z = 0, \quad \forall z \in I_m(A)\}$$

Potremo allora riscrivere b come la somma delle componenti *parallela* e perpendicolare:

$$b \in \mathbb{C}^m \implies b = b_1 + b_2, \quad \begin{cases} b_1 \in I_m(A) \\ b_2 \in I_m(A)^\perp \end{cases}$$

Prendiamo allora $A^T b$ come:

$$A^T b = A^T b_1 + A^T b_2$$

Si ha che $A^T b_1 \in I_m(A^T A)$ da quanto avevamo detto prima, mentre riguardo ad $A^T b_2$ si può dire:

$$A^T b_2 = \begin{pmatrix} a_1^T b_2 \\ \vdots \\ a_m^T b_2 \end{pmatrix} = 0$$

perchè $b_2 \in I_m(A)^\perp$ e le colonne di A stanno in $I_m(A)$, quindi la condizione di Rouché-Capelli è soddisfatta e la soluzione esiste. □

2. Per l'unicità, vogliamo verificare che $\det(A^T A) \neq 0$ soddisfatta la proprietà $\operatorname{rank}(A) = n$. Abbiamo allora che dal teorema di Binet-Cauchy *generalizzato*:

$$\det(A^T A) = \sum_{[j]} \det(A^T_{[j]}) \cdot \det(A_{[j]}) = \sum_{[j]} |\det(A_{[j]})|^2$$

dove la sommatoria varia su tutte le possibili scelte di n indici in $\{1, ..., m\}$. Vogliamo allora mostrare che $\det(A^T A) \geq 0$, cioè che $\exists$ almeno una sottomatrice $A_{[j]}$ tale che $\det(A_{[j]}) \neq 0$. Questa esisterà sempre se $\operatorname{rank}(A) = n$, e quindi anche l'ultima tesi del teorema è soddisfatta. □

2 esempi

1.1.1 Considerazioni di complessità del sistema delle equazioni normali

Valutiamo la complessità del sistema visto finora. Dobbiamo:

1. Calcolare $A^H A$, che ha complessità $O(mn^2)$ (da una $(n \times m)(m \times n)$);
2. Calcolare $A^H b$, che ha complessità $O(mn)$ (da una $(n \times m)(m \times 1)$);
3. Risolvere il sistema $A^H A x = A^H b$, che ha complessità $O(mn^2 + n^3) \sim O(n^3)$.

Vediamo che il problema non è tanto la complessità, ma il fatto che $A^T A$ ha spesso un numero di condizionamento piuttosto alto, ad esempio nel caso $m = n$ si ha:

$$\mu(A^T A) = \mu(A)^2$$

Se $\mu(A^T A)$ ($< 10^k$ con k moderato), questo è fastidioso in quanto abbatte sostanzialmente la precisione. Conviene quindi applicare un metodo alternativo.

1.2 Metodo QR per problemi ai minimi quadrati

Vediamo quindi un metodo basato sulla fattorizzazione QR.

1.2.1 Fattorizzazione QR

La fattorizzazione QR è un tipo di fattorizzazione, come lo era la **fattorizzazione LU** che abbiamo già visto (8.3.4).

Diamo quindi la definizione:

Definizione 1.1: Fattorizzazione LU

Data $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, con $m \geq n$, una fattorizzazione QR di A è una coppia di matrici (Q, R) tali che: $A = QR$, con $Q \in \mathbb{C}^{m \times m}$ unitaria ($Q^H Q = QQ^H = I$), e $R \in \mathbb{C}^{m \times m}$ della forma triangolare superiore rettangolare (con un certo numero di righe a zero sotto il triangolo), cioè esprimibile come:

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

con $R_1 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ triangolare superiore.

Varrà allora il teorema:

Teorema 1.2: Esistenza della fattorizzazione QR

Per ogni matrice $\exists$ sempre una fattorizzazione QR, a non è mai unica.

Questo viene dal fatto che data $A = QR$, si potrebbe prendere $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$ diagonale con $|d_j| = 1$ per $j = \ ..., m$, e dire:

$$A = Q_2 R_2, \quad \begin{cases} Q_2 = QD \\ R_2 = D^{-1} R \end{cases}$$

in quanto:

$$A = QR = \underbrace{QD}_{Q_2} \cdot \underbrace{D^{-1}R}_{R_2}$$

Una proprietà di rilievo è che la norma 2 e la norma di Frobenius sono invarianti per moltiplicazioni con matrici unitarie, ovvero:

$$|A| = |QA| = |AQ| = |Q_1 A Q_2|$$

con norma $| \cdot |$ 2 o di Frobenius.

Dimostriamo per le due norme:

- **Norma 2:** questo si ha prendendo la definizione di norma 2:

$$|A|_2 = \sqrt{\rho(A^H A)}$$

  Allora la norma di AQ, ad esempio, sarà:

$$|AQ|_2 = \sqrt{\rho((AQ)^H AQ)} = \sqrt{\rho(Q^H A^H AQ)}$$

$Q^H A^H AQ$ è simile a $A^H A$ in quanto dalla definizione di unarietà di Q, si può intendere $Q^H = Q^{-1}$ e quindi prendere la forma come un applicazione di matrice di trasformazione, da cui la tesi per la norma 2. □

- **Norma di Frobenius:** questo si ha prendendo la definizione di norma di Frobenius:

$$|A|_F = \sqrt{\text{trace}(A^H A)}$$

Allora la norma di AQ, ad esempio, sarà:

$$|AQ|_F = \sqrt{\text{trace}(Q^H A^H AQ)}$$

da cui come sopra. □

Nei problemi ai minimi quadrati, la fattorizzazione QR è utile in quanto se $A = QR$:

$$\min_{x\in\mathbb{C}^n} |b - Ax|_2 = \min_{x\in\mathbb{C}^n} |b - QRx|_2 = \min_{x\in\mathbb{C}} |Q^H b - Rx|_2$$

moltiplicando per Q^H all'ultimo passaggio.

Chiamato $Q^H b = c$, osserviamo quindi poter prendere:

$$\psi(x) = |cx - Rx|_2^2$$

che preso:

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

diventa:

$$\psi(x) = \left| \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} x \right|_2^2 = \left| \begin{pmatrix} c_1 - R_1 x \\ c_2 \end{pmatrix} \right|_2^2 = |c_1 - R_1 x|_2^2 + |c_2|_2^2$$

l'unico termine su cui abbiamo controllo è il primo, e possiamo quindi trascurare $|c_2|_2^2$. Prendiamo allora:

$$\psi'(x) = |c_1 - R_1 x|_2^2$$

che rappresenta un sistema lineare $n \times n$, dove bastera scegliere x tale che:

$$R_1 x = c$$

così da trovare 0 e ottenere il valore di ψ' (e quindi di ψ) minore possibile. Il vantaggio aggiunto è che R_1 è triangolare superiore, e quindi si può calcolare:

$$x = R_1^{-1} c$$

per sostituzione all'indietro.

Riassumendo, quindi, abbiamo ottenuto il metodo:

1. Si calcola la fattorizzazione $A = QR$;
2. Si calcola $Q^H b = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, che ha costo $O(nm)$ (non è $O(m^2 n)$, per via della struttura di Q);
3. Si risolve $R_1 x = c_1$, che è un sistema lineare triangolare superiore $n \times n$, quindi ha costo $O(n^2)$ per sostituzione all'indietro.

L'unica incognita è allora il costo della fattorizzazione, che anticipiamo è $O(mn^2)$.

1.2.2 Matrici di Householder

Una proprietà rilevante è che dato un vettore $v \in \mathbb{C}^m$ esiste sempre una matrice unitaria H_v tale che:

$$H_v \cdot v = c \cdot e_1, \quad c \in \mathbb{C}$$

per e_1 primo elemento della base canonica. Dato che la moltiplicazione per matrici unitarie non cambia la norma si ha:

$$|c| = |v|_2$$

Inoltre, H_v può essere scelta perché:

$$H_v = I - 2v \cdot \frac{\tilde{v}\tilde{v}^H}{|\tilde{v}|_2^2}$$

con $\tilde{v}$ definita come:

$$\tilde{v} = v \pm |v|_2 \cdot e_1 = \begin{pmatrix} v_1 \pm |v|_2 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_m \end{pmatrix}$$

Le matrici costituite in questo modo vengono anche dette **Matrici di Householder** associate al vettore v.

1.2.3 Calcolo della fattorizzazione QR

Analogamente al metodo di Gauss, per la fattorizzazione QR si moltiplica a sinistra per matrici unitarie che *"sistemano"* gli elementi sotto la diagonale.

Sfruttando la proprietà delle matrici di Householder, agiamo come segue:

$$H_1 = H_{a_1} = \text{matrice di Householder associata ad } a_1\text{, prima colonna di } A$$

diciamo:

$$H_1 \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & ... & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ? & ... \\ 0 & ... \\ \vdots & ... \\ 0 & ... \end{pmatrix}$$

a questo punto basterà prendere H_2 per *"sistemare"* gli elementi della sottomatrice di coda successiva:

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

e così via, introducendo di volta in volta più elementi della diagonale in testa. Si potrà quindi riscrivere la matrice A come:

$$A = \underbrace{H_1^H H_2^H ... H_n^H}_{Q} R$$

dove il prodotto delle unitarie rappresenterà la matrice Q.

Osserviamo che per avere costo $O(mn^2)$ (ed anche costo $O(mn)$ per $Q^H b$) si sfrutta il fatto che:

$$H_j = I + ab^T ???$$

e quindi boh nel caso:

$$H_j b \to O(m), \implies H_n \cdot H_{n-1} \cdot ... \cdot H_1 b \to O(mn)$$

Osserviamo poi che nel caso $m = n$ si può sfruttare la fattorizzazione QR per risolvere sistemi lineari, con costo $O(\frac{4}{3}n^3)$ per la fattorizzazione, il doppio rispetto a Gauss, ma solitamente più stabile.

Osserviamo che se $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ si può restare nei reali ed avere $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $Q^T Q = I$, ecc...

uff