MINIMI QUADRATI LINEARI

LUCIA GASTALDI

1. Approssimazione di dati

Supponiamo di avere a disposizione i dati (x_i, y_i) per $i = 1, \dots, m$ relativi ad un certo esperimento. Supponiamo che un modello del fenomeno sia dato da una funzione $F(x; \underline{\mathbf{c}})$ essendo $\underline{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^n$ un vettore di parametri. Quindi si dovrebbe avere

$$y_i = F(x_i; \underline{\mathbf{c}}) \quad i = 1, \dots, m \tag{1}$$

ma da una parte le misurazioni possono dare risultati affetti da errore e dall'altra parte non sono noti i parametri $\underline{\mathbf{c}}$.

Per semplicità consideriamo un modello lineare, cioè

$$F(x, \underline{\mathbf{c}}) = \sum_{j=1}^{n} c_j \varphi_j(x) = c_1\varphi_1(x) + \cdots + c_n\varphi_n(x), \tag{2}$$

essendo $\varphi_j(x)$ $j = 1, \dots, n$ funzioni assegnate (funzioni di forma). Un caso particolare si ha se si scelgono come funzioni $\varphi_j(x) = x^j$ per $j = 0, \dots, n$, quindi il modello lineare è dato da

$$F(x, \underline{\mathbf{c}}) = \tilde{P}(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j x^{n-j}. \tag{3}$$

In questo caso si deve determinare il polinomio $P(x)$ di grado n tale che

$$P(x_i) = y_i \quad i = 1, \dots, m. \tag{4}$$

Abbiamo visto che, quando si ha un numero elevato di dati, l'interpolazione polinomiale e le spline non forniscono delle soluzioni adeguate in quanto si possono verificare oscillazioni che non rispettano l'andamento del fenomeno fisico. Pertanto nei modelli introdotti si sceglie $n \ll m$; di conseguenza nei sistemi lineari (1) e (4), il numero delle equazioni è superiore a quello delle incognite e il sistema si dice *sovradeterminato*. La soluzione di questi sistemi esiste solo in casi particolari di scelte del vettore $\underline{\mathbf{y}}$. Cerchiamo quindi i parametri $\underline{\mathbf{c}}$ in modo tale che F fornisca un'approssimazione dei dati secondo un criterio di ottimalità.

2. Minimi quadrati lineari

In questa sezione trattiamo il caso dell'approssimazione con polinomi data da (3). Invece di risolvere il sistema (4) si vuole determinare il polinomio P di grado n che meglio approssima nel senso dei *minimi quadrati lineari* ossia tale che

$$\sum_{i=1}^{m} |y_i - P(x_i)|^2 \le \sum_{i=1}^{m} |y_i - p_n(x_i)|^2 \tag{5}$$

al variare di $p_n(x)$ nello spazio vettoriale dei polinomi di grado n. In forma matriciale il problema di minimo (5) si scrive: cerco il vettore $\underline{\mathbf{c}}^* \in \mathbb{R}^{n+1}$ tale che

$$\|\underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}}^*\|^2 = \min_{\underline{\mathbf{b}}\in\mathbb{R}^{n+1}} \|\underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}}\|^2, \tag{6}$$

essendo $B \in \mathbb{R}^{m\times n+1}$, $\underline{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^m$ e $\underline{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^{n+1}$ dati da

$$B = \begin{bmatrix} x_1^n & \dots & x_1 & 1 \\ x_2^n & \dots & x_2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_m^n & \dots & x_m & 1 \end{bmatrix} \quad \underline{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix} \quad \underline{\mathbf{c}} = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Quindi il problema è stato ricondotto a cercare il minimo della funzione $\Phi : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}$ definita come segue:

$$\Phi(\underline{\mathbf{c}}) = \Phi(c_0, c_1, \dots, c_n) = \sum_{i=1}^{m} \Big(y_i - c_0 x_i^n - \dots - c_{n-1}x_i - c_n\Big)^2. \tag{8}$$

Studiamo il caso particolare della *retta di regressione lineare*, ossia il caso in cui il polinomio $P(x) = c_0 x + c_1$. Si deve cercare il punto di minimo della funzione:

$$\Phi(c_0, c_1) = \sum_{i=1}^{m} \Big(y_i - c_0 x_i - c_1\Big)^2.$$

Annullando le derivate parziali si ottiene:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial c_0}(c_0, c_1) = \sum_{i=1}^{m} 2(y_i - c_0 x_i - c_1)(-x_i) = 0$$
$$\frac{\partial\Phi}{\partial c_1}(c_0, c_1) = \sum_{i=1}^{m} 2(y_i - c_0 x_i - c_1)(-1) = 0$$

Abbiamo quindi ottenuto il sistema di 2 equazioni in 2 incognite

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=0}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{m} y_i \end{bmatrix}. \tag{9}$$

In questo caso particolare la matrice B ha la forma seguente

$$B = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \dots & \dots \\ x_n & 1 \end{bmatrix} = [\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{1}}]$$

essendo $\underline{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^m$ il vettore colonna di componenti x_i e $\underline{\mathbf{1}}$ il vettore colonna con tutte le componenti pari a 1. Si verifica facilmente che il sistema (9) corrisponde al sistema delle *equazioni normali*

$$B^\top B\underline{\mathbf{c}} = B^\top \underline{\mathbf{y}}. \tag{10}$$

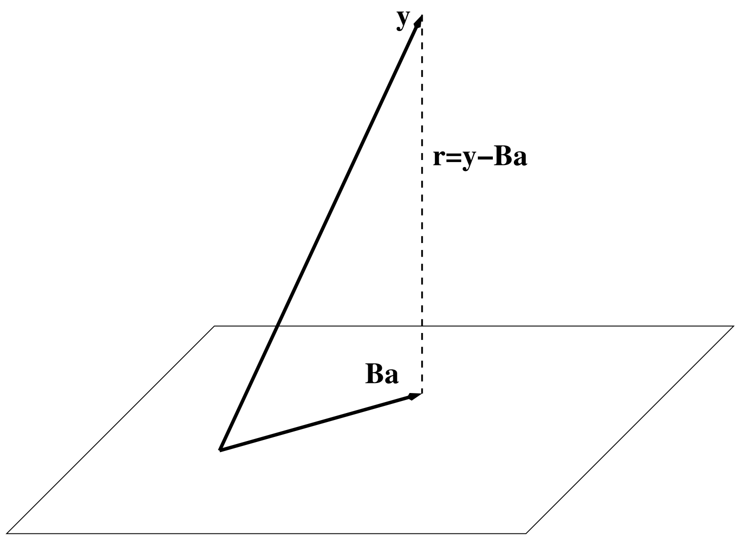

FIGURE 1. Interpretazione geometrica delle equazioni normali

La soluzione di questo sistema si scrive $\underline{\mathbf{c}} = (B^\top B)^{-1} B^\top \underline{\mathbf{y}}$ dove la matrice $(B^\top B)^{-1} B^\top$ è detta *matrice pseudo inversa* di B.

Tornando al problema più generale in cui si cerca un polinomio di grado n, si può verificare che la ricerca dei minimi della funzione Φ definita in (8) porta alla soluzione del sistema delle equazioni normali (10) con B, $\underline{\mathbf{y}}$ e $\underline{\mathbf{c}}$ dati in (7).

Possiamo riscrivere il sistema delle equazioni normali nella forma

$$B^\top(\underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}}) =$$

che indica che il vettore residuo $\mathbf{r} = \underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}}$ è ortogonale a tutte le colonne di B, e quindi $B\underline{\mathbf{c}}$ è il punto nello spazio vettoriale generato dalle colonne di B che si trova a minima distanza da $\underline{\mathbf{y}}$, vedi Figura 1. Il calcolo della matrice $B^\top B$ può essere oneroso e la propagazione degli errori di macchina può diventare significativa, pertanto la risoluzione del problema ai minimi quadrati lineari si effettua utilizzando la *fattorizzazione* QR della matrice B.

3. FATTORIZZAZIONE QR

Definizione 1. Una matrice quadrata $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ si dice *ortogonale* se vale $Q^\top Q = \mathbb{I}_m$ dove $\mathbb{I}_m$ è la matrice identità in $\mathbb{R}^{m \times m}$. Questo significa che facendo il prodotto scalare di due colonne distinte di Q si ottiene 0, mentre, per ogni colonna $\underline{\mathbf{q}}_i$, $i = 1, \ldots, m$ di Q si ha $\|\underline{\mathbf{q}}_i\| = \underline{\mathbf{q}}_i^\top \underline{\mathbf{q}}_i = 1$.

Definizione 2. Diciamo che una matrice $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ammette una *fattorizzazione* QR, se esistono una matrice ortogonale $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ed una matrice triangolare superiore $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$B = QR.$$

Osserviamo che le ultime $m - n$ righe di R hanno tutti gli elementi nulli. Si veda la Figura 2.

Indichiamo con $\underline{\mathbf{b}}_i$, $i = 1, \ldots, n$ le colonne di B e con $\underline{\mathbf{q}}_i$, $i = 1, \ldots, m$ quelle di Q. Si ha quindi $B = [\underline{\mathbf{b}}_1, \ldots, \underline{\mathbf{b}}_n]$ e $Q = [\underline{\mathbf{q}}_1, \ldots \underline{\mathbf{q}}_m]$. Se B è a rango pieno (ossia tutte le sue colonne sono linearmente indipendenti) allora lo spazio generato dalle colonne di B è uguale

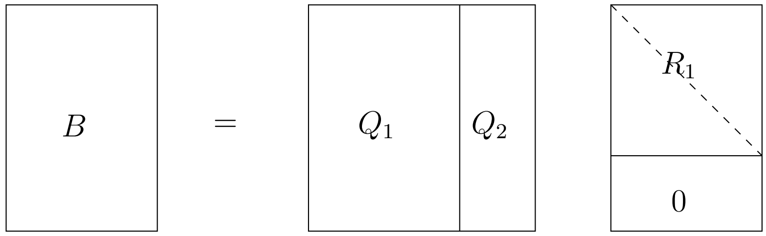

FIGURE 2. La fattorizzazione QR

allo spazio generato dalle prime n colonne di Q. La figura 2 schematizza la fattorizzazione. Si nota in particolare che $B = Q_1 R_1$. In particolare, la colonna $\underline{\mathbf{b}}_k$ di B si ottiene come combinazione lineare delle prime k colonne di Q come segue

$$\underline{\mathbf{b}}_k = \sum_{i=1}^{k} r_{ik}\underline{\mathbf{q}}_i, \tag{11}$$

essendo r_{ik} elementi della matrice R_1. Per calcolare direttamente la fattorizzazione $B = Q_1 R_1$ si può usare il *metodo di Gram-Schmidt*. Prima di tutto si osserva che avendo calcolato le prime $k-1$ colonne di Q_1, la colonna $\underline{\mathbf{q}}_k$ si ottiene risolvendo l'equazione (11) cioè

$$\underline{\mathbf{q}}_k = \frac{\underline{\mathbf{b}}_k - \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} r_{ik}\underline{\mathbf{q}}_i}{r_{kk}}.$$

Quindi si ottiene il seguente algoritmo in cui la matrice R_1 viene costruita per colonne.

Algoritmo di Gram-Schmidt classico

$$
\begin{array}{l}
\texttt{for } k = 1:n \\
\quad \texttt{for } i = 1:k-1 \\
\qquad r_{ik} = \underline{\mathbf{q}}_i^\top \underline{\mathbf{b}}_k \\
\quad \texttt{end} \\
\quad \underline{\mathbf{z}} = \underline{\mathbf{b}}_k - \displaystyle\sum_{i=1}^{k-i} r_{ik}\underline{\mathbf{q}}_i \\
\quad r_{kk} = \|\underline{\mathbf{z}}\| \\
\quad \underline{\mathbf{q}}_k = \underline{\mathbf{z}}/r_{kk} \\
\texttt{end}
\end{array}
$$

Purtroppo il metodo di Gram-Schmidt classico fornisce un risultato poco attendibile in quanto le colonne $\underline{\mathbf{q}}_i$ non soddisfano in modo soddisfacente la condizione di ortogonalità. Riordinando le operazioni e quindi costruendo la matrice R_1 per righe si ottiene un algoritmo numericamente più efficiente in quanto è meno sensibile alla propagazione degli errori di macchina.

Algoritmo di Gram-Schmidt modificato

$$
\begin{array}{l}
\texttt{for } k = 1 : n \\
\quad r_{kk} = \|\underline{\mathbf{b}}_k\| \\
\quad \underline{\mathbf{q}}_k = \underline{\mathbf{b}}_k / r_{kk} \\
\quad \texttt{for } j = k+1 : n \\
\quad\quad r_{kj} = \underline{\mathbf{q}}_k^\top \underline{\mathbf{b}}_j \\
\quad\quad \underline{\mathbf{b}}_j = \underline{\mathbf{b}}_j - r_{kj} \underline{\mathbf{q}}_k \\
\quad \texttt{end} \\
\texttt{end}
\end{array}
$$

Avendo a disposizione la fattorizzazione QR della matrice B, il sistema delle equazioni normali si risolve osservando che valgono le seguenti identità:

$$
\begin{aligned}
&B^\top B = R_1^\top Q_1^\top Q_1 R_1 = R_1^\top I_n R_1 = R_1^\top R_1 \\
&B^\top \underline{\mathbf{y}} = R_1^\top Q_1^\top \underline{\mathbf{y}},
\end{aligned}
$$

dove I_n è la matrice identità di dimensione n.

Il sistema delle equazioni normali diventa:

$$
R_1^\top R_1 \underline{\mathbf{c}} = R_1^\top Q_1^\top \underline{\mathbf{y}};
$$

se la matrice B è a rango pieno, la matrice triangolare superiore è invertibile, quindi si ottiene $\underline{\mathbf{c}}$ risolvendo il sistema

$$
R_1 \underline{\mathbf{c}} = Q_1^\top \underline{\mathbf{y}}.
$$

La fattorizzazione QR dà anche la soluzione del problema di minimo (6). Data una matrice ortogonale $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$, si verifica facilmente che per ogni vettore $x \in \mathbb{R}^m$ vale

$$
\|Qx\|^2 = x^\top Q^\top Q x = x^\top x = \|x\|^2,
$$

ossia la moltiplicazione per una matrice ortogonale non modifica la norma. Si ottiene quindi la seguente sequenza di identità ricordando la decomposizione della matrici Q ed R riportata in Figura 2:

$$
\begin{aligned}
\|\underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}}\|^2 &= \|Q^\top(\underline{\mathbf{y}} - B\underline{\mathbf{c}})\|^2 = \|Q^\top \underline{\mathbf{y}} - Q^\top Q R \underline{\mathbf{c}}\|^2 \\
&= \|Q^\top \underline{\mathbf{y}} - R\underline{\mathbf{c}}\|^2 = \|Q_1^\top \underline{\mathbf{y}} - R_1 \underline{\mathbf{c}}\|^2 + \|Q_2^\top \underline{\mathbf{y}}\|^2
\end{aligned}
$$

L'ultima relazione indica che il minimo si ottiene risolvendo $R_1\underline{\mathbf{c}} = Q_1^\top \underline{\mathbf{y}}$ e il valore minimo è $\|Q_2^\top \underline{\mathbf{y}}\|^2$.

DICATAM - sez. di Matematica, Università di Brescia, Italy
Email address: `lucia.gastaldi@unibs.it`
URL: `lucia-gastaldi.unibs.it`