

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
MATEMATIKA INTÉZET

Szalai Eszter

**MÁTRIX FELBONTÁSOK ÉS
ALKALMAZÁSAIK**

BSc szakdolgozat

Témavezető: Dr. Gergó Lajos



ELTE Numerikus Analízis Tanszék

Budapest 2016.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Gergó Lajosnak, hogy a szakdolgozat témaválasztásában, a hozzá kapcsolódó szakirodalom megismerésében, illetve annak feldolgozásában segítségemre volt.

Tartalomjegyzék

1. Mátrix felbontások	3
1.1. Gauss-elimináció	3
1.2. LU-felbontás	4
1.3. Cholesky-féle felbontás	7
1.4. QR-felbontás	9
1.5. Schur-féle felbontás	11
1.6. Szinguláris felbontás	13
2. Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása	16
2.1. Newton-módszer	16
2.2. Egyszerűsített Newton-módszer	18
2.3. Összehasonlítás	18
3. Legkisebb négyzetek módszere	19
3.1. Egyenes illesztése a síkon	20
3.2. Két párhuzamos egyenes illesztése a síkon	23
3.3. Két egymásra merőleges egyenes illesztése a síkon	24
3.4. Téglalap illesztés	25
3.5. Négyzet illesztés	27
3.6. További sokszög illesztések	28
3.7. Hipersík illesztése	30

Bevezetés

A matematikai modellezés során gyakran találkozunk lineáris és nemlineáris egyenletrendszerekkel, melyek megoldási módszereivel és azok fejlesztésével foglalkozik a numerikus analízis egy jelentős része. A lineáris egyenletrendszerek megoldására kezdetben a Gauss-eliminációt használták, viszont ez nagyobb méretű mátrixoknál már nem hatékony, így szükség volt más módszerek bevezetésére is, ilyenek például a mátrix felbontások.

A dolgozatban először bemutatom a Gauss-elimináció lépéseit, hiszen az LU- és a Cholesky-felbontás is ezen az algoritmuson alapszik. A QR-felbontás egy egészen más irányból közelíti meg a feladatot: a Gram-Schmidt ortogonalizáció futtatása adja a felbontást. A Schur- és szinguláris felbontások pedig unitér mátrixok segítségével állíthatóak elő, a módszerek levezetése az 1.5. és 1.6. fejezetekben található.

Az LU-felbontás alkalmazására a 2. fejezetben láthatunk példát. Itt az $f(\mathbf{x}) = 0$ alakú nemlineáris egyenletrendszerek megoldásában van szerepe, melyre a Newton-módszer két változatát mutatom be. A klasszikus Newton-módszerben minden iterációs lépésben használjuk az LU-felbontást, ezt hasonlítom össze az egyszerűsített Newton-módszerrel, ahol csak az első lépésben alkalmazzuk a felbontást, amit az iteráció további lépéseiben változtatás nélkül felhasználunk.

A 3. fejezetben megismerkedünk a legkisebb négyzetek módszerével, amely a QR- és a szinguláris felbontást használja fel. A módszert a matematika számos területén alkalmazzák mért adatok közötti kapcsolat becslésére. A gyakorlatban minőségellenőrzésekkel is felmerülhet a probléma, azaz a gyártási folyamat során az elkészült darabokat lemérik, majd az adatokat összevetik az elvárt adatokkal, így ellenőrizve a gyártás minőségét. Ebben a dolgozatban lineáris egyenesek illesztését vezetjük be, majd megmutatjuk, hogy ennek kis változtatásával zárt alakzatok illesztésére is alkalmazható a módszer. Végezetül pedig nagyobb dimenziókra is kiterjesztjük a feladatot, aminek segítségével bemutatjuk, hogy a legkisebb négyzetek módszere hipersíkok illesztésére is alkalmazható.

1. Mátrix felbontások

1.1. Gauss-elimináció

A Gauss-elimináció lineáris egyenletrendszerek (továbbiakban: LER) megoldására egy egyszerű és jól alkalmazható algoritmus. Tekintsük a következő n ismeretlenes és n egyenletből álló LER-t:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (1.1)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \quad (1.2)$$

...

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n. \quad (1.3)$$

Első lépésben a LER alapján elkészítjük a következő három mátrixot:

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,k} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,k} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,k} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

melyek segítségével a LER felírható az

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \det(A) \neq 0, \quad \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, \quad A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

alakban is, ahol az \mathbf{x} vektor értékét keressük.

Bővítsük ki az A mátrixot \mathbf{b} -vel, és legyen a bővített mátrix $A^{(0)} = [A|\mathbf{b}]$, így egy $\mathbb{R}^{n \times (n+1)}$ -es mátrixot kapunk. Ezen a mátrixon hajtjuk végre a Gauss-eliminációt, aminek az algoritmus két fő részből áll. Az első részben az $A^{(0)}$ mátrixot felső háromszögmátrixszá alakítjuk, a másodikban pedig rekurzív visszahelyettesítéssel meghatározzuk az \mathbf{x} -et. A felső háromszögmátrix eléréséhez $n - 1$ lépésre lesz szükségünk, melyek során minden k -adik lépésben kinullázzuk a k -adik oszlop főátló alatti részét. Ezt úgy érjük el, hogy minden j -re, melyre $k < j \leq n$, a j -edik sorhoz hozzáadjuk a k -adik sor $-\frac{a_{j+1,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}$ -szeresét. Az így kapott mátrixot nevezzük el $A^{(k)}$ -nak,

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1,n} & a_{1,n+1} \\ 0 & a_{2,2}^{(1)} & \cdots & a_{2,k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2,n}^{(1)} & a_{2,n+1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{k,k}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k-1)} & a_{k,n+1}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} & a_{k+1,n+1}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{n,n}^{(k)} & a_{n,n+1}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

$$a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} a_{k,j}^{(k-1)}, \quad i = k+1, \dots, n, \quad j = k, \dots, n, n+1. \quad (1.5)$$

Az $(n-1)$ -edik lépésben kapott $A^{(n-1)}$ egy felső háromszögmátrixú LER-t reprezentál, aminek segítségével rekurzív visszahelyettesítéssel kiszámítható az $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ vektor.

$$x_n = \frac{a_{n,n+1}^{(n-1)}}{a_{n,n}^{(n-1)}} \quad (1.6)$$

$$x_k = \frac{1}{a_{k,k}^{(k-1)}} (a_{k,n+1}^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^n a_{k,j}^{(k-1)} x_j), \quad (1.7)$$

$$k = n-1, n-2, \dots, 2, 1.$$

1.1. Tétel. Az $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $\det(A) \neq 0$, $D_k \neq 0 \forall k = 1, \dots, n-1$ LER esetén a Gauss-elimináció algoritmus végrehajtható. D_k az A mátrix k -edik főminorá, azaz a bal felső $k \times k$ -as részmátrix determinánsa.

Bizonyítás. Indirekt tegyük fel, hogy a k -edik lépésben megakad az algoritmus. Ez csak akkor fordulhat elő, ha az $A^{(k-1)}$ mátrixban az $a_{k,k}^{(k-1)}$ elem nulla, azaz $D_k = a_{1,1} a_{2,2}^{(1)} \cdots a_{k,k}^{(k-1)} = 0$, ami ellentmond a $D_k \neq 0$ feltevéssel. \square

1.2. LU-felbontás

Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk, hogy egy adott $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\det(A) \neq 0$ mátrixnak milyen feltételek mellett létezik azon $A = LU$ felbontása, ahol L egy alsó háromszögmátrix, és $\forall i = 1, 2, \dots, n$ -re $l_{i,i} = 1$ (jelölés: $L \in \mathcal{L}^{(1)}$), az U pedig

felső háromszögmátrix (jelölés: $U \in \mathcal{U}$). A szorzat előállításához az előző fejezetben tárgyalt Gauss-elimináció lépéseire fogunk támaszkodni: az algoritmus k -edik lépésében előállított $A^{(k)}$ mátrix elemeit felhasználva definiáljuk az

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{k+1,k} & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{n,k} & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrixokat, ahol az $l_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}$, $i = k+1, \dots, n$ számok az L_k mátrix k -edik oszlopában vannak, illetve a főátlóban csak egyesek szerepelnek. Az így kapott mátrixok invertálhatóak lesznek, ugyanis egy alsó háromszögmátrix determinánsa a főátlóbeli elemek szorzata, így $\det(L_k) = 1$. Sőt, az L_k^{-1} -et úgy kapjuk L_k -ből, hogy L_k főátló alatti elemeit megszorozzuk (-1) -gyel. Az így definiált L_k mátrixokkal egyszerűen felírhatóak a Gauss-elimináció k -edik lépésében kapott $A^{(k)}$ mátrixok, azaz az $A^{(0)}$ -t $A^{(0)} = A$ -nak választva:

$$L_1 A^{(0)} = A^{(1)}, \quad L_2 A^{(1)} = A^{(2)}, \quad \dots, \quad L_k A^{(k-1)} = A^{(k)}.$$

Ezek után az $A^{(n-1)}$ kifejezhető az L_k és A mátrixokkal:

$$L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A = A^{(n-1)} \in U. \quad (1.8)$$

Az egyenlet jobboldalán így egy felső háromszögmátrixot kaptunk, hiszen az $A^{(n-1)}$ a Gauss-elimináció eredményeképp kapott mátrix. Vezessük be az $U = A^{(n-1)}$ jelölést, és rendezzük az egyenletet az L_k -k inverzeivel való szorzással.

$$A = (L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}) U. \quad (1.9)$$

Könnyen belátható, hogy az $L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}$ szorzat egy $\mathcal{L}^{(1)}$ -beli mátrix,

$$L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & l_{n,3} & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

ahol az l_i, k értékek a fentebb megadott hányadosok. Így az

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} \quad (1.10)$$

jelöléssel az A mátrix felírható $A = LU$ formában, ahol L alsó háromszögmátrix, U felső háromszögmátrix, ráadásul a Gauss-elimináció futtatása során meg is kapjuk a két mátrixot.

Vizsgáljuk meg, hogy milyen feltételek mellett létezik a felbontás, majd a felbontás egyértelműségét.

1.2. Tétel. *Ha $D_k \neq 0 \forall k = 1, \dots, n-1$, akkor az $A = LU$ felbontás létezik.*

Bizonyítás. Az 1.1. tételnél láttuk, hogy a Gauss-elimináció algoritmusával ezzel a feltétellel lefuttatható, így a futás során a két mátrix elő is áll, tehát a felbontás is létezik. \square

1.3. Tétel. *$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ha $\det(A) \neq 0$, akkor az $A = LU$ felbontás egyértelmű.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy létezik két felbontása is az A mátrixnak, azaz, hogy létezik $L_1, L_2 \in \mathcal{L}^{(1)}$ és $U_1, U_2 \in \mathcal{U}$ úgy, hogy $A = L_1 U_1 = L_2 U_2$, ahol L_1, L_2, U_1, U_2 invertálható mátrixok. Rendezzük az egyenletet úgy, hogy az egyik oldalra csak az alsó, a másik oldalra csak a felső háromszögmátrixok kerüljenek:

$$L_1^{-1} L_1 U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 U_2 U_2^{-1} \quad (1.11)$$

$$U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2. \quad (1.12)$$

A rendezés után azt látjuk, hogy az egyenlet bal oldalán két felső háromszögmátrix szorzata van, mely szintén egy felső háromszögmátrixot eredményez, míg a jobb oldalán egy olyan alsó háromszögmátrix, melynek főátlójában csak egyesek szerepelnek. A két oldal csak abban az esetben egyezhet meg, ha mindkét oldalon diagonális mátrix áll. Mivel a jobb oldalon az egységmátrix szerepel, a bal oldali is egységmátrix, tehát a két egyenletet felírva

$$U_1 U_2^{-1} = I \Leftrightarrow U_1 = U_2, \quad \text{illetve} \quad (1.13)$$

$$L_1 L_2^{-1} = I \Leftrightarrow L_1 = L_2 \quad (1.14)$$

belátható, hogy amennyiben létezik egy mátrixnak a tételben említett tulajdonságok mellett LU-felbontása, akkor az egyértelmű is. \square

1.3. Cholesky-féle felbontás

Az LU-felbontásnál egy általános felső háromszögmátrix és egy olyan alsó háromszögmátrix szorzatára bontottuk az A -t, melynek főtlójában csak egyesek szerepelnek, ez a felbontás azonban nagyobb mátrixok esetén már nagy tárhelyet is foglalhat. Ennek kiküszöbölésére a Cholesky-féle felbontásnál azt vizsgáljuk, létezik-e egy mátrixnak olyan felbontása, ahol alkalmas \mathcal{L} -beli L -re $A = LL^T$, azaz mindössze egy általános alsó háromszögmátrix definiálásával szorzattá alakítható-e az A . Látni fogjuk, hogy ehhez arra van szükség, hogy A szimmetrikus, és pozitív definit mátrix legyen.

1.3.1. Definíció. Egy A szimmetrikus mátrix pozitív definit, ha $\forall \mathbf{x} \neq 0, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ -re $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$.

A szorzat előállításához vegyük alapul az 1.2. fejezetben taglalt LU-felbontást. Azt tudjuk, hogy az $A = LU$ felbontás létezik, hiszen a pozitív definitésg miatt minden $D_k \neq 0$, így a felbontás egyértelmű is.

Az U mátrixban $\forall i = 1, \dots, n$ -re az $u_{i,i}$ elem pozitív, ugyanis a főminorok determinánsaira igaz, hogy

$$D_k = \prod_{i=1}^k u_{i,i} > 0 \quad \forall k = 1, \dots, n.$$

Következésképp minden $u_{i,i}$ -nek létezik valós gyöke, amik segítségével bevezethetjük a D diagonális mátrixot, melyre $d_{i,i} = \sqrt{u_{i,i}}$. Ekkor a DD^{-1} szorzat az egységmátrixot adja, így A felírható az

$$A = LDD^{-1}U = (LD)(D^{-1}U) \tag{1.15}$$

alakban. Vezessük be a következő jelöléseket: $B = LD$ és $C = D^{-1}U$, tehát az (1.15) egyenlet átírható az $A = BC$ formába. Mivel $B \in \mathcal{L}$, és $C \in \mathcal{U}$, ezek akár jó jelöltek is lehetnek a Cholesky-felbontás két tagjára. Ehhez azt kell megvizsgálunk, hogy $C = B^T$ teljesül-e.

1.1. Állítás. Az előbbi jelölésekkel $C = B^T$.

Bizonyítás. Mivel A szimmetrikus mátrix, a BC szorzatnak is szimmetrikusnak kell lennie, azaz

$$BC = (BC)^T = C^T B^T \tag{1.16}$$

Rendezzük az egyenletet: szorozzunk balról B inverzével, jobbról B^T inverzével:

$$B^{-1}BC(B^T)^{-1} = B^{-1}C^TB^T(B^T)^{-1} \quad (1.17)$$

$$C(B^T)^{-1} = B^{-1}C^T. \quad (1.18)$$

A baloldalon egy \mathcal{U} -beli, a jobboldalon egy \mathcal{L} -beli mátrix van (az inverz számítás nem változtat a felső, illetve alsó háromszögmátrix tulajdonságon). Az egyenlőség csak abban az esetben állhat fenn, ha mindkét oldalon az egységmátrix áll, tehát a következő egyenletet rendezve:

$$C(B^T)^{-1} = I \Leftrightarrow C = B^T \quad (1.19)$$

beláttuk az állítást. □

Ezután megfogalmazhatjuk a létezését és egyértelműséget kimondó tételt:

1.4. Tétel. *Ha $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szimmetrikus, pozitív definit mátrix, akkor létezik egy olyan $A = LL^T$ felbontása, ahol $L \in \mathcal{L}$. Továbbá, ha L főátlóbeli elemei pozitívak, a felbontás egyértelmű.*

Bizonyítás. Az LU-felbontásról már beláttuk, hogy létezik ezen feltételek mellett. Azt is láttuk, hogy az U mátrix minden főátlóbeli eleme pozitív, tehát $\forall i$ -re létezik a $\sqrt{u_{i,i}}$, így az adott feltételek mellett minden esetben előállítható a szükséges D mátrix, illetve annak inverze.

Az egyértelműség bizonyításához indirekt tegyük fel, hogy az A mátrixhoz két különböző felbontás is létezik, azaz $A = L_1L_1^T = L_2L_2^T$. Tegyük fel továbbá, hogy az L_1 és az L_2 mátrixok főátlóbeli elemei pozitívak. Rendezzük az egyenletet L_1 inverzével, illetve L_2^T inverzével való beszorzással:

$$L_1^{-1}L_1L_1^T(L_2^T)^{-1} = L_1^{-1}L_2L_2^T(L_2^T)^{-1} \quad (1.20)$$

$$L_1^T(L_2^T)^{-1} = L_1^{-1}L_2 \quad (1.21)$$

Az (1.21) egyenlet baloldalán egy felső, jobboldalán egy alsó háromszögmátrixot találhatók. Az egyenlőség csak úgy teljesülhet, ha mindkét oldalon az egységmátrix szerepel, amiből következik, hogy $L_1 = L_2$. □

1.4. QR-felbontás

A QR-felbontás egyik felhasználása a legkisebb négyzetek módszeréhez köthető, amivel a későbbiekben a 3. fejezetben fogunk foglalkozni. A felbontás egy Q és egy R mátrix szorzatára bontja az A mátrixot, ahol Q ortogonális, melynek oszlopai ortonormált rendszert alkotnak, R pedig egy felső háromszögmátrix. A két mátrixot a Gram-Schmidt ortogonalizáció végrehajtásával állíthatjuk elő.

Jelöljük \mathbf{q}_i -vel a Q mátrix i -edik oszlopát, $r_{i,i}$ -vel az R mátrix i -edik diagonálelemét, ahol $i = 1, \dots, n$, $c_i^{(k)}$ -val az R i -edik sorának k -adik elemét, ahol $i = 1, \dots, n-1$ és $k = 1, \dots, n-1$, valamint A i -edik oszlopát \mathbf{a}_i -vel, ahol $i = 1, \dots, n$.

Először számítsuk ki \mathbf{q}_1 -et a következő módon:

$$\mathbf{q}_1^* = \mathbf{a}_1 \quad (1.22)$$

$$r_{1,1} = \|\mathbf{q}_1^*\|_2 \quad (1.23)$$

$$\mathbf{q}_1 = \frac{1}{r_{1,1}} \mathbf{q}_1^*. \quad (1.24)$$

Ezután tegyük fel, hogy Q első $k-1$ ortonormált oszlopát már elkészítettük, melyek segítségével fejezzük ki a \mathbf{q}_k oszlopot.

$$\mathbf{q}_k^* = \mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} c_j^{(k)} \mathbf{q}_j, \quad (1.25)$$

$$c_j^{(k)} = \langle \mathbf{a}_k, \mathbf{q}_j \rangle, \quad j = 1, \dots, k-1 \quad (1.26)$$

$$r_{k,k} = \|\mathbf{q}_k^*\|_2 \quad (1.27)$$

$$\mathbf{q}_k = \frac{1}{r_{k,k}} \mathbf{q}_k^*. \quad (1.28)$$

Ezzel definiáltuk a $Q = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ mátrixot, illetve az

$$R = \begin{pmatrix} r_{1,1} & c_1^{(1)} & \cdots & c_1^{(n-1)} \\ 0 & r_{2,2} & \cdots & c_2^{(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{n,n} \end{pmatrix}$$

mátrixot, de még ellenőriznünk kell, hogy a két mátrix szorzata valóban A -t adja-e. Ehhez elég megnéznünk az A k -adik oszlopát, amit ki tudunk fejezni \mathbf{q}_k definíciójá-

ból:

$$\mathbf{a}_k = r_{k,k}\mathbf{q}_k + \sum_{j=1}^{k-1} c_j^{(k)}\mathbf{q}_j. \quad (1.29)$$

Könnyen belátható, hogy a két mátrix szorzata is ugyanerre az eredményre vezet, tehát az így definiált mátrixokkal megadható az $A = QR$ felbontás.

Felvetődik a kérdés, hogy milyen A mátrixokhoz létezik ilyen Q és R mátrix, illetve fontos még megvizsgálni az egyértelműség kérdését is. Ezek megválaszolására szolgál a következő két tétel.

1.5. Tétel. *Ha $\det(A) \neq 0 \Rightarrow$ az $A = QR$ felbontás létezik (az eddigi jelöléseket használva).*

Bizonyítás. A Gram-Schmidt eljárás csak a \mathbf{q}_k vektor meghatározásánál akadhat el, amikor is $r_{k,k}$ -val osztunk. Indirekt tegyük fel, hogy $r_{k,k} = 0$. Ez az jelenti, hogy

$$r_{k,k} = \|\mathbf{q}^*\|_2 = 0 \Leftrightarrow \mathbf{q}_k^* = \mathbf{0}, \quad (1.30)$$

tehát $\mathbf{a}_k = \sum_{j=1}^{k-1} c_j^{(k)}\mathbf{q}_j$, vagyis \mathbf{a}_k lineárisan függ az \mathbf{a}_i vektoroktól, ahol $0 < i < k$. Ebből viszont következik, hogy A determinánsa nulla, ami ellentmond a $\det(A) \neq 0$ feltételnek. \square

1.6. Tétel. *Ha $\det(A) \neq 0$ és R főátlóbeli elemei pozitívak, akkor az A mátrix QR -felbontása egyértelmű.*

Bizonyítás. Legyen A olyan mátrix, melynek létezik QR-felbontása. Indirekt tegyük fel, hogy léteznek a Q_1, Q_2, R_1, R_2 mátrixok úgy, hogy $A = Q_1R_1$, és $A = Q_2R_2$, tehát $Q_1R_1 = Q_2R_2$. Rendezzük az egyenletet: szorozzunk balról Q_1^T -tal és jobbról R_2 inverzével.

$$Q_1^T Q_1 R_1 R_2^{-1} = Q_1^T Q_2 R_2 R_2^{-1} \quad (1.31)$$

Kihasználjuk, hogy Q_1 ortogonális mátrix, azaz Q_1 inverze egyben a transzponáltja is ($Q_1^T Q_1 = I$), amiből az

$$R_1 R_2^{-1} = Q_1^T Q_2 \quad (1.32)$$

egyenletet kapjuk. Az egyenlet baloldalán egy felső háromszögmátrix, a jobboldalán pedig egy ortonormált mátrix található. Egy felső háromszögmátrix viszont csak abban az esetben lehet ortonormált, ha az az egységmátrix, tehát az egyenlet mindkét oldalán egy-egy egységmátrix található.

$$Q_1^T Q_2 = I \Leftrightarrow Q_1 = Q_2 \quad (1.33)$$

$$R_1 R_2^{-1} = I \Leftrightarrow R_1 = R_2. \quad (1.34)$$

Ezzel beláttuk, hogy az A egy QR-felbontása az adott feltételekkel egyértelmű. \square

1.5. Schur-féle felbontás

1.5.1. Definíció (Unitér mátrix). Az $U \in \mathbb{K}^{n \times n}$ unitér mátrix, ha transzponált konjugáltja megegyezik az inverzével.

A Schur-felbontásban A mátrixnak egy olyan szorzatra bontását keressük, ahol $A = URU^*$ úgy, hogy U egy unitér mátrix, illetve R egy felső háromszögmátrix legyen. A felbontás létezésének bizonyításához szükséges a következő lemma belátása:

1.1. Lemma. $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ esetén létezik U unitér mátrix, hogy

$$U^*AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{c}^T \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$$

alakú, ahol λ_1 A egy sajátértéke, \mathbf{c}^T egy $n-1$ hosszú sorvektor, és $A_1 \in \mathbb{K}^{(n-1) \times (n-1)}$.

Bizonyítás. Legyen $(\lambda_1, \mathbf{u}_1)$ A egy sajátpárja úgy, hogy $\|\mathbf{u}_1\|_2 = 1$, és legyen az $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$ mátrix egy ortonormált rendszer. Ekkor U unitér mátrix, és az U^*AU pontosan a lemmában megadott mátrixot adja. Ennek a belátásához elég kiszámolnunk, hogy mi az U^*AU első oszlopa. Legyen $\mathbf{e}_1 \in \mathbb{R}^n$ az első egységvektor, azaz első eleme 1, a többi 0. Ekkor a szorzat első oszlopát az

$$U^*AU\mathbf{e}_1 = U^*A\mathbf{u}_1 \quad (1.35)$$

szorzat adja. Mivel \mathbf{u}_1 sajátvektora A -nak, melyhez a λ_1 sajátérték tartozik, az előző egyenlet átírható az

$$U^*\lambda_1\mathbf{u}_1 = \lambda_1U^*\mathbf{u}_1 \quad (1.36)$$

formába is. Az $U^*\mathbf{u}_1$ szorzat az \mathbf{e}_1 vektort adja eredményül, ugyanis az

$$U^*\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^*\mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2^*\mathbf{u}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^*\mathbf{u}_1 \end{pmatrix}$$

mátrix minden sorában egy skalárszorzat van, ahol az első szorzat kivételével egymásra merőleges vektorokat szorzunk össze, mivel U ortonormált rendszer, amin a konjugálás és transzponálás nem változtat. Így egyedül az $\mathbf{u}_1^*\mathbf{u}_1$ skalárszorzat nem lesz nulla. Ennek az értéke pedig az \mathbf{u}_1 kettes normájának négyzete, azaz $\|\mathbf{u}_1\|_2^2 = 1$. Megkaptuk tehát, hogy $U^*\mathbf{u}_1 = \mathbf{e}_1$, így az $U^*AU\mathbf{e}_1 = \lambda_1\mathbf{e}_1$, ami pontosan a lemmában meghatározott mátrix első oszlopát adja. \square

A lemma segítségével már kimondható és bizonyítható a felbontás létezése.

1.7. Tétel. *Ha $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$, akkor létezik U unitér és $R \in \mathcal{U}$, hogy $A = U^*RU$.*

Bizonyítás. A tételt teljes indukcióval fogjuk bizonyítani, azaz először $n = 1$ -re nézzük meg az állítást.

$$a_{1,1} = 1^*a_{1,1}1 \tag{1.37}$$

Ebben az esetben létezik felbontás. Tegyük fel most, hogy $n - 1$ -re igaz az állítás, és megmutatjuk, hogy ekkor $n \times n$ -es mátrixhoz is létezik Schur-felbontás. $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$, tehát az előző lemma szerint létezik \bar{U} unitér mátrix úgy, hogy

$$\bar{U}^*A\bar{U} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{c}^T \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}. \tag{1.38}$$

A_1 egy $\mathbb{K}^{(n-1) \times (n-1)}$ -beli mátrix, tehát az indukciós feltevés miatt létezik hozzá U_1 unitér és $R_1 \in \mathcal{U}$ mátrix, hogy $A_1 = U_1R_1U_1^*$. Könnyen belátható, hogy az (1.38) jobb oldala felírható a következő szorzatalakban:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{y}^* \\ 0 & R_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{c}^* \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}, \tag{1.39}$$

amennyiben az \mathbf{y}^* -ot meghatározzuk. Ahhoz, hogy az egyenlőség fennálljon, úgy kell megadnunk az \mathbf{y} -t, hogy az

$$\mathbf{y}^*U_1^* = \mathbf{c}^* \tag{1.40}$$

igaz legyen. Ehhez vegyük mindkét oldal transzponáltjának konjugáltját, majd az U mátrix unitér tulajdonságát kihasználva rendezzük az egyenletet:

$$U_1 \mathbf{y} = \mathbf{c} \quad (1.41)$$

$$\mathbf{y} = U_1^* \mathbf{c}. \quad (1.42)$$

Az (1.39) egyenlet baloldalán szereplő mátrixokat jelöljük rendre U' , R , illetve U'^* -gal, melyek segítségével röviden felírható az (1.38) egyenlet:

$$\bar{U}^* A \bar{U} = U' R U'^*. \quad (1.43)$$

Az egyenletet A -ra rendezve a következőt kapjuk:

$$A = \bar{U} U' R U'^* \bar{U}^*. \quad (1.44)$$

Jelöljük az $\bar{U} U'$ mátrixot U -val, az $U'^* \bar{U}^* = (\bar{U} U')^*$ mátrixot pedig U^* -gal. Két unitér mátrix szorzata is unitér, így U is unitér mátrix, amiből természetesen következik, hogy U^* is unitér. A tehát felírható az $A = U R U^*$ formában, ami az A mátrix Schur-felbontását adja. \square

1.6. Szinguláris felbontás

A szinguláris felbontás lényege, hogy egy $A \in \mathbb{K}^{m \times n}$ mátrix felbontható három mátrix szorzatára egy U unitér mátrix, egy D diagonális mátrix és egy V^* unitér mátrix segítségével úgy, hogy

$$A = U D V^*. \quad (1.45)$$

1.6.1. Definíció (Normális mátrix). Legyen A komplex négyzetes mátrix. Ekkor A -t normális mátrixnak hívjuk, ha igaz, hogy

$$A^* A = A A^*, \quad (1.46)$$

ahol A^* jelöli A transzponáltjának konjugáltját.

A szinguláris felbontásról szóló tétel kimondása előtt szükséges a következő tétel bizonyítása.

1.8. Tétel. Legyen $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$, és vegyük az $A = U R U^*$ Schur-felbontását. Ekkor R diagonális mátrix $\Leftrightarrow A$ normális.

Bizonyítás. Először bizonyítsuk a \Rightarrow irányt. A bizonyításhoz az A^*A és az AA^* szorzatokat kell megvizsgálnunk. Mivel A -nak létezik Schur-felbontása, $A = URU^*$, illetve $A^* = UR^*U^*$.

$$AA^* = URU^*UR^*U^* = URR^*U^* \quad (1.47)$$

$$A^*A = UR^*U^*URU^* = UR^*RU^*. \quad (1.48)$$

(1.47) és (1.48) csak akkor egyezik meg, ha $RR^* = R^*R$. Mivel R a feltevés miatt diagonális mátrix, az egyenlőség fennáll, tehát beláttuk, hogy ekkor A normális mátrix.

Most nézzük meg a másik irányt. A normális, tehát igaz rá, hogy $A^*A = AA^*$, valamint A -nak létezik Schur-felbontása, aminek segítségével felírhatjuk az $A^*A = AA^*$ egyenlőséget, felhasználva azt, amit az (1.47), illetve az (1.48) egyenleteknél már kiszámoltunk. A két szorzat a feltétel miatt megegyezik, tehát

$$UR^*RU^* = URR^*U^* \Leftrightarrow R^*R = RR^*. \quad (1.49)$$

Mivel R egy felső háromszögmátrix, az egyenlőség csak abban az esetben áll fent, ha R diagonális mátrix. \square

1.9. Tétel. *Legyen A egy $\mathbb{K}^{m \times n}$ -es mátrix, ahol $m \geq n$. Ekkor létezik A -nak egy $A = UDV^*$ felbontása úgy, hogy $U \in \mathbb{K}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{K}^{n \times n}$ unitér mátrixok, illetve $D \in \mathbb{K}^{m \times n}$, és $D = \begin{pmatrix} D_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ alakú, $D_1 \in \mathbb{K}^{n \times n}$ diagonál mátrix, melynek elemei:*

$$d_{i,i} = \sigma_i, \quad \sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_s > \sigma_{s+1} = \dots = \sigma_n = 0, \quad (1.50)$$

$s = \text{rang}(A)$. A σ_i számokat nevezzük A szinguláris értékeinek.

Bizonyítás. Tekintsük az A^*A szimmetrikus, pozitív szemidefinit mátrixot, azaz $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq 0$ vektorra $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} \geq 0$. Tudjuk, hogy ennek létezik Schur-felbontása, azaz létezik olyan $V \in \mathbb{K}^{n \times n}$ unitér mátrix, hogy

$$V^*(A^*A)V = \text{diag}(\sigma_i^2). \quad (1.51)$$

Tegyük fel, hogy a σ_i számokra teljesül az (1.50) feltétel (tehát csökkenő sorrendben vannak). Bontsuk két részre a V mátrixot úgy, hogy $V = (V_1, V_2)$, $V_1 \in \mathbb{K}^{n \times s}$ a V

mátrix első s oszlopát tartalmazza, $V_2 \in \mathbb{K}^{n \times (n-s)}$ az utolsó $n - s$ oszlopot, ahol s az A mátrix rangját jelöli. Ekkor a blokkmátrixok szorzási szabályának felhasználásával kapjuk a következőket:

$$V_1^* A^* A V_1 = \text{diag}(\sigma_i^2) \in \mathbb{K}^{s \times s} \quad (1.52)$$

$$V_2^* A^* A V_2 = 0 \Leftrightarrow A V_2 = 0 \in \mathbb{K}^{n \times (n-s)}. \quad (1.53)$$

Vezessük be az $U_1 = A V_1 \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_s^{-1}) \in \mathbb{K}^{m \times s}$ mátrixot. Ekkor

$$U_1^* U_1 = I, \quad (1.54)$$

sőt, az U_1 oszlopai ortogonálisak. Egészítsük ki U -t további $m - s$ oszloppal úgy, hogy $U = (U_1, U_2) \in \mathbb{K}^{m \times m}$ ortogonális mátrix legyen. Felírhatjuk az

$$U^* A V = \begin{pmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{pmatrix} A(V_1, V_2) = \begin{pmatrix} U_1^* A V_1 & U_1^* A V_2 \\ U_2^* A V_1 & U_2^* A V_2 \end{pmatrix}$$

szorzatot, ahol konstrukció szerint $A V_2 = 0$, $A V_1 = U_1 \text{diag}(\sigma_i)$. Emiatt

$$U^* A V = \begin{pmatrix} U_1^* U_1 \text{diag}(\sigma_i) & 0 \\ U_2^* U_1 \text{diag}(\sigma_i) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

□

1.7. *Megjegyzés.* Az A mátrix szinguláris értékeit megkaphatjuk az $A^* A$ mátrix sajátértékeiből, tehát $\exists i, j$, melyekre

$$\sigma_i^2 = \lambda_j(A^* A), \quad \text{azaz} \quad \sigma_i = \sqrt{\lambda_j(A^* A)}. \quad (1.55)$$

Miután beláttuk a szinguláris felbontás létezéséről szóló tételt, vizsgáljuk meg, hogyan állítható elő a felbontás. Ehhez két teljes sajátérték feladat megoldására van szükség. Az U mátrix oszlopait az $A A^*$ mátrix sajátvektoraiból álló ortogonális vektorrendszer adja, V oszlopait pedig az $A^* A$ sajátvektorai alkotják. A Σ diagonális mátrix szinguláris értékeit az 1.7. megjegyzés miatt az $A A^*$ és mátrix sajátértékeinek négyzetgyökei adják.

2. Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása

2.1. Newton-módszer

A természettudományos, gazdasági vagy technológiai folyamatokat leíró modellek-nél gyakran találkozunk nemlineáris egyenletekkel, egyenletrendszerekkel. Az ilyen egyenletrendszerek megoldására egy jól alkalmazható módszer a Newton-módszer. Ebben a dolgozatban nem foglalkozunk az egy dimenziós ([1]) esettel, csupán annak kiterjesztésével n dimenzióra.

Tekintsük a következő n nemlineáris, n változós egyenletet:

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (2.1)$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (2.2)$$

...

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad (2.3)$$

ahol $\forall i = 1, \dots, n$ -re $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Legyen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ egy folytonosan differenciálható függvény, és legyen $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$. Az egyenletrendszer ekkor felírható az

$$f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = 0 \quad (2.4)$$

formában. A Newton-módszer első lépése egy kezdeti $\mathbf{x}^{(0)}$ közelítés megadása. Közelítsük f -et az elsőfokú Taylor-polinomjával az $\mathbf{x}^{(0)}$ helyen a másodfokú tagok elhagyásával:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}^{(0)}) + Df(\mathbf{x}^{(0)})(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}). \quad (2.5)$$

$Df(\mathbf{x}^{(0)})$ az f vektorfüggvény Jacobi-mátrixa, azaz az f elemeinek parciális deriváltjait tartalmazó mátrix,

$$Df(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}^{(0)}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}^{(0)}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}^{(0)}) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}^{(0)}) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Olyan \mathbf{x} -et keresünk, melyre a (2.5) közelítés nulla, tehát válasszuk meg $\mathbf{x}^{(1)}$ -et úgy, hogy

$$f(\mathbf{x}^{(0)}) + Df(\mathbf{x}^{(0)})(\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}) = 0 \quad (2.7)$$

teljesüljön. Amennyiben a $Df(\mathbf{x}^{(0)})$ Jacobi-mátrix reguláris, az $\mathbf{x}^{(1)}$ kifejezhető a (2.7) egyenletből, mégpedig

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - (Df(\mathbf{x}^{(0)}))^{-1}f(\mathbf{x}^{(0)}), \quad (2.8)$$

ahol az $\mathbf{x}^{(1)}$ az $\mathbf{x}^{(0)}$ egy javítása, azaz egy jobb közelítése a (2.4) megoldásának. Ha a Jacobi mátrix nem invertálható, akkor másik $\mathbf{x}^{(0)}$ vektort kell megadnunk.

A gyakorlatban azonban $\mathbf{x}^{(1)}$ kiszámítására nem a Jacobi-mátrix inverzét használjuk, ehelyett inkább a

$$Df(\mathbf{x}^{(0)})\Delta\mathbf{x}^{(0)} = -f(\mathbf{x}^{(0)}) \quad (2.9)$$

egyenletrendszert oldjuk meg, melyből $\Delta\mathbf{x}^{(0)}$ segítségével megkaphatjuk a javított $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \Delta\mathbf{x}^{(0)}$ közelítését a megoldásnak. Ezek alapján felírhatjuk a (2.4) megoldására vezető iterációt:

$$Df(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (2.10)$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)} \quad (2.11)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Azaz minden lépésben meg kell oldanunk egy egyenletrendszert, melyre alkalmazhatjuk például az 1.2. fejezetben tárgyalt LU-felbontást. A Newton-módszer nemlineáris egyenletrendszerek esetében másodrendben konvergens, az alábbi tételben ([3]) megállapított feltételek mellett (a tételt nem bizonyítjuk).

2.1. Tétel. *Legyen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ folytonosan differenciálható függvény, melynek egy \mathbf{x}^* zérushelye eleme egy $C \subset \mathbb{R}^n$ nyílt, konvex halmaznak. Tegyük fel továbbá, hogy az x^* egy környezetében az f függvény Df Jacobi-mátrixa Lipschitz-folytonos, illetve létezik $(Df(\mathbf{x}^*))^{-1}$. Ekkor \mathbf{x}^* -nak létezik olyan környezete, melynek bármely pontjából indítva a (2.10) és (2.11) által meghatározott iterációt az másodrendben konvergens, és \mathbf{x}^* -hoz tart.*

2.2. Egyszerűsített Newton-módszer

A Newton módszernek két alapvető hiányossága van. Az egyik, hogy minden iterációs lépésben ki kell számolnunk a Jacobi-mátrixot, ami lépésenként n^2 függvényértéket jelent. Ez a feladat azonban a gyakorlatban nem minden esetben oldható meg, például, ha maga az f nem analitikus formában van megadva, akkor a Jacobi-mátrix sem számítható ki analitikus képletekkel. A másik hátrány, hogy iterációs lépésenként egy új lineáris egyenletrendszer megoldására van szükség. Ezeket a problémákat kerüli meg az egyszerűsített Newton-módszer, melynek során elég az első Jacobi-mátrixot, illetve annak LU-felbontását meghatározni, és az iteráció minden további lépésében ezzel számolni.

Ez az eljárás a Newton-módszer (2.10) egyenletrendszerének módosításával a következő iterációval írható le:

$$Df(\mathbf{x}^{(0)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = -f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (2.12)$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)} \quad (2.13)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

2.3. Összehasonlítás

Vizsgáljuk meg, mit jelent egy dimenziós esetben a két módszer. A Newton-módszer minden iterációs lépése új érintőt határozott meg az $\mathbf{x}^{(k)}$ pontban, melynek metszéspontja az x -tengellyel adja az iteráció következő közelítését. Az egyszerűsített változatban csak az első lépésben számolunk érintőt, a további lépésekben azal párhuzamos egyeneseket állít elő. Ebből is látszik, hogy annak ellenére, hogy a Newton-módszer két hátrányát is kiküszöböltük, az egyszerűsített változat mégis jelentősen lassabban konvergál az eredetinel. LU-felbontást használva a (2.12) megoldása $\mathcal{O}(n^2)$ lépést igényel (az első iterációs lépést kivéve), míg a (2.10) megoldásához $\mathcal{O}(n^3)$ lépés szükséges. Az algoritmikus komplexitás szempontjából tehát javult az eljárás, viszont lassult a konvergencia, az egyszerűsített Newton-módszer már csak lineárisan konvergens.

Nézzük meg néhány egyszerű példán keresztül, hogy a gyakorlatban mennyire mutatkozik a különbség a két módszer között.

2.4. Példa.

$$\begin{aligned}x_1^2 - 1 &= 0 \\x_2^2 - 1 &= 0 \\x_{\text{mo}} &= (1,1)\end{aligned}$$

2.5. Példa.

$$\begin{aligned}x_1^2 + 3x_1 - x_2 + 2 &= 0 \\2x_1 - x_2 + 3 &= 0 \\x_{\text{mo}} &= (-1.62, -0.24)\end{aligned}$$

2.6. Példa.

$$\begin{aligned}x_1^2 x_3 - 2x_2 + 8 &= 0 \\3x_3^2 - 2x_2 - 2 &= 0 \\2x_1 x_2 - 5x_3 &= 0 \\x_{\text{mo}} &= (1,5,2)\end{aligned}$$

Az 1. táblázatban láthatjuk a futási eredményeket, ahol a harmadik, illetve negyedik oszlopok az iterációs szám/futási időt tartalmazzák. A tesztek MATLAB 7.11-ben futottak a Newton.m és SimplifiedNewton.m programok segítségével.

Példa száma	$\mathbf{x}^{(0)}$ kezdővektor	Newton	Egyszerűsített Newton
2.4. Példa	(1.1,1.1)	2/0.0009	4/0.0009
2.4. Példa	(5,5)	5/0.0015	48/0.004
2.5. Példa	(-1.5, -0.2)	2/0.0009	2/0.0007
2.5. Példa	(-2.1,0)	3/0.0012	8/0.0012
2.6. Példa	(0.9,4.5,2.1)	3/0.0014	4/0.0009
2.6. Példa	(0.5,6,2.3)	3/0.0012	9/0.0014

1. táblázat. A feladatokat megoldó Newton.m és SimplifiedNewton.m programok eredményei

3. Legkisebb négyzetek módszere

Bevezetés

Ebben a fejezetben megismerkedünk a legkisebb négyzetek módszerével, aminek széleskörű gyakorlati alkalmazása ismert. Ezek közül az egyik legfontosabb a görbeillesztés, melynek során olyan matematikai függvényt határozunk meg, mely a legjobban illeszkedik egy adathalmazra. A módszer úgy ad közelítő függvényt egy adott ponthalmazhoz, hogy minimalizálja a távolságok négyzeteinek összegét, ahol a távolságokat az egyes pontok távolsága adja az illesztett függvénytől. Ebben a fejezetben lineáris függvényeket fogunk illeszteni, illetve ennek felhasználásával két

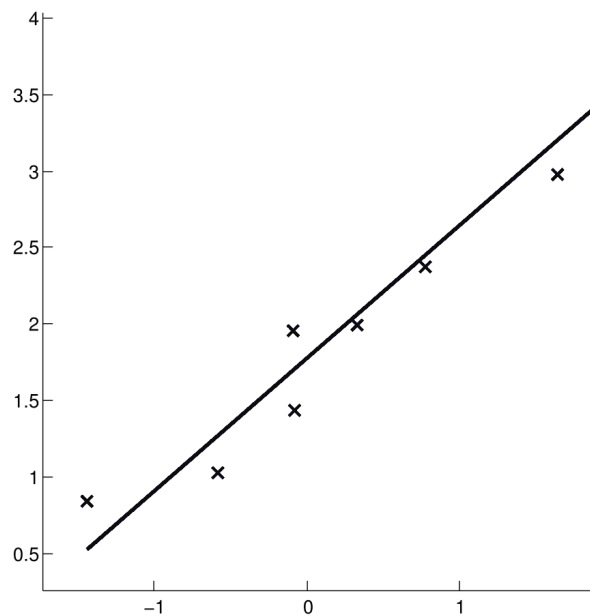
dimenziós alakzatok illesztésének feltételeivel és módszerével is megismerkedünk, végül kiterjesztjük az eljárást magasabb dimenziókra is.

3.1. Egyenes illesztése a síkon

Adott a síkon m pont, jelölje ezeket P_1, P_2, \dots, P_m , melyek koordinátáik sorra:

$$(x_{P_1}, y_{P_1}), (x_{P_2}, y_{P_2}), \dots, (x_{P_m}, y_{P_m}). \quad (3.1)$$

A feladat, hogy ezekre a pontokra olyan egyenest illesszünk, amelyre igaz, hogy az eltérések négyzeteinek összege minimális legyen.



1. ábra. Példa egyenes illesztésre

Egy egyenes megadható a következő háromismeretlenes egyenlettel:

$$c + n_1x + n_2y = 0. \quad (3.2)$$

Vegyük hozzá az $n_1^2 + n_2^2 = 1$ feltételt, és jelöljük \mathbf{n} -nel az (n_1, n_2) vektor, mely az egyenes normálvektora. Tudjuk, hogy egy pont akkor illeszkedik az egyenesre, ha a koordinátái kielégítik a (3.2) egyenletet. Az illesztés során azonban gyakoribb az az

eset, amikor egy pont nem illeszkedik az egyenesre. Legyen $P_i = (x_i, y_i)$ egy ilyen, az egyenesre nem illeszkedő pont, és tekintsük az

$$r_i = \frac{|c + n_1x_i + n_2y_i|}{\|\mathbf{n}\|_2} \quad (3.3)$$

kifejezést. Ekkor $|r_i|$ pontosan a P_i pont egyenestől vett távolságát adja meg. Ezt a távolságot számítsuk ki minden megadott P_i pontra, és legyen $\mathbf{r} = (r_1, r_2, \dots, r_m)^T$ a távolságokat tartalmazó oszlopvektor. A feladat tehát olyan egyenes keresése, melyre

$$\|\mathbf{r}\|_2^2 = \sum_{i=1}^m r_i^2 = \sum_{i=1}^m \frac{(n_1x_i + n_2y_i + c)^2}{n_1^2 + n_2^2} = \sum_{i=1}^m (n_1x_i + n_2y_i + c)^2 \quad (3.4)$$

minimális. A (3.4)-et felírhatjuk mátrixos alakban, ehhez konstruáljuk meg az

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_{P_1} & y_{P_1} \\ 1 & x_{P_2} & y_{P_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{P_n} & y_{P_n} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} c \\ n_1 \\ n_2 \end{pmatrix}$$

mátrixokat. Könnyen belátható, hogy az $A\mathbf{z}$ szorzat az \mathbf{r} vektort adja eredményül, így ezekkel a jelölésekkel röviden felírható a probléma: olyan \mathbf{z} vektor keresése, melyre

$$\begin{cases} \|A\mathbf{z}\|_2^2 \rightarrow \min \\ \|\mathbf{n}\|_2 = 1 \end{cases}$$

Vegyük az A mátrix QR-felbontását, és használjuk fel a kettes norma azon tulajdonságát, miszerint a kettes norma invariáns az ortogonális transzformációkra. Tehát, ha $A = QR$, akkor az $A\mathbf{z} = \mathbf{r}$ egyenletet balról Q^T -tal szorozva kapjuk, hogy

$$Q^T A\mathbf{z} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \\ 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ n_1 \\ n_2 \end{pmatrix} = Q^T \mathbf{r}.$$

Vegyük mindkét oldal normáját, így a kettes norma tulajdonságai miatt $\|Q^T \mathbf{r}\|_2^2 = \|\mathbf{r}\|_2^2$ és

$$\begin{aligned} \|R\mathbf{z}\|_2^2 &= (r_{11}c + r_{12}n_1 + r_{13}n_2)^2 + (r_{22}n_1 + r_{23}n_2)^2 + (r_{33}n_2)^2 = \\ &= (r_{11}c + r_{12}n_1 + r_{13}n_2)^2 + \|\mathbf{B}\mathbf{n}\|_2^2, \end{aligned} \quad (3.5)$$

ahol B -vel az $\begin{pmatrix} r_{22} & r_{23} \\ 0 & r_{33} \end{pmatrix}$ mátrixot jelöltük. Mivel a nemlineáris $\|\mathbf{n}\|_2 = 1$ feltétel csak két ismeretlent tartalmaz, elég megoldani a $\|B\mathbf{n}\|_2^2 \rightarrow \min$ feladatot az $\|\mathbf{n}\|_2 = 1$ feltétellel. Az \mathbf{n} ismeretében ugyanis a c szám is kiszámolható az $r_{11}c + r_{12}n_1 + r_{13}n_2 = 0$ egyenlet megoldásával, ahol az átrendezés után $c = \frac{-(r_{12}n_1 + r_{13}n_2)}{r_{11}}$. A minimum értékét a B mátrix legkisebb szinguláris értékének négyzete adja, a megoldást pedig a hozzá tartozó jobb szinguláris vektor, amit a következő állításban bizonyítunk.

3.1. Állítás. *Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Ekkor a*

$$\begin{cases} \|A\mathbf{x}\|_2^2 \rightarrow \min \\ \|\mathbf{x}\|_2 = 1 \end{cases}$$

feladatban a minimum értéke megegyezik az A mátrix legkisebb szinguláris értékének négyzetével, a megoldást pedig a szinguláris értékhez tartozó jobb szinguláris vektor adja.

Bizonyítás. A kettes norma definíciója alapján $\|A\mathbf{x}\|_2^2 = \langle A\mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle$. A skalárszorzat tulajdonságait felhasználva ez átrendezhető a

$$\langle A\mathbf{x}, A\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, A^T A \mathbf{x} \rangle \quad (3.6)$$

alakra. $A^T A$ normális mátrix, tehát vehetjük az $A^T A = UDU^T$ Schur-féle felbontását, ahol D diagonális mátrix. D főátlójában az $A^T A$ mátrix sajátértékeit tartalmazza. Jelöljük az i -edik sajátértéket λ_i -vel úgy, hogy $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$.

$$\langle \mathbf{x}, A^T A \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, UDU^T \mathbf{x} \rangle = \langle U^T \mathbf{x}, DU^T \mathbf{x} \rangle \quad (3.7)$$

Legyen $\mathbf{y} = U^T \mathbf{x}$, így ezzel a helyettesítéssel a következő skalárszorzatra egyszerűsödik a feladat:

$$\langle \mathbf{y}, D\mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2. \quad (3.8)$$

Mivel λ_n a legkisebb sajátérték, és U ortogonális mátrix

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2 \geq \lambda_n \sum_{i=1}^n y_i^2 = \lambda_n \|\mathbf{y}\|_2^2 = \lambda_n \|\mathbf{x}\|_2^2 = \lambda_n. \quad (3.9)$$

Az 1.7. megjegyzés miatt az A mátrix legkisebb szinguláris értékének négyzete megegyezik az $A^T A$ mátrix legkisebb sajátértékével, tehát $\sigma_{\min}^2 = \lambda_n$.

Legyen $\mathbf{v} \neq 0$ és $\mathbf{u} \neq 0$ a σ_{\min} -hez tartozó jobb, illetve bal szinguláris vektor úgy, hogy $A\mathbf{v} = \sigma_{\min}\mathbf{u}$. Ekkor

$$\|A\mathbf{v}\|_2^2 = \langle A\mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle = \langle \sigma_{\min}\mathbf{u}, \sigma_{\min}\mathbf{u} \rangle = \sigma_{\min}^2 \|\mathbf{u}\|_2^2 = \sigma_{\min}^2. \quad (3.10)$$

□

3.2. Két párhuzamos egyenes illesztése a síkon

Az előző részben egyenest illesztettünk egy megadott ponthalmazra, a következő feladat azonban két adott ponthalmazra egymással párhuzamos egyenesek illesztése. Ez elsőre talán összetettebb feladatnak tűnhet, de látni fogjuk, hogy egy kis módosítással alkalmazhatjuk az előző részben bevezetett módszert.

Legyen a két ponthalmaz $\{P_i\}$ ($i = 1, \dots, p$) és $\{Q_i\}$ ($i = 1, \dots, q$). Mivel két párhuzamos egyenesről van szó, a normálvektorjaik megegyeznek, így az egyetlen különbség a két illesztendő egyenes egyenlete között a konstans tag:

$$c_1 + n_1\mathbf{x} + n_2\mathbf{y} = 0 \quad (3.11)$$

$$c_2 + n_1\mathbf{x} + n_2\mathbf{y} = 0, \quad (3.12)$$

ahol $n_1^2 + n_2^2 = 1$. Jelöljük ismét \mathbf{r} vektorral a távolságokat tartalmazó vektort, viszont figyeljünk arra, hogy most $p + q$ darab pontunk van, így $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{p+q}$ ahol az első p koordináta a $\{P_i\}$ ponthalmaz pontjainak a távolsága az első egyenestől, a többi koordináta pedig a $\{Q_i\}$ ponthalmaz pontjaihoz tartozó távolságok. Az A mátrixot és a \mathbf{z} vektort az

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_{P_1} & y_{P_1} \\ 1 & 0 & x_{P_2} & y_{P_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & x_{P_p} & y_{P_p} \\ 0 & 1 & x_{Q_1} & y_{Q_1} \\ 0 & 1 & x_{Q_2} & y_{Q_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & x_{Q_q} & y_{Q_q} \end{pmatrix} \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ n_1 \\ n_2 \end{pmatrix}$$

módon definiálva az Az szorzat ismét az \mathbf{r} vektort adja, így a feladat ismét az $\|Az\|_2^2 \rightarrow \min$ megoldása az $\|\mathbf{n}\|_2 = 1$ feltétel mellett. Ehhez vegyük az A mátrix QR-felbontását, ahol

$$R = \begin{pmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & B \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

alakú. R_1 főátló elemei nem nullák, tehát a determinánsa sem nulla, ezért invertálható. Vezessük be a $\mathbf{c} = (c_1, c_2)^T$ vektort, így

$$\|Az\|_2^2 = \|R_1\mathbf{c} + R_2\mathbf{n}\|_2^2 + \|B\mathbf{n}\|_2^2. \quad (3.13)$$

Ebből a megoldást ugyanazzal a módszerrel kapjuk, amit az előző fejezetben taglaltunk, azaz elég megoldanunk a

$$\begin{cases} \|B\mathbf{n}\|_2^2 \rightarrow \min \\ \|\mathbf{n}\|_2 = 1 \end{cases}$$

feladatot, amiből \mathbf{n} ismeretében a \mathbf{c} vektor értéke megadható a $\mathbf{c} = -R_1^{-1}R_2\mathbf{n}$ alakban.

3.3. Két egymásra merőleges egyenes illesztése a síkon

A merőleges egyenesek illesztésének menete nem sokban különbözik a párhuzamos egyenesek illesztésének megoldásától. Ismét két ponthalmaz adott, jelöljük ezeket a szokásos jelölésekkel: $\{P_i\}$ ($i = 1, \dots, p$) és $\{Q_i\}$ ($i = 1, \dots, q$). A két keresett egyenes ebben az esetben a normálvektorban is különbözni fog, mivel az egyik egyenes normálvektora a másik egyenes irányvektora. Tehát, ha az egyik egyenesnek (n_1, n_2) a normálvektora, akkor a másiknak $(-n_2, n_1)$ lesz, így a két egyenes egyenlete

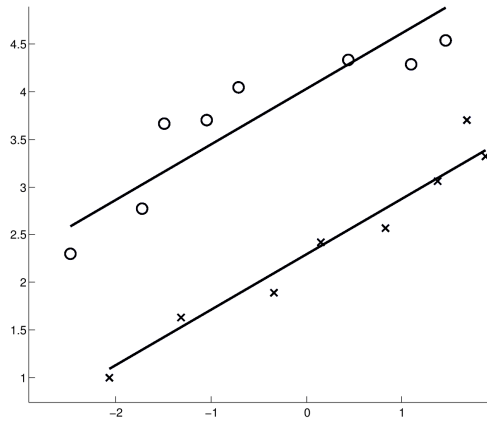
$$c_1 + n_1x + n_2y = 0 \quad (3.14)$$

$$c_2 - n_2x + n_1y = 0, \quad (3.15)$$

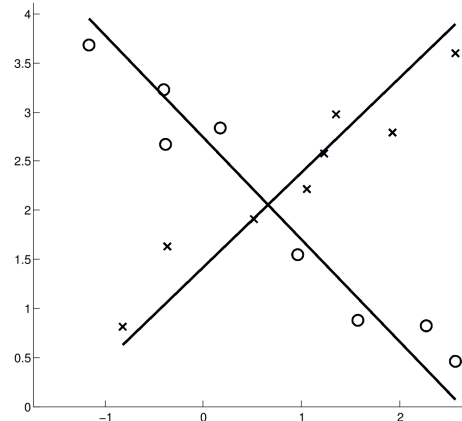
amihez hozzávesszük a szokásos $n_1^2 + n_2^2 = 1$ feltételt. Ismét felírjuk az A mátrixot, tehát a feladat

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & x_{P_1} & y_{P_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & x_{P_p} & y_{P_p} \\ 0 & 1 & y_{Q_1} & -x_{Q_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & y_{Q_q} & -x_{Q_q} \end{pmatrix}$$

mátrixszal és az előző \mathbf{z} jelölést használva az $\|A\mathbf{z}\|_2^2 \rightarrow \min$ megoldása $\|\mathbf{n}\|_2 = 1$ feltétellel, melyet szintén az A QR-felbontásával, majd az R hasonlóan definiált 2×2 -es részmátrixának szinguláris felbontásának segítségével oldunk meg.



2. ábra. Párhuzamos egyenesek illesztése



3. ábra. Merőleges egyenesek illesztése

3.4. Téglalap illesztés

Miután tudunk párhuzamos és merőleges egyeneseket is illeszteni adott pontthalmazokra, érdekes feladat ezek felhasználása zárt alakzatok illesztésére. Először a téglalap illesztéssel foglalkozunk, amihez szükségünk van négy pontthalmazra, legyenek ezek $\{P_i\}$ ($i = 1, \dots, p$), $\{Q_i\}$ ($i = 1, \dots, q$), $\{R_i\}$ ($i = 1, \dots, r$) és $\{S_i\}$ ($i = 1, \dots, s$). A keresett téglalap oldalait sorra a, b, c és d -vel jelölve az egyes olda-

lakhoz tartozó egyenesek egyenletei

$$a: c_1 + n_1x + n_2y = 0 \quad (3.16)$$

$$b: c_2 - n_2x + n_1y = 0 \quad (3.17)$$

$$c: c_3 + n_1x + n_2y = 0 \quad (3.18)$$

$$d: c_4 - n_2x + n_1y = 0 \quad (3.19)$$

ahol $n_1^2 + n_2^2 = 1$. Az előzőek mintájára felírhatjuk az A mátrixot és a \mathbf{z} vektort:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & x_{P_1} & y_{P_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & x_{P_p} & y_{P_p} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -y_{Q_1} & x_{Q_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -y_{Q_q} & x_{Q_q} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_{R_1} & y_{R_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_{R_r} & y_{R_r} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -y_{S_1} & x_{S_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -y_{S_s} & x_{S_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ n_1 \\ n_2 \end{pmatrix}$$

ami alapján a megoldást ismét a

$$\begin{cases} \|A\mathbf{z}\|_2^2 \rightarrow \min \\ \|\mathbf{n}\|_2 = 1 \end{cases}$$

feladat megoldásával kapjuk meg.

Az egyenesek ismeretében, további feladat lehet az illesztett téglalap csúcsainak koordinátáit meghatározni. Ehhez az egyes oldalakhoz tartozó egyenesek metszéspontjait kell kiszámolni, például az a és b oldalakhoz tartozó csúcs koordinátáit az

$$n_1x + n_2y = -c_1 \quad (3.20)$$

$$-n_2x + n_1y = -c_2 \quad (3.21)$$

két ismeretlenes egyenletrendszer megoldása adja. Hasonlóan felírható a többi három csúcshoz tartozó egyenletrendszer, sőt, az

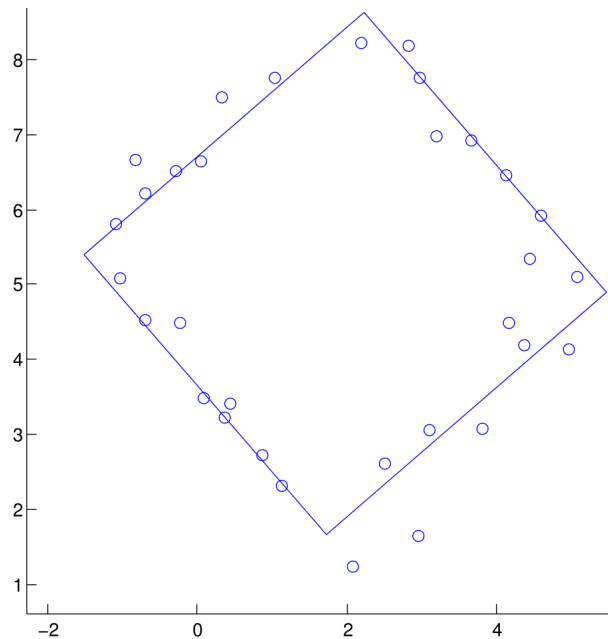
$$N = \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ -n_2 & n_1 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad C = \begin{pmatrix} -c_1 & -c_3 & -c_3 & -c_1 \\ -c_2 & -c_2 & -c_4 & -c_4 \end{pmatrix}$$

mátrixok felhasználásával a négy metszéspont egyszerre kiszámítható. Ehhez vezessük be az $X \in \mathbb{R}^{2 \times 4}$ mátrixot, ami a csúcsok (x, y) koordinátáit tartalmazza, ekkor az $NX = C$ a négy csúcshoz tartozó négy egyenletrendszert határozza meg. Az N mátrix ortogonalitása miatt, az

$$X = N^T C \tag{3.22}$$

szorzat adja meg a négy csúcs koordinátáit.

3.5. Négyzet illesztés



4. ábra. Példa négyzet illesztésre

Legyen $|d|$ az adott pontokra illesztendő négyzet oldalának hossza, a négy pont-halmaz pedig $\{P_i\}$ $i = 1, \dots, p$, $\{Q_i\}$ $i = 1, \dots, q$, $\{R_i\}$ $i = 1, \dots, r$ és $\{S_i\}$

$i = 1, \dots, s$. A négy oldalhoz tartozó egyenesek egyenletei az óramutató járásával ellentétesen megadva

$$a_1 : \quad c_1 + n_1x + n_2y = 0 \quad (3.23)$$

$$a_2 : \quad c_2 - n_2x + n_1y = 0 \quad (3.24)$$

$$a_3 : \quad d + c_1 + n_1x + n_2y = 0 \quad (3.25)$$

$$a_4 : \quad d + c_2 - n_2x + n_1y = 0 \quad (3.26)$$

$$n_1^2 + n_2^2 = 1. \quad (3.27)$$

Ezek alapján az A mátrix és \mathbf{z} vektor meghatározásával a feladat visszavezethető a korábbi megoldási módszerekre.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & x_{P_1} & y_{P_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & x_{P_p} & y_{P_p} \\ 0 & 0 & 1 & y_{Q_1} & -x_{Q_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & y_{Q_q} & -x_{Q_q} \\ 1 & 1 & 0 & x_{R_1} & y_{R_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 0 & x_{R_r} & y_{R_r} \\ 1 & 0 & 1 & y_{S_1} & -x_{S_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 1 & y_{S_s} & -x_{S_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} d \\ c_1 \\ c_2 \\ n_1 \\ n_2 \end{pmatrix}.$$

A csúcsok koordinátáinak meghatározásához felhasználhatjuk a téglalpnál bevezetett jelöléseket. A C mátrix alábbi

$$C = \begin{pmatrix} -c_1 & -c_1 - d & -c_1 - d & -c_1 \\ -c_2 & -c_2 & -c_2 - d & -c_2 - d \end{pmatrix}$$

módosításával tehát a metszéspontokat meghatározza az $X = N^T C$ szorzat.

3.6. További sokszög illesztések

A téglalap és négyzet illesztés után felmerül a kérdés, hogy vajon lehet-e tetszőleges $k \in \mathbb{N}$ oldalú sokszöget illeszteni megadott ponthalmazra. Az eddigi tapasztalat

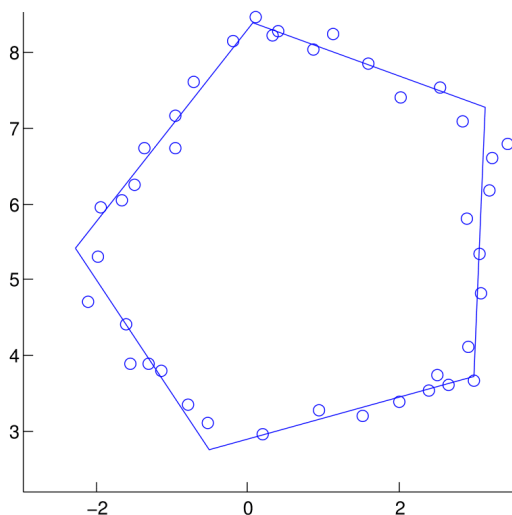
azt mutatja, hogy elég az A mátrixot meghatározni, amiből egy QR-, illetve szinguláris felbontás megadja az eredményt. Az A meghatározásához először írjuk fel egy k oldalú sokszög oldalaihoz tartozó egyenleteket (óramutató járásával ellentétes irányban megadva):

$$e_1 : c_1 + n_{1,1} + n_{1,2} = 0 \quad (3.28)$$

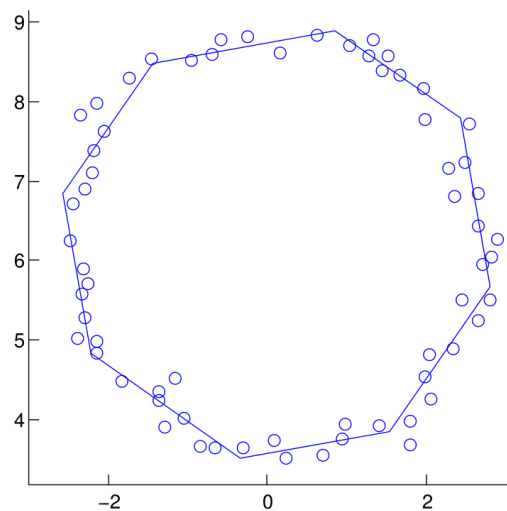
$$e_2 : c_2 + n_{2,1} + n_{2,2} = 0 \quad (3.29)$$

...

$$e_k : c_k + n_{k,1} + n_{k,2} = 0 \quad (3.30)$$



5. ábra. Példa ötszög illesztésre



6. ábra. Példa nyolcszög illesztésre

A téglalap illesztésnél egy normálvektor meghatározásával fejeztük ki minden oldal egyenesének normálvektorát, nézzük meg, hogy ezt itt is megtehetjük-e. Ennek érdekében vegyük az illesztendő sokszög tulajdonságaihoz, hogy az oldalak által bezárt szögek egyenlőek legyenek. Ez egy k oldalú sokszög esetén $\vartheta = \pi - \frac{2\pi}{k}$ szöveget jelent. A sík origó körüli óramutató járásával ellentétes irányú φ szögű forgatása a következő mátrixszal adható meg:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

A forgatást meghatározó mátrixszal már kifejezhetőek a normálvektorok az első normálvektor ismeretében, mégpedig az i -edik oldalhoz tartozó egyenes normálvektora megadható az

$$\mathbf{n}_i = \begin{pmatrix} \cos \varphi_i & -\sin \varphi_i \\ \sin \varphi_i & \cos \varphi_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{1,1} \\ n_{1,2} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

alakban, ahol $\varphi_i = (i-1)\vartheta$, és $i = 1, \dots, k$. Jelöljük az i -edik normálvektorhoz tartozó forgatás mátrixát F_i -vel, ahol a forgatás szöge φ_i , így az i -edik egyenlet felírható a

$$c_i + (x \ y)F_i\mathbf{n}_1 \quad (3.33)$$

alakban.

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy minden oldalhoz tartozó pontthalmaz $h \in \mathbb{N}$ méretű. Az i -edik oldalhoz tartozó pontokat tartalmazza a $P^{(i)} \in \mathbb{R}^{h \times 2}$ mátrix, a hozzátartozó j -edik pontot pedig jelöljük $P_j^{(i)}$ -vel. Ezekkel a jelölésekkel az A és \mathbf{z} mátrix felírhatóak:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \hat{P}_{1,1}^{(1)} & \hat{P}_{1,2}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & \hat{P}_{h,1}^{(1)} & \hat{P}_{h,2}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \hat{P}_{1,1}^{(2)} & \hat{P}_{1,2}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \hat{P}_{h,1}^{(2)} & \hat{P}_{h,2}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \hat{P}_{1,1}^{(k)} & \hat{P}_{1,2}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \hat{P}_{h,1}^{(k)} & \hat{P}_{h,2}^{(k)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \\ n_{1,1} \\ n_{1,2} \end{pmatrix},$$

ahol $\hat{P}_{j,l}^{(i)}$ jelöli a $P_j^{(i)}F_i$ vektor l -edik koordinátáját. A feladat ismét az $\|A\mathbf{z}\|_2^2 \rightarrow \min$ megoldása az $\|\mathbf{n}_1\|_2 = 1$ feltétel mellett, melynek megoldását megadja egy QR- és egy azt követő szinguláris felbontás.

3.7. Hipersík illesztése

Ebben a fejezetben a legkisebb négyzetek módszerének kiterjesztését mutatjuk be az n dimenziós térre. A cél \mathbb{R}^n -ben adott pontthalmazra egy s dimenziós hipersík illesz-

tése, ahol $1 \leq s \leq n - 1$. A pontokat az $X = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_m)^T$ mátrix tartalmazza, ahol $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$. Egy hipersík \mathbb{R}^n -ben az

$$\mathbf{y} = \mathbf{p} + \mathbf{a}_1 t_1 + \mathbf{a}_2 t_2 + \dots + \mathbf{a}_s t_s = \mathbf{p} + A\mathbf{t} \quad (3.34)$$

egyenlettel írható fel, ahol \mathbf{p} a sík egy pontja, az \mathbf{a}_i vektorok pedig lineárisan független irányvektorok. Tegyük fel, hogy A ortogonális.

Első lépésben minimalizáljuk a pontok távolságát a hipersíktól, az \mathbf{x}_i -hez tartozó távolságot jelöljük d_i -vel, melynek értékét a

$$d_i = \min_{\mathbf{t}} \|\mathbf{p} - \mathbf{x}_i + A\mathbf{t}\|_2 \quad (3.35)$$

kifejezés adja. A minimum meghatározásához először a

$$\text{grad}(d_i^2) = 2A^T(\mathbf{p} - \mathbf{x}_i + A\mathbf{t}) = 0 \quad (3.36)$$

egyenletet kell megoldanunk \mathbf{t} -re, melyből az átrendezés után A ortogonalitása miatt azt kapjuk, hogy $\mathbf{t} = A^T(\mathbf{x}_i - \mathbf{p})$. Így már kifejezhető a távolság négyzete:

$$d_i^2 = \|\mathbf{p} - \mathbf{x}_i + AA^T(\mathbf{x}_i - \mathbf{p})\|_2^2 = \|P(\mathbf{x}_i - \mathbf{p})\|_2^2, \quad (3.37)$$

ahol P -vel a $I - AA^T$ -at jelöltük. A feladatunk minimalizálni a pontokhoz tartozó d_i távolságok négyzeteinek összegét. A könnyebb átláthatóság érdekében vezessük be az

$$F(\mathbf{p}, A) = \sum_{i=1}^m \|P(\mathbf{x}_i - \mathbf{p})\|_2^2 \quad (3.38)$$

függvényt, a $\text{grad}(F) = \mathbf{0}$ feltétellel. Tekintsük a gradiens első elemét, a \mathbf{p} szerinti parciális deriváltat, aminek a feltétel szerint nullával kell megegyeznie:

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = - \sum_{i=1}^m (2P^T P(\mathbf{x}_i - \mathbf{p})) = -2P(\sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i - m\mathbf{p}) = 0, \quad (3.39)$$

ahol kihasználtuk, hogy a $P^T P = P$. Mivel P a $\sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i - m\mathbf{p}$ vektort a $\mathbf{0}$ -ba vetíti, ennek a $\sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i - m\mathbf{p}$ vektornak benne kell lennie az A mátrix oszlopterében, tehát \mathbf{p} kifejezhető a

$$\mathbf{p} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i + A\tau \quad (3.40)$$

alakban. Ezt behelyettesítve a (3.38) kifejezésbe $F(\mathbf{p}, A)$ függvény leegyszerűsödik a csak A -tól függő

$$G(A) = \sum_{i=1}^m \|P\hat{\mathbf{x}}_i\|_2^2 = \|P\hat{X}\|_F^2 \quad (3.41)$$

függvényre, ahol

$$\hat{\mathbf{x}}_i = \mathbf{x}_i - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i, \quad (3.42)$$

és a Frobenius normát használtuk ($\|A\|_F^2 = \sum_{i,j} a_{ij}^2$). P szimmetriája miatt a $G(A)$ függvényt felírhatjuk a

$$G(A) = \|\hat{X}P\|_F^2 = \|\hat{X}(I - AA^T)\|_F^2 = \|\hat{X} - \hat{X}AA^T\|_F^2 \quad (3.43)$$

alakban is. Legyen $Y = \hat{X}AA^T$ egy s rangú mátrix. Ekkor a feladat átírható az

$$\|\hat{X} - Y\|_F^2 \rightarrow \min \quad (3.44)$$

feladatra $\text{rang}(Y) = s$ feltétellel. A Frobenius normában egy mátrix becsülhető egy kisebb rangú mátrixszal. Ehhez először megadjuk az \hat{X} szinguláris felbontását, $\hat{X} = U\Sigma V^T$, ahol $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ és $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$. Ezután a minimalizáló mátrixot az $Y = U\Sigma_s V^T$ adja, ahol $\Sigma_s = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_s, 0, \dots, 0)$. Tehát olyan ortogonális mátrixot kell keresnünk, melyre az $Y = \hat{X}AA^T$ is igaz. Válasszuk meg az A -t úgy, hogy a V ortogonális mátrix első s oszlopával legyen egyenlő, így az $\hat{X}AA^T = U\Sigma_s V^T$ teljesülni fog. Ezután az \hat{X} szinguláris felbontása megadja az adott pontokra az összes legjobban illesztett alacsonyabb dimenziós hipersíkot:

$$\mathbf{y} = \mathbf{p} + A\mathbf{t}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{p} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbf{x}_i. \quad (3.45)$$

Hivatkozások

- [1] Gergó Lajos, *Numerikus módszerek*, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest (2010)
- [2] Stoyan Gisbert, Takó Galina, *Numerikus módszerek I.*, Typotex, Budapest (1993)
- [3] Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F., *Numerical Mathematics*, Springer (2007)
- [4] Walter Gander, Jiri Hrebicek, *Solving Problems in Scientific Computing Using Maple and MATLAB*, Springer (2004)
- [5] Stoyan Gisbert, *Numerikus matematika mérnököknek és programozóknak*, Typotex, Budapest (2007)
- [6] Natasa Krejic, Zorana Luzanin, *Newton-like method with modification of the right-hand-side vector* (2001)
<http://www.ams.org/journals/mcom/2002-71-237/S0025-5718-01-01322-9/S0025-5718-01-01322-9.pdf>