ZOBECNĚNÝ GREVILLŮV ALGORITMUS

Jitka Machalová
Katedra MA a AM PřF UP Olomouc

1. Úvod

V mnoha oblastech matematiky se při řešení složitějších problémů často setkáváme s úlohou najít řešení systému lineárních rovnic. Označme $\boldsymbol{M}_{m,n}$ množinu všech matic typu (m, n). Uvažujme systém lineárních rovnic

$$Ax = b \tag{1}$$

kde $A \in \boldsymbol{M}_{n,n}$ je regulární a $x, b \in \boldsymbol{M}_{n,1}$, pak existuje jediné řešení $x_0 = A^{-1}b$.
Pokud ale matice A není regulární, pak tato soustava může mít i nekonečně mnoho řešení nebo nemusí být řešitelná. V tomto případě hledáme řešení ve smyslu metody nejmenších čtverců (MNČ). Jinými slovy, pokud má systém lineárních rovnic nekonečně mnoho řešení, hledáme to, které má minimální normu a pokud nemá řešení, hledáme vektor, který minimalizuje normu rezidua

$$\|Ax - b\|$$

a mezi všemi vektory minimalizujícími tuto normu je v normě nejmenší.
Je známo, že pokud pro vektor $x \in \boldsymbol{M}_{n,1}$ uvažujeme Euklidovskou normu

$$\|x\|_2 = \sqrt{x^T x} \tag{2}$$

lze řešení ve smyslu metody nejmenších čtverců systému lineárních rovnic popsat pomocí *Moore-Penroseovy inverze.* Budeme-li pro vektor $x \in \boldsymbol{M}_{n,1}$ uvažovat normu definovanou vztahem

$$\|x\|_N = \sqrt{x^T N x} \tag{3}$$

kde $N \in \boldsymbol{M}_{n,n}$ je pozitivně definitní a symetrická matice (PDS), pak lze řešení ve smyslu MNČ systému lineárních rovnic popsat pomocí *Chipmanovy pseudoinverze.* Uvedená tvrzení lze najít v [1], [10].

2. Metoda nejmenších čtverců

V této kapitole uvedeme definici Moore-Penroseovy a Chipmanovy inverze a popíšeme řešení ve smyslu MNČ systému lineárních rovnic (1), kde $A \in \boldsymbol{M}_{m,n}$ a $b \in \boldsymbol{M}_{m,1}$.
Uvedené definice a věty lze najít například v [1], [10].

Definice 2. 1 Nechť $A \in \boldsymbol{M}_{m,n}$. Pak matice $X \in \boldsymbol{M}_{n,m}$ splňující axiomy

$$\begin{array}{llll} \text{(i)} & AXA = A & \text{(iii)} & (AX)^T = AX \\ \text{(ii)} & XAX = X & \text{(iv)} & (XA)^T = XA \end{array} \tag{4}$$

se nazývá *Moore-Penroseova inverze* matice A a značí se A^+. Někdy se používá také zkráceného názvu *pseudoinverze.*

Věta 2. 2 *Pro každou matici $A \in \boldsymbol{M}_{m,n}$ existuje jediná Moore-Penroseova inverze A^+.*

Důkaz lze najít v již citované literatuře [1], [10].

Uvažujme nyní pro vektor $x \in \boldsymbol{M}_{n,1}$ Euklidovskou normu definovanou vztahem (2).

Věta 2. 3 *Nechť* $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$, $b\in \boldsymbol{M}_{m,1}$ *a* $x_0 = A^+b$. *Pak pro každé* $x\in \boldsymbol{M}_{n,1}$, $x \neq x_0$ *platí:*

$$(a) \quad \|Ax_0 - b\|_2 < \|Ax - b\|_2$$

nebo

$$(b) \quad \|Ax_0 - b\|_2 = \|Ax - b\|_2 \quad a \quad \|x_0\|_2 < \|x\|_2$$

Vektor $x_0 = A^+b$ *se nazývá řešením ve smyslu metody nejmenších čtverců systému lineárních rovnic (1), někdy bývá také označováno jako „the least squares solution with minimum norm".*

Moore-Penroseovu inverzi lze zobecnit následujícím způsobem, (viz [2], [10]):

Definice 2. 4 Nechť $N\in \boldsymbol{M}_{n,n}$ a $M\in \boldsymbol{M}_{m,m}$ jsou PDS matice a $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$. Pak matice $X\in \boldsymbol{M}_{n,m}$ splňující axiomy

$$\text{(i)} \ \ AXA = A \qquad \text{(iii)} \ \ (MAX)^T = MAX \qquad (5)$$

$$\text{(ii)} \ \ XAX = X \qquad \text{(iv)} \ \ (NXA)^T = NXA$$

bývá označována jako *„N-norm M-least squares generalized inverse of A"* a značí se

$$A^+_{M,N}\ .$$

V některých publikacích lze tuto zobecněnou inverzi také najít pod názvem *Chipmanova pseuinverze,* neboť jako první se o této inverzi zmínil J. S. Chipman ve svém článku [2].

Uvažujeme-li místo Euklidovské normy (2) normu definovanou vztahem (3), lze zformulovat analogická tvrzení, jejichž důkazy lze najít v [10].

Věta 2. 5 *Pro každou matici* $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$ *a dvě PDS matice* $N\in \boldsymbol{M}_{n,n}$ *a* $M\in \boldsymbol{M}_{m,m}$ *existuje jediná Chipmanova pseudoinverze.*

Věta 2. 6 *Nechť* $N\in \boldsymbol{M}_{n,n}$ a $M\in \boldsymbol{M}_{m,m}$ *jsou PDS matice a nechť* $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$, $b\in \boldsymbol{M}_{m,1}$ *a*

$$x_0 = A^+_{M,N}b.$$

Pak pro každé $x\in \boldsymbol{M}_{n,1}$, $x \neq x_0$ *je:*

$$(a) \quad \|Ax_0 - b\|_M < \|Ax - b\|_M$$

nebo

$$(b) \quad \|Ax_0 - b\|_M = \|Ax - b\|_M \quad a \quad \|x_0\|_N < \|x\|_N$$

Vektor x_0 je pak řešením ve smyslu metody nejmenších čtverců systému lineárních rovnic (1), v některých publikacích lze toto řešení najít také pod názvem *„the M-least squares solution with N-minimum norm*".

3. Grevillův algoritmus

Pro výpočet Moore-Penroseovy inverze existuje řada metod, jejichž částečný přehled lze najít v [8]. Programový systém MATLAB má pro výpočet této inverze zabudovaný M-file *pinv,* který je založen na singulárním rozkladu matice. V [8], ale i v řadě jiných pracích je ukázáno, že velmi efektivní metodou pro výpočet Moore-Penroseovy inverze je také tzv. *Grevillův algoritmus.*
Jeho výpočet je založen na následující větě, která popisuje jak v případě, kdy máme dánu matici *A*, jejíž Moore-Penroseovu inverzi A^+ známe, spočítáme Moore-Penroseovu inverzi matice vzniklé přidáním jednoho sloupce k matici *A*.

Věta 3. 1

Nechť $A_n \in \boldsymbol{M}_{m,n}$ $, a_{n+1} \in \boldsymbol{M}_{m,1}$ *a nechť* $A_{n+1} = \begin{pmatrix} A_n & a_{n+1} \end{pmatrix} \in \boldsymbol{M}_{m,n+1}$.

Pak

$$A_{n+1}^{+} = \begin{pmatrix} A_n^{+} - A_n^{+} a_{n+1} k_{n+1}^{T} \\ k_{n+1}^{T} \end{pmatrix},$$

$$kde \quad k_{n+1} = \begin{cases} \dfrac{1}{\left\| \left(I - A_n A_n^{+}\right) a_{n+1} \right\|_2^2} \left(I - A_n A_n^{+}\right) a_{n+1} & pokud \quad \left(I - A_n A_n^{+}\right) a_{n+1} \neq 0 \\ \dfrac{1}{1 + \left\| A_n^{+} a_{n+1} \right\|_2^2} \left(A_n^{+}\right)^T A_n^{+} a_{n+1} & pokud \quad \left(I - A_n A_n^{+}\right) a_{n+1} = 0 \end{cases}$$

Důkaz této věty lze najít v [1].

Výše uvedená věta popisuje jeden krok Grevillova algoritmu, takže celý algoritmus, který lze najít v citované literatuře [1], [10], je pak následující:

Grevillův algoritmus:

Nechť $A_n \in \boldsymbol{M}_{m,n}$, *nechť* a_i *,* $i=1,\ldots,n$ *značí i-tý sloupec matice A a nechť* $A_k=(a_1,\ldots,a_k)$ *je matice tvořená prvními k sloupci matice A.*

Algoritmus:

$$(a) \quad A_1^{+} = \begin{cases} \left(a_1^T a_1\right)^{-1} a_1^T & pro \quad a_1 \neq 0 \\ 0 & pro \quad a_1 = 0 \end{cases}$$

(b) Pro k = 2,…,n počítáme postupně

$$(i) \quad d_k = A_{k-1}^{+} a_k \ , \ c_k = a_k - A_{k-1} d_k$$

$$(ii) \quad b_k = \begin{cases} c_k^{+} = \left(c_k^T c_k\right)^{-1} c_k^T & pro \quad c_k \neq 0 \\ \left(1 + d_k^T d_k\right)^{-1} d_k^T A_{k-1}^{+} & pro \quad c_k = 0 \end{cases}$$

$$(iii) \quad A_k^{+} = \begin{pmatrix} A_{k-1}^{+} - d_k b_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

Potom

$$A^{+} = A_n^{+}$$

je hledaná Moore-Penroseova inverze matice A.

4. Zobecněný Grevillův algoritmus

Naším cílem nyní bude zobecnit Grevillův algoritmus pro výpočet Chipmanovy pseudoinverze, přičemž využijeme Věty 3.1 s tím, že pro vektory $x \in \boldsymbol{M}_{m,1}$ a $y \in \boldsymbol{M}_{n,1}$ definujeme normy vztahem

$$\|x\|_M = \sqrt{x^T M x} \qquad \|y\|_N = \sqrt{y^T N y},$$

kde $N \in \boldsymbol{M}_{n,n}$ a $M \in \boldsymbol{M}_{m,m}$ jsou PDS matice.

Zobecněný Grevillův algoritmus pro výpočet Chipmanovy pseudoinverze uvedeme ve dvou verzích. V první verzi budeme pro vektory $z \in \boldsymbol{M}_{i,1}$, i = 1,…, m-1 uvažovat Euklidovské normy definované vztahem (2). Druhá verze Zobecněného Grevillova algoritmu bude obecnější v tom smyslu, že pro vektory $z\in \boldsymbol{M}_{i,1}$, i = 1,…, m-1 budeme definovat normy vztahem

$$\|z\|_{N_i} = \sqrt{z^T N_i z},$$

kde $N_1,\ldots,N_{m-1}$ je posloupnost PDS matic, přičemž $N_i\in \boldsymbol{M}_{i,i}$. Na tuto posloupnost PDS matic nejsou kladeny žádné teoretické požadavky, pouze z numerického hlediska by bylo vhodné, aby tyto matice byly dobře podmíněné.

Nejprve uvedeme tvrzení potřebná pro další výklad.

Věta 4. 1 (Singulární rozklad) *Nechť je dána matice $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$, rank(A) = r. Pak existují unitární matice $U\in \boldsymbol{M}_{m,m}$ a $V\in \boldsymbol{M}_{n,n}$ takové, že*

$$A=UDV^T, \tag{6}$$

kde

$$D=\begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\in \boldsymbol{M}_{m,n}, D_1 = diag(d_1,\ldots,d_r)\in \boldsymbol{M}_{r,r}$$

matice D_1 je regulární a je určena jednoznačně až na permutace svých diagonálních prvků. Vzorec (6) se nazývá singulární rozklad matice A a diagonální prvky $d_1,\ldots,d_r$ matice D_1 se nazývají singulární čísla matice A.

Důkaz lze najít v [10].

Poznámka 4. 2 Jestliže $A\in \boldsymbol{M}_{n,n}$ je PDS matice, pak její singulární rozklad je ve tvaru

$$A=UDU^T$$

a pro její singulární čísla platí $d_1 > 0,\ldots, d_n > 0$.

Nyní tedy uvedeme algoritmus pro výpočet Chipmanovy pseudoinverze.

I. varianta zobecněného Grevillova algoritmu:

Nechť jsou dány PDS matice $N\in \boldsymbol{M}_{n,n}$, $M\in \boldsymbol{M}_{m,m}$ a matice $A\in \boldsymbol{M}_{m,n}$.

1. Nechť $M = UDU^T$ je singulární rozklad matice M, kde

   $$D = diag(d_1,\ldots,d_m).$$

   Položme

   $$A_{m-1} = \begin{pmatrix} D^{(1)} & 0_{m-1,1} \end{pmatrix} U^T A \qquad \text{a} \qquad a_m = \begin{pmatrix} 0_{1,m-1} & \sqrt{d_m} \end{pmatrix} U^T A.$$

   kde

   $$D^{(1)} = diag\left(\sqrt{d_1},\ldots,\sqrt{d_{m-1}}\right)$$

   a kde $0_{m,n}$ značí nulovou matici typu *(m,n).*

2. Položme

   $$A_1^+ = N^{-1}A_1^T\left(A_1 N^{-1} A_1^T\right)^{-1}.$$

3. Nechť a_k, $k = 1,\ldots,m-1$ značí k-tý řádek matice A_{m-1} a A_k, $k = 1,\ldots,m-1$ nechť značí matici tvořenou prvními k řádky matice A_{m-1}. Pro $k = 2,\ldots, m$ postupně počítejme

   $$d_k = a_k A_{k-1}^+$$

   $$c_k = a_k - d_k A_{k-1}$$

   $$b_k = \begin{cases} \left(c_k N^{-1} c_k^T\right)^{-1} c_k & \text{pro } c_k \neq 0 \\ \left(1 + d_k d_k^T\right)^{-1} d_k \left(A_{k-1}^+\right)^T N & \text{pro } c_k = 0. \end{cases}$$

   Pak pro $k = 2,\ldots m-1$ je

   $$A_k^+ = \begin{pmatrix} A_{k-1}^+ - N^{-1} b_k^T d_k & N^{-1} b_k^T \end{pmatrix}$$

Pro k = m je pak hledaná Chipmanova pseudoinverze určena vztahem

$$A^+_{M,N} = A^+_m = \left(A^+_{m-1} - N^{-1}b^T_m d_m \quad N^{-1}b^T_m\right)D^{1/2}U^T.$$

Důkaz algoritmu lze provést matematickou indukcí ověřením platnosti axiomů (5).

Příklad 4. 3 Vypočítejte Chipmanovu pseudoinverzi matice *A*, je-li dáno

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 9 \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} 6 & 4 & 4 \\ 4 & 10 & 4 \\ 4 & 4 & 16 \end{pmatrix}.$$

<u>1.krok algoritmu</u>

$$U = \begin{pmatrix} 0.4619 & -0.8817 \\ 0.8817 & 0.4719 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 10.6056 & 0 \\ 0 & 3.3944 \end{pmatrix}$$

Pak je tedy

$$A_1 = (13.0218 \quad 17.4297 \quad 21.8376), \quad a_2 = (1.8530 \quad 1.0980 \quad 0.3429)$$

<u>2.krok algoritmu</u>

$$A^+_1 = \begin{pmatrix} 0.0183 \\ 0.0211 \\ 0.0181 \end{pmatrix}$$

<u>3.krok algoritmu</u>

$$d_2 = 0.0632$$
$$c_2 = (1.0301 \quad -0.0035 \quad -1.0371)$$
$$b_2 = (2.3573 \quad -0.0081 \quad -2.3735)$$
$$A^+_{M,N} = A^+_2 = \begin{pmatrix} -1.1579 & 0.5263 \\ 0.3158 & -0.0526 \\ 0.5088 & -0.1404 \end{pmatrix}.$$

Jednoduchým výpočtem lze ověřit, že tato matice splňuje axiomy (5).

Nyní uvedeme obecnější verzi algoritmu, kterou jsme zmínili již v úvodu této kapitoly. Pro jednodušší zápis použijeme v dalším operaci *, kterou definujeme takto:

Definice 4. 4 Nechť je dána matice $A \in \mathcal{M}_{m,n}$ a dvě PDS matice $N \in \mathcal{M}_{n,n}$ a $M \in \mathcal{M}_{m,m}$. Pak definujme operaci * předpisem

$$A^* = N^{-1}A^T M.$$

II. varianta zobecněného Grevillova algoritmu:

Nechť jsou dány PDS matice $N \in \boldsymbol{M}_{n,n}$ a $M \in \boldsymbol{M}_{m,m}$ a matice $A \in \boldsymbol{M}_{m,n}$. Dále nechť je dána posloupnost PDS matic $N_1,\ldots,N_{m-1}$, přičemž $N_i \in \boldsymbol{M}_{i,i}$.

1. Označme $A_m = A$, $N_m = M$. Dále pro k = m, m-1,…,2 počítejme matice

$$A_{k-1} = E^{(k)}_{k-1}A_k \qquad a_k = E^{(k)}_1 A_k,$$

kde

$$E^{(k)}_{k-1} = U_{k-1}\left(\left[D_{k-1}D^{(1)}_k\right]^{-1/2} \quad 0_{k-1,1}\right)U^T_k$$
$$E^{(k)}_1 = U_1\left(0_{1,k-1} \quad \left[D_1 D^{(2)}_k\right]^{-1/2}\right)U^T_k,$$

přičemž

$$N_k = U_k D_k U_k^T$$

jsou singulární rozklady a

$$D_k = diag(d_1,...d_k),\quad D_k^{(1)} = (diag(d_1,...,d_{k-1}))^{-1},\quad D_k^{(2)} = 1/d_k.$$

2. Položme

$$A_1^+ = N^{-1}A_1^T\left(A_1N^{-1}A_1^T\right)^{-1}.$$

3. Pro k = 2,…, m postupně počítáme matice typu *(n , k)*

$$A_k^+ = \left[\begin{pmatrix} E_{k-1}^{(k)*} & E_1^{(k)*}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\left(A_{k-1}^+\right)^* - d_k^* b_k \\ b_k\end{pmatrix}\right]^*,$$

kde

$$d_k = a_k A_{k-1}^+$$

$$c_k = a_k - d_k A_{k-1}$$

$$b_k = \begin{cases}\left(\left(c_k^*\right)^T N c_k^*\right)^{-1}\left(c_k^*\right)^T N & \text{pro } c_k \neq 0\\ \left(1 + d_k d_k^*\right)^{-1} d_k \left(A_{k-1}^+\right)^* & \text{pro } c_k = 0.\end{cases}$$

Pak pro k = 2,…, m jsou matice

$$A_{N_k,N}^+ = A_k^+$$

Chipmanovy pseudoinverze matic A_k.
Tedy pro danou matici A a PDS matice M, N je hledaná Chipmanova pseudoinverze rovna

$$A_{M,N}^+ = A_m^+.$$

Důkaz algoritmu lze podobně jako v předchozím dokázat matematickou indukcí ověřením platnosti axiomů (5).

5. Použití Chipmanovy pseudoinverze v úloze optimální interpolace

Uvažujme úlohu interpolovat daná data (x_i, y_i), i = 1,…,n kubickým splajnem. Pokud předpokládáme, že uzly splajnu *s(x)* jsou právě v předepsaných bodech x_i, pak podmínky interpolace

$$s(x_i) = y_i\ ,\ i = 1,\dots,n$$

ponechávají kubickému interpolačnímu splajnu dva volné parametry. Je známo, viz [3], [5], že přirozené kubické splajny, tj.splajny s nulovými druhými derivacemi v krajních bodech, minimalizují na množině funkcí

$$V = \left\{s \in W_2^2[x_1, x_n], s(x_i) = y_i, i = 1,...,n\right\}$$

L_2 normu svých druhých derivací, tedy funkcionál

$$J(s) = \|s\|_2^2 = \int_{x_1}^{x_n}[s''(x)]^2\,dx.$$

Ukážeme, jak lze tuto vlastnost kubických splajnů zobecnit . Naším cílem bude tedy najít řešení následující úlohy: nechť jsou dány uzly splajnu

$$\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_{g+1} \qquad (7)$$

a body interpolace (x_i, y_i), i = 1,…,n. Hledáme kubický splajn na dané posloupnosti uzlů, interpolující daná data a minimalizující funkcionál *J(s).*

Na dané síti uzlů lze použít různých typů reprezentací splajnů. My budeme používat *B*-splajnové reprezentace. Použité definice a základní vlastnosti *B*-splajnů lze najít v [3], [5].
Vektorový prostor kubických splajnů s posloupností uzlů (7) má dimenzi $g+4$. Na této posloupnosti uzlů lze sestrojit pouze $g-2$ lineárně nezávislých kubických *B*-splajnů $B_i^4(x)$, i = 0,…,$g-3$. Abychom

dostali celou bázi B-splajnů, je třeba přidat další uzly

$$\lambda_{-3} \le \lambda_{-2} \le \lambda_{-1} \le \lambda_0 \qquad \lambda_{g+1} \le \lambda_{g+2} \le \lambda_{g+3} \le \lambda_{g+4}.$$

Na takto rozšířené posloupnosti uzlů již můžeme sestrojit $g+4$ lineárně nezávislých B-splajnů $B_i^4(x)$, $i = -3,\dots,g$. Pak každý kubický splajn na této posloupnosti uzlů je jednoznačně určen vektorem B-splajnových koeficientů $b=(b_{-3},\dots,b_g)^T$ a tedy lze psát

$$s(x) = \sum_{i=-3}^{g} b_i B_i^4(x).$$

Interpolační podmínky $s(x_i) = y_i$, $i = 1,\dots,n$ pak můžeme zapsat ve tvaru

$$C_4 b = y \tag{8}$$

kde $y=(y_1,\dots,y_n)^T$ a C_4 je $(n, g+4)$ - kolokační matice kubických B-splajnů $B_i^4(x)$, $i=-3,\dots,g$ v bodech $x_1,\dots,x_n$. Obecnou definici kolokační matice lze najít v již citované literatuře.
Pokud $n=g+4$ a kolokační matice C_4 je regulární, pak existuje jediné řešení systému (8). Nejsou zde tedy žádné volné parametry, kterých bychom mohli použít k optimalizaci. Je zřejmé, že systém (8) je řešitelný právě tehdy, když $n<g+4$ a matice C_4 je plné řádkové hodnosti. V tomto případě máme k dispozici $g+4-n$ volných parametrů. Následující větu lze v obecné verzi najít v [3].

Věta 5. 1 (Schoenberg-Whitney)
Matice C_4 bude plné řádkové hodnosti právě tehdy, když $n<g+4$ a existuje

$$\{\mu_1,\dots,\mu_n\} \subset \{\lambda_{-3},\dots,\lambda_g\}, \mu_i < \mu_{i+1}, i = 1,\dots,n$$

takové, že

$$\mu_i < x_i < \mu_{i+4}, i = 1,\dots,n.$$

Použitím přesné kvadraturní formule (Simpsonova formule pro lineární funkci) dostaneme funkcionál $J(s)$ ve tvaru

$$J(s) = \int_{x_1}^{x_n} [s''(x)]^2 dx = \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_1}^{x_n} [s''(x)]^2 dx = \frac{1}{6} M^T R M,$$

kde $M_i = s''(x_i)$, $i = 1,\dots, n$, $M = (M_1,\dots,M_a)^T$ a R je třídiagonální PDS matice typu (n,n), přičemž $diag(R)=(2h_1, 2(h_1+h_2),\dots,2(h_{n-1}+h_{n-2}), 2h_{n-1})$, $subdiag(R)=(h_1,h_2,\dots,h_{n-1})$, kde $h_i=x_{i+1}-x_i$, $i=1,\dots,n-1$.
Dále lze použitím vlastností derivování B- splajnů psát

$$M = 6 C_2 S_2 b,$$

kde C_2 je $(n, g+2)$ - kolokační matice lineárních B-splajnů $B_i^2(x)$, i = -1,…,g v bodech $x_1,\dots,x_g$ a S_2 je $(g+2, g+4)$-matice plné řádkové hodnosti, jejíž j-tý řádek , $j = 1,\dots,g+2$, je tvaru

$$\begin{pmatrix} 0_{1,j-1} & e_{j-2} & -(e_{j-2} + f_{j-2}) & f_{j-2} & 0_{1,g-j+2} \end{pmatrix},$$

kde

$$e_k = \frac{1}{(\lambda_{k+2} - \lambda_{k-1})(\lambda_{k+2} - \lambda_k)}, f_k = \frac{1}{(\lambda_{k+3} - \lambda_k)(\lambda_{k+2} - \lambda_k)}, k = -1,\dots,g.$$

Pak lze tedy psát funkcionál $J(s)$ ve tvaru

$$J(s) = 6(C_2 S_2 b)^T R C_2 S_2 b = 6\|C_2 S_2 b\|_R^2. \tag{9}$$

<u>Naše úloha je tedy nyní</u>: najít vektor B-splajnových koeficientů b splňující podmínky interpolace (8) a minimalizující funkcionál $J(s)$ ve tvaru (9) .

Označme $Z = C_2 S_2$, což je matice typu $(n, g+4)$ a řešíme systém lineárních rovnic

$$Zb = d, \tag{10}$$

kde d je zatím neznámý vektor. Aby existovalo řešení tohoto systému, je nutné a postačující, aby matice Z byla plné řádkové hodnosti. To bude vzhledem k vlastnostem matice S_2 splněno v případě, když $n<g+2$ *a* matice C_2 bude plné řádkové hodnosti. Analogicky s Větou 5.1 lze stanovit následující:

Věta 5. 2 Matice C_2 bude plné řádkové hodnosti právě tehdy, když $n<g+2$ a existuje

$$\{\mu_1,\ldots,\mu_n\}\subset\{\lambda_{-3},\ldots,\lambda_g\}, \mu_i<\mu_{i+1}, i=1,\ldots,n$$

takové, že

$$\mu_i<x_i<\mu_{i+2}, i=1,\ldots,n.$$

Pokud je tedy matice C_2 plné řádkové hodnosti, existuje jediné řešení ve smyslu MNČ systému (10) a lze jej podle Věty 2.6 psát ve tvaru

$$b=Z_{R,I}^{+}d$$

Vektor *b* ovšem musí splňovat také podmínky interpolace, takže po dosazení do (8) dostáváme systém lineárních rovnic

$$C_4 Z_{R,I}^{+} d = y.$$

Matice tohoto systému je vzhledem k předcházejícím předpokladům plné řádkové hodnosti, tedy opět existuje jediné řešení ve smyslu MNČ a podle Věty 2.6 je tvaru

$$d=\left[C_4 Z_{R,I}^{+}\right]_{I,R}^{+} y.$$

Celkem lze tedy hledaný vektor *b*, tj. řešení naší úlohy, psát ve tvaru

$$b=Z_{R,I}^{+}\left[C_4 Z_{R,I}^{+}\right]_{I,R}^{+} y \tag{11}$$

Na základě předcházejících úvah lze tedy zformulovat větu:

Věta 5. 3 *Nechť jsou dány uzly splajnu $\lambda_0<\ldots<\lambda_{g+1}$ a data (x_i, y_i), $i=1,\ldots,n$ taková, že $n<g+2$. Pak existuje jediný kubický splajn $s(x)$ interpolující daná data a minimalizující funkcionál*

$$J(s)=\|s\|_2^2=\int_{x_1}^{x_n}[s''(x)]^2\,dx$$

právě tehdy, když existuje

$$\{\mu_1,\ldots,\mu_n\}\subset\{\lambda_{-3},\ldots,\lambda_g\}, \mu_i<\mu_{i+1}, i=1,\ldots,n$$

takové, že

$$\mu_i<x_i<\mu_{i+2}, i=1,\ldots,n.$$

Vektor B-splajnových koeficientů b splajnu s(x) je určen vztahem (11).

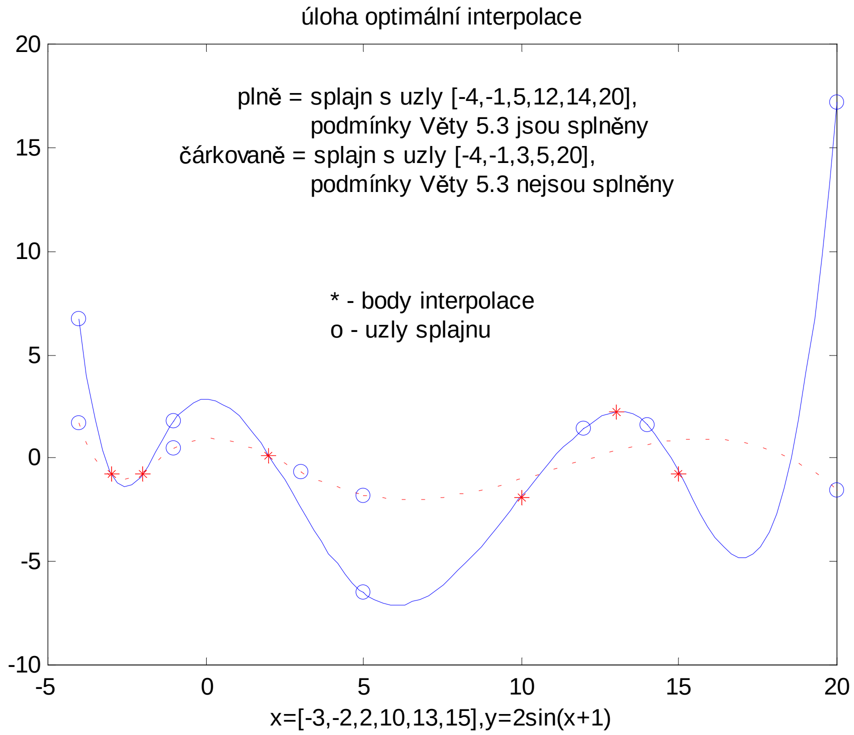
Pokud nejsou splněny nutné a postačující podmínky předchozí věty, pak vektor *B*-splajnových koeficientů *b* daný vztahem (11) určuje kubický splajn *s(x)*, který daná data pouze aproximuje, nikoliv interpoluje.

Příklad 5. 4 Na uvedeném obrázku jsou dva kubické splajny. Plnou čarou je znázorněn splajn, který splňuje nutné a postačující podmínky Věty 5.3 , a tedy interpoluje daná data. Čárkovaně je znázorněn splajn, který tyto podmínky nesplňuje, a tedy daná data pouze aproximuje.

6. Numerické výsledky

Grevillův algoritmus pro výpočet Moore-Penroseovy inverze dává dobré numerické výsledky pro matice menších rozměrů. Stejný výsledek lze tedy očekávat i u Zobecněného Grevillova algoritmu. Pro ilustraci zde uvedeme několik výsledků pro různé matice.

Označme *X* Chipmanovu pseudoinverzi matice *A* pro dané PDS matice *M, N* příslušných rozměrů. Dále nechť $v(1)=max(AXA-A)$, $v(3)=max((MAX)^T-MAX)$
$v(2)=max(XAX-X)$, $v(4)=max((NXA)^T-NXA)$ a $v=max_i\, v(i)$.



Numerické výpočty jsou provedeny v systému MATLAB na osobním počítači Intel Pentium II, 333 Mhz, RAM 64 MB, HDD 4.8 GB. Použita je I. varianta zobecněného Grevillova algoritmu, jehož M-file je uveden v následující kapitole. Výpočty jsou provedeny pro matice *A* náhodných čísel z intervalu [0,1] o rozměrech *(m,n)* a hodnosti *r*. Matice *M, N* jsou plné PDS matice odpovídajících rozměrů.

m,n	*r*	*V*
5, 10	5	$6.03\ 10^{-14}$
10, 25	5	$8.52\ 10^{-14}$
50, 100	50	$5.73\ 10^{-11}$
75, 100	50	$3.74\ 10^{-9}$
100, 100	50	$1.92\ 10^{-8}$
150, 100	50	$2.42\ 10^{-8}$
150, 100	100	$5.89\ 10^{-8}$
250, 100	50	$7.68\ 10^{-8}$
250, 100	100	$3.79\ 10^{-9}$
250, 250	250	----

7. M-files

Pro ilustraci zde uvedeme M-file I. varianty zobecněného Grevillova algoritmu a M-file, který počítá maximální odchylku *v* definovanou v předchozí kapitole.

```
function PA=zgrevil(A,M,N)
%A...daná matice
%M,N...PDS matice odpovídajících rozměrů
%PA...Chipmanova pseudoinverze matice A pro dané PDS matice M,N
[m,n]=size(A);
R=[];
     % 1. krok algoritmu
[U,D,V]=svd(M);
dM=diag(D);
E=diag(dM(1:m-1));F=diag(dM(m));
```

```
e=[sqrt(E),zeros(m-1,1)]*U';
f=[zeros(1,m-1),sqrt(F)]*U';
u=e*A;v=f*A;
A=u;R=[A;v];
     % 2. krok algoritmu
a=R(1,:);
PA=inv(N)*a'*inv(a*inv(N)*a')
     % 3. krok algoritmu
for k=2:m
   a=R(k,:);d=a*PA;
   c=a-d*A(1:(k-1),:);
   if max(max(abs(c)))<10^(-10);
      c=zeros(1,n);
   end
   if c==zeros(1,n);
      b=inv(1+d*d')*d*PA'*N;
   else
      b=inv(c*inv(N)*c')*c;
   end
   if k==m;
      PA=[PA-inv(N)*b'*d,inv(N)*b']*sqrt(D)*U';
   else
      PA=[PA-inv(N)*b'*d,inv(N)*b'];
   end
end

function v=test(A,P,M,N)
ax(1)=max(max(abs(A*P*A-A)));
ax(2)=max(max(abs(P*A*P-P)));
ax(3)=max(max(abs((M*A*P)'-M*A*P)));
ax(4)=max(max(abs((N*P*A)'-N*P*A)));
v=max(ax);
```

8. Seznam literatury

[1] Albert, A.: *Regression and the Moore-Penrose Pseudoinverse.* Academic Press, New York and London, 1972.

[2] Chipman, J. S.: *Specification Problems in Regression Analysis.* T. J. Boullion, P.I. Odell, Proceedings of the Symposium on Theory and Applications of Generalized Inverses of Matrices, Texas 1968, 114-176.

[3] Dierckx, P. : *Curve and Surface Fitting with Splines* ,Oxford Science Publications, 1993

[4] Djordovič, D. S., Stanimirovič, P. S.: *Universal Iterative Methods for Computing Generalized Inverses.* Acta Math. Hungaria **79** (1998), 253-268.

[5] Kobza, J.: *Splajny*. VUP, Olomouc, 1993.

[6] Kubáček, L.: *Notice on the Chipman Generalization on the Matrix Inverse.* Acta Univ. Palacki. Olomuc., Fac. Rer nat., Math. **36** (1997), 95-98.

[7] Machalová, J.: *Chipman Pseudoinverse of Matrix, its Computation and Application in Spline Theory.* Acta Univ. Palacki. Olomuc., Fac. Rer nat., Math. **39** (2000), 137-151.

[8] Machalová, J.: *Výpočty Pseudoinverzních Matic.* Preprint Dept. MAaAM, FS UP Olomouc

[9] Peška, P.: *The Moore-Penrose Inverse of a Partitioned Morphism in an Additive Category.* Folia Fac. Sci. Nat. Univ. Masaryk. Brunensis., Math. **9**, (podáno do tisku)

[10] Rao, C. R., Mitra, K. S.: *Generalized Inverse of Matrices and Its Application.* J.Wiley, New York, 1971

Mgr. Jitka Machalová
Katedra MaaAM , PřF UP Olomouc
Tomkova 40, 779 00 Olomouc
E-mail: pmachala@ iol.cz