Numerička matematika
4. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava:
  - Hilbertove matrice.
  - Teorija perturbacije linearnih sustava (nastavak).
  - Uloga reziduala i iterativno poboljšanje rješenja.
  - Struktura LR (LU) faktorizacije.
  - Matrice za koje ne treba pivotiranje.
  - Simetrične pozitivno definitne matrice.
  - Faktorizacija Choleskog.
  - Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog.
- Aproksimacija i interpolacija:
  - Uvod u problem aproksimacije (norme, linearnost).

Informacije

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

http://web.math.hr/~singer/num_mat/

Tamo su kompletna predavanja od prošle četiri godine, a stizat će i nova (kako nastaju). Prva 2 su još nesređena — onako kako ste ih vidjeli!

Skraćena verzija skripte — 1. dio (prvih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat1.pdf

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 6 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat2.pdf

Informacije — demonstratori

Kolegij "Numerička matematika" ima čak tri demonstratora:

- Mario Berljafa — termin: petak, 10–12, u Pr3, poželjna najava mailom,
- Anastasia Kruchinina — termin: ponedjeljak, 17–19, poželjna najava mailom,
- Melkior Ornik — termin: utorak, 16–18, sastanak pred oglasnom pločom, nužna najava mailom.

Demosi lijepo mole da im se najavite mailom koji dan ranije!

- Njihove mail adrese nađete na oglasnoj ploči,
- ili se javite meni.

Hilbertove matrice

Hilbertova matrica

Primjer. Kod aproksimacije polinomima javljaju se linearni sustavi oblika

$$H_n x = b,$$

gdje je H_n Hilbertova matrica reda n, tj. $(H_n)_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$, ili

$$H_n = \begin{bmatrix} 1 & \dfrac{1}{2} & \cdots & \dfrac{1}{n} \\ \dfrac{1}{2} & \dfrac{1}{3} & \cdots & \dfrac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{1}{n} & \dfrac{1}{n+1} & \cdots & \dfrac{1}{2n-1} \end{bmatrix}.$$

Hilbertova matrica

Da bismo ispitali točnost rješenja, stavimo desnu stranu

$$b(i) := \sum_{j=1}^{n} H_n(i,j) = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{i+j-1}, \qquad i = 1, \ldots, n,$$

tako da je egzaktno rješenje sustava $x^T = [1, 1, \ldots, 1]$.

Što možemo očekivati od rješenja takvog sustava?

Pogled na Frobeniusovu normu matrice A kaže da ona nije naročito velika, tj.

$$\|H_n\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} \left|\frac{1}{i+j-1}\right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} 1} = n.$$

Hilbertova matrica

Međutim ... ne treba gledati samo normu matrice!!!

Uvjetovanost Hilbertovih matrica je vrlo visoka:

n	$\kappa_2(H_n)$
2	$1.928 \cdot 10^{1}$
3	$5.241 \cdot 10^{2}$
4	$1.551 \cdot 10^{4}$
5	$4.766 \cdot 10^{5}$
6	$1.495 \cdot 10^{7}$
7	$4.754 \cdot 10^{8}$
8	$1.526 \cdot 10^{10}$

n	$\kappa_2(H_n)$
9	$4.932 \cdot 10^{11}$
10	$1.603 \cdot 10^{13}$
11	$5.231 \cdot 10^{14}$
12	$1.713 \cdot 10^{16}$
13	$5.628 \cdot 10^{17}$
14	$1.853 \cdot 10^{19}$

n	$\kappa_2(H_n)$
15	$6.117 \cdot 10^{20}$
16	$2.022 \cdot 10^{22}$
17	$6.697 \cdot 10^{23}$
18	$2.221 \cdot 10^{25}$
19	$7.376 \cdot 10^{26}$
20	$2.452 \cdot 10^{28}$

Hilbertova matrica — $n = 2, 5$

Za sustav s Hilbertovom matricom, u `extended` točnosti, umjesto svih jedinica u rješenju, dobivamo:

Red 2

$$x(1) = 1.0000000000000000 \qquad x(2) = 1.0000000000000000$$

Red 5

$$x(1) = 1.0000000000000000 \qquad x(4) = 0.9999999999999990$$

$$x(2) = 0.9999999999999999 \qquad x(5) = 1.0000000000000005$$

$$x(3) = 1.0000000000000007$$

Hilbertova matrica — $n = 10$

$$x(1) = 1.0000000000003436 \qquad x(6) = 0.9999999294831902$$

$$x(2) = 0.9999999999710395 \qquad x(7) = 1.0000001151701616$$

$$x(3) = 1.0000000006068386 \qquad x(8) = 0.9999998890931838$$

$$x(4) = 0.9999999945453735 \qquad x(9) = 1.0000000580638087$$

$$x(5) = 1.0000000258066880 \qquad x(10) = 0.9999999872591526$$

Uvjetovanost: $\approx 1.603 \cdot 10^{13}$.

Hilbertova matrica — $n = 15$

$x(1) = 1.000000000005406387$ $\quad$ $x(9) = 1.0952919444304200$

$x(2) = 0.9999999069805858$ $\quad$ $x(10) = 0.8797820363884070$

$x(3) = 1.0000039790948573$ $\quad$ $x(11) = 1.0994671444236333$

$x(4) = 0.9999257525660447$ $\quad$ $x(12) = 0.9508102511158300$

$x(5) = 1.0007543452271621$ $\quad$ $x(13) = 1.0106027108940050$

$x(6) = 0.9953234190795597$ $\quad$ $x(14) = 1.0012346841153261$

$x(7) = 1.0188643674562383$ $\quad$ $x(15) = 0.9992252029377023$

$x(8) = 0.9487142544341838$

Uvjetovanost: $\approx 6.117 \cdot 10^{20}$.

Hilbertova matrica — $n = 20$

$x(1) =$	1.0000000486333029	$x(11) =$	231.3608002738048500
$x(2) =$	0.9999865995557111	$x(12) =$	-60.514339162587356
$x(3) =$	1.0008720556363132	$x(13) =$	-57.667497268288612
$x(4) =$	0.9760210562677670	$x(14) =$	5.1760567992057506
$x(5) =$	1.3512820600312678	$x(15) =$	8.7242780841976215
$x(6) =$	-2.0883247796748707	$x(16) =$	210.1722288687690970
$x(7) =$	18.4001541798146106	$x(17) =$	-413.9544667202651170
$x(8) =$	-63.8982130462650081	$x(18) =$	349.7671855031355400
$x(9) =$	161.8392478869777220	$x(19) =$	-142.9134532513063250
$x(10) =$	-254.7902985140752950	$x(20) =$	25.0584794423327874

Uvjetovanost $\approx 2.452 \cdot 10^{28}$.

Uvjetovanost Hilbertovih matrica

Može se pokazati da za uvjetovanost Hilbertove matrice H_n vrijedi formula

$$\kappa_2(H_n) \approx \frac{(\sqrt{2}+1)^{4n+4}}{2^{15/4}\sqrt{\pi n}} \quad \text{za} \quad n \to \infty.$$

Dakle, iako Hilbertove matrice imaju "idealna" svojstva,

- simetrične, pozitivno definitne (čak totalno pozitivne = determinanta svake kvadratne podmatrice je pozitivna),

njihova uvjetovanost katastrofalno brzo raste!

"Krivci" za to su elementi inverza H_n^{-1}.

Inverz Hilbertove matrice

Recimo, H_5^{-1} izgleda ovako:

$$H_5^{-1} = \begin{bmatrix} 25 & -300 & 1050 & -1400 & 630 \\ -300 & 4800 & -18900 & 26880 & -12600 \\ 1050 & -18900 & 79380 & -117600 & 56700 \\ -1400 & 26880 & -117600 & 179200 & -88200 \\ 630 & -12600 & 56700 & -88200 & 44100 \end{bmatrix}.$$

A kako tek izgledaju elementi H_{20}^{-1}?

Inverz Hilbertove matrice

Elementi inverza H_n^{-1} Hilbertove matrice mogu se eksplicitno izračunati u terminima binomnih koeficijenata

$$(H_n^{-1})_{ij} = (-1)^{i+j}\,(i+j-1)\cdot$$
$$\cdot\binom{n+i-1}{n-j}\binom{n+j-1}{n-i}\binom{i+j-2}{i-1}^2.$$

Lako se vidi da ovi elementi vrlo brzo rastu za malo veće n.

Pogledajte

`http://mathworld.wolfram.com/HilbertMatrix.html`

Perturbacije linearnih sustava (nastavak)

Još malo o perturbacijama linearnih sustava

Ocjenu koliko se najviše promijenilo rješenje sustava $Ax = b$,

- ako perturbiramo samo A ili samo b,
- ako perturbiramo i A i b,

možemo dobiti direktno — po normi i po elementima.

Pretpostavimo da smo perturbirali samo A. Umjesto sustava $Ax = b$, tada rješavamo sustav

$$(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b.$$

Također, možemo pretpostaviti da za operatorsku normu perturbacije vrijedi

$$\|\Delta A\| \leq \varepsilon \|A\|.$$

Komentar. Ako je ε točnost računanja, tolika perturbacija je napravljena već pri spremanju elemenata matrice u računalo.

Perturbacija matrice A

Oduzimanjem $Ax = b$ od $(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b$ dobivamo

$$A\,\Delta x + \Delta A\,(x + \Delta x) = 0.$$

Množenjem slijeva s A^{-1} i sređivanjem dobivamo

$$\Delta x = -A^{-1}\,\Delta A\,(x + \Delta x).$$

Uzimanjem norme lijeve i desne strane, a zatim ocjenjivanjem odozgo, dobivamo

$$\begin{aligned} \|\Delta x\| &\leq \|A^{-1}\|\,\|\Delta A\|\,\|x + \Delta x\| \leq \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|A\|\,\|x + \Delta x\| \\ &= \varepsilon\,\kappa(A)\,(\|x\| + \|\Delta x\|), \end{aligned}$$

pri čemu je $\kappa(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|$ uvjetovanost matrice A.

Perturbacija matrice A

Premještanjem na lijevu stranu svih pribrojnika koji sadrže Δx dobivamo

$$(1 - \varepsilon\,\kappa(A))\,\|\Delta x\| \leq \varepsilon\,\kappa(A)\,\|x\|.$$

Ako je $\varepsilon\,\kappa(A) < 1$, a to znači i $\|\Delta A\|\,\|A^{-1}\| < 1$, onda je

$$\|\Delta x\| \leq \frac{\varepsilon\,\kappa(A)}{1 - \varepsilon\,\kappa(A)}\,\|x\|,$$

što pokazuje da je pogreška u rješenju (relativno, po normi)

- približno proporcionalna uvjetovanosti matrice A.

Perturbacija vektora b

Pretpostavimo sad da, umjesto sustava $Ax = b$, rješavamo

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b.$$

Opet, pretpostavljamo da za operatorsku normu perturbacije vektora b vrijedi

$$\|\Delta b\| \leq \varepsilon \|b\|.$$

Oduzimanjem $Ax = b$ od $A(x + \Delta x) = b + \Delta b$ izlazi

$$A \, \Delta x = \Delta b.$$

Množenjem slijeva s A^{-1} dobivamo

$$\Delta x = A^{-1} \, \Delta b.$$

Perturbacija vektora b

Uzimanjem norme lijeve i desne strane, a zatim ocjenjivanjem odozgo, dobivamo

$$\begin{aligned} \|\Delta x\| &\leq \|A^{-1}\|\,\|\Delta b\| \leq \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|b\| = \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|Ax\| \\ &\leq \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|A\|\,\|x\| = \varepsilon\,\kappa(A)\,\|x\|, \end{aligned}$$

što pokazuje da je pogreška u rješenju (relativno, po normi)

- ponovno, proporcionalna uvjetovanosti matrice A.

Sada možemo generalizirati ove rezultate na slučaj

- kad perturbiramo istovremeno i A i b.

Perturbacija matrice A i vektora b

Teorem. Neka je $Ax = b$ i

$$(A + \Delta A)\,(x + \Delta x) = b + \Delta b,$$

gdje je

$$\|\Delta A\| \leq \varepsilon\,\|E\|, \quad \|\Delta b\| \leq \varepsilon\,\|f\|,$$

pri čemu je E neka matrica, a f neki vektor. Također, neka je

$$\varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|E\| < 1.$$

Tada, za $x \neq 0$, vrijedi ocjena

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|E\|} \left(\frac{\|A^{-1}\|\,\|f\|}{\|x\|} + \|A^{-1}\|\,\|E\| \right).$$

Perturbacija matrice A i vektora b

Komentar: Uobičajeno se za E uzima A, jer je to pogreška koju napravimo spremanjem matrice A u računalo. Jednako tako, za f se uzima b. U tom slučaju je

$$
\begin{aligned}
\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} &\leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|A\|} \left(\frac{\|A^{-1}\| \, \|b\|}{\|x\|} + \|A^{-1}\| \, \|A\| \right) \\
&= \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon \, \kappa(A)} \left(\frac{\|A^{-1}\| \, \|Ax\|}{\|x\|} + \kappa(A) \right) \\
&\leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon \, \kappa(A)} \left(\frac{\|A^{-1}\| \, \|A\| \, \|x\|}{\|x\|} + \kappa(A) \right) \\
&= \frac{2\varepsilon \, \kappa(A)}{1 - \varepsilon \, \kappa(A)}.
\end{aligned}
$$

Perturbacija matrice A i vektora b

Dokaz (skica). Provodi se na sličan način kao za pojedinačne perturbacije matrice A, odnosno, vektora b.

Ako od $(A + \Delta A)\,(x + \Delta x) = b + \Delta b$ oduzmemo $Ax = b$, dobivamo

$$A\,\Delta x = \Delta b - \Delta A\,x - \Delta A\,\Delta x.$$

Množenjem s A^{-1} slijeva, a zatim korištenjem svojstava operatorskih normi, s malo truda, izlazi traženo. $\blacksquare$

Malo kompliciranije, mogu se dobiti i ocjene za perturbacije po elementima. Na primjer, uz pretpostavke da je

$$|\Delta A| \le \varepsilon\,E, \quad |\Delta b| \le \varepsilon\,f,$$

gdje je E neka matrica, a f neki vektor (v. Higham, ASNA2).

Komentar rezultata teorije perturbacija

Uočimo da sve ocjene vrijede

- samo za "dovoljno male" perturbacije matrice A.

Na primjer, za relativne perturbacije po normi, mora biti

$$\varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|E\| < 1, \quad \text{odnosno}, \quad \varepsilon \, \kappa(A) < 1.$$

Druga relacija se dobiva za $E = A$.

U protivnom, ocjena ne vrijedi (nazivnik nula ili krivi znak),

- tj. relativna greška (po normi) može biti po volji velika.

Pitanje. Što kaže obratna analiza grešaka zaokruživanja, tj.

- koje su ocjene na perturbacije?

Rezultati obratne analize grešaka zaokruživanja

Obratna ocjena za LR faktorizaciju

Teorem. U aritmetici računala računamo LR faktorizaciju zadane matrice A reda n. Pretpostavimo da je algoritam uspješno završio,

- bez pojave prevelikih ili premalih brojeva koji nisu prikazivi,
- i bez pokušaja dijeljenja s nulom.

Izračunati trokutasti faktori $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ onda zadovoljavaju

$$\widehat{L}\,\widehat{R} = A + \Delta A, \quad |\Delta A| \leq \gamma_n\,|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|,$$

gdje je γ_n standardna oznaka za mjeru grešaka zaokruživanja

$$\gamma_n := \frac{nu}{1 - nu}.$$

■

Obratna ocjena za rješenje sustava

Teorem. U aritmetici računala računamo rješenje linearnog sustava $Ax = b$, s matricom A reda n.

Uz iste pretpostavke kao u prošlom teoremu, neka su

- $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ izračunati trokutasti faktori u LR faktorizaciji matrice A,
- i neka je $\widehat{x}$ izračunato rješenje sustava $Ax = b$.

Onda postoji perturbacija ΔA matrice A za koju vrijedi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad |\Delta A| \leq \gamma_{3n}\,|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|. \qquad \blacksquare$$

Za zaključak o relativnoj grešci, fali nam još

- neka veza između $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$ i $|A|$.

Put do relativnih ocjena

U idealnom slučaju, željeli bismo da je

$$|\Delta A| \leq u \, |A|.$$

To bi odgovaralo grešci zaokruživanja koju napravimo

- početnim spremanjem elemenata matrice A u memoriju računala.

No, to nije realistično. Nad svakim elementom matrice A

- vrši se još najviše n aritmetičkih operacija.

Zato ne možemo očekivati nešto bolje od ocjene oblika

$$|\Delta A| \leq c_n u \, |A|,$$

gdje je c_n "konstanta" reda veličine n, tj. $c_n u \approx c \, \gamma_n$.

Relative ocjene — idealni slučaj

Na primjer, takvu ocjenu dobivamo pod uvjetom da $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ zadovoljavaju da je

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}|.$$

To je idealan slučaj — i, naravno, ne vrijedi uvijek.

Ako to vrijedi, onda iz prvog teorema izlazi

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}| = |A + \Delta A| \leq |A| + |\Delta A| \leq |A| + \gamma_n |\widehat{L}|\,|\widehat{R}|,$$

pa, prebacivanjem članova dobivamo

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| \leq \frac{1}{1 - \gamma_n}\,|A|.$$

Relativne ocjene — idealni slučaj (nastavak)

Ako tu relaciju uvrstimo u drugi teorem, onda izlazi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad |\Delta A| \leq \frac{\gamma_{3n}}{1 - \gamma_n}\,|A|,$$

tj. izračunato rješenje $\widehat{x}$ ima

- malu obratnu relativnu grešku po komponentama.

Za koje matrice vrijedi "idealno" $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}|$?

Na primjer, ako LR faktorizacija daje nenegativne elemente u faktorima L i R, tj. vrijedi $L, R \geq 0$ (po elementima).

- Takve su tzv. totalno nenegativne ili totalno pozitivne matrice.

Javljaju se, na primjer, kod splajn interpolacije (v. kasnije).

Što je bitno za stabilnost?

Iz prethodna dva teorema slijedi da stabilnost LR faktorizacije i rješenja linearnog sustava

- ne ovisi o veličini multiplikatora,
- već o veličini elemenata koji se javljaju u matrici $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$, relativno obzirom na elementu matrice A.

Naime, ta matrica $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$

- može imati male elemente, iako su joj multiplikatori $m_{ij} = \ell_{ij}$ veliki,
- ali može imati i velike elemente, a da su joj multiplikatori reda veličine 1.

Analiza i procjena stabilnosti algoritma

Za lakšu analizu, ne gleda se po svim elementima, već se analizira omjer normi

$$\frac{\|\,|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|\,\|}{\|A\|}.$$

Bitno: ovaj omjer ovisi o algoritmu kojim računamo LR faktorizaciju!

Kod LR faktorizacije bez pivotiranja, omjer normi može biti proizvoljno velik. Na primjer, pokažite da je za matricu

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

taj omjer jednak ε^{-1}.

Stabilnost parcijalnog pivotiranja

Kod parcijalnog pivotiranja znamo da vrijedi

$$|\ell_{ij}| \leq 1 \quad \text{za sve } i \geq j.$$

Kad uvrstimo $m_{ik} = \ell_{ik}$ u formule transformacije

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)},$$

indukcijom po koracima eliminacije, dobivamo da vrijedi

$$|r_{ij}| \leq 2^{i-1} \max_{k \leq i} |a_{kj}|.$$

Dakle, kod parcijalnog pivotiranja

- L je malen, a R je ograđen relativno obzirom na A.

Ocjena stabilnosti preko faktora rasta

Tradicionalno, obratna analiza greške izražava se preko faktora rasta (engl. growth factor)

$$\rho_n = \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}.$$

U procesu Gaussovih eliminacija, očito vrijedi da je

$$|r_{ij}| = \left|a_{ij}^{(i)}\right| \leq \rho_n \max_{i,j} |a_{ij}|.$$

što daje ogradu za R, relativno obzirom na A.

Može se naći i precizna veza između omjera normi i faktora rasta.

Obratna ocjena za sustav preko faktora rasta

Teorem (Wilkinson). Neka je A regularna kvadratna matrica reda n i neka je $\widehat{x}$ izračunato rješenje sustava $Ax = b$

- Gaussovim eliminacijama s parcijalnim pivotiranjem u aritmetici računala.

Tada vrijedi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad \|\Delta A\|_\infty \leq n^2 \gamma_{3n} \rho_n \|A\|_\infty. \qquad \blacksquare$$

U prethodnom teoremu, pretpostavka da koristimo parcijalno pivotiranje nije nužna.

Naime, isto vrijedi i za Gaussove eliminacije bez pivotiranja, samo s malo drugačijom konstantom.

Naravno, faktor rasta može biti puno veći!

Rezidual i iterativno poboljšanje rješenja

Rezidual približnog rješenja

Kad rješenje sustava $Ax = b$ računamo približno (računalom),

- umjesto pravog rješenja x, dobivamo približno rješenje $\hat{x}$.

Veličinu

$$r = b - A\hat{x},$$

zovemo rezidual izračunatog rješenja $\hat{x}$.

Napomena. Egzaktni rezidual pravog rješenja x je $r = 0$!

Međutim, ako je (egzaktni) rezidual

- velik, onda sigurno nismo blizu pravom rješenju,
- ali rezidual može biti malen, a da izračunato rješenje sustava nije ni blizu pravom.

Izračunati rezidual

Primjer. Gledamo izračunato rješenje $\hat{x}$ linearnog sustava

$$H_{20}x = b$$

s desnom stranom takvom da je $x^T = [1, 1, \ldots, 1]$.

Kad računamo u `extended` točnosti,

- izračunati rezidual $\hat{r} = b - A\hat{x}$ je nula-vektor (kraćenje),

a komponente rješenja $\hat{x}$ su bile u stotinama.

Ovo ponašanje je u skladu s teorijom perturbacija, koja

- garantira mali rezidual r, za iole razumne perturbacije,
- a rješenje može biti katastrofalno, ako je uvjetovanost matrice A velika.

Uloga reziduala — poboljšanje točnosti

Reziduali se mogu iskoristiti za poboljšavanje netočnog rješenja linearnog sustava.

To se obično provodi u tri koraka — može i iterativno.

- Izračuna se rezidual $r = b - A\hat{x}$, pri čemu je $\hat{x}$ izračunato (ili približno) rješenje sustava.
- Riješi se sustav $Ad = r$, gdje je d korekcija.
- Korekcija se doda izračunatom rješenju

$$y = \hat{x} + d,$$

  što bi trebalo dati bolje rješenje y.

Postupak se može ponoviti s y, umjesto $\hat{x}$.

Računanje reziduala — mora u većoj točnosti

Ovo ima smisla samo ako se prvi korak

- računanje reziduala $r = b - A\hat{x}$
- radi u većoj točnosti od one u kojoj je izračunat $\hat{x}$.

To je nužno zbog kraćenja, tako da

- izračunati $\hat{r}$ ima dovoljnu relativnu točnost.

Preostala dva koraka standardno se rade

- u "običnoj" točnosti, kao za $\hat{x}$ (to je ideja!).

Tipično se računanje reziduala radi u

- dvostrukoj točnosti — jedinična greška reda veličine u^2, obzirom na jednostruku.

Na pr. `double`, prema `single`.

Kad ne treba pivotirati u LR faktorizaciji?

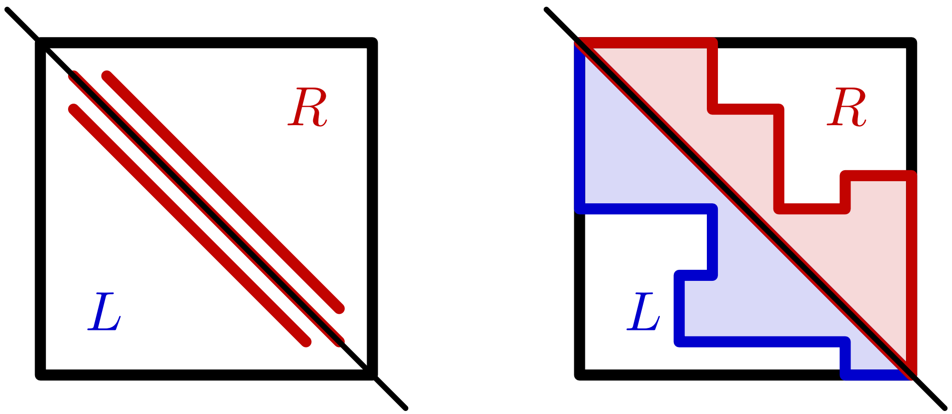
Struktura LR faktorizacije

Ako matrica A koja ulazi u LR faktorizaciju ima nekakvu strukturu, pitanje je kad će se ta struktura sačuvati.

To je posebno bitno za

- sustave gdje je A takva da se bitna informacija o njoj može spremiti u bitno manje od n^2 elemenata.

Ako ne pivotiramo, onda se čuvaju, recimo, sljedeće forme:



Prva su vrpčaste matrice, a druga su "rupe udesno i nadolje".

Kad ne moramo pivotirati?

Dakle, zgodno je znati kad ne treba pivotirati, a da

- imamo garantiranu stabilnost algoritma eliminacija, odnosno, LR faktorizacije.

Odgovor. Postoje tipovi matrica kod kojih ne moramo pivotirati. Na primjer, to su:

- strogo dijagonalno dominantne matrice po stupcima, tj. matrice za koje vrijedi

$$|a_{jj}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} |a_{ij}|,$$

- dijagonalno dominantne matrice po recima ($i \leftrightarrow j$),
- simetrične pozitivno definitne matrice (v. malo kasnije).

Kad ne moramo pivotirati?

Za dijagonalno dominantne matrice po stupcima, treba samo pokazati da iza prvog koraka eliminacije ostaju dijagonalno dominantne po stupcima.

1. Zaključak. $a_{11} \neq 0$ i maksimalan po apsolutnoj vrijednosti u 1. stupcu, pa sigurno možemo napraviti 1. korak eliminacije.

Dobivamo matricu $A^{(2)}$ oblika

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_1 \\ 0 & S \end{bmatrix},$$

pri čemu je S regularna (dokaz korištenjem determinanti).

2. Korak. Moramo pokazati da je matrica S dijagonalno dominantna po stupcima.

Kad ne moramo pivotirati?

Za $j = 2, \ldots, n$ vrijedi

$$\sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}^{(2)}| = \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} \left| a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j} \right| \leq \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}| + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{i1}|$$

(dijagonalna dominantnost obje sume)

$$< (|a_{jj}| - |a_{1j}|) + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| (|a_{11}| - |a_{j1}|)$$

$$= |a_{jj}| - \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} a_{j1} \right| \qquad \text{(koristimo } |a| - |b| \leq |a - b|\text{)}$$

$$\leq \left| a_{jj} - \frac{a_{1j}}{a_{11}} a_{j1} \right| = |a_{jj}^{(2)}|,$$

što pokazuje da je i $A^{(2)}$ dijagonalno dominantna po stupcima.

Dijagonalno dominantne matrice — preciznije

Za kompleksnu matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ kažemo da je dijagonalno dominantna po stupcima ako vrijedi

$$|a_{jj}| \geq \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}|, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Ako vrijedi stroga nejednakost ($>$), za sve $j = 1, \ldots, n$, onda kažemo da je A strogo dijagonalno dominantna po stupcima.

Matrica A je (strogo) dijagonalno dominantna po recima, ako je A^* (strogo) dijagonalno dominantna po stupcima ($i \leftrightarrow j$).

U oba slučaja, Gaussove eliminacije i LR faktorizacija su

- savršeno stabilne i bez pivotiranja.

GE i LR za dijagonalno dominantne matrice

Teorem (Wilkinson). Neka je A kompleksna regularna kvadratna matrica reda n.

- Ako je A dijagonalno dominantna po recima ili stupcima, tada A ima LR faktorizaciju bez pivotiranja i za faktor rasta vrijedi $\rho_n \leq 2$.
- Ako je A dijagonalno dominantna po stupcima, tada je $|\ell_{ij}| \leq 1$ za sve i, j, u LR faktorizaciji bez pivotiranja.

To znači da parcijalno pivotiranje ne radi nikakve zamjene redaka (najveći element je već na dijagonali). ■

Napomena. Regularnost samo osigurava da dijagonalni elementi ne smiju biti nula, jer dozvoljavamo $\geq$.

Dokaz. Sličan prethodnom (v. skripta ili Higham, ASNA2).

Simetrične pozitivno definitne matrice

Simetrične pozitivno definitne matrice

Za simetrične/hermitske pozitivno definitne matrice radi se "simetrizirana varijanta" LR faktorizacije

- jer je 2 puta brža nego obična LR faktorizacija,
- čuva strukturu matrice A — čak i kad računamo u aritmetici računala, množenjem faktora uvijek dobivamo simetričnu matricu.

"Simetrizirana LR" faktorizacija zove se faktorizacija Choleskog.

Prisjećanje. Matrica je hermitska ako je

$$A = A^*.$$

Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, onda je hermitska matrica isto što i simetrična, tj. $* = T$.

Simetrične pozitivno definitne matrice

Pozitivna definitnost matrice se ne vidi odmah. Uobičajeno se unaprijed, iz prirode problema zna da je neka matrica pozitivno definitna.

Matrica $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ je pozitivno definitna ako je

$$x^* A x > 0, \quad \text{za svaki} \quad x \in \mathbb{F}^n, \quad x \neq 0.$$

Ekvivalentni uvjeti za pozitivnu definitnost:

- sve svojstvene vrijednosti od A su pozitivne, tj. vrijedi

  $$\lambda_k(A) > 0, \quad \text{za} \quad k = 1, \ldots, n,$$

  gdje λ_k označava k-tu najveću svojstvenu vrijednost;

Simetrične pozitivno definitne matrice

Ekvivalentni uvjeti (nastavak):

- sve vodeće glavne minore od A su pozitivne, tj. vrijedi

$$\det(A_k) > 0, \quad \text{za} \quad k = 1, \ldots, n,$$

  gdje je $A_k = A(1:k, 1:k)$ vodeća glavna podmatrica od A reda k.

Posljedica. Sve vodeće glavne podmatrice A_k su regularne, za $k = 1, \ldots, n$.

Digresija. Katkad se puno lakše vidi da neka matrica nije pozitivno definitna. Pokažite da nisu pozitivno definitne matrice koje

- na dijagonali imaju negativan element ili nulu.

Pozitivna definitnost i simetrija

Za kompleksne matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, može se pokazati da vrijedi

- A je pozitivno definitna $\implies$ A je hermitska $(A = A^*)$.

Za realne matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ to ne mora vrijediti, tj.

- pozitivno definitna matrica ne mora biti simetrična (može biti i $A \neq A^T$).

Međutim, u numerici se vrlo često koristi "stroža" varijanta pojma — koja, po definiciji, uključuje i simetriju:

- Realna matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ pozitivno definitna ako je simetrična i za svaki $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, vrijedi $x^T A x > 0$.

Da ne bude zabune, u nastavku, koristimo "strožu" definiciju! U tom slučaju, originalni pojam (bez simetrije) katkad se zove samo "pozitivnost" matrice A.

LR Faktorizacija za sim. poz. def. matrice

Iz ekvivalentnog uvjeta odmah izlazi da se za

- hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu

uvijek može napraviti

- LR faktorizacija bez pivotiranja (v. Teorem o LR)!

Simetrizacija — faktorizacija Choleskog

Tvrdnja. Za hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu A, LR faktorizaciju možemo napisati u obliku

$$A = LDL^*.$$

Ta faktorizacija se obično zove LDL^* faktorizacija.

Kako se dobije ova faktorizacija?

U LR faktorizaciji matrice A, faktor R se rastavi na

$$R = DM^*,$$

gdje je

- D dijagonalna,
- a M^* gornja trokutasta s jedinicama na dijagonali.

Faktorizacija Choleskog

Da se dobije takva faktorizacija,

- dijagonalni elementi R stave se na dijagonalu od D,
- svaki redak u R podijeli se s dijagonalnim elementom u tom retku da se dobije M^*.

Dakle,

$$A = LDM^*, \quad M \ \text{donjetrokutasta, regularna.}$$

Zbog hermitičnosti/simetrije vrijedi

$$A = A^* = (LDM^*)^* = MDL^*,$$

pa je $LDM^* = MDL^* \ldots$

Faktorizacija Choleskog

(nastavak) . . .

$$LDM^* = MDL^*.$$

Množenjem slijeva s L^{-1} i zdesna s L^{-*} dobivamo

$$DM^*L^{-*} = L^{-1}MD.$$

Na lijevoj strani imamo produkt gornjetrokutastih matrica, a na desnoj strani donjetrokutastih, pa su ti produkti dijagonalne matrice.

Te dijagonalne matrice su jednake D (jer i M i L imaju na dijagonali jedinice), pa je

$$L^{-1}MD = D \implies MD = LD \implies M = L.$$

Faktorizacija Choleskog

Nadalje, D ima pozitivne elemente, jer bi inače postojao vektor x takav da je

$$(Ax, x) = (LDL^* x, x) = (DL^* x, L^* x) := (Dy, y) \leq 0.$$

Dakle, D možemo rastaviti na

$$D = \Delta \cdot \Delta$$

gdje je Δ dijagonalna i $\Delta_{ii} = \sqrt{D_{ii}}$.

Tada LDL^* faktorizaciju možemo napisati u obliku:

$$A = LDL^* = (L\Delta)(\Delta L^*) = (L\Delta)(\Delta^* L^*) = (L\Delta)(L\Delta)^*.$$

Faktorizacija Choleskog

Uz oznaku $R := (L\Delta)^*$ dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$A = R^* R.$$

Digresija. Mnogi slovom L označavaju $L := L\Delta$, pa se u literaturi faktorizacija Choleskog može naći napisana kao

$$A = LL^*.$$

Oprez: taj L nema jedinice na dijagonali!

Kad znamo da postoji, Faktorizacija Choleskog se može i direktno izvesti, znajući da je $A = R^* R$.

Algoritam

Ograničimo se na realni slučaj. Tada je

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} r_{ki}\, r_{kj}, \quad i \leq j,$$

pa dobivamo sljedeću rekurziju za elemente:

$$\text{za } j = 1, \ldots, n :$$

$$r_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}\, r_{kj} \right) \Big/ r_{ii}, \quad i = 1, \ldots, j-1,$$

$$r_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj}^2 \right)^{1/2}.$$

Za $j = 1$ računamo samo r_{11}.

Algoritam

Greške zaokruživanja ⇒ moguć negativan izraz pod korijenom.

Faktorizacija Choleskog

```
za j = 1 do n radi {
    /* Nađi j-ti stupac od R */
    /* Supstitucija unaprijed iznad dijagonale */
  za i = 1 do j - 1 radi {
    sum = A[i, j];
    za k = 1 do i - 1 radi {
      sum = sum - R[k, i] * R[k, j];
    };
    R[i, j] = sum / R[i, i];
  };
```

Algoritam

```
    /* Dijagonalni element */
  sum = A[j, j];
  za k = 1 do j - 1 radi {
    sum = sum - R[k, j]**2;
  };
  ako je sum > 0.0 onda {
    R[j, j] = sqrt(sum)
  };
  inače
    /* Matrica nije pozitivno definitna, STOP */
};
```

Komentar na algoritam

Uočimo da:

- se po prethodnoj rekurziji matrica R generira stupac po stupac, dok se u LR faktorizaciji R generirala redak po redak, a L stupac po stupac;
- ovo je tzv. jik varijanta algoritma, a naziv dolazi od poretka petlji, uz prirodno imenovanje indeksa;
- ovo nije jedina varijanta za realizaciju algoritma.

Složenost algoritma (broj aritmetičkih operacija) je približno jednaka

$$OP(n) \sim \frac{1}{3} n^3,$$

što je približno polovina složenosti LR faktorizacije.

Rješenje linearnog sustava

Kad imamo faktorizaciju Choleskog $A = R^T R$, onda se rješenje linearnog sustava $Ax = b$ svodi na dva rješavanja trokutastih sustava

$$R^T y = b, \quad Rx = y,$$

koje lako rješavamo:

- sustav $R^T y = b$ — supstitucijom unaprijed

$$y_1 = b_1 / r_{11}$$

$$y_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} r_{ji}\, y_j \right) \Bigg/ r_{ii}, \quad i = 2, \ldots, n,$$

Rješenje linearnog sustava

- sustav $Rx = y$ — supstitucijom unatrag

$$x_n = y_n / r_{nn}$$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij}\, x_j \right) \Big/ r_{ii}, \quad i = n-1, \ldots, 1.$$

Za razliku od LR faktorizacije, ovdje u obje supstitucije imamo dijeljenja.
Zbog toga se često koristi LDL^T oblik faktorizacije:

- u algoritmu nema računanja drugih korijena;
- rješavaju se tri linearna sustava:

$$Lz = b, \quad Dy = z, \quad L^T x = y.$$

- L ima jediničnu dijagonalu, pa štedimo n dijeljenja.

Može li LDL^T za simetrične matrice?

Može li se LDL^T faktorizacija napraviti za bilo koju simetričnu matricu A (uz dozvolu da matrica D ima i negativne elemente)?

To ne vrijedi! Kontraprimjer:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

Pomaže li simetrična permutacija redaka/stupaca? Ne!

Poopćenje na indefinitne matrice dobivamo tako da

- dozvolimo dijagonalne blokove reda 2 u matrici D.

Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

I kod faktorizacije Choleskog možemo koristiti pivotiranje.

- Da bismo očuvali simetriju radne matrice, pivotiranje mora biti "simetrično", tj. radimo istovremene zamjene redaka i stupaca u A

$$A \to P^T A P,$$

  gdje je P matrica permutacije.
- "Simetrična zamjena" $\Rightarrow$ dijagonalni element zamjenjuje mjesto s dijagonalnim!
- Standardni izbor pivotnog elementa u k-tom koraku je

$$a_{rr}^{(k)} = \max_{k \le i \le n} a_{ii}^{(k)},$$

  što odgovara potpunom pivotiranju u Gaussovim eliminacijama.

Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Ovim postupkom dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$P^T A P = R^T R,$$

a za elemente matrice R vrijedi

$$r_{kk}^2 \geq \sum_{i=k}^{j} r_{ij}^2, \quad j = k+1, \ldots, n, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Posebno, to znači da R ima nerastuću dijagonalu

$$r_{11} \geq \cdots \geq r_{nn} > 0.$$

Napomena. Usporedite kasnije s rezultatom za QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca.

Aproksimacija i interpolacija

Općenito o problemu aproksimacije

Što je problem aproksimacije?

Poznate su neke informacije o funkciji f, definiranoj na nekom podskupu $X \subseteq \mathbb{R}$.

Na osnovu tih informacija, želimo funkciju f

- zamijeniti nekom drugom funkcijom φ na skupu X, ili na još većem skupu,
- tako da su funkcije f i φ bliske u nekom smislu.

Skup X je najčešće:

- interval oblika $[a, b]$ (koji može biti i neograničen), ili
- diskretni skup točaka.

Pitanje: Zašto uopće želimo zamjenu $f \mapsto \varphi$?

Oblici problema aproksimacije

Problem aproksimacije javlja se u dva bitno različita oblika.

Prvi oblik: Znamo funkciju f (analitički ili slično),

- ali je njezina forma prekomplicirana za računanje.

U tom slučaju,

- izaberemo neke informacije o f i
- po nekom kriteriju odredimo aproksimacijsku funkciju φ.

Prednosti ovog oblika problema aproksimacije:

- Možemo birati informacije o f koje ćemo koristiti.
- Jednako tako, možemo ocijeniti grešku dobivene aproksimacije φ, obzirom na prave vrijednosti funkcije f.

Oblici problema aproksimacije (nastavak)

Drugi oblik: Ne znamo funkciju f,

- već samo neke informacije o njoj,
- na primjer, vrijednosti na nekom (diskretnom) skupu točaka.

Zamjenska funkcija φ određuje se iz raspoloživih informacija.

- Osim samih podataka (poznate vrijednosti),
- ove informacije mogu uključivati i očekivani oblik ponašanja tih podataka (tj. funkcije φ).

Mane ovog oblika problema aproksimacije:

- Ne može se napraviti ocjena pogreške,
- bez dodatnih informacija o nepoznatoj funkciji f.

Prvi oblik problema — primjene

Prvi oblik se obično koristi u teoriji

- za razvoj numeričkih metoda na bazi aproksimacije.

Na primjer, za numeričko

- integriranje funkcija (integriramo aproksimaciju),
- rješavanje diferencijalnih jednadžbi.

Praktični primjer:

- programska biblioteka za računanje raznih elemenatrnih funkcija (exp, sin, cos, sqrt i sl),

Traži se maksimalna brzina i puna točnost, na razini osnovne greške zaokruživanja.

Realizacija standardno ide racionalnim aproksimacijama.

Drugi oblik problema — primjene

Drugi oblik problema se vrlo često javlja u praksi.

Na primjer,

- kod mjerenja nekih veličina (rezultat je “tablica”),
- osim izmjerenih podataka, pokušavamo aproksimirati i podatke koji se nalaze “između” izmjerenih točaka.

To je ključna svrha ovakve aproksimacije!

Napomena. Kod mjerenja se javljaju i greške mjerenja.

- Zato postoje posebne tehnike — vrste aproksimacija, za “ublažavanje” tako nastalih grešaka.

Na primjer, metoda najmanjih kvadrata.

Izbor aproksimacijske funkcije φ

Aproksimacijska funkcija φ bira se:

- prema prirodi modela — izbor dolazi iz problema,
- ali tako da bude relativno jednostavna za računanje.

Obično se prvo fiksira (izabere) neki skup funkcija $\mathcal{F}$.

- Onda se traži "najbolja" aproksimacija φ iz tog skupa $\mathcal{F}$.

Skup $\mathcal{F}$ može biti vektorski prostor, ali ne mora.

Za praktično računanje, funkcija φ obično ovisi

- o nekom konačnom broju parametara a_k, $k = 0, \ldots, m$,
- koje treba odrediti po nekom kriteriju aproksimacije.

Ideja: Sve moguće vrijednosti ovih $m + 1$ parametara određuju skup svih "dozvoljenih" funkcija $\mathcal{F}$.

Parametrizacija aproksimacijske funkcije φ

Kad funkciju φ zapišemo u obliku

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_m),$$

kao funkciju koja ovisi o parametrima a_k, onda kažemo da smo

- da smo izabrali opći oblik aproksimacijske funkcije φ (u odnosu na skup $\mathcal{F}$).

Prema obliku ovisnosti o parametrima, aproksimacijske funkcije možemo grubo podijeliti na:

- linearne aproksimacijske funkcije,
- nelinearne aproksimacijske funkcije.

Koje su bitne razlike između ove dvije grupe?

Linearne aproksimacijske funkcije

Opći oblik linearne aproksimacijske funkcije je

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x),$$

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ poznate funkcije koje znamo računati.

Linearnost u ovisnosti o parametrima znači:

- traženi parametri su koeficijenti u linearnoj kombinaciji poznatih funkcija.

Velika prednost: Određivanje parametara a_k obično vodi na "linearne" probleme (koji su lakše rješivi od nelinearnih):

- sustave linearnih jednadžbi, ili
- linearne probleme optimizacije.

Linearne aproksimacijske funkcije (nastavak)

Standardni model za linearni oblik aproksimacije:

- skup “dozvoljenih” funkcija $\mathcal{F}$ je vektorski prostor, a
- funkcije $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ su neka baza u tom prostoru.

Unaprijed se bira (fiksira):

- vektorski prostor $\mathcal{F}$, odgovarajuće dimenzije $m+1$,
- baza $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ u $\mathcal{F}$.

Napomena. Kod približnog numeričkog računanja,

- “dobar” izbor baze je ključan za stabilnost postupka
- i točnost izračunatih vrijednosti parametara aproksimacijske funkcije φ.

Primjer 1 — polinomi

Nekoliko primjera najčešće korištenih vektorskih prostora $\mathcal{F}$.

Polinomi. Uzimamo $\mathcal{F} = \mathcal{P}_m$, gdje je $\mathcal{P}_m$ vektorski prostor polinoma stupnja $\leq m$.

Standardni izbor baze je $\varphi_k(x) = x^k$, za $k = 0, \ldots, m$, tj.

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m.$$

Nije nužno da φ zapisujemo u bazi $\{ 1, \ x, \ \ldots, \ x^m \}$. Upravo suprotno, vrlo često je neka druga baza bitno bolja.

- Na primjer, $\{ 1, \ (x - x_0), \ (x - x_0)(x - x_1), \ \ldots \}$, gdje su $x_0, x_1, \ldots$ zadane točke (v. kod interpolacije).
- Ortogonalni polinomi, obzirom na pogodno izabrani skalarni produkt (v. kod najmanjih kvadrata).

Primjer 2 — trigonometrijski polinomi

Trigonometrijski “polinomi”. Za funkcije φ_k uzima se prvih $m+1$ funkcija iz skupa

$$\{\, 1,\ \cos x,\ \sin x,\ \cos 2x,\ \sin 2x,\ \ldots \,\}.$$

Koriste se za aproksimaciju periodičkih funkcija na intervalu perioda — ovdje, recimo, $[0, 2\pi]$.

- Primjena je, na primjer, u obradi i modeliranju signala.

Varijacije u izboru baze:

- Koristi se dodatni faktor u argumentu sinusa i kosinusa ($x \mapsto \lambda x$) — koji služi za kontrolu perioda.
- Ponekad se biraju samo parne ili samo neparne funkcije iz ovog skupa.

Primjer 3 — polinomni splajnovi

Polinomni splajnovi. To su funkcije koje su "po dijelovima" polinomi. Ako su zadane točke $x_0 < \cdots < x_n$, onda se splajn funkcija na svakom podintervalu

- svodi na polinom određenog fiksnog (niskog) stupnja,

$$\varphi\Big|_{[x_{k-1},x_k]} = p_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

a p_k su polinomi najčešće stupnjeva 1, 2, 3 ili 5.

U točkama x_i obično se zahtijeva da funkcija φ zadovoljava još

- i "uvjete ljepljenja" vrijednosti funkcije i nekih njezinih derivacija, ili nekih aproksimacija za te derivacije.

Splajnovi se često koriste zbog dobrih ocjena greške aproksimacije i kontrole oblika aproksimacijske funkcije.

Nelinearne aproksimacijske funkcije

Nelinearne aproksimacijske funkcije φ

$$\varphi(x) = \varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_m),$$

imaju nelinearnu ovisnosti o parametrima aproksimacijske funkcije $a_0, \ldots, a_m$.

Pripadni skup ‘dozvoljenih” funkcija $\mathcal{F}$ najčešće

- nije vektorski prostor.

Određivanje parametara a_k, općenito, vodi na “nelinearne” probleme:

- sustave nelinearnih jednadžbi, ili
- nelinearne probleme optimizacije.

Primjer 4 — eksponencijalne funkcije

Par primjera najčešće korištenih oblika nelinearnih aproksimacijskih funkcija.

Eksponencijalne aproksimacije. Imaju oblik linearne kombinacije eksponencijalnih funkcija s parametrima u eksponentu:

$$\varphi(x) = c_0 e^{b_0 x} + c_1 e^{b_1 x} + \cdots + c_r e^{b_r x},$$

Broj nezavisnih parametara je $m + 1 = 2r + 2$.

Opisuju, na primjer,

- procese rasta i odumiranja u raznim populacijama,
- s primjenom u biologiji, ekonomiji i medicini.

Primjer 5 — racionalne funkcije

Racionalne funkcije. Imaju opći oblik

$$\varphi(x) = \frac{b_0 + b_1 x + \cdots + b_r x^r}{c_0 + c_1 x + \cdots + c_s x^s},$$

i $m + 1 = r + s + 1$ nezavisnih parametara, a ne $r + s + 2$, kako formalno piše.

Objašnjenje. Razlomci se mogu proširivati,

- ako su b_i, c_i parametri, onda su to i tb_i, tc_i, za $t \neq 0$;
- uvijek možemo fiksirati jedan od koeficijenata b_i ili c_i, a koji je to — obično slijedi iz prirode modela.

Ovako definirane racionalne funkcije imaju mnogo bolja svojstva aproksimacije nego polinomi, a pripadna teorija je relativno nova.

Kriteriji aproksimacije — interpolacija

Interpolacija je zahtjev da se funkcije f i φ podudaraju na nekom konačnom skupu točaka.

- Te točke nazivamo čvorovi interpolacije.
- Zahtjevu se može, ali i ne mora, dodati zahtjev da se u čvorovima, osim funkcijskih vrijednosti, poklapaju i vrijednosti nekih derivacija.

U najjednostavnijem obliku interpolacije, kad se podudaraju samo funkcijske vrijednosti, od podataka o funkciji f

- koristi se samo informacija o njenoj vrijednosti na skupu od $n + 1$ točaka,
- tj. podaci (x_k, f_k), gdje je $f_k := f(x_k)$, za $k = 0, \ldots, n$.

Kriteriji aproksimacije — interpolacija

- Parametri $a_0, \ldots, a_n$ (mora ih biti točno onoliko koliko i podataka, tj. $m = n$) određuju se iz uvjeta

$$\varphi(x_k; a_0, a_1, \ldots, a_n) = f_k, \quad k = 0, \ldots, n,$$

što je, općenito, nelinearni sustav jednadžbi.

- Linearnost funkcije φ povlači da parametre a_k dobivamo iz sustava linearnih jednadžbi
  - koji ima točno $n + 1$ jednadžbi za $n + 1$ nepoznanica.

Matrica tog sustava je kvadratna.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Minimizacija pogreške je drugi kriterij određivanja parametara aproksimacije. Funkcija φ bira se tako da se minimizira neka odabrana norma pogreške

$$e(x) = f(x) - \varphi(x)$$

u nekom odabranom prostoru funkcija $\mathcal{F}$ za φ, na nekoj domeni X.

Ove aproksimacije, često zvane i najbolje aproksimacije po normi, dijele se na

- diskretne — ako se norma pogreške e minimizira na diskretnom skupu podataka X;
- kontinuirane — ako se norma pogreške e minimizira na kontinuiranom skupu podataka X.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Standardno se kao norme pogreške koriste

- 2-norma i
- ∞-norma.

Za 2-normu

- pripadna se aproksimacija zove srednjekvadratna,
- a metoda za njeno nalaženje zove se metoda najmanjih kvadrata.

Funkcija φ, odnosno njeni parametri, se traže tako da bude

$$\min_{\varphi \in \mathcal{F}} \|e(x)\|_2.$$

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

- U diskretnom slučaju je $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$, pa raspisom prethodne relacije dobivamo

$$\sqrt{\sum_{k=0}^{n} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2} \to \min,$$

- a u kontinuiranom slučaju

$$\sqrt{\int_a^b (f(x) - \varphi(x))^2 \, dx} \to \min .$$

Preciznije, minimizira se samo ono pod korijenom.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

U slučaju ∞-norme pripadna se aproksimacija zove minimaks aproksimacija, a parametri se biraju tako da se nađe

$$\min_{\varphi \in \mathcal{F}} \|e(x)\|_\infty .$$

- U diskretnom slučaju traži se

$$\max_{k=0,\ldots,n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \to \min,$$

- a u kontinuiranom slučaju

$$\max_{x \in [a,b]} |f(x) - \varphi(x)| \to \min .$$

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Ovaj je tip aproksimacija poželjniji od srednjekvadratnih,

- jer se traži da maksimalna greška bude minimalna,
- ali ih je općenito mnogo teže izračunati (na primjer, dobivamo problem minimizacije nederivabilne funkcije!).

Za znatiželjne: U praksi norme, pored funkcije mogu uključivati i neke njene derivacije. Primjer takve norme

$$\|f\| = \sqrt{\int_a^b \left[(f(x))^2 + (f'(x))^2\right] dx},$$

na prostoru $C^1[a, b]$ svih funkcija koje imaju neprekidnu prvu derivaciju na $[a, b]$.

Ključni problemi kod aproksimacije

Matematički problemi koje treba riješiti:

- egzistencija i jedinstvenost rješenja problema aproksimacije, što ovisi o tome
  - koje funkcije f aproksimiramo kojim funkcijama φ (dva prostora)
  - i kako mjerimo grešku e (norma);
- analiza kvalitete dobivene aproksimacije — vrijednost "najmanje" pogreške i ponašanje funkcije greške e (jer norma je ipak samo broj),
- konstrukcija algoritama za računanje najbolje aproksimacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — diskretno

U diskretnom slučaju,

- problem interpolacije na konačnom skupu točaka X (točke iz X su čvorovi interpolacije),

možemo smatrati specijalnim, ali posebno važnim slučajem

- aproksimacije po normi na skupu X, uz neku od
- standardnih normi na konačnodimenzionalnim prostorima (ovisi o tome odakle biramo φ).

Posebnost: uz minimizaciju norme pogreške $\|e\| \to \min$, dodatno tražimo da je

- minimum norme pogreške jednak nuli, tj. $\min \|e\| = 0$,

što je onda ekvivalentno odgovarajućim uvjetima interpolacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

Primjer. Neka je $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$ i tražimo aproksimacijsku funkciju φ

- u prostoru $\mathcal{P}_n$ svih polinoma stupnja najviše baš n.

Kao kriterij aproksimacije uzmimo neku p-normu ($1 \leq p \leq \infty$)

- vektora e grešaka funkcijskih vrijednosti na skupu X.

Za $1 \leq p < \infty$, zahtjev je

$$\|e\|_p = \|f - \varphi\|_p = \left(\sum_{k=0}^{n} |f(x_k) - \varphi(x_k)|^p \right)^{1/p} \to \min .$$

Za $p = \infty$, tražimo

$$\|e\|_\infty = \|f - \varphi\|_\infty = \max_{k=0,\ldots,n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \to \min .$$

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

Očito je $\|e\|_p = 0$ ekvivalentno uvjetima interpolacije

$$f(x_k) = \varphi(x_k), \quad k = 0, \ldots, n.$$

Međutim, nije jasno može li se to postići, tj.

- postoji li takva aproksimacijska funkcija $\varphi \in \mathcal{P}_n$
- za koju je minimum norme greške jednak nuli,

tako da je φ i interpolacijska funkcija.

U nastavku, pokazat ćemo da je odgovor potvrdan za ovaj primjer. Razlog:

- Prostor $\mathcal{P}_n$, u kojem tražimo aproksimaciju, ima taman dovoljno veliku dimenziju.