Numerička matematika
4. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.pmf.unizg.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 prošlih 5 godina, a stizat će i nova (kako nastaju).

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 dva demonstratora:

- Mario Berljafa
  - termini: utorak, 9–10 i petak, 12–13.
  - e–mail: `mberljaf@student.math.hr`
- Marin Bužančić
  - termin: utorak, 16–18.
  - e–mail: `buzancic@student.math.hr`

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

- Sastanak za demonstrature je pred oglasnom pločom (bar zasad).

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, $(H_n)_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$, ili

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

Hilbertova matrica

Da bismo ispitali točnost rješenja, stavimo desnu stranu

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

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

Što možemo očekivati od rješenja takvog sustava?

Pogled na Frobeniusovu normu matrice H_n kaže da ona nije naročito velika,

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

Hilbertova matrica — uvjetovanost

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 — rješenje za $n = 2, 5$

Za sustav $H_n x = b$ s Hilbertovom matricom, u `extended` točnosti, umjesto svih jedinica u rješenju, dobivamo:

Red $n = 2$

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

Red $n = 5$

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

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

$x(3) = 1.0000000000000007$

Uvjetovanost: $\approx 4.766 \cdot 10^5$.

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 10$

$$x(1) = 1.0000000000003436 \qquad x(6) = 0.9999999294831902$$
$$x(2) = 0.9999999999710395 \qquad x(7) = 1.0000001151701616$$
$$x(3) = 1.0000000006068386 \qquad x(8) = 0.9999998890931838$$
$$x(4) = 0.9999999945453735 \qquad x(9) = 1.0000000580638087$$
$$x(5) = 1.0000000258066880 \qquad x(10) = 0.9999999872591526$$

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 15$

$$x(1) = 1.000000000\,5406387 \qquad x(9) = 1.095291944\,4304200$$
$$x(2) = 0.999999906\,9805858 \qquad x(10) = 0.879782036\,3884070$$
$$x(3) = 1.000003979\,0948573 \qquad x(11) = 1.099467144\,4236333$$
$$x(4) = 0.999925752\,5660447 \qquad x(12) = 0.950810251\,1158300$$
$$x(5) = 1.000754345\,2271621 \qquad x(13) = 1.010602710\,8940050$$
$$x(6) = 0.995323419\,0795597 \qquad x(14) = 1.001234684\,1153261$$
$$x(7) = 1.018864367\,4562383 \qquad x(15) = 0.999225202\,9377023$$
$$x(8) = 0.948714254\,4341838$$

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 20$

$x(1) =$	1.0000000486333029	$x(11) =$	231.3608002738048500
$x(2) =$	0.9999865995557111	$x(12) =$	-60.5143391625873562
$x(3) =$	1.0008720556363132	$x(13) =$	-57.6674972682886125
$x(4) =$	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

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

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

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

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

Perturbacija matrice A (nastavak)

Premještanjem na lijevu stranu svih članova 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.

Korektno bi bilo dodati "u najgorem slučaju", jer imamo ocjenu odozgo, ali se ona može dostići.

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 (nastavak)

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

$$\|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\| \, \|\Delta b\| \leq \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|b\| = \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|Ax\|$$

$$\leq \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|A\| \, \|x\| = \varepsilon \, \kappa(A) \, \|x\|,$$

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 neka je

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

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 (nastavak)

Komentar: Uobičajeno se za E uzima A, jer je to pogreška koju napravimo spremanjem matrice A u računalo. Jednako tako, za f se obično 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 (nastavak)

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. ■

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

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

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, kad računamo približno?

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

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

Za zaključak o relativnoj grešci, fali nam još

- neka veza između matrica $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$ 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 samo

- 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, odnosno, $c_n u \approx c\,\gamma_n$.

Relativne 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 — i zato se kod njih ne pivotira u GE ili LR.

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 odgovarajuće elemente matrice A (toliko kraćenje može nastati računanjem $\widehat{L}\widehat{R} \approx A$).

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

- može imati male elemente, iako su joj multiplikatori $m_{ij} = \ell_{ij}$ veliki — pripadni elementi u $\widehat{R}$ su jako mali,
- ali može imati i velike elemente, a da su joj multiplikatori reda veličine 1 — pripadni elementi u $\widehat{R}$ su veliki.

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 matrice A!

Kod LR faktorizacije bez pivotiranja, ovaj 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 ($PA = LR$) znamo da vrijedi

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

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

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

indukcijom po koracima eliminacije, dobivamo da vrijedi

$$|r_{ij}| \leq 2^{i-1} \max_{k \leq i} |(PA)_{kj}| \leq 2^{i-1} \max_{k} |a_{kj}|,$$

jer element r_{ij} nastaje nakon $i - 1$ koraka eliminacije.

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 pivotnog rasta ili 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. Naravno, faktor rasta ρ_n ovisi o algoritmu kojim računamo.

Može se naći i precizna ocjena omjera normi odozgo, preko faktora rasta, i obratno (ovisi o algoritmu i izabranoj normi).

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

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

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

Naime, slično vrijedi i za Gaussove eliminacije bez pivotiranja, samo s malo drugačijim oblikom faktora ispred $\|A\|_\infty$.

Naravno, faktor rasta ρ_n 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

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

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 $\hat{x}$ sustava nije ni blizu pravom rješenju x.

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 izračunato rješenje $\hat{x}$ 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. Egzaktno bi bilo $r(y) = b - A\hat{x} - Ad = r - r = 0$.

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 $\hat{x}$ (baš to je ideja!).

Tipično se računanje reziduala radi u

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

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

Kad ne treba pivotirati u LR faktorizaciji?

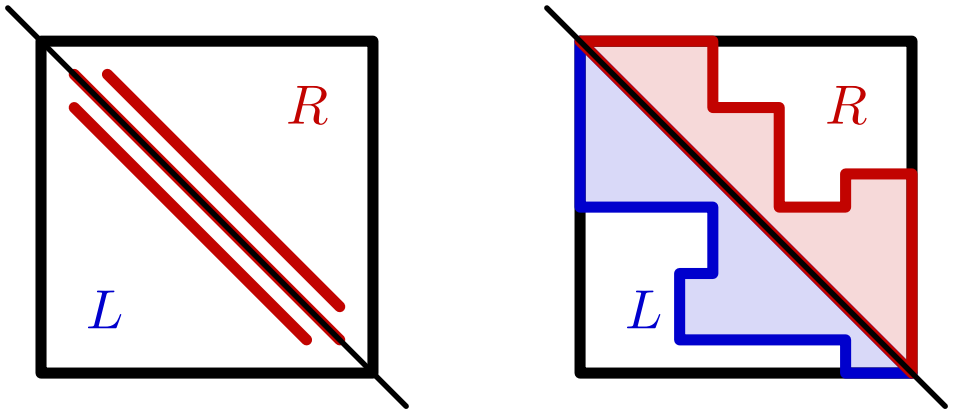
Struktura LR faktorizacije

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

To je posebno bitno za tzv. "šuplje" sustave

- gdje se sva informacija o matrici A 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).

Dijagonalno dominantna — ne treba pivotirati

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

Prvi korak. Element $a_{11} \neq 0$ (čak je maksimalan po apsolutnoj vrijednosti u prvom stupcu), pa sigurno možemo napraviti prvi korak eliminacije. Dobivamo matricu $A^{(2)}$ oblika

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

pri čemu je $S^{(2)}$ regularna (dokaz korištenjem determinanti).

Za nastavak, moramo pokazati da je matrica $S^{(2)}$, također, dijagonalno dominantna po stupcima ("korak indukcije").

Dijagonalno dominantna — ne treba pivotirati

Iz formula za transformacije elemenata, za $j = 2, \ldots, n$, slijedi

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

(dijagonalna dominantnost obje sume)

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

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

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

Dakle, i $S^{(2)}$ je 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,
- i čuva strukturu matrice A — čak i kad računamo u aritmetici računala, množenjem faktora uvijek dobivamo simetričnu/hermitsku matricu.

Ova simetrizirana faktorizacija zove se faktorizacija Choleskog.

Prisjećanje. Kompleksna matrica $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je hermitska ako je

$$A = A^*, \quad \text{ili} \quad a_{ji} = \bar{a}_{ij}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

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

Simetrične pozitivno definitne matrice

Definicija. Matrica $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ je pozitivno definitna ako za svaki vektor $x \in \mathbb{F}^n$, takav da je $x \neq 0$, vrijedi

$$\langle Ax, x\rangle = x^* Ax > 0.$$

Napomena. Pozitivna definitnost matrice se ne vidi odmah. Obično se unaprijed, iz prirode problema, zna da je neka matrica pozitivno definitna (očuvanje energije i slično).

Ekvivalentni uvjeti za pozitivnu definitnost:

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

$$\lambda_k(A) > 0, \quad k = 1, \ldots, n,$$

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

$$\det(A_k) > 0, \quad k = 1, \ldots, n,$$

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 $k = 1, \ldots, n$. Posebno, matrica A je regularna.

Digresija. Katkad se lakše vidi da neka matrica nije pozitivno definitna. Pokažite da nisu pozitivno definitne one 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 $\Longrightarrow$ 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 $x^T Ax > 0$.

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

Tvrdnja. Za svaku hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu A

- uvijek se može napraviti LR faktorizacija bez pivotiranja.

Osim toga, matrica R ima pozitivnu dijagonalu i regularna je.

Dokaz. Sve vodeće glavne podmatrice $A_k = A(1:k, 1:k)$ su regularne, pa prva tvrdnja slijedi iz teorema o LR faktorizaciji.

U LR faktorizaciji matrice A, za sve vodeće glavne podmatrice matrica A i R vrijedi (v. prošli puta)

$$\det(A_k) = \det(R_k) = r_{11}\, r_{22} \cdots r_{kk}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Iz drugog ekvivalentnog uvjeta $\det(A_k) > 0$, slijedi $r_{11} > 0$ i $r_{kk} = \det(A_k)/\det(A_{k-1}) > 0$, za $k = 2, \ldots, n$. ■

Simetrizirana LR faktorizacija

Tvrdnja. LR faktorizaciju hermitske/simetrične pozitivno definitne matrice A možemo napisati u simetriziranom obliku

$$A = LDL^*,$$

gdje je

- L donja trokutasta matrica s jedinicama na dijagonali,
- a D dijagonalna matrica s pozitivnom dijagonalom.

Ta faktorizacija se obično zove LDL^* faktorizacija.

Dokaz. Ide u dva koraka. U LR faktorizaciji matrice A, faktor R se prvo rastavi na

$$R = DM^*,$$

gdje je M^* gornja trokutasta s jedinicama na dijagonali, a zatim se dokaže da je $M = L$.

Simetrizirani LR — faktorizacija Choleskog

Prvi korak. Faktorizaciju $R = DM^*$ dobijemo tako da

- dijagonalne elemente r_{ii} od R izlučimo slijeva (iz redaka) u dijagonalnu matricu D (s pozitivnom dijagonalom),
- svaki redak u R podijelimo s dijagonalnim elementom u tom retku — dobijemo M^* s jedinicama na dijagonali (ostaje gornja trokutasta, kao i R).

Dakle, izlazi da je

$$A = LDM^*,$$

gdje su L i M donje trokutaste s jedinicama na dijagonali, a D je dijagonalna s pozitivnim dijagonalnim elementima.

Sve tri matrice su regularne.

Simetrizirani LR — faktorizacija Choleskog

Drugi korak. Zbog hermitičnosti/simetrije matrice A, vrijedi

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

Množenjem slijeva s L^{-1} i zdesna s $L^{-*} = (L^{-1})^*$ dobivamo

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

Na lijevoj strani imamo produkt gornjih trokutastih matrica, a na desnoj donjih, pa su ti produkti = dijagonalna matrica.

Matrice M i L imaju jedinice na dijagonali, pa usporedbom dijagonala izlazi da su obje strane baš jednake D. Koristeći regularnost, dobivamo

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

Faktorizacija Choleskog — standardni oblik

Teorem (Standardni oblik faktorizacije Choleskog). Za svaku hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu A postoji faktorizacija

$$A = R^* R,$$

gdje je R gornja trokutasta matrica. Ako fiksiramo da R ima (na pr.) pozitivnu dijagonalu, ova faktorizacija je jedinstvena.

Dokaz. Matrica A ima jedinstvenu LDL^* faktorizaciju (jedinstvenost slijedi iz jedinstvenosti LR faktorizacije).

Nadalje, D ima pozitivnu dijagonalu, pa se može rastaviti kao

$$D = \Delta \cdot \Delta = \Delta \cdot \Delta^*,$$

gdje je Δ dijagonalna i $\Delta_{ii} = \sqrt{D_{ii}} = \sqrt{r_{ii}} > 0$ ($+$ predznak).

Faktorizacija Choleskog — standardni oblik

Tada LDL^* faktorizaciju od A možemo napisati u obliku

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

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

$$A = R^* R.$$

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

$$A = LL^*.$$

Oprez: Ovaj "novi" L nema jedinice na dijagonali!

Kad znamo da postoji, faktorizacija Choleskog se može i direktno izvesti (slično kao LR), znajući da je $A = R^* R$.

Algoritam

Ograničimo se na realni slučaj. Iz $A = R^T R$, za gornji trokut od A, slijedi

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

pa dobivamo sljedeću rekurziju za elemente:

za $j = 1, \ldots, n$:

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

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

Za $j = 1$ računamo samo $r_{11} = \sqrt{a_{11}}$.

Algoritam

Greške zaokruživanja $\Rightarrow$ 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;
  }
    /* Provjera prije korijena */
  ako je sum > 0.0 onda {
    R[j, j] = sqrt(sum);
  }
  inače
    /* Matrica nije pozitivno definitna, STOP */
}
```

Napomena. Za simetričnu matricu A, test `sum > 0.0` je ekvivalentan provjeri pozitivne definitnosti od A.

Komentar na algoritam

Ovo je tzv. *jik* varijanta algoritma, a naziv dolazi od poretka petlji (izvana, prema unutra), uz prirodno imenovanje indeksa.

- Ovdje se matrica R generira stupac po stupac,
- dok se, u LR faktorizaciji, matrica R generirala redak po redak, a L stupac po stupac.

To nije jedina varijanta za realizaciju algoritma (v. iza).

Za složenost algoritma = broj aritmetičkih operacija, izlazi

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

što je, približno, polovina složenosti LR faktorizacije. Razlog:

- računamo samo jednu trokutastu matricu, a ne dvije.

Algoritam — ijk varijanta

Zamjenom indeksa i, j dobivamo tzv. ijk varijantu algoritma:

za $i = 1, \ldots, n$:

$$r_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}^2 \right)^{1/2},$$

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

Tu se R računa redak po redak, a za $i = n$ računamo samo r_{nn}.

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

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

Rješenje linearnog sustava

Ove sustave lako rješavamo:

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

$$y_1 = \frac{b_1}{r_{11}},$$

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

- sustav $Rx = y$ — supstitucijom unatrag

$$x_n = \frac{y_n}{r_{nn}},$$

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

Alternativa za rješenje linearnog sustava

Za razliku od LR faktorizacije, ovdje

- u obje supstitucije imamo dijeljenja.

U praksi se često koristi LDL^T oblik faktorizacije Choleskog.
Prednosti te varijante su:

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

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

  Srednji sustav $Dy = z$ treba samo n dijeljenja.
- L ima jediničnu dijagonalu, pa štedimo n dijeljenja.

Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

I kod faktorizacije Choleskog možemo koristiti pivotiranje. Međutim, da bismo očuvali simetriju radne matrice,

- pivotiranje mora biti "simetrično", tj.
- radimo istovremene zamjene redaka i stupaca u A

$$A \mapsto P^T A P,$$

  gdje je P matrica permutacije,

- $\Rightarrow$ dijagonalni element zamjenjuje mjesto s dijagonalnim.

Matrica $P^T A P$ je opet hermitska/simetrična i, što je ključno,

- ostaje pozitivno definitna (dokažite to)!

Posljedica. Sve glavne podmatrice od A (a ne samo vodeće) imaju pozitivnu determinantu.

Dijagonalno pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Standardno se koristi tzv. dijagonalno pivotiranje:

- u k-tom koraku faktorizacije, izbor pivotnog elementa je

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

To odgovara potpunom pivotiranju u LR faktorizaciji ili GE. Naime, najveći elementi u $A^{(k)}$ su sigurno na dijagonali.

Dokaz. Gledamo bilo koju glavnu podmatricu A_2, reda 2, u A

$$A_2 = \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \bar{a}_{ij} & a_{jj} \end{bmatrix}.$$

Iz $\det(A_2) > 0$ slijedi $a_{ii}a_{jj} > |a_{ij}|^2$, pa je bar jedan od dijagonalnih elemenata veći od $|a_{ij}|$. Isto vrijedi za sve $A^{(k)}$. ■

Dijagonalno pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Ovim postupkom dobivamo faktorizaciju Choleskog

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

u kojoj za elemente matrice R vrijedi

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

Desna strana = elementi j-tog stupca, od k-tog do dijagonale.
Posebno, to znači da R ima nerastuću dijagonalu

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

Isto je u QR faktorizaciji s pivotiranjem stupaca (v. kasnije).

Nažalost, kod Hilbertove matrice, ni to ne pomaže!

Može li LDL^T za bilo koje simetrične matrice?

Pitanje. Može li se LDL^T faktorizacija napraviti za bilo koju simetričnu matricu A — općenito, indefinitnu,

- uz dozvolu da matrica D ima i negativne elemente?

To ne vrijedi! Kontraprimjer je tzv. elementarna indefinitna matrica

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

Pomaže li simetrična permutacija redaka i stupaca? Opet, ne!

Pravo poopćenje na indefinitne matrice dobivamo tako da

- dozvolimo dijagonalne blokove reda 2 u matrici D.

Faktorizacija: Bunch–Parlett ili Bunch–Kaufman–Parlett (razlike su u pivotiranju).

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 $\leq m$ (dimenzija tog prostora je $m+1$).

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, na $[0, 2\pi]$.

- 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 φ, na svakom podintervalu između susjednih točaka,

- svodi na polinom određenog fiksnog (niskog) stupnja, tj.

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

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 ovisnost 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 čvorovima 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 njezinoj 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

Kod interpolacije zadanih vrijednosti

- broj parametara interpolacijske funkcije mora biti jednak broju zadanih podataka, tj. mora biti $m = n$.

Prijevod: "broj stupnjeva slobode" = "broj uvjeta".

- Parametri $a_0, \ldots, a_n$ određuju se iz uvjeta interpolacije

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

  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 $\| \ \|$ funkcije 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 $\|e\|$ minimizira na diskretnom skupu podataka X (to znači da je X konačan ili prebrojiv);
- kontinuirane — ako se $\|e\|$ 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 njezino nalaženje zove se metoda najmanjih kvadrata.

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

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

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

- U diskretnom slučaju, za $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$, dobivamo

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

- a u kontinuiranom slučaju, za $X = [a, b]$, dobivamo

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

Preciznije, minimizira se samo ono pod korijenom, pa odatle naziv "najmanji kvadrati".

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, za $X = \{x_0, \ldots, x_n\}$, traži se

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

- a u kontinuiranom slučaju, za $X = [a, b]$,

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

Naziv "minimaks" dolazi od minimizacije maksimuma.

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 njezine derivacije. Primjer takve norme je

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

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.