Numerička matematika
4. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr
web.math.pmf.unizg.hr/~singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava (nastavak):
  - 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).

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Interpolacija polinomima:
  - Problem interpolacije polinomima.
  - Egzistencija i jedinstvenost.
  - Izbor baze — potencije i Vandermondeova determinanta.
  - Lagrangeova baza.
  - Računanje Lagrangeovog oblika IP.
  - Ocjena pogreške za dovoljno glatke funkcije.

Informacije

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Tamo su kompletna predavanja iz prošlih 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 dvije demonstratorice:

- Angela Bašić–Šiško
  - termin: ponedjeljak, 12–14.
  - e–mail: `abasic@student.math.hr`
- Mia Jukić
  - termin: srijeda, 14–16.
  - e–mail: `mia.jukic2@gmail.com`

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

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

Kad ne treba pivotirati u LR faktorizaciji?

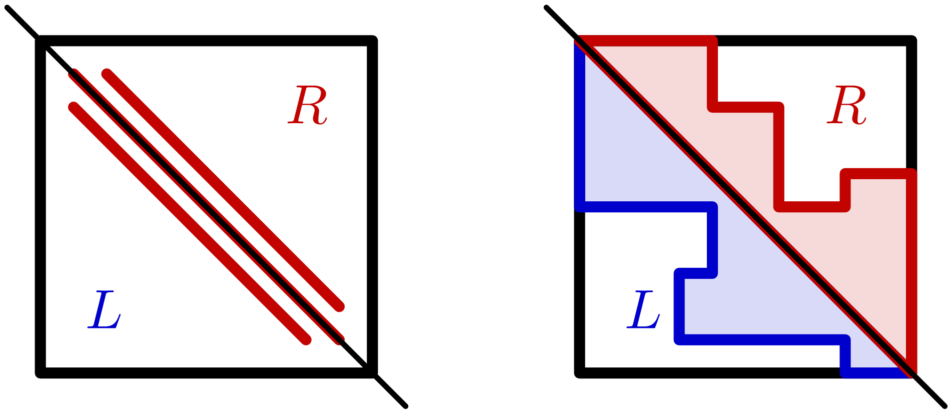
Struktura LR faktorizacije

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 kod kojih za svaki stupac $j = 1, \ldots, n$ 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)

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

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

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

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

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

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 u stupcu 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 bar jedan 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 $x^T Ax > 0$.

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 r_{ii} 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 od L i D, 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 više 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

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

pa dobivamo sljedeću rekurziju za elemente:

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

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

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

U prvom koraku, za $j = 1$, računamo samo $r_{11} = \sqrt{a_{11}}$.

Algoritam

Zbog grešaka zaokruživanja, pod korijenom možemo dobiti

- negativan izraz ili nulu $\Longrightarrow$ nužna provjera!

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;    /* ** <=> pow */
  }
    /* 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` ekvivalentan je provjeri pozitivne definitnosti od A.

Komentar na algoritam, složenost

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 (Fortran),
- 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 (račun "na ruke", C)

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 (istim brojevima).

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

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

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! Probajte!

Može li LDL^T za bilo koje simetrične matrice?

Pitanje. Može li se LDL^T faktorizacija napraviti za bilo koju simetričnu matricu $A = A^T$ — 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). Slično ide za $A = -A^T$ (Bunch).

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 istom 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. oblik 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 elementarnih 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 i o parametrima a_k, onda kažemo

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

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 zapišemo u bazi potencija $\{\, 1,\ x,\ \ldots\ ,\ x^m \,\}$. 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, traže se 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 $X = [a, b]$, traži se

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

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 jedan 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.

Interpolacija polinomima

Interpolacija polinomima

Neka je funkcija f zadana na

- diskretnom skupu međusobno različitih točaka (čvorova) x_k, za $k = 0, \ldots, n$, tj. vrijedi $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$.
- Poznate funkcijske vrijednosti u tim točkama skraćeno označavamo s $f_k = f(x_k)$.

Komentar. Kad bismo dozvolili da je $x_i = x_j$, za neke $i \neq j$,

- ili f nije funkcija (ako je $f_i \neq f_j$),
- ili imamo redundantan podatak (ako je $f_i = f_j$).

Ako je $[a, b]$ segment, u praksi su točke obično numerirane tako da je

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b,$$

ali to ovdje nije bitno.

Egzistencija i jedinstvenost

Pitanja.

- Uz koje uvjete postoji interpolacijski polinom?
- Je li jedinstven?

Odgovor daje sljedeći teorem.

Teorem. Neka je $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Za zadane točke (x_k, f_k), $k = 0, \ldots, n$, gdje je $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$, postoji jedinstveni interpolacijski polinom $\varphi \in \mathcal{P}_n$, stupnja najviše n,

$$\varphi(x) := p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

za kojeg vrijedi

$$p_n(x_k) = f_k, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Uočiti: čvorovi moraju biti različiti, a f_k mogu biti bilo kakvi!

Egzistencija i jedinstvenost

Dokaz. Neka je

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

polinom stupnja najviše n. Uvjete interpolacije napišimo u obliku linearnog sustava s nepoznanicama $a_0, \ldots, a_n$,

$$\begin{aligned}
p_n(x_0) &= a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = f_0 \\
p_n(x_1) &= a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = f_1 \\
&\cdots\cdots\cdots \\
p_n(x_n) &= a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = f_n.
\end{aligned}$$

Pokazat ćemo da je matrica ovog sustava regularna, pa sustav ima jedinstveno rješenje, ako i samo ako su čvorovi različiti.

Egzistencija i jedinstvenost

Provjeru regularnosti napravit ćemo računanjem vrijednosti determinante.

Pripadna determinanta je tzv. Vandermondeova determinanta

$$D_n = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \cdots & x_{n-1}^n \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix}.$$

Egzistencija i jedinstvenost

Definiramo determinantu koja "nalići" na D_n, samo umjesto čvora x_n, stavimo da je posljednji redak u $V_n(x)$ funkcija od x:

$$V_n(x) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \cdots & x_{n-1}^n \\ 1 & x & x^2 & \cdots & x^n \end{vmatrix}.$$

Primijetimo da je

$$D_n = V_n(x_n).$$

Promatrajmo $V_n(x)$ kao funkciju varijable x.

Egzistencija i jedinstvenost

Razvojem po posljednjem retku uočavamo da je

- $V_n(x)$ polinom stupnja najviše n u varijabli x,
- koeficijent tog polinoma uz x^n je determinanta D_{n-1} ("križanje" zadnjeg retka i stupca u $V_n(x)$).

Ako u determinantu $V_n(x)$, redom, uvrštavamo $x_0, \ldots, x_{n-1}$,

- determinanta $V_n(x_k)$, za $k = 0, \ldots, n-1$, ima dva jednaka retka,

pa je

$$V_n(x_0) = V_n(x_1) = \cdots = V_n(x_{n-1}) = 0,$$

tj. točke $x_0, \ldots, x_{n-1}$ su nultočke polinoma $V_n(x)$ stupnja n.

Egzistencija i jedinstvenost

Za polinom $V_n(x)$, stupnja n, znamo

- vodeći koeficijent — D_{n-1},
- sve nultočke — $x_0, \ldots, x_{n-1}$,

pa $V_n(x)$ možemo napisati kao produkt

$$V_n(x) = D_{n-1}\,(x - x_0)\,(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}).$$

Uvrštavanjem $x = x_n$, dobivamo rekurzivnu relaciju za D_n

$$D_n = D_{n-1}\,(x_n - x_0)\,(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1}).$$

Odmah vidimo da je $D_0 = 1$ (lijevi gornji kut!), pa indukcijom slijedi

$$D_n = \prod_{0 \le j < i \le n} (x_i - x_j).$$

Egzistencija i jedinstvenost

Budući da je $x_i \neq x_j$, za $i \neq j$, onda je

$$D_n \neq 0,$$

a vrijedi i obrat. Matrica linearnog sustava je regularna, pa

- postoji jedinstveno rješenje $a_0, \ldots, a_n$ za koeficijente polinoma p_n u standardnoj bazi potencija.

Iz jedinstvenosti prikaza u bazi slijedi da postoji jedinstveni interpolacijski polinom $p_n \in \mathcal{P}_n$ za zadane podatke. ∎

Napomena. Nadalje ćemo se baviti

- raznim formama interpolacijskog polinoma,
- koje će uvijek predstavljati isti interpolacijski polinom,

samo zapisan u raznim bazama.

Izbor baze i matrica sustava

Ako u prostoru polinoma $\mathcal{P}_n$ izaberemo neku bazu $\varphi_0, \ldots, \varphi_n$, onda interpolacijski polinom p_n možemo prikazati u obliku

$$p_n = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x).$$

Linearni sustav za nepoznate koeficijente $a_0, \ldots, a_n$ ima oblik

$$\begin{aligned} p_n(x_0) &= a_0\varphi_0(x_0) + a_1\varphi_1(x_0) + \cdots + a_n\varphi_n(x_0) = f_0 \\ p_n(x_1) &= a_0\varphi_0(x_1) + a_1\varphi_1(x_1) + \cdots + a_n\varphi_n(x_1) = f_1 \\ &\cdots\cdots\cdots \\ p_n(x_n) &= a_0\varphi_0(x_n) + a_1\varphi_1(x_n) + \cdots + a_n\varphi_n(x_n) = f_n. \end{aligned}$$

Pitanje. Može li se relativno jednostavno pronaći baza $\varphi_0, \ldots, \varphi_n$ za koju je matrica ovog sustava jedinična matrica?

Izbor baze za interpolaciju

Primjer

Primjer. Rješavanjem linearnog sustava za koeficijente, nađite interpolacijski polinom p_{40} stupnja 40 koji interpolira funkciju

$$f(x) = \sin x,$$

na ekvidistantnoj mreži čvorova $x_i = i\,\dfrac{\pi}{2}$, na intervalu $[0, 20\pi]$.

Vandermondeov linearni sustav je katastrofalno uvjetovan,

$$\kappa_2 \approx 5.027 \cdot 10^{82},$$

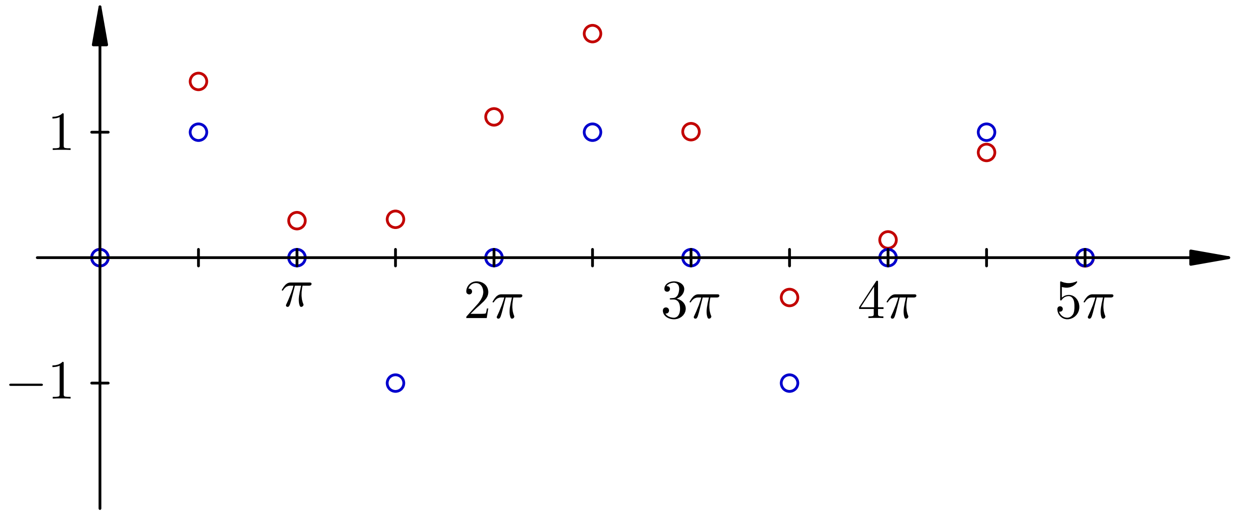
pa se očekuju velike greške u rješenju.

Kad izračunamo vrijednost u čvorovima interpolacije, greške su tolike da interpolacijski polinom ne interpolira zadane podatke — dakle, ni izračunati rezidual više nije malen.

Primjer (nastavak)

Legenda. Slika prikazuje samo dio podataka do 5π. Oznake:

- plavi kružići = zadane vrijednosti funkcije sin,
- crveni kružići = izračunate vrijednosti polinoma p_{40} u čvorovima interpolacije.



Zaključak. Treba naći brži način računanja (ovo traje $O(n^3)$), koji u čvorovima daje grešku 0.

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Pogledajmo uvjetovanost Vandermondeovih matrica za neke standardne izbore mreža čvorova, u ovisnosti o broju čvorova.

Oznaka: Za zadani $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ promatramo mrežu s $n+1$ čvorova

$$x_i^{(n)}, \quad i = 0, \ldots, n, \qquad x_0^{(n)} < \cdots < x_n^{(n)}.$$

Pripadnu Vandermondeovu matricu reda $n+1$ označavamo s

$$V^{(n+1)} = V^{(n+1)}\big(x_0^{(n)}, \cdots, x_n^{(n)}\big),$$

a njezini elementi su

$$\big(V^{(n+1)}\big)_{ij} = \Big(x_{i-1}^{(n)}\Big)^{j-1}, \quad i, j = 1, \ldots, n+1.$$

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 1. Ekvidistantna mreža s n podintervala na segmentu $[-1, 1]$,

$$x_i^{(n)} = -1 + \frac{2}{n} \cdot i, \quad i = 0, \ldots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$1.000 \cdot 10^0$	8	$1.605 \cdot 10^3$	25	$2.131 \cdot 10^{11}$	60	$2.253 \cdot 10^{28}$
2	$3.226 \cdot 10^0$	10	$1.395 \cdot 10^4$	30	$5.642 \cdot 10^{13}$	70	$1.722 \cdot 10^{33}$
3	$8.012 \cdot 10^0$	12	$1.234 \cdot 10^5$	35	$1.496 \cdot 10^{16}$	80	$1.329 \cdot 10^{38}$
4	$2.353 \cdot 10^1$	14	$1.105 \cdot 10^6$	40	$4.044 \cdot 10^{18}$	90	$1.033 \cdot 10^{43}$
5	$6.383 \cdot 10^1$	16	$9.983 \cdot 10^6$	45	$1.093 \cdot 10^{21}$	100	$8.083 \cdot 10^{47}$
6	$1.898 \cdot 10^2$	18	$9.085 \cdot 10^7$	50	$2.989 \cdot 10^{23}$		
7	$5.354 \cdot 10^2$	20	$8.314 \cdot 10^8$				

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 2. Ekvidistantna mreža s n podintervala na segmentu $[0, 1]$,

$$x_i^{(n)} = \frac{i}{n}, \quad i = 0, \ldots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$2.618 \cdot 10^0$
2	$1.510 \cdot 10^1$
3	$9.887 \cdot 10^1$
4	$6.864 \cdot 10^2$
5	$4.924 \cdot 10^3$
6	$3.606 \cdot 10^4$
7	$2.678 \cdot 10^5$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
8	$2.009 \cdot 10^6$
10	$1.156 \cdot 10^8$
12	$6.781 \cdot 10^9$
14	$4.032 \cdot 10^{11}$
16	$2.421 \cdot 10^{13}$
18	$1.465 \cdot 10^{15}$
20	$8.920 \cdot 10^{16}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
25	$2.628 \cdot 10^{21}$
30	$7.896 \cdot 10^{25}$
35	$2.404 \cdot 10^{30}$
40	$7.391 \cdot 10^{34}$
45	$2.289 \cdot 10^{39}$
50	$7.132 \cdot 10^{43}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
60	$7.018 \cdot 10^{52}$
70	$6.998 \cdot 10^{61}$
80	$7.048 \cdot 10^{70}$
90	$7.151 \cdot 10^{79}$
100	ne ide

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Primjer 3. Neekvidistantna "harmonijska" mreža s n podintervala na segmentu $[0, 1]$,

$$x_i^{(n)} = \frac{1}{n+1-i}, \quad i = 0, \dots, n.$$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$6.342 \cdot 10^{0}$
2	$5.965 \cdot 10^{1}$
3	$7.532 \cdot 10^{2}$
4	$1.217 \cdot 10^{4}$
5	$2.404 \cdot 10^{5}$
6	$5.620 \cdot 10^{6}$
7	$1.518 \cdot 10^{8}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
8	$4.650 \cdot 10^{9}$
10	$6.033 \cdot 10^{12}$
12	$1.129 \cdot 10^{16}$
14	$2.878 \cdot 10^{19}$
16	$9.586 \cdot 10^{22}$
18	$4.041 \cdot 10^{26}$
20	$2.102 \cdot 10^{30}$

n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
25	$9.112 \cdot 10^{39}$
30	$1.037 \cdot 10^{50}$
35	$2.649 \cdot 10^{60}$
40	$1.356 \cdot 10^{71}$
45	$1.277 \cdot 10^{82}$
50	$2.071 \cdot 10^{93}$

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

Za dani n, čvorovi "harmonijske" mreže su, redom,

$$x_0^{(n)} = \frac{1}{n+1}, \quad x_1^{(n)} = \frac{1}{n}, \quad \dots , \quad x_{n-1}^{(n)} = \frac{1}{2}, \quad x_n^{(n)} = \frac{1}{1},$$

pa zato i naziv "harmonijska". Prvi čvor teži prema 0, kad $n \to \infty$.

Može se pokazati da je

$$\kappa_2(V^{(n+1)}) > (n+1)^{n+1}.$$

"Dobre" Vandermondeove matrice

Primjer 4. Postoje i "dobre" mreže čvorova za interpolaciju, ali njih treba tražiti u $\mathbb{C}$, a ne u $\mathbb{R}$.

Najvažniji primjer u praksi su kompleksni korijeni iz jedinice (promjena indeksa $i \to k$, jer je i imaginarna jedinica),

$$x_k^{(n)} = e^{2\pi k i/(n+1)} = \cos\frac{2k\pi}{n+1} + i \cdot \sin\frac{2k\pi}{n+1}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Vandermondeova matrica je skalarni višekratnik unitarne matrice $U^{(n+1)}$

$$V^{(n+1)} = \sqrt{n+1} \cdot U^{(n+1)},$$

a za njezinu uvjetovanost vrijedi $\kappa_2(V^{(n+1)}) = 1$.

Ovo je podloga za tzv. brzu Fourierovu transformaciju (FFT), "najkorisniji" algoritam u povijesti!

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Da bismo našli koeficijente interpolacijskog polinoma, nije potrebno (ni dobro) rješavati linearni sustav za koeficijente.

Interpolacijski polinom p_n treba zapisati u nekoj drugoj bazi.

Po definiciji, Lagrangeova baza $\{\ell_k, k = 0, \ldots, n\}$ u prostoru polinoma $\mathcal{P}_n$ je ona baza za koju je

- matrica sustava za interpolaciju baš jedinična matrica, tj.
- za koeficijente interpolacijskog polinoma vrijedi $a_k = f_k$.

Dakle, Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma p_n je

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k \ell_k(x).$$

Koeficijenti su zadani podaci f_k, a problem je izračunati bazu!

Lagrangeova baza — kardinalna interpolacija

U Lagrangeovoj bazi, elementi matrice A sustava interpolacije su $A_{ik} = \ell_k(x_i)$, za $i, k = 0, \ldots, n$. Iz uvjeta $A = I$ dobivamo:

Polinomi ℓ_k Lagrangeove baze su rješenja posebnih problema interpolacije

$$\ell_k(x_i) = \delta_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{za } i \neq k, \\ 1, & \text{za } i = k, \end{cases}$$

u kojima su desne strane (zadane vrijednosti) upravo jedinični vektori e_{k+1} standardne baze u $\mathbb{R}^{n+1}$, za $k = 0, \ldots, n$.

Raniji teorem $\Longrightarrow$ postoje jedinstveni polinomi $\ell_k \in \mathcal{P}_n$ koji zadovoljavaju ove — tzv. kardinalne uvjete interpolacije.

- Iz njih odmah slijedi da je $\{\ell_k, k = 0, \ldots, n\}$ baza u $\mathcal{P}_n$ (katkad se zove i kardinalna baza). Dokažite to!

Lagrangeova baza — eksplicitni oblik polinoma

Kardinalni uvjeti interpolacije za polinom ℓ_k

$$\ell_k(x_i) = \begin{cases} 0, & \text{za } i \neq k, \\ 1, & \text{za } i = k, \end{cases}$$

zadaju sve nultočke i još jednu vrijednost za ℓ_k. Odavde slijedi

$$\begin{aligned} \ell_k(x) &= \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})\,(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})\,(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)} \\ &= \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} := \frac{\omega_k(x)}{\omega_k(x_k)}, \qquad k = 0, \ldots, n. \end{aligned}$$

Iz ovog oblika vidimo da je za računanje vrijednosti polinoma $p_n(x)$ u Lagrangeovoj formi potrebno $O(n^2)$ operacija.

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

To je ubrzanje obzirom na $O(n^3)$ iz sustava, ali može još brže.

Polinom
$$\omega(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)$$
zovemo polinom čvorova.

Polinome $\ell_k(x)$ Lagrangeove baze možemo napisati preko $\omega(x)$,
$$\ell_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\,\omega_k(x_k)}.$$

Nadalje, derivacijom ω kao produkta izlazi $\omega_k(x_k) = \omega'(x_k)$, pa je
$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{f_k}{(x - x_k)\,\omega'(x_k)}.$$

Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma

Forma

$$p_n(x) = \omega(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{f_k}{(x - x_k)\, \omega'(x_k)}$$

se može koristiti za računanje vrijednosti polinoma u točki $x \neq x_k$, za $k = 0, \ldots, n$ (za $x = x_k$ znamo da je $p_n(x_k) = f_k$). Broj operacija za svaku točku x je $O(n)$, tj. linearan u n.

Ipak, svrha Lagrangeovog oblika interpolacijskog polinoma

- nije računanje vrijednosti u točki, već se uglavnom koristi za teoretske svrhe (dokaze).

Ako znamo neke informacije o funkciji f, možemo napraviti i ocjenu greške interpolacijskog polinoma. Razumno u praksi:

- f je "malo više" netrivijalno glatka od polinoma p_n.

Greška interpolacijskog polinoma

Teorem. Pretpostavimo da

- funkcija f ima $(n+1)$-u derivaciju na segmentu $[a,b]$ za neki $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$;
- $x_k \in [a,b]$, $k = 0, \ldots, n$, su međusobno različiti čvorovi interpolacije, tj. $x_i \neq x_j$ za $i \neq j$;
- p_n je interpolacijski polinom za f u tim čvorovima.

Za bilo koju točku $x \in [a,b]$, postoji točka ξ

$$x_{\min} := \min\{x_0, \ldots, x_n, x\} < \xi < \max\{x_0, \ldots, x_n, x\} =: x_{\max}$$

takva da za grešku interpolacijskog polinoma vrijedi

$$e(x) := f(x) - p_n(x) = \frac{\omega(x)}{(n+1)!} \, f^{(n+1)}(\xi).$$

Greška interpolacijskog polinoma

Dokaz. 1. slučaj — ako je $x = x_k$, tj. x je čvor interpolacije.

Tada je $e(x_k) = \omega(x_k) = 0$, pa su obje strane posljednje relacije jednake 0, a ξ je proizvoljan. Dakle, tvrdnja vrijedi!

2. slučaj — pretpostavimo da x nije čvor interpolacije.

Tada je $\omega(x) \neq 0$ i grešku interpolacije prikazujemo u obliku

$$e(x) = f(x) - p_n(x) = \omega(x)s(x),$$

s time da je $s(x)$ korektno definiran (broj), čim x nije čvor.

Fiksirajmo x, a zatim definiramo funkciju $g = g_x$ u varijabli t

$$g(t) = e(t) - \omega(t)s(x) = e(t) - \omega(t)\,\frac{e(x)}{\omega(x)}, \quad t \in [a, b].$$

Greška interpolacijskog polinoma

Gledamo derivabilnost od g po t, s tim da su p_n i ω polinomi.
Zaključci:

- funkcija pogreške e ima točno onoliko derivacija (po t) koliko i f, i one su neprekidne kad su to i derivacije od f;
- x nije čvor, pa je $g^{(n+1)}$ korektno definirana na $[a, b]$.

Nađimo koliko nultočaka ima funkcija g. Ako za t uvrstimo čvor x_k, dobivamo

$$g(x_k) = e(x_k) - \omega(x_k) \frac{e(x)}{\omega(x)} = 0, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Jednako tako je i

$$g(x) = e(x) - e(x) = 0.$$

Drugim riječima, g ima barem $n + 2$ nultočke na $[x_{\min}, x_{\max}]$.

Greška interpolacijskog polinoma

Sad iskoristimo da $g^{(n+1)}$ postoji na $[x_{\min}, x_{\max}] \subseteq [a, b]$.

Zbog $n \geq 0$, funkcija g je derivabilna na $[x_{\min}, x_{\max}]$, pa

- Rolleov teorem $\Longrightarrow$ g' ima barem $n+1$ nultočku unutar $(x_{\min}, x_{\max})$.

Induktivnom primjenom Rolleovog teorema zaključujemo da

- $g^{(j)}$ ima barem $n+2-j$ nultočaka na $(x_{\min}, x_{\max})$, za $j = 0, \ldots, n+1$;
- Na kraju, za $j = n+1$ dobivamo da $g^{(n+1)}$ ima bar jednu nultočku $\xi \in (x_{\min}, x_{\max})$.

Ova nultočka ξ, naravno, ovisi o x, isto kao i funkcija g.

Za kraj dokaza, treba izračunati $g^{(n+1)}$ i uvrstiti nultočku ξ.

Greška interpolacijskog polinoma

Znamo da su p_n i ω polinomi odgovarajućih stupnjeva:

- p_n je polinom stupnja najviše n, pa je $p_n^{(n+1)} = 0$,
- ω je polinom stupnja točno $n+1$.

Onda je

$$e^{(n+1)}(t) = f^{(n+1)}(t), \quad \omega^{(n+1)}(t) = (n+1)!\,.$$

Uvrštavanjem ovih relacija u izraz za $g^{(n+1)}(t)$, dobivamo

$$\begin{aligned} g^{(n+1)}(t) &= e^{(n+1)}(t) - \omega^{(n+1)}(t)\,\frac{e(x)}{\omega(x)} \\ &= f^{(n+1)}(t) - (n+1)!\,\frac{e(x)}{\omega(x)}. \end{aligned}$$

Greška interpolacijskog polinoma

Kad uvažimo da je $g^{(n+1)}(\xi) = 0$, onda je

$$0 = g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!\,\frac{e(x)}{\omega(x)},$$

odnosno,

$$e(x) = \frac{\omega(x)}{(n+1)!}\,f^{(n+1)}(\xi).$$

■

Uočite sljedeće bitne stvari u tvrdnji i dokazu:

- Dovoljno je samo da $f^{(n+1)}(x)$ postoji, za svaki $x \in [a,b]$, bez daljnjih zahtjeva (ograničenost, neprekidnost, i sl.).
- Faktor $\omega(x)$ osigurava poništavanje greške u čvorovima. Lijepi oblik $\Rightarrow$ treba $n+1$-a derivacija. Zato nam treba prijelaz na t i "trik" s x, kao dodatnom nultočkom za g.

Za drugačije glatkoće od f postoje tzv. Jacksonovi teoremi.

Ocjena greške interpolacijskog polinoma

Pojačanje tvrdnje.

- Ako je $f^{(n+1)}$ ograničena na $[a, b]$, ili, jače,
- ako je $f \in C^{n+1}[a, b]$, tj. f ima neprekidnu $(n + 1)$-u derivaciju na $[a, b]$,

onda vrijedi sljedeća “globalna” ocjena greške interpolacijskog polinoma p_n za funkciju f, u bilo kojoj točki $x \in [a, b]$

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{|\omega(x)|}{(n+1)!} M_{n+1}, \qquad M_{n+1} := \max_{x \in [a,b]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Ova ocjena slijedi direktno iz prošlog teorema, a korisna je ako relativno jednostavno možemo

- izračunati ili odozgo ocijeniti vrijednost M_{n+1}.