

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):
 - Obratna analiza grešaka i pivotiranje.
 - Pivotni rast kao mjera nestabilnosti.
 - Hilbertove matrice.
 - 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.

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Aproksimacija i interpolacija:
 - Uvod u problem aproksimacije (norme, linearnost).
- Interpolacija polinomima:
 - Problem interpolacije polinomima.
 - Egzistencija i jedinstvenost.
 - Izbor baze — potencije i Vandermondeova determinanta.

Informacije — predavanja

Trenutno nema **konkretnih** informacija.

- Pratite web stranice fakulteta!
- Za “**nastavu na daljinu**” pratite web stranice kolegija.

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 \hat{L} i \hat{R} onda zadovoljavaju

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

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

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

Onda postoji perturbacija ΔA matrice A , za koju vrijedi

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

Za zaključak o relativnoj grešci, fali nam još

- neka veza između matrica $|\hat{L}| |\hat{R}|$ 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 (za $A = LR$).

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 \hat{L} i \hat{R} zadovoljavaju da je

$$|\hat{L}| |\hat{R}| = |\hat{L}\hat{R}|.$$

To je **idealni** slučaj — i, naravno, **ne vrijedi** uvijek.

Ako to **vrijedi**, onda iz **prvog** teorema izlazi

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

pa, prebacivanjem članova dobivamo

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

Relativne ocjene — idealni slučaj (nastavak)

Ako tu relaciju uvrstimo u drugi teorem, onda izlazi

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

tj. **izračunato** rješenje \hat{x} ima

- malu obratnu **relativnu** grešku po **komponentama**.

Za koje matrice **vrijedi** “idealno” $|\hat{L}| |\hat{R}| = |\hat{L}\hat{R}|$?

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 $|\hat{L}| |\hat{R}|$, relativno obzirom na odgovarajuće elemente matrice A (toliko kraćenje može nastati računanjem $\hat{L}\hat{R} \approx A$).

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

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

Analiza i procjena stabilnosti algoritma

Za lakšu (ali grublju) analizu, ne gleda se po **svim** elementima, već se analizira omjer **normi**

$$\frac{\| |\hat{L}| |\hat{R}| \|}{\|A\|}.$$

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

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

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 .

Pivotni rast

Parcijalno vs. potpuno pivotiranje

Možemo li, i na temelju čega, reći da je **potpuno** pivotiranje “**bolje**” od **parcijalnog**?

• Tradicionalno, to se čini na temelju tzv. **pivotnog rasta**.

Pivotni rast ili “**faktor rasta**”, u oznaci ρ_n , je **omjer**

• **najvećeg** (po apsolutnoj vrijednosti) elementa u **svim** koracima eliminacije — **ovisi** o pivotiranju,

• i (apsolutno) **najvećeg** elementa u **originalnoj** matrici A ,

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

Intuitivno je jasno da **nije dobro** da elementi **jako narastu** po apsolutnoj vrijednosti, jer to može dovesti do **gubitka točnosti**.

To je analogno “**uništavanju**” polaznih jednadžbi!

Pivotni rast — parcijalno pivotiranje

Koliki je pivotni rast ρ_n^p kod parcijalnog pivotiranja?

Transformacije elemenata u k -tom koraku eliminacija su

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

Kod parcijalnog pivotiranja, za multiplikatore m_{ik} vrijedi

$$|m_{ik}| \leq 1,$$

pa je

$$|a_{ij}^{(k+1)}| \leq |a_{ij}^{(k)}| + 1 \cdot |a_{kj}^{(k)}| \leq 2 \max_{i,j} |a_{ij}^{(k)}|.$$

Dakle, nakon jednog koraka, faktor rasta je najviše jednak 2.

Nakon $n - 1$ koraka algoritma, ova ocjena daje pivotni rast ρ_n^p

$$\rho_n^p \leq 2^{n-1}.$$

Pivotni rast — parcijalno pivotiranje (nastavak)

Već je J. H. Wilkinson primijetio da se taj pivotni rast može dostići za sve matrice oblika

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & 1 \\ -1 & 1 & & & 1 \\ -1 & -1 & \ddots & & 1 \\ -1 & -1 & \ddots & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Eksponencijalno rastu elementi zadnjeg stupca (s faktorom 2).

Ovo je samo “umjetno” konstruirani primjer, a u praksi je takvih matrica izrazito malo, pa se parcijalno pivotiranje ponaša mnogo bolje od očekivanog. Obično je $\rho_n^p(A) \ll 2^{n-1}$.

Pivotni rast — potpuno pivotiranje

Za pivotni rast ρ_n^c kod **potpunog** pivotiranja, J. H. Wilkinson je 1961. godine dokazao da vrijedi sljedeća **ocjena odozgo**

$$\rho_n^c \leq n^{1/2} \left(2 \cdot 3^{1/2} \dots n^{1/(n-1)} \right)^{1/2} \approx c n^{1/2} n^{(\ln n)/4}$$

i da se ta ocjena **ne može** dostići.

Dugo se mislilo da vrijedi

$$\rho_n^c \leq n.$$

Međutim, **nađeni** su kontraprimjeri matrica kad to **ne vrijedi**.

- 1991. g. — matrica reda **13** za koju je $\rho_{13}^c = 13.0205$,
- 1992. g. — matrica reda **25** za koju je $\rho_{25}^c = 32.986341$.

Točno ponašanje ρ_n^c je **otvoren** problem!

Ocjena stabilnosti preko faktora rasta

Tradicionalno, **obratna** analiza greške izražava se, također, 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

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

što daje ogradu za R , **relativno** obzirom na A . Naravno, faktor rasta ρ_n ovisi o **algoritmu** kojim računamo matricu R .

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 \hat{x} izračunato rješenje sustava $Ax = b$

- Gaussovima eliminacijama s parcijalnim pivotiranjem u aritmetici računala.

Tada vrijedi

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

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!

Hilbertove matrice

Hilbertova matrica

Primjer. Kod aproksimacije polinomima (v. kasnije) 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

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

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

Što možemo očekivati kod **računanja** 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	$\kappa_2(H_n)$	n	$\kappa_2(H_n)$	n	$\kappa_2(H_n)$
2	$1.928 \cdot 10^1$	9	$4.932 \cdot 10^{11}$	15	$6.117 \cdot 10^{20}$
3	$5.241 \cdot 10^2$	10	$1.603 \cdot 10^{13}$	16	$2.022 \cdot 10^{22}$
4	$1.551 \cdot 10^4$	11	$5.231 \cdot 10^{14}$	17	$6.697 \cdot 10^{23}$
5	$4.766 \cdot 10^5$	12	$1.713 \cdot 10^{16}$	18	$2.221 \cdot 10^{25}$
6	$1.495 \cdot 10^7$	13	$5.628 \cdot 10^{17}$	19	$7.376 \cdot 10^{26}$
7	$4.754 \cdot 10^8$	14	$1.853 \cdot 10^{19}$	20	$2.452 \cdot 10^{28}$
8	$1.526 \cdot 10^{10}$				

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 2, 5$

Za sustav $H_n x = b$ s Hilbertovom matricom, za razne n ,

• GE s parcijalnim pivotiranjem, u extended točnosti, dobivamo ove rezultate (umjesto svih jedinica u rješenju):

Red $n = 2$

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

Red $n = 5$

$$x(1) = 1.0000000000000000 \quad x(4) = 0.99999999999999990$$

$$x(2) = 0.9999999999999999 \quad x(5) = 1.00000000000000005$$

$$x(3) = 1.00000000000000007$$

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 10$

$$x(1) = 1.00000000000003436$$

$$x(6) = 0.9999999294831902$$

$$x(2) = 0.9999999999710395$$

$$x(7) = 1.0000001151701616$$

$$x(3) = 1.0000000006068386$$

$$x(8) = 0.9999998890931838$$

$$x(4) = 0.9999999945453735$$

$$x(9) = 1.0000000580638087$$

$$x(5) = 1.0000000258066880$$

$$x(10) = 0.9999999872591526$$

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 15$

$$x(1) = 1.00000000005406387$$

$$x(9) = 1.0952919444304200$$

$$x(2) = 0.99999999069805858$$

$$x(10) = 0.8797820363884070$$

$$x(3) = 1.0000039790948573$$

$$x(11) = 1.0994671444236333$$

$$x(4) = 0.9999257525660447$$

$$x(12) = 0.9508102511158300$$

$$x(5) = 1.0007543452271621$$

$$x(13) = 1.0106027108940050$$

$$x(6) = 0.9953234190795597$$

$$x(14) = 1.0012346841153261$$

$$x(7) = 1.0188643674562383$$

$$x(15) = 0.9992252029377023$$

$$x(8) = 0.9487142544341838$$

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

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

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

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

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

Pogledajte

<http://mathworld.wolfram.com/HilbertMatrix.html>

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} .

Vektor

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

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

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

Međutim, ako je (egzaktni) rezidual $r = r(\hat{x})$

- ☛ **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 b , takvom da je $x = [1, 1, \dots, 1]^T$.

Kad računamo u **extended** točnosti,

• **izračunati** rezidual $\hat{r} = b - A\hat{x}$ je **nul-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

Rezidual se može iskoristiti za **poboljšanje** netočnog rješenja \hat{x} 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 tzv. **korekcija**.
- **Korekcija** se **doda** izračunatom rješenju

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

što bi **trebalo** dati **bolje** rješenje y . Za **egzaktne** r i d , dobili bismo $r(y) = b - Ay = b - A\hat{x} - Ad = r - r = 0$.

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 — istoj kao za \hat{x} .

Baš to je **ideja** — samo n^2 operacija je u **većoj** točnosti.

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?**

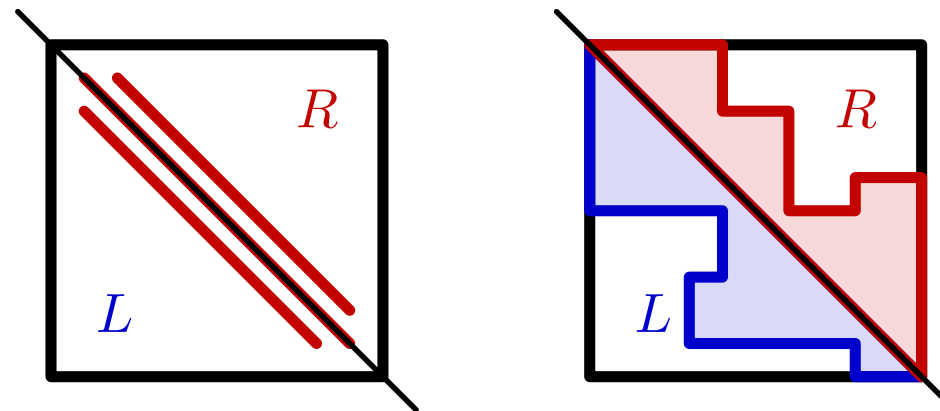
Struktura LR faktorizacije

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

- **garantirano stabilnost** algoritma Gaussovih eliminacija, odnosno, **LR** faktorizacije.

Postoje razni **tipovi** matrica kod kojih **ne moramo** pivotirati.

Na primjer, to su:

- strogo **dijagonalno dominantne** matrice po **stupcima**, tj. matrice kod kojih za **svaki** stupac vrijedi

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

- **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 $j = 2, \dots, n$, 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)

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

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

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

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

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

Ako vrijedi **stroga** nejednakost ($>$), za **sve** $j = 1, \dots, n$, 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, u LR faktorizaciji bez pivotiranja vrijedi $|\ell_{ij}| \leq 1$, za sve i, j .

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 vrijedi

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

Spektar od A je realan! Ako je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, onda je hermitska matrica isto što i simetrična, tj. $*$ = T (nema konjugiranja).

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

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

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 realne i **pozitivne**, tj. vrijedi

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

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

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

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 $k = 1, \dots, n$. 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 $x^T A x > 0$.

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

LR faktorizacija za sim. poz. def. matrice

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)

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

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

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 s lijeva (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 (M^* 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

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

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

$$A = R^*R. \quad \blacksquare$$

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

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

pa dobivamo sljedeću **rekurziju** za elemente:

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

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

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

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** \implies 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 $\text{sum} > 0.0$ 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 $i = 1, \dots, n$:

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

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

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

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

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

🔴 sustav $Rx = y$ — supstitucijom unatrag

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

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

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 **višestruke**:

- U algoritmu LDL^T faktorizacije **nema 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**.
- U preostala dva sustava, L ima **jediničnu** dijagonalu (**nema dijeljenja**), pa ukupno **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. U $A = A^{(1)}$, gledamo **bilo koju** glavnu podmatricu A_2 , reda 2,

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

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

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

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

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

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 prekomplikirana 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 jednačbi.

Praktični primjer:

- programska biblioteka za računanje raznih elementarnih funkcija (`exp`, `sin`, `cos`, `sqrt`, ...), poput `<math.h>`.

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

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 ima opravdanje u matematičkoj statistici.

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 , $k = 0, \dots, m$,
- 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

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

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

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

gdje su $\varphi_0, \dots, \varphi_m$ **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** jednažbi, ili
- linearne** probleme **optimizacije**.

Linearne aproksimacijske funkcije (nastavak)

Standardni model za linearni oblik aproksimacije:

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

Unaprijed se bira (fiksira):

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

Napomena. Kod približnog numeričkog računanja,

- “dobar” izbor baze je ključan za stabilnost postupka
- i točnost izračunatih vrijednosti parametara a_0, \dots, a_m 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 $k = 0, \dots, m$, tj.

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_mx^m.$$

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

- Na primjer, $\{1, (x - x_0), (x - x_0)(x - x_1), \dots\}$, gdje su x_0, x_1, \dots 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

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


Koriste se za aproksimaciju **periodičkih** funkcija na intervalu **perioda** — ovdje je period $P = 2\pi$, a interval je, na pr., $[0, 2\pi]$.

● **Primjena** je, recimo, 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** ($P \mapsto P/\lambda$).
- 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 $x_0 < \dots < x_n$, onda se **splajn** funkcija φ , na svakom **podintervalu** između susjednih točaka,  svodi na **polinom** određenog fiksnog (**niskog**) stupnja, tj.

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

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 u praksi, zbog dobrih **ocjena greške** aproksimacije i **kontrole oblika** aproksimacijske funkcije.

Nelinearne aproksimacijske funkcije

Nelinearne aproksimacijske funkcije φ

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

imaju nelinearnu ovisnost o parametrima a_0, \dots, a_m . Dovoljna je nelinearnost u nekom/jednom od njih.

Pripadni skup “dozvoljenih” funkcija \mathcal{F} najčešće

● nije vektorski prostor.

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

● sustave nelinearnih jednažbi, ili

● nelinearne probleme optimizacije.

Primjer 4 — “opće” eksponencijalne funkcije

Par primjera oblika nelinearnih aproksimacijskih funkcija, koji se često koriste u praksi.

Opće eksponencijalne funkcije. To su linearne kombinacije običnih eksponencijalnih funkcija s različitim parametrima u eksponentu

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

Nelinearno ovise o parametrima b_0, \dots, b_r . Broj nezavisnih parametara (tzv. “stupnjeva slobode”) je $m + 1 = 2r + 2$.

Ovakve “opće” eksponencijalne funkcije opisuju

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

Primjer 5 — racionalne funkcije

Racionalne funkcije. Imaju opći oblik

$$\varphi(x) = \frac{b_0 + b_1x + \cdots + b_r x^r}{c_0 + c_1x + \cdots + c_s x^s}.$$

Broj nezavisnih parametara $(m + 1)$ je samo $r + s + 1$, 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.

Racionalne funkcije imaju mnogo bolja svojstva aproksimacije od polinoma stupnja m , 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 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 su (x_k, f_k) , gdje je $f_k := f(x_k)$, za $k = 0, \dots, n$.

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, \dots, a_n određuju se iz uvjeta interpolacije

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

što je, općenito, **nelinearni** sustav jednačbi.

- **Linearnost** funkcije φ povlači da parametre a_k dobivamo iz sustava **linearnih** jednačbi,
 - koji ima **točno** $n + 1$ jednačbi 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 $\| \cdot \|$ funkcije pogreške

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

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

Ove aproksimacije često se zovu i najbolje aproksimacije po normi. Dijelev 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 (obično je X interval oblika $[a, b]$).

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Standardno se kao **norme pogreške** koriste

- 2-norma i
- ∞ -norma.

Ponekad se koristi i 1-norma.

Za 2-normu,

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

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

$$\|e(x)\|_2 \rightarrow \min, \quad \text{za } \varphi \in \mathcal{F}.$$

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

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

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

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

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

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

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

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

$$\|e(x)\|_{\infty} \rightarrow \min, \quad \text{za } \varphi \in \mathcal{F}.$$

• U **diskretnom** slučaju, za $X = \{x_0, \dots, x_n\}$, traži se

$$\max_{k=0, \dots, n} |f(x_k) - \varphi(x_k)| \rightarrow \min.$$

• U **kontinuiranom** slučaju, za $X = [a, b]$, traži se

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

Naziv “**minimaks**” dolazi od **minimizacije maksimuma**.

Kriteriji aproksimacije — minimizacija pogreške

Minimaks tip aproksimacija je **poželjniji** od **srednjekvadratnih**,

- jer se traži da **maksimalna greška** bude **minimalna**,
- ali ih je, općenito, **mного 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

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

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 $\|e\|$ i ponašanje funkcije greške e na cijeloj domeni X .
(Norma greške $\|e\|$ je samo jedan broj, a ne funkcija.)
- Konstrukcija algoritama za računanje najbolje aproksimacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — diskretno

U diskretnom linearnom slučaju,

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

možemo smatrati specijalnim, ali posebno važnim slučajem

- najbolje aproksimacije po normi na skupu X ,
- uz neku standardnu normu na konačnodimenzionalnim vektorskim prostorima (ovisi o tome odakle biraemo φ).

Posebnost: Uz minimizaciju norme pogreške $\|e\| \rightarrow \min$, dodatno tražimo da je

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

To je onda ekvivalentno odgovarajućim uvjetima interpolacije.

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

Primjer. Neka je $X = \{x_0, \dots, x_n\}$ i tražimo aproksimacijsku funkciju φ u vektorskom prostoru

• \mathcal{P}_n — svih polinoma stupnja najviše n (tj. $m = n$).

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

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

Za $p = \infty$, tražimo

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

Veza aproksimacije i interpolacije — primjer

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

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

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 potvrđan za ovaj primjer. Razlog: Prostor \mathcal{P}_n , u kojem tražimo aproksimaciju,

- ima dovoljno veliku dimenziju za egzistenciju ($m \geq n$), a
- $m = n$ garantira jedinstvenost interpolacijske funkcije φ .

Interpolacija polinomima

Interpolacija polinomima

Neka je funkcija f zadana na

- diskretnom skupu međusobno različitih točaka (čvorova) x_k , za $k = 0, \dots, n$, 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

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

ali to ovdje nije bitno.

Egzistencija i jedinstvenost

Pitanja:

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

Odgovor daje sljedeći teorem.

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

$$\varphi(x) := p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

za kojeg vrijedi

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

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

Egzistencija i jedinstvenost

Dokaz. Neka je $p_n \in \mathcal{P}_n$ polinom stupnja **najviše** n , zapisan u bazi **potencija**,

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n.$$

Uvjete interpolacije napišemo u obliku **linearnog sustava** s nepoznanicama a_0, \dots, a_n ,

$$p_n(x_0) = a_0 + a_1x_0 + \cdots + a_nx_0^n = f_0$$

$$p_n(x_1) = a_0 + a_1x_1 + \cdots + a_nx_1^n = f_1$$

.....

$$p_n(x_n) = a_0 + a_1x_n + \cdots + a_nx_n^n = f_n.$$

Pokažimo da je matrica ovog sustava **regularna**, ako i samo ako su čvorovi **različiti**, a onda sustav **ima jedinstveno rješenje**.

Egzistencija i jedinstvenost

Provjeru **regularnosti** matrice 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 “naliči” na D_n , samo umjesto čvora x_n , stavimo da je **posljednji redak** u $V_n(x)$ funkcija od x :

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

Primijetimo da je

$$D_n = V_n(x_n).$$

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

Egzistencija i jedinstvenost

Razvojem po posljednjem retku $V_n(x)$, uočavamo da je

- $V_n(x)$ = polinom stupnja najviše n u varijabli x ,
- a 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, \dots, x_{n-1} ,

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

pa je

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

tj. točke x_0, \dots, 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, \dots, 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

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

Egzistencija i jedinstvenost

Budući da je (po pretpostavci) $x_i \neq x_j$, 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, \dots, a_n za koeficijente polinoma p_n u standardnoj bazi potencija.

Iz jedinstvenosti prikaza u bazi slijedi da **postoji jedinstveni** interpolacijski polinom $\varphi = p_n \in \mathcal{P}_n$ 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 $\varphi_0, \dots, \varphi_n$, onda interpolacijski polinom p_n možemo prikazati u obliku

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

Linearni sustav za nepoznate koeficijente a_0, \dots, a_n ima oblik

$$p_n(x_0) = a_0\varphi_0(x_0) + a_1\varphi_1(x_0) + \dots + a_n\varphi_n(x_0) = f_0$$

$$p_n(x_1) = a_0\varphi_0(x_1) + a_1\varphi_1(x_1) + \dots + a_n\varphi_n(x_1) = f_1$$

.....

$$p_n(x_n) = a_0\varphi_0(x_n) + a_1\varphi_1(x_n) + \dots + a_n\varphi_n(x_n) = f_n.$$

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

Izbor baze za interpolaciju

Primjer

Primjer. Nađite interpolacijski polinom p_{40} , stupnja 40, zapisan u standardnoj bazi **potencija**, koji interpolira funkciju

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

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

Vandermondeov linearni sustav je **katastrofalno uvjetovan**,

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

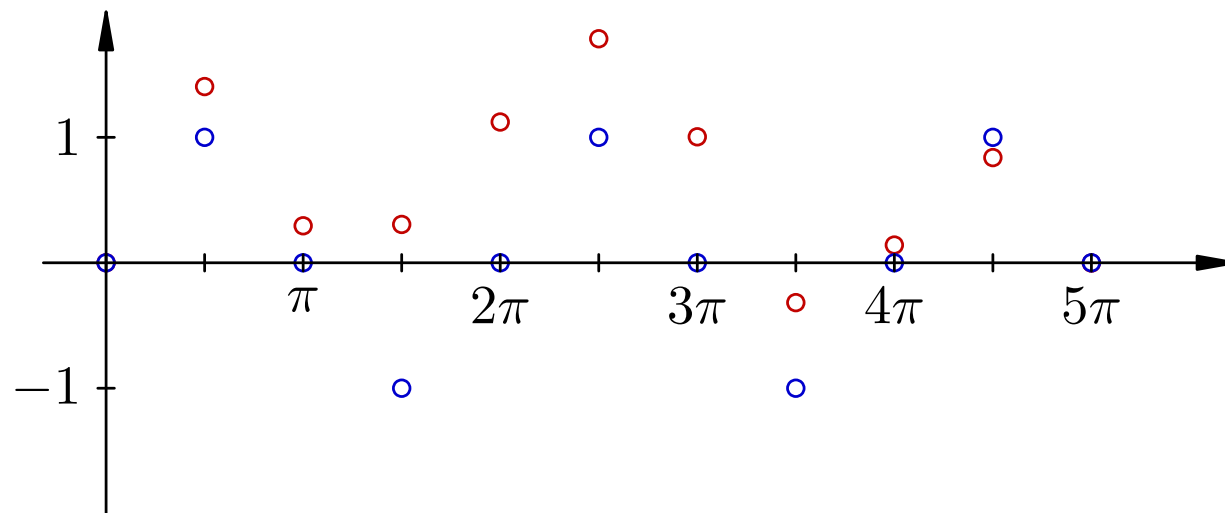
pa se očekuju **velike greške** u rješenju.

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**

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

Pripadnu **Vandermondeovu matricu** reda $n + 1$ označavamo s

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

a njezini elementi su

$$(V^{(n+1)})_{ij} = \left(x_{i-1}^{(n)}\right)^{j-1}, \quad i, j = 1, \dots, n + 1.$$

Uvjetovanost Vandermondeovih matrica

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

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

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 $[0, 1]$,

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

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	$2.618 \cdot 10^0$	8	$2.009 \cdot 10^6$	25	$2.628 \cdot 10^{21}$	60	$7.018 \cdot 10^{52}$
2	$1.510 \cdot 10^1$	10	$1.156 \cdot 10^8$	30	$7.896 \cdot 10^{25}$	70	$6.998 \cdot 10^{61}$
3	$9.887 \cdot 10^1$	12	$6.781 \cdot 10^9$	35	$2.404 \cdot 10^{30}$	80	$7.048 \cdot 10^{70}$
4	$6.864 \cdot 10^2$	14	$4.032 \cdot 10^{11}$	40	$7.391 \cdot 10^{34}$	90	$7.151 \cdot 10^{79}$
5	$4.924 \cdot 10^3$	16	$2.421 \cdot 10^{13}$	45	$2.289 \cdot 10^{39}$	100	ne ide
6	$3.606 \cdot 10^4$	18	$1.465 \cdot 10^{15}$	50	$7.132 \cdot 10^{43}$		
7	$2.678 \cdot 10^5$	20	$8.920 \cdot 10^{16}$				

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	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$	n	$\kappa_2(V^{(n+1)})$
1	$6.342 \cdot 10^0$	8	$4.650 \cdot 10^9$	25	$9.112 \cdot 10^{39}$
2	$5.965 \cdot 10^1$	10	$6.033 \cdot 10^{12}$	30	$1.037 \cdot 10^{50}$
3	$7.532 \cdot 10^2$	12	$1.129 \cdot 10^{16}$	35	$2.649 \cdot 10^{60}$
4	$1.217 \cdot 10^4$	14	$2.878 \cdot 10^{19}$	40	$1.356 \cdot 10^{71}$
5	$2.404 \cdot 10^5$	16	$9.586 \cdot 10^{22}$	45	$1.277 \cdot 10^{82}$
6	$5.620 \cdot 10^6$	18	$4.041 \cdot 10^{26}$	50	$2.071 \cdot 10^{93}$
7	$1.518 \cdot 10^8$	20	$2.102 \cdot 10^{30}$		

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 $n \rightarrow \infty$.

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 $i \rightarrow k$, jer je i imaginarna jedinica),

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

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!