Numerička analiza

16. predavanje

Autor: Saša Singer & Tina Bosner
Predavač: Tina Bosner

tinab@math.hr
web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
  - Diskretni problem najmanjih kvadrata.
  - Normalne jednadžbe.
  - Linearizacija.
  - Neprekidni problem najmanjih kvadrata.
  - Splajn aproksimacija pomoću metode najmanjih kvadrata.
  - Ortogonalne funkcije.
  - Primjeri ortogonalnih familija funkcija.
  - Svojstva ortogonalnih polinoma.

Diskretni problem najmanjih kvadrata

Minimizacija vektora pogreške

Neka je funkcija f

- zadana na diskretnom skupu točaka $x_0, \ldots, x_n$.

Točaka $x_0, \ldots, x_n$ ima mnogo više nego nepoznatih parametara $a_0, \ldots, a_m$ aproksimacijske funkcije φ, tj. $n \gg m$.

Aproksimacijska funkcija

$$\varphi(x, a_0, \ldots, a_m)$$

određuje se iz uvjeta da je 2-norma vektora pogrešaka u čvorovima aproksimacije najmanja moguća, tj. minimizira se

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

Sustav normalnih jednadžbi

Uočimo da je

- uvijek $S \geq 0$, bez obzira kakvi su parametri, jer se radi o zbroju kvadrata.
- Funkcija S minimizira se kao funkcija više varijabli $a_0, \ldots, a_m$.
- S je dovoljno glatka funkcija, jer je funkcija u parametrima a_k, pa je nužni uvjet ekstrema

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, \ldots, m.$$

Takav pristup vodi na tzv. sustav normalnih jednadžbi.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje treba po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati pravcem

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x.$$

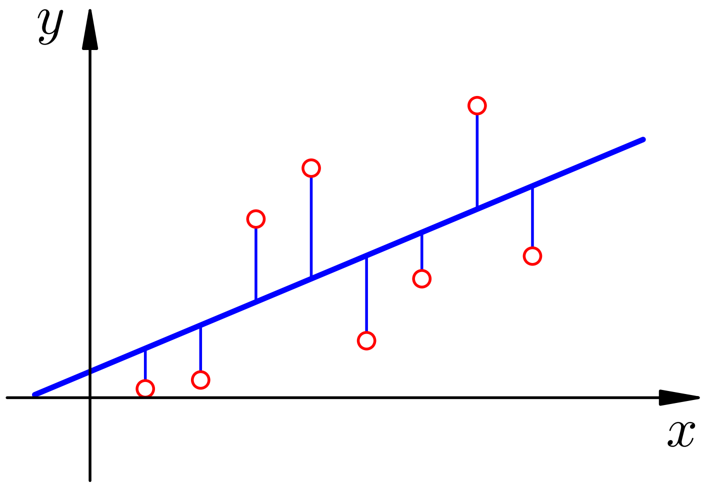
Greška aproksimacije (u čvorovima), koju minimiziramo je

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2$$

$$= \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika zadanih točaka u ravnini i pravca koji ih aproksimira.



Uočiti da se greška u svakoj točki "mjeri" u smjeru osi y

$$S = S(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Parcijalne derivacije po parametrima a_0 i a_1 su:

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k),$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 - a_1 x_k) x_k.$$

Dijeljenjem s -2 i sređivanjem po nepoznanicama a_0, a_1, dobivamo linearni sustav

$$a_0 (n+1) + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k = \sum_{k=0}^{n} f_k$$

$$a_0 \sum_{k=0}^{n} x_k + a_1 \sum_{k=0}^{n} x_k^2 = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k.$$

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Uvedemo li standardne skraćene oznake

$$s_\ell = \sum_{k=0}^{n} x_k^\ell, \quad t_\ell = \sum_{k=0}^{n} f_k x_k^\ell, \quad \ell \geq 0,$$

onda linearni sustav možemo pisati kao

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0$$

$$s_1 a_0 + s_2 a_1 = t_1.$$

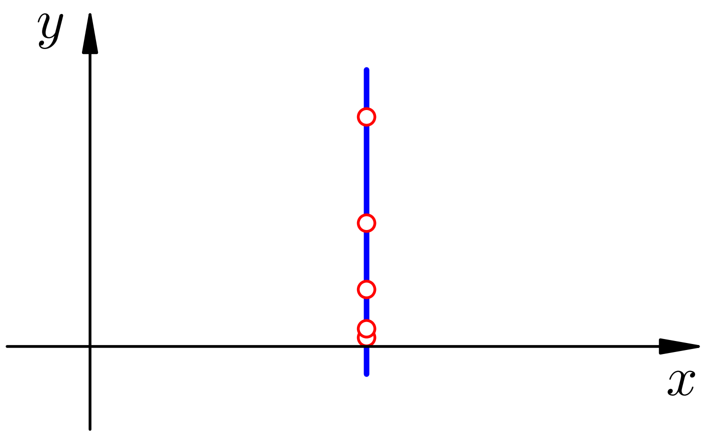
Matrica sustava je regularna, što slijedi iz linearne nezavisnosti vektora

$$(1, 1, \ldots, 1)^T \quad \text{i} \quad (x_0, x_1, \ldots, x_n)^T,$$

uz uvjet da imamo barem dvije različite točke x_k, pa postoji jedinstveno rješenje sustava.

Diskretna metoda najmanjih kvadrata za pravac

Slika situacije u kojoj problem najmanjih kvadrata za pravac nema rješenja, s tim da je $n \geq m = 1$, tj. imamo barem dvije točke.



Ako imamo više različitih podataka u jednoj jedinoj točki x_0,

- aproksimacijski pravac (očito) postoji i jedinstven je,
- ali je okomit na x-os,
- pa njegova jednadžba nema oblik $y = a_0 + a_1 x$.

Minimalnost rješenja?

Je li to zaista minimum?

- To nije teško pokazati, korištenjem drugih parcijalnih derivacija (dovoljan uvjet minimuma je pozitivna definitnost Hesseove matrice).

Provjera je li to minimum, može i puno lakše, jer se radi o zbroju kvadrata, pa

- S predstavlja paraboloid s otvorom prema gore, u varijablama a_0, a_1, pa je jasno da takvi paraboloidi imaju minimum.

Zbog toga se nikad ni ne provjerava je li dobiveno rješenje minimum za S.

Najmanji kvadrati za polinome

Za funkciju φ mogli bismo uzeti i polinom višeg stupnja,

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

ali postoji opasnost da je za malo veće m ($m \approx 10$)

- dobiveni sustav vrlo loše uvjetovan, pa dobiveni rezultati mogu biti jako pogrešni.

U praksi se to nikada direktno ne radi (na ovaj način), već za $m \geq 2, 3$.

Ako se koriste aproksimacije polinomima viših stupnjeva,

- onda se to radi korištenjem ortogonalnih polinoma (vidjeti kasnije).

Najmanji kvadrati za opće linearne funkcije

Linearni model diskretnih najmanjih kvadrata je potpuno primjenjiv na opću linearnu funkciju

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

gdje su $\varphi_0, \ldots, \varphi_m$ poznate (zadane) funkcije.

Zadatak. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje treba po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x).$$

Rješenje. Ide sasvim analogno (pogledati u skripti ili 8. predavanje).

Što s nelinearnim funkcijama?

Što ako φ nelinearno ovisi o parametrima?

- Dobivamo nelinearni sustav jednadžbi, koji se relativno teško rješava.
- Problem postaje ozbiljan optimizacijski problem, koji se može približno rješavati.
- Metode koje se najčešće koriste su metode pretraživanja ili Levenberg–Marquardt metoda.

Postoji i drugi pristup.

- Katkad se jednostavnim transformacijama problem može transformirati u linearni problem najmanjih kvadrata.
- Rješenja lineariziranog i nelinearnog problema nisu jednaka, jer je i greška (nelinearno) transformirana!

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata

Primjer. Zadane su točke $(x_0, f_0), \ldots, (x_n, f_n)$, koje po diskretnoj metodi najmanjih kvadrata treba aproksimirati funkcijom oblika

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x}.$$

Uočite da φ nelinearno ovisi o parametru a_1.

Direktni pristup problemu vodi na minimizaciju

$$\begin{aligned} S = S(a_0, a_1) &= \sum_{k=0}^{n} (f_k - \varphi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k})^2 \to \min . \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata (nast.)

Parcijalnim deriviranjem po varijablama a_0 i a_1 dobivamo

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k})\, e^{a_1 x_k},$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{k=0}^{n} (f_k - a_0 e^{a_1 x_k}) a_0\, x_k e^{a_1 x_k}.$$

To je nelinearan sustav jednadžbi, kojeg ne znamo riješiti!

S druge strane, ako logaritmiramo relaciju

$$\varphi(x) = a_0 e^{a_1 x},$$

dobivamo

$$\ln \varphi(x) = \ln(a_0) + a_1 x.$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata (nast.)

Moramo logaritmirati još i vrijednosti funkcije f u točkama x_k, pa uz supstitucije

$$h(x) = \ln f(x), \quad h_k = h(x_k) = \ln f_k, \quad k = 0, \ldots, n,$$

i

$$\psi(x) = \ln \varphi(x) = b_0 + b_1 x,$$

gdje je

$$b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1,$$

dobivamo linearni problem najmanjih kvadrata

$$\begin{aligned} \widetilde{S} = \widetilde{S}(b_0, b_1) &= \sum_{k=0}^{n} (h_k - \psi(x_k))^2 \\ &= \sum_{k=0}^{n} (h_k - b_0 - b_1 x_k)^2 \to \min . \end{aligned}$$

Primjer nelinearnih najmanjih kvadrata (nast.)

Iz rješenja b_0 i b_1, lako očitamo a_0 i a_1

$$a_0 = e^{b_0}, \quad a_1 = b_1.$$

Napomene uz linearizaciju:

- Pri linearizaciji smo pretpostavili da je $f_k > 0$, da bismo mogli logaritmirati.
- Ovako dobiveno rješenje uvijek daje pozitivan a_0, tj. linearizirani $\varphi(x)$ će uvijek biti veći od 0.

Tipične linearizacije — opća potencija

Kratki popis funkcija koje su često u upotrebi i njihovih standardnih linearizacija u problemu najmanjih kvadrata.

(a) Funkcija

$$\varphi(x) = a_0 x^{a_1}$$

linearizira se logaritmiranjem

$$\psi(x) = \log \varphi(x) = \log(a_0) + a_1 \log x,$$

$$h_k = \log f_k, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Uvedimo oznake

$$b_0 = \log(a_0), \quad b_1 = a_1.$$

Tipične linearizacije — opća potencija (nast.)

Linearizirani problem najmanjih kvadrata glasi

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(b_0, b_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - b_0 - b_1 \log(x_k))^2 \to \min,$$

U ovom slučaju, da bismo mogli provesti linearizaciju,

- mora biti i $x_k > 0$ i $f_k > 0$.

Tipične linearizacije — 1 / linearna funkcija

(b) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$$

linearizira se na sljedeći način

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija

(c) Funkciju

$$\varphi(x) = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$$

možemo linearizirati na više načina.

1. način:

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 \frac{1}{x} + a_1,$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} \Big(h_k - a_0 \frac{1}{x_k} - a_1\Big)^2 \to \min.$$

Tipične linearizacije — x / linearna funkcija (n.)

2. način:

$$\psi(x) = \frac{x}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 x,$$

$$h_k = \frac{x_k}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 x_k)^2 \to \min .$$

Tipične linearizacije — još jedan primjer

(d) Funkcija

$$\varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}}$$

linearizira se stavljanjem

$$\psi(x) = \frac{1}{\varphi(x)} = a_0 + a_1 e^{-x},$$

$$h_k = \frac{1}{f_k}, \qquad k = 0, \ldots, n.$$

Pripadni linearni problem najmanjih kvadrata je

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(a_0, a_1) = \sum_{k=0}^{n} (h_k - a_0 - a_1 e^{-x_k})^2 \to \min .$$

Konkretan primjer 1

Primjer. Uvaženi znanstvenik dr. Zurić, Ulica astronoma 69, dobio je ideju da se Zemlja giba oko Sunca po eliptičnoj orbiti, sa Suncem u jednom fokusu.

Nakon niza opažanja i mjerenja (uz dosta računa), dobio je slijedeće podatke

x [°]	0	45	90	135	180
r [10^6 km]	147	148	150	151	152

.

u kojima je

- r udaljenost od Zemlje do Sunca (u 10^6 km),
- a x je kut između spojnice Zemlja–Sunce i glavne osi elipse (u stupnjevima):

Konkretan primjer 1 (nastavak)

Dr. Zurić, naravno, zna da se elipsa može opisati formulom

$$r = \frac{\rho}{1 + \varepsilon \cos x}.$$

Pomognite mu da nađe ρ i ε, diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata, nakon preuređenja ove formule.

Rješenje. Pomnožimo formulu s nazivnikom funkcije, pa dobivamo

$$r(1 + \varepsilon \cos x) = \rho,$$

odnosno

$$-\varepsilon\, r \cos x + \rho = r.$$

Konkretan primjer 1 (nastavak)

Relaciju $-\varepsilon\, r\cos x + \rho = r$ gledamo kao funkciju oblika

$$au + b = v,$$

gdje je

$$u = r\cos x, \quad v = r, \quad a = -\varepsilon, \quad b = \rho.$$

Zatim se primijeni linearna metoda najmanjih kvadrata za pravac.

Prema tome, treba minimizirati

$$S = \sum_{i=0}^{4} (v_i - au_i - b)^2 \to \min.$$

Konkretan primjer 1 (nastavak)

Deriviranjem izlazi

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b) u_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=0}^{4} (v_i - a u_i - b) = 0.$$

Nakon sređivanja, uz $n + 1 = 5$, imamo

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{4} u_i^2 & \sum_{i=0}^{4} u_i \\ \sum_{i=0}^{4} u_i & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{4} u_i v_i \\ \sum_{i=0}^{4} v_i \end{bmatrix}.$$

Konkretan primjer 1 (nastavak)

Kad se radi “na ruke”, traženi podaci se obično slože u tablicu

i	$v_i = r_i$	$u_i = r_i \cos x_i$	u_i^2	$u_i v_i$
0	147	147	21609	21609
1	148	104.6518036	10952	15488.46693
2	150	0	0	0
3	151	−106.7731240	11400.5	−16122.74172
4	152	−152	23104	−23104
$\sum$	748	−7.1213204	67065.5	−2129.27479

Konkretan primjer 1 (nastavak)

Linearni sustav za koeficijente je

$$\begin{bmatrix} 67065.5 & -7.1213204 \\ -7.1213204 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2129.27479 \\ 748 \end{bmatrix}.$$

Rješenje tog sustava je

$$a = -1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad b = 149.5774021,$$

pa je

$$\varepsilon = 1.58663722 \cdot 10^{-2}, \quad \rho = 149.5774021.$$

Značenja:

- ε je ekscentricitet elipse,
- ρ je “srednja” udaljenost od Zemlje do Sunca.

Izbor aproksimacijske funkcije

Kad smo jednom odabrali oblik aproksimacijske funkcije pitamo se — jesmo li dobro izabrali njezin oblik?

- Kad nađemo aproksimaciju, moramo pogledati graf pogreške.
- Ako on "jednoliko" oscilira oko nule, onda je aproksimacijska funkcija dobro odabrana.

Primjer uklanjanja slučajne greške

Metoda najmanjih kvadrata uklanja i slučajne greške (recimo, kod mjerenja). To joj je osnovna svrha u statistici!

Primjer. Eksperimentalni podaci uzeti su tako da se y koordinate točaka na pravcu

$$y(x) = 4x + 3$$

za $x = 0, 1, \ldots, 100$, perturbiraju za

- uniformno distribuirani slučajni broj, između -1 i 1.

Tako se dobiju podaci

$$f_i = 4x_i + 3 + \text{slučajna perturbacija između } -1 \text{ i } 1,$$
$$i = 0, \ldots, 100.$$

Primjer uklanjanja slučajne greške (nastavak)

Prvih nekoliko podataka izgleda ovako:

x_i	$y(x_i)$	f_i
0	3	3.48175795724697 3
1	7	7.90598744987789 0
2	11	11.93107009769001 5
3	15	15.49513187608454 9
4	19	18.68144135301999 8
5	23	22.98482020710819 4

Kad se metodom najmanjih kvadrata za pravac $\varphi(x) = ax + b$ izračunaju parametri, oni su

$$a = 3.99598, \quad b = 3.20791.$$

Primjer uklanjanja slučajne greške (nastavak)

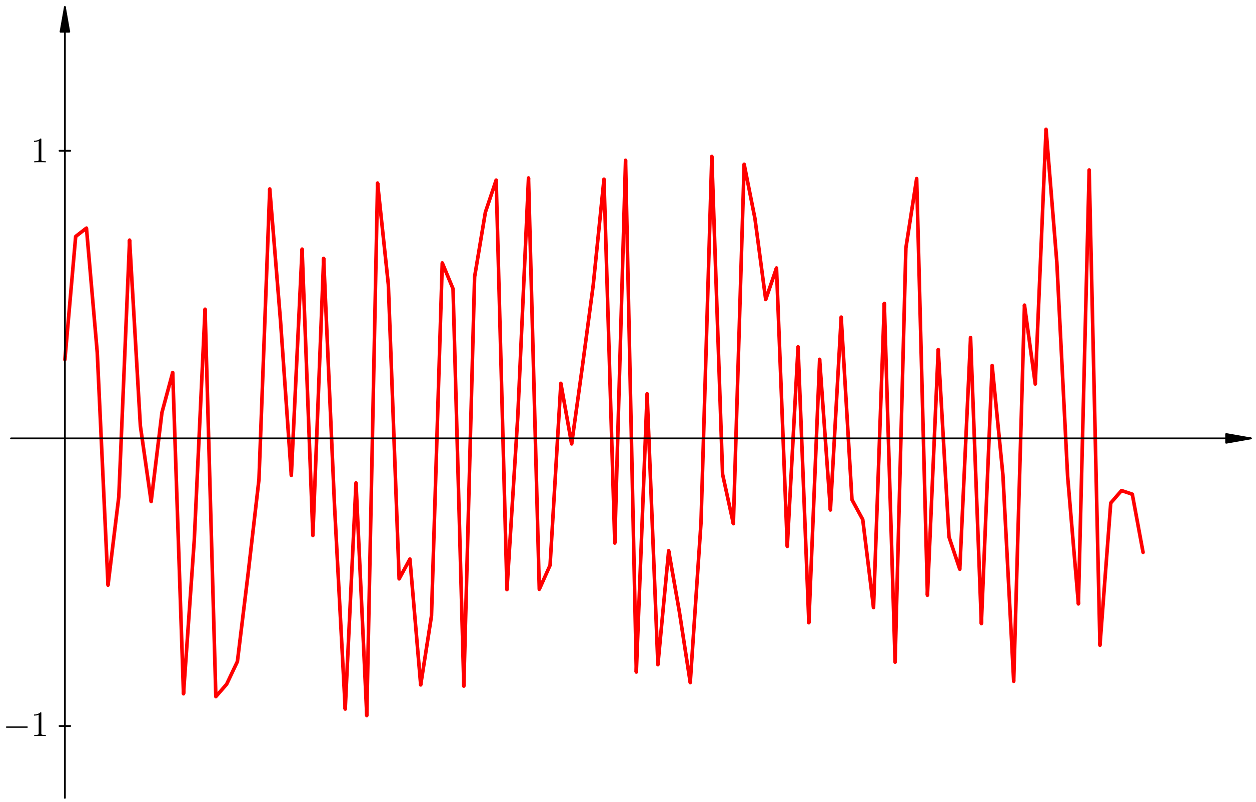
Pogledajmo što su aproksimacije vrijednosti f_i za prvih nekoliko podataka:

x_i	$y(x_i)$	$\varphi(x_i)$
0	3	3.207905163100534
1	7	7.203881519200112
2	11	11.199857875299690
3	15	15.195834231399269
4	19	19.191810587498847
5	23	23.187786943598425

Uočite da su greške $\varphi(x_i)$ obzirom na $y(x_i)$ znatno manje nego greške f_i obzirom na $y(x_i)$.

Primjer uklanjanja slučajne greške (nastavak)

Pogledajmo kako se ponaša greška $f_i - \varphi(x_i)$.



Greška izgleda kao slučajna uniformna funkcija između -1 i 1.

Demo primjeri

GnuPlot demo za prethodni problem.

- `approx\mls\gnuplot\pravac\pravac.plt`

Diskretnom metodom najmanjih kvadrata aproksimiraju se podaci za viskoznost 40% etilnog alkohola.

- Primjer pokazuje različita rješenja ako problem lineariziramo ili ako ga ne lineariziramo.
- Također, pokazan je način izbora aproksimacijske funkcije.

- `approx\mls\gnuplot\etil\etil.plt`

Konkretan primjer 2

Primjer. Diskretnom linearnom metodom najmanjih kvadrata nađite funkciju oblika

$$\varphi(x) = \frac{x + a}{bx + c}$$

koja aproksimira slijedeći skup podataka (točaka):

x_i	0	1	2	3	4
f_i	2.02	0.97	0.82	0.70	0.67

.

Nađite

- aproksimacije i pogreške u čvorovima x_i i
- sumu kvadrata apsolutnih grešaka S.

Konkretan primjer 2 — linearizacija

Rješenje nađite

- korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog,
- korištenjem QR faktorizacije,
- korištenjem QR faktorizacije s pivotiranjem stupaca.

Rješenje. Traženi oblik funkcije je nelinearan, pa ga treba linearizirati. To možemo napraviti na više načina.

1. Pomnožimo oblik funkcije φ s $bx + c$ i dobivamo

$$(bx + c)\varphi(x) = x + a,$$

odnosno

$$-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x.$$

Konkretan primjer 2 — linearizacija (nastavak)

2. Ovu funkciju $-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x$ možemo podijeliti s $\varphi(x)$, pa dobivamo drugu linearizaciju

$$-a \cdot \frac{1}{\varphi(x)} + bx + c = \frac{x}{\varphi(x)}.$$

Primijetite da ove dvije linearizacije

- ne moraju (i neće) dati isto rješenje!

Obje pripadaju “grupi” linearizacija oblika

$$D + Eu + Fv = w,$$

pri čemu je $w = w(u, v)$.

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Prvo riješimo problem korištenjem sustava normalnih jednadžbi i faktorizacije Choleskog.

Za 1. slučaj metoda najmanjih kvadrata ima oblik

$$S = \sum_{i=0}^{n} \big(w_i - (-a + bu_i + cv_i)\big)^2 \to \min,$$

pri čemu su supstitucije za varijable

$$u = x\varphi(x), \quad v = \varphi(x), \quad w = x,$$

a za vrijednosti varijabli u čvorovima

$$u_i = x_i f_i, \quad v_i = f_i, \quad w_i = x_i.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Deriviranjem po sve tri varijable izlazi

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=0}^{n} \big(w_i - (-a + bu_i + cv_i)\big)(-1) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=0}^{n} \big(w_i - (-a + bu_i + cv_i)\big)u_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c} = -2 \sum_{i=0}^{n} \big(w_i - (-a + bu_i + cv_i)\big)v_i = 0.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav

$$\begin{bmatrix} (n+1) & -\sum_{i=0}^{n} u_i & -\sum_{i=0}^{n} v_i \\ -\sum_{i=0}^{n} u_i & \sum_{i=0}^{n} u_i^2 & \sum_{i=0}^{n} u_i v_i \\ -\sum_{i=0}^{n} v_i & \sum_{i=0}^{n} u_i v_i & \sum_{i=0}^{n} v_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{i=0}^{n} w_i \\ \sum_{i=0}^{n} u_i w_i \\ \sum_{i=0}^{n} v_i w_i \end{bmatrix}.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Kad uvrstimo zadane podatke, za 1. slučaj dobivamo linearni sustav $Mx = d$, gdje je

$$M = \begin{bmatrix} 5 & -7.39 & -5.18 \\ -7.39 & 15.2229 & 5.5513 \\ -5.18 & 5.5513 & 6.6326 \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} -10 \\ 21.27 \\ 7.39 \end{bmatrix}.$$

Faktorizacija Choleskog matrice M je $M = R^T R$, uz

$$R \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Sad moramo još riješiti dva trokutasta sustava:

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

Rješenja prvog, pa drugog sustava su

$$y \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}, \quad x \approx \begin{bmatrix} 1.768586298 \\ 1.936999050 \\ 0.874229442 \end{bmatrix}.$$

Prema tome, rješenje za parametre u 1. slučaju je

$$a = 1.768586298,$$

$$b = 1.936999050,$$

$$c = 0.874229442.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Vrijednosti u čvorovima dobivamo tako da uvrstimo x_i u $\varphi(x)$

$$\varphi(x_i) = \frac{x_i + 1.768586298}{1.936999050x_i + 0.874229442},$$

pripadne greške su $f_i - \varphi(x_i)$, a zbroj kvadrata grešaka je

$$S = \sum_{i=0}^{4} (f_i - \varphi(x_i))^2.$$

Izračunajte sami!

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Za 2. slučaj treba uvesti supstitucije za varijable

$$u = -\frac{1}{\varphi(x)}, \quad v = x, \quad w = \frac{x}{\varphi(x)},$$

i vrijednosti varijabli u čvorovima

$$u_i = -\frac{1}{f_i}, \quad v_i = x_i, \quad w_i = \frac{x_i}{f_i}.$$

Metoda najmanjih kvadrata imat će oblik

$$S = \sum_{i=0}^{n} \big(w_i - (au_i + bv_i - c)\big)^2 \to \min\,.$$

Konkr. primjer 2 — sustav normalnih jednadžbi

Pripadni linearni sustav glasi $Mx = d$, gdje je

$$M \approx \begin{bmatrix} 7.0636 & -13.7258 & -5.6666 \\ -13.7258 & 30 & 10 \\ -5.6666 & 10 & 5 \end{bmatrix}, \quad d \approx \begin{bmatrix} -19.0704 \\ 42.6467 \\ 13.7258 \end{bmatrix}.$$

Rješenje za parametre u 2. slučaju je

$$a = 1.752205717,$$
$$b = 1.938744602,$$
$$c = 0.853483129.$$

Ova rješenja se ponešto razlikuju od prethodnih!

Konkretan primjer 2 — QR faktorizacija

Riješimo sad 1. slučaj korištenjem QR faktorizacije. Uvrštavanjem točaka (x_i, f_i) u

$$-a + b\,x\varphi(x) + c\,\varphi(x) = x,$$

dobivamo

$$-a + bx_i f_i + cf_i = x_i, \quad i = 0, \ldots, 4,$$

pa su A i b iz problema minimizacije jednaki

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0.00 & 2.02 \\ -1 & 0.97 & 0.97 \\ -1 & 1.64 & 0.82 \\ -1 & 2.10 & 0.70 \\ -1 & 2.68 & 0.67 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Konkretan primjer 2 — QR faktorizacija (nast.)

Skraćena forma QR faktorizacije od A je $A = Q_0 R_0$, gdje je

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} -0.447213595 & -0.712715113 & 0.536492779 \\ -0.447213595 & -0.244965682 & -0.647620310 \\ -0.447213595 & 0.078118977 & -0.281410215 \\ -0.447213595 & 0.299938295 & -0.065005678 \\ -0.447213595 & 0.579623522 & 0.457543425 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 2.236067977 & -3.304908471 & -2.316566425 \\ & 2.073759870 & -1.014939111 \\ & & 0.485817456 \end{bmatrix}.$$

Uočite: $R_0 = R$ iz faktorizacije Choleskog za $M = A^T A$.

Konkretan primjer 2 — QR faktorizacija (nast.)

Desna strana linearnog sustava je $Q_0^T b$, gdje je

$$Q_0^T b \approx \begin{bmatrix} -4.472135955 \\ 3.129581246 \\ 0.424715923 \end{bmatrix}.$$

Rješenje trokutastog sustava $R_0 x = Q_0^T b$ je

$$x \approx \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}$$

Napravite isto sami za drugu linearizaciju.

Konkr. primjer 2 — QR faktorizacija s pivot.

Ako napravimo QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca, dobit ćemo $AP = Q_0 R_0$, gdje je poredak stupaca $p = [2, 3, 1]$,

$$Q_0 \approx \begin{bmatrix} 0.000000000 & 0.940989460 & 0.332153833 \\ 0.248612544 & 0.287082061 & -0.731570874 \\ 0.420334610 & 0.103390036 & -0.312927468 \\ 0.538233342 & -0.030653048 & -0.059615261 \\ 0.686888265 & -0.143155917 & 0.502991359 \end{bmatrix},$$

$$R_0 \approx \begin{bmatrix} 3.901653496 & 1.422807024 & -1.894068760 \\ & 2.146676541 & -1.157652593 \\ & & 0.268968410 \end{bmatrix}.$$

Konkr. primjer 2 — QR faktorizacija s pivot.

Dobiveno rješenje trokutastog sustava $R_0 x' = Q_0^T b$ je

$$x' \approx \begin{bmatrix} 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \\ 1.76858629811 \end{bmatrix}.$$

Sad još treba vratiti x u "pravi poredak". Budući da je finalni pivotni vektor bio $p = [2, 3, 1]$, to odgovara matrici permutacije

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

Konkr. primjer 2 — QR faktorizacija s pivot.

Pravo rješenje x dobit ćemo kao

$$x = Px' = \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}.$$

Neprekidni problem najmanjih kvadrata

Još jednom o najmanjim kvadratima

U uvodu o aproksimaciji rečeno je da se parametri funkcije $\varphi \in \mathcal{F}$ po metodi najmanjih kvadrata, traže tako da bude

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

pri čemu je $e(x) = f(x) - \varphi(x)$.

Da bismo mogli naći minimalnu grešku u neprekidnom slučaju, moramo definirati

- skalarni produkt za neprekidne funkcije na odgovarajućem intervalu.
- Definicija norme nije dovoljna, jer je rješenje već u diskretnom slučaju bila projekcija na potprostor, a za to nam je potreban skalarni produkt.

Definicija norme i skalarnog produkta

Neka je $w(x)$ zadana funkcija. $w(x)$ je težinska funkcija ako je

- $w(x) \geq 0$ na intervalu $[a, b]$,
- $w(x)$ može biti jednaka 0 samo u izoliranim točkama.

Težinska L_2-norma (ili samo 2-norma) funkcije u na $[a, b]$ je

$$\|u\|_2 = \left(\int\limits_a^b w(x)\, |u(x)|^2 \, dx \right)^{1/2}.$$

Ako je ta norma konačna i za funkciju u i za funkciju v, onda možemo definirati težinski skalarni produkt

$$\langle u, v \rangle = \int\limits_a^b w(x)\, u(x) \overline{v(x)} \, dx.$$

Definicija skalarnog produkta

Skalarni produkt $\langle u, v\rangle$ je dobro definiran (konačan), jer vrijedi Cauchy–Schwarzova nejednakost

$$|\langle u, v\rangle| \leq \|u\|_2 \cdot \|v\|_2.$$

$\langle u, v\rangle$ je skalarni produkt, jer

1. $\langle u, u\rangle \geq 0$, a jednak je 0 za one funkcije u koje su nula u svim točkama gdje je $w(x) > 0$, (v. mjera i integral)
2. vrijedi linearnost u prvom argumentu

$$\langle \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2, v\rangle = \alpha_1 \langle u_1, v\rangle + \alpha_2 \langle u_2, v\rangle,$$

3. i antilinearnost/linearnost ($\mathbb{C}/\mathbb{R}$) u drugom argumentu,

$$\langle u, \beta_1 v_1 + \beta_2 v_2\rangle = \bar{\beta}_1 \langle u, v_1\rangle + \bar{\beta}_2 \langle u, v_2\rangle.$$

Ortogonalne funkcije

Napomena. Ako se radi o realnim funkcijama, onda kompleksno konjugiranje drugog argumenta izbacujemo.

U nastavku radimo samo s poljem $\mathbb{R}$, tj. s realnim funkcijama.

Za funkcije u i v reći ćemo da su ortogonalne ako vrijedi

$$\langle u, v \rangle = 0.$$

Ako su u i v ortogonalne, onda vrijedi

$$\begin{aligned} \|u + v\|^2 &= \langle u, u \rangle + \langle u, v \rangle + \langle v, u \rangle + \langle v, v \rangle \\ &= \|u\|^2 + 2\langle u, v \rangle + \|v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2. \end{aligned}$$

Pitagorin poučak!

Sustavi ortogonalnih funkcija

Ako imamo sustav ortogonalnih funkcija u_k, $k = 0, \ldots, m$, za koje vrijedi

$$\langle u_i, u_j \rangle = 0, \quad \text{za} \quad i \neq j, \quad i, j = 0, \ldots, m,$$

i $u_k \not\equiv 0$ tamo gdje je $w(x) > 0$, onda vrijedi

$$\left\| \sum_{k=0}^{m} \alpha_k u_k \right\|_2^2 = \sum_{k=0}^{m} |\alpha_k|^2 \|u_k\|_2^2.$$

Prethodna jednakost znači da je ortogonalni sustav funkcija linearno nezavisan tamo gdje je $w(x) > 0$.

Ako je lijeva strana jednaka nula, mora biti i desna, a po pretpostavci je $\|u_k\|_2 > 0$, pa je jedino moguće da je $\alpha_k = 0$ za $k = 0, \ldots, m$.

Norma kvadrata greške

Ako je φ linearna funkcija, tj. $\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x)$, onda za normu kvadrata greške dobivamo

$$S := \|e\|_2^2 = \|f - \varphi\|_2^2 = \langle f, f\rangle - 2\langle f, \varphi\rangle + \langle \varphi, \varphi\rangle.$$

Ako uvrstimo oblik funkcije φ i definiciju skalarnog produkta, dobivamo

$$S = \int_a^b w(x) f^2(x)\, dx - 2\int_a^b w(x) f(x) \left(\sum_{j=0}^m a_j\varphi_j(x)\right) dx + \int_a^b w(x) \left(\sum_{j=0}^m a_j\varphi_j(x)\right)^2 dx.$$

Sustav normalnih jednadžbi

Kvadrat norme greške S je funkcija koeficijenata a_j.

- Radi se o kvadratnoj funkciji u $m+1$ varijabli, pa je uvjet minimuma da su sve parcijalne derivacije jednake 0.

Dakle,

$$0 = \frac{\partial S}{\partial a_i} = 2 \int_a^b w(x) \left(\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x) \right) \varphi_i(x) \, dx - 2 \int_a^b w(x) f(x) \varphi_i(x) \, dx,$$

pa mora biti ...

Sustav normalnih jednadžbi (nastavak)

pa mora biti ...

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \int\limits_a^b w(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\, dx = \int\limits_a^b w(x) f(x)\varphi_i(x)\, dx,$$

za $i = 0, \ldots, m$. Uočimo da su odgovarajući integrali skalarni produkti, pa imamo

$$\sum_{j=0}^{m} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j = \langle \varphi_i, f \rangle.$$

Ako označimo

$$m_{ij} = \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle, \quad t_i = \langle \varphi_i, f \rangle, \quad i, j = 0, \ldots, m,$$

Sustav normalnih jednadžbi (nastavak)

pri čemu je

$$a^T = [a_0, a_1, \ldots, a_m],$$

onda problem najmanjih kvadrata možemo pisati kao sustav normalnih jednadžbi

$$Ma = t.$$

Matrica M je

- (očito) simetrična,
- ali i pozitivno definitna.

Pozitivna definitnost matrice M

Pozitivna definitnost izlazi iz definicije elemenata m_{ij}. Za svaki vektor $x \neq 0$ imamo

$$x^T M x = \sum_{i=0}^{m} \sum_{j=0}^{m} x_i x_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \sum_{i=0}^{m} \sum_{j=0}^{m} \langle x_i \varphi_i, x_j \varphi_j \rangle$$
$$= \left\langle \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i, \sum_{j=0}^{m} x_j \varphi_j \right\rangle = \left\| \sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \right\|_2^2,$$

što je očito nenegativno. Nuli je jednako ako i samo ako je

$$\sum_{i=0}^{m} x_i \varphi_i \equiv 0, \quad \text{čim je } w(x) > 0.$$

Rješenje problema najmanjih kvadrata

Zaključak. Simetrične pozitivno definitne matrice su nesingularne, pa

- postoji jedinstveno rješenje problema $Ma = t$.

Nadalje, izračunati vektor a je jedinstveni minimum za problem najmanjih kvadrata, jer je

- Hesseova matrica drugih parcijalnih derivacija H pozitivno definitna, što slijedi iz

$$h_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial a_i \partial a_j} = 2 \int_a^b w(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x)\, dx = 2m_{ij},$$

tj. $H = 2M$!

Jednostavni primjer

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite polinom stupnja 1 koji aproksimira funkciju

$$f(x) = e^x$$

na intervalu $[-1, 1]$ uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Rješenje. Treba minimizirati

$$S = \int_{-1}^{1} (e^x - a_1 x - a_0)^2 \, dx \to \min\,.$$

Jednostavni primjer (nastavak)

Deriviranjem dobivamo

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \int_{-1}^{1} (e^x - a_1 x - a_0) x \, dx$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \int_{-1}^{1} (e^x - a_1 x - a_0) \, dx,$$

pa uz oznake

$$s_k := \int_{-1}^{1} x^k \, dx, \qquad t_k := \int_{-1}^{1} e^x x^k \, dx,$$

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

Jednostavni primjer (nastavak)

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

$$\begin{aligned} s_2 a_1 + s_1 a_0 &= t_1 \\ s_1 a_1 + s_0 a_0 &= t_0, \end{aligned}$$

Izračunajmo integrale s lijeve strane

$$s_k = \int\limits_{-1}^{1} x^k \, dx = \frac{1}{k+1} x^{k+1} \,\Big|_{-1}^{1} = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1}$$

$$= \begin{cases} \dfrac{2}{k+1}, & \text{za } k \text{ paran}, \\ 0, & \text{za } k \text{ neparan}. \end{cases}$$

Jednostavni primjer (nastavak)

Za integrale desne strane dobivamo

$$t_0 := \int_{-1}^{1} e^x \, dx = e^x \Big|_{-1}^{1} = e - e^{-1}$$

$$t_1 := \int_{-1}^{1} xe^x \, dx = \left\{ \begin{matrix} u = x & du = dx \\ dv = e^x dx & v = e^x \end{matrix} \right\} = xe^x \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} e^x \, dx$$

$$= e + e^{-1} - (e - e^{-1}) = 2e^{-1}.$$

Jednostavni primjer (nastavak)

Linearni sustav tada glasi:

$$\begin{aligned} \frac{2}{3} \cdot a_1 + 0 \cdot a_0 &= 2e^{-1} \\ 0 \cdot a_1 + 2 \cdot a_0 &= e - e^{-1}, \end{aligned}$$

a njegovo rješenje je

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{t_1}{s_2} = 3e^{-1} \approx 1.103638324, \\ a_0 &= \frac{t_0}{s_0} = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1) \approx 1.175201194. \end{aligned}$$

Pravac dobiven neprekidnom metodom najmanjih kvadrata je

$$p_1(x) \approx 1.103638324x + 1.175201194.$$

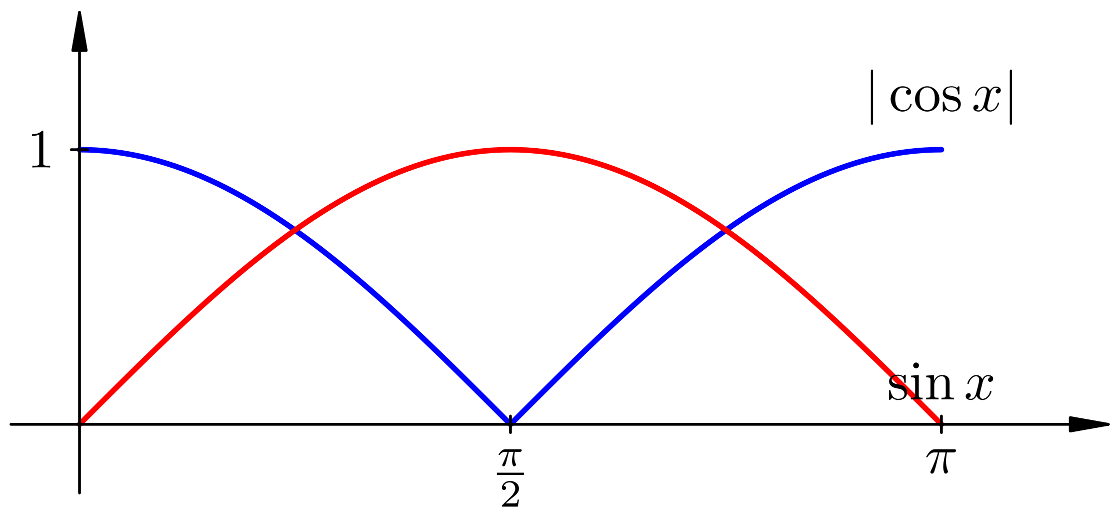
Složeniji primjer

Primjer. Neprekidnom metodom najmanjih kvadrata nađite polinome stupnjeva 1, 2 i 3 koji aproksimiraju funkciju

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

na intervalu $[0, \pi]$ uz težinsku funkciju $w(x) = |\cos x|$.

Rješenje. Skicirajmo prvo funkcije f i w.



Složeniji primjer (nastavak)

Budući da su obje funkcije simetrične oko točke $\frac{\pi}{2}$, polinome se isplati pisati u bazi $(x - \frac{\pi}{2})^k$.

Označimo s p_n polinom stupnja n,

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_{nk} \Big(x - \frac{\pi}{2}\Big)^k.$$

Treba minimizirati

$$S = \int\limits_0^{\pi} |\cos x| \big(\sin x - p_n(x)\big)^2 \, dx \to \min .$$

Složeniji primjer (nastavak)

Iz uvjeta

$$\frac{\partial S}{\partial a_{nk}} = 0, \quad k = 0, \ldots, n,$$

dobivamo linearni sustav

$$\sum_{j=0}^{n} a_{nj} \int_0^\pi |\cos x| \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^{k+j} dx = \int_0^\pi |\cos x| \sin x \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^{k} dx,$$

za $k = 0, \ldots, n$.

Složeniji primjer (nastavak)

Nađimo sad potrebne integrale:

$$\int_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| \, dx = \left\{ \begin{array}{ll} y = x - \dfrac{\pi}{2} & x = 0 \;\Rightarrow y = -\dfrac{\pi}{2} \\ dy = dx & x = \pi \;\Rightarrow y = \dfrac{\pi}{2} \end{array} \right\}$$

$$= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} y^k |\sin y| \, dy = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{za } k \text{ neparan}, \\ 2 \displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \, dy, & \text{za } k \text{ paran}. \end{array} \right\}$$

Napomena. Neparni koeficijenti su nula jer je baza pogodno odabrana, tako da koristi činjenicu da je $w(x)$ parna funkcija obzirom na $\frac{\pi}{2}$. Baza sadrži samo "parne" i "neparne" funkcije.

Složeniji primjer (nastavak)

Nađimo rekurziju za integral

$$s_k := 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \, dy = \left\{ \begin{array}{cc} u = y^k & du = k y^{k-1} \, dy \\ dv = \sin y \, dy & v = -\cos y \end{array} \right\}$$

$$= 2 \left(-y^k \cos y \, \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + k \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1} \cos y \, dy \right)$$

$$= \left\{ \begin{array}{cc} u = y^{k-1} & du = (k-1) y^{k-2} \, dy \\ dv = \cos y \, dy & v = \sin y \end{array} \right\}$$

$$= 2k y^{k-1} \sin y \, \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - k(k-1) \left(2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2} \sin y \, dy \right)$$

$$= 2k \left(\frac{\pi}{2} \right)^{k-1} - k(k-1) s_{k-2}.$$

Složeniji primjer (nastavak)

Još treba izračunati

$$s_0 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sin y|\, dy = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin y\, dy = -2\cos y \,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 2.$$

Sada je

$$s_2 = 4\frac{\pi}{2} - 2s_0 = 2\pi - 4,$$

$$s_4 = 8\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 - 12s_2 = \pi^3 - 24\pi + 48,$$

$$s_6 = 12\left(\frac{\pi}{2}\right)^5 - 30s_4 = \frac{3}{8}\pi^5 - 30\pi^3 + 720\pi - 1440.$$

Složeniji primjer (nastavak)

Ostaje još izračunati integrale s desne strane:

$$t_k := 2 \int_0^{\pi} \left(x - \frac{\pi}{2}\right)^k |\cos x| \sin x \, dx$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} y = x - \dfrac{\pi}{2} & x = 0 \Rightarrow y = -\dfrac{\pi}{2} \\ dy = dx & x = \pi \Rightarrow y = \dfrac{\pi}{2} \end{array} \right\} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} y^k |\sin y| \cos y \, dy$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \text{za } k \text{ neparan}, \\ 2 \displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin y \cos y \, dy = \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y) \, dy, & \text{za } k \text{ paran}. \end{array} \right\}$$

Složeniji primjer (nastavak)

Za parne indekse k s desne strane imamo

$$t_k := \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y)\,dy = \left\{ \begin{matrix} u = y^k & du = ky^{k-1}\,dy \\ dv = \sin(2y)\,dy & v = -\cos(2y)/2 \end{matrix} \right\}$$

$$= -\frac{1}{2}\,y^k\cos(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \frac{k}{2}\int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-1}\cos(2y)\,dy$$

$$= \left\{ \begin{matrix} u = y^{k-1} & du = (k-1)y^{k-2}\,dy \\ dv = \cos(2y)\,dy & v = \sin(2y)/2 \end{matrix} \right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^k + \frac{k}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}\,y^{k-1}\sin(2y)\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \frac{k-1}{2}\int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} y^{k-2}\sin(2y)\,dy\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^k - \frac{k(k-1)}{4}t_{k-2}.$$

Složeniji primjer (nastavak)

Još treba izračunati

$$t_0 = \int\limits_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(2y)\, dy = -\frac{1}{2} \cos(2y) \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 1.$$

Sada je

$$t_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 - \frac{1}{2}\, t_0 = \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} = \frac{\pi^2 - 4}{8}.$$

Linearni sustav sada ima oblik

$$\sum_{j=0}^{n} a_{nj} s_{k+j} = t_k, \quad k = 0, \ldots, n.$$

Složeniji primjer (nastavak)

Za $n = 1$ sustav je:

$$
\begin{aligned}
s_0 a_{10} + s_1 a_{11} &= t_0 \\
s_1 a_{10} + s_2 a_{11} &= t_1,
\end{aligned}
$$

tj. ako uvrstimo izračunate s_k i t_k, imamo

$$
\begin{aligned}
2 \cdot a_{10} + \qquad\qquad 0 \cdot a_{11} &= 1 \\
0 \cdot a_{10} + (2\pi - 4) \cdot a_{11} &= 0.
\end{aligned}
$$

Rješenje tog sustava je $a_{10} = \dfrac{1}{2}$, $a_{11} = 0$, pa je aproksimacijski polinom

$$
p_1(x) = \frac{1}{2}.
$$

Složeniji primjer (nastavak)

Za $n = 2$ sustav je:

$$\begin{aligned} s_0 a_{20} + s_1 a_{21} + s_2 a_{22} &= t_0 \\ s_1 a_{20} + s_2 a_{21} + s_3 a_{22} &= t_1 \\ s_2 a_{20} + s_3 a_{21} + s_4 a_{22} &= t_2. \end{aligned}$$

Ako uvrstimo izračunate veličine, sustav glasi:

$$\begin{aligned} 2 \cdot a_{20} + {} & 0 \cdot a_{21} + {} & (2\pi - 4) \cdot a_{22} &= 1 \\ 0 \cdot a_{20} + {} & (2\pi - 4) \cdot a_{21} + {} & 0 \cdot a_{22} &= 0 \\ (2\pi - 4) \cdot a_{20} + {} & 0 \cdot a_{21} + {} & (\pi^3 - 24\pi + 48) \cdot a_{22} &= \frac{\pi^2 - 4}{8}. \end{aligned}$$

Složeniji primjer (nastavak)

Rješenje tog sustava je

$$a_{20} \approx 0.964909552, \quad a_{21} = 0, \quad a_{22} \approx -0.407246447,$$

pa je aproksimacijski polinom

$$p_2(x) \approx -0.407246447 \left(x - \frac{\pi}{2} \right)^2 + 0.964909552.$$

Za $n = 3$ dobije se rješenje $p_3 = p_2$ (provjerite sami).

Još jedan primjer

Primjer. Ako funkciju $f(x)$ na $[0,1]$ uz $w(x) = 1$ aproksimiramo polinomom stupnja n po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata, matrica linearnog sustava je

$$M = \begin{bmatrix} s_0 & s_1 & \cdots & s_n \\ s_1 & s_2 & \cdots & s_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \cdots \\ s_n & s_{n+1} & \cdots & s_{2n} \end{bmatrix},$$

pri čemu su

$$s_k := \int\limits_0^1 x^k \, dx = \frac{x^{k+1}}{k+1} \Big|_0^1 = \frac{1}{k+1}.$$

Matrica linearnog sustava je Hilbertova matrica reda $n+1$!

Komentari primjera

U posljednja dva primjera uočili smo sljedeće:

- Ako za bazu biramo funkcije $1, x, x^2, \ldots$, matrica sustava može biti vrlo loše uvjetovana.
- U složenijem primjeru, podizanjem stupnja polinoma mijenjaju se koeficijenti polinoma p_n. Na primjer, a_0 ovisi o stupnju n.

Prethodna dva problema otklanjaju se ako se za bazu funkcija uzmu ortogonalne funkcije.

Splajn aproksimacija pomoću metode najmanjih kvadrata

Splajn aproksimacija pomoću diskretne MNK

- Želimo upotrijebiti polinomni splajn u metodi najmanjih kvadrata, tj. tražimo $\varphi \in \mathcal{S}(k, \mathbf{T})$, $\dim \mathcal{S}(k, \mathbf{T}) = n$, gdje je $\mathbf{T} = \{t_i\}_{i=1}^{n+k}$, $t_i \leqslant t_{i+1}$ proširena particija na $[a, b]$,

$$\varphi = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,k}$$

koji najbolje aproksimira određeni skup podataka u smislu najmanjih kvadrata, što je ekvivalentno određivanju koeficijenata α_j, tako da φ najbolje aproksimira dane podatke.

Splajn aproksimacija pomoću diskr. MNK (na.)

- Za diskretnu metodu najmanjih kvadrata pretpostavljamo da splajnom želimo aproksimirati podatke izražene u $m \geq n$ točaka

$$(x_i, y_i) \in [a, b], \quad i = 1, \ldots, m.$$

- Dakle, želimo riješiti sljedeći problem

$$\min_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n} \sum_{i=1}^{m} (y_i - \varphi(x_i))^2 = \min_{\alpha_1,\ldots,\alpha_n} \sum_{i=1}^{m} \left(y_i - \sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,k}(x_i) \right)^2.$$

- Ako sve podatke sada prikažemo u matričnom obliku

Splajn aproksimacija pomoću diskr. MNK (na.)

$$A = \begin{bmatrix} B_{1,k}(x_1) & B_{2,k}(x_1) & \cdots & B_{n,k}(x_1) \\ B_{1,k}(x_2) & B_{2,k}(x_2) & \cdots & B_{n,k}(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ B_{1,k}(x_m) & B_{2,k}(x_m) & \cdots & B_{n,k}(x_m) \end{bmatrix},$$

$$x = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix},$$

Splajn aproksimacija pomoću diskr. MNK (na.)

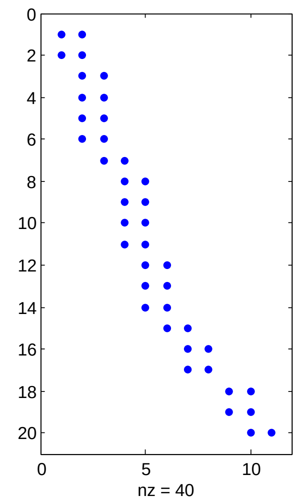
tada smo dobili standardni linearni problem najmanjih kvadrata

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2.$$

- Zbog već spomenutih svojstva B-splajnova, za svaki $x \in [a, b]$ postoji najviše k B-splajnova za koje je $B_{j,k}(x) \neq 0$.
- Zbog toga matrica A ima vrpčastu strukturu, kod koje u svakom retku matrice postoji najviše k netrivijalnih elemenata.
- Znamo da će ovaj problem imati jedinstveno rješenje ako matrica A ima puni stupčani rang.

Splajn aproksimacija pomoću diskr. MNK (na.)

- To će se postići, isto kao i kod interpolacije, ako za svaki $j = 1, \ldots, n$ postoji x_{i_j} takav da je $x_{i_j} \in \langle t_j, t_{j+k} \rangle$, pri čemu su svi x_{i_j}, $j = 1, \ldots, n$ međusobno različiti.
- To znači, da za svaki $B_{j,k}$, $j = 1, \ldots, n$ postoji neki zasebni x_{i_j} za koji je $B_{j,k}(x_{i_j}) \neq 0$.
- U tom slučaju matrica A nema niti jedan nulstupac, i svi su linearno nezavisni.



Linearna splajn aproksimacija pomoću DMNK

- Riješit ćemo konkretan problem najmanjih kvadrata za po dijelovima linearnu aproksimaciju.
- Proširena particija $\mathbf{T}$ ima sve unutrašnje čvorove multipliciteta 1, tj.

$$a = t_1 = t_2 < t_3 < t_4 < \cdots < t_n < t_{n+1} = t_{n+2} = b.$$

- Pripadni prostor splajnova $\mathcal{S}(2, \mathbf{T})$ je, naravno, dimenzije n.
- Ako uzmemo neki x takav da je $x \in [t_i, t_{i+1}]$, tada su na tom segmentu samo dva B-splajna netrivijalna: $B_{i-1,2}$ i $B_{i,2}$.
- Zbog toga u matrici $A = [B_{j,2}(x_i)]$ svaki redak ima najviše dva netrivijalna elementa.

Linearna splajn aproksimacija pomoću DMNK

- U slučaju da je $m = n$, i da su $x_i = t_{i+1}$, $i = 1, \ldots, n$, tada se problem najamanjih kvadrata svodi na rješavanje trivijalnog sustava linearnih jednadžbi za $A = I$ (jer je $B_{j,2}(t_{i+1}) = \delta_{ij}$).
- U tom slučaju radi se o interpolaciji točaka (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, a rezultat je $\alpha_j = y_j$, $j = 0, \ldots, n$, tj.

$$\varphi = \sum_{j=1}^{n} y_j B_{j,2}.$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću DMNK

- U slučaju da je $m > n+1$, i da za svaki $j = 1, \ldots, n$ postoji x_{i_j} takav da je $x_{i_j} \in \langle t_j, t_{j+2} \rangle$, pri čemu su svi x_{i_j}, $j = 1, \ldots, n$ međusobno različiti, tada se radi o problemu najmanjih kvadrata sa jedinstvenim rješenjem

$$\varphi = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,2}.$$

Splajn aproksimacija pomoću neprekidne MNK

- Sada rješavamo problem
$$\min_{\varphi \in \mathcal{S}_{k,\mathbf{T}}} \|f - \varphi\|_2.$$
- Parametre funkcije $\varphi = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j B_{j,k}$ odredit ćemo rješavanjem sustava normalnih jednadžbi
$$Ax = b,$$

Splajn aproksimacija pomoću nepr. MNK (n.)

gdje je

$$A = \begin{bmatrix} \langle B_{1,k}, B_{1,k} \rangle & \langle B_{1,k}, B_{2,k} \rangle & \cdots & \langle B_{1,k}, B_{n,k} \rangle \\ \langle B_{2,k}, B_{1,k} \rangle & \langle B_{2,k}, B_{2,k} \rangle & \cdots & \langle B_{2,k}, B_{n,k} \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle B_{n,k}, B_{1,k} \rangle & \langle B_{n,k}, B_{2,k} \rangle & \cdots & \langle B_{n,k}, B_{n,k} \rangle \end{bmatrix},$$

$$x = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} \langle f, B_{1,k} \rangle \\ \langle f, B_{2,k} \rangle \\ \vdots \\ \langle f, B_{n,k} \rangle \end{bmatrix}.$$

Splajn aproksimacija pomoću nepr. MNK (n.)

- Ako je $w \equiv 1$, tada se elementi matrice A različiti od nule

$$\langle B_{i,k}, B_{j,k} \rangle = \int\limits_{t_i}^{t_{i+k}} B_{i,k} B_{j,k}\, dx = \sum_{l=i}^{i+k-1} \int\limits_{t_l}^{t_{l+1}} B_{i,k} B_{j,k}\, dx \qquad (1)$$

za $|i - j| \leqslant k - 1$, mogu računati egzaktno tako da se primjeni Gaussova integracijska formula u k točaka

$$\int\limits_a^b f(x)\, dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{j=1}^{k} w_j f\left(\frac{z_j(b-a)}{2} + \frac{b+a}{2} \right)$$

na svaki od k integrala u sumi u (1).

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

- U slučaju linearne aproksimacije, bazne funkcije su "krovići" $B_{j,2}$, $j = 1, \ldots, n$, a $w(x) = 1$.
- Pogledajmo kako u tom slučaju izgleda matrica A.
- Prvo možemo zaključiti da je $B_{i,2}(x) \cdot B_{j,2}(x) = 0$ za sve $x \in [a, b]$ kada je $|i - j| > 1$.
- Dalje vrijedi

$$B_{j-1,2}(x) \cdot B_{j,2}(x) = \begin{cases} \frac{t_{j+1}-x}{t_{j+1}-t_j} \cdot \frac{x-t_j}{t_{j+1}-t_j}, & x \in [t_j, t_{j+1}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{-x^2+(t_j+t_{j+1})x-t_jt_{j+1}}{(t_{j+1}-t_j)^2}, & x \in [t_j, t_{j+1}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

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

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

$$B_{1,2}(x)^2 = \begin{cases} \frac{(t_3-x)^2}{(t_3-t_2)^2}, & x \in [t_2, t_3] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{x^2-2t_3x+t_3^2}{(t_3-t_2)^2}, & x \in [t_2, t_3] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$B_{j,2}(x)^2 = \begin{cases} \frac{(x-t_j)^2}{(t_{j+1}-t_j)^2}, & x \in [t_j, t_{j+1}] \\ \frac{(t_{j+2}-x)^2}{(t_{j+2}-t_{j+1})^2}, & x \in [t_{j+1}, t_{j+2}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{x^2-2t_jx+t_j^2}{(t_{j+1}-t_j)^2}, & x \in [t_j, t_{j+1}] \\ \frac{x^2-2t_{j+2}x+t_{j+2}^2}{(t_{j+2}-t_{j+1})^2}, & x \in [t_{j+1}, t_{j+2}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$j = 2, \ldots, n-1$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

$$B_{n,2}(x)^2 = \begin{cases} \frac{(x-t_n)^2}{(t_{n+1}-t_n)^2}, & x \in [t_n, t_{n+1}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{x^2-2t_nx+t_n^2}{(t_{n+1}-t_n)^2}, & x \in [t_n, t_{n+1}] \\ 0, & \text{inače} \end{cases}$$

- Elemente matrice A sada je lako odrediti.

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

$$\langle B_{j-1,2}, B_{j,2}\rangle = \int\limits_a^b B_{j-1,2}(x) B_{j,2}(x)\,dx = \int\limits_{t_j}^{t_{j+1}} B_{j-1,2}(x) B_{j,2}(x)\,dx$$

$$= \frac{t_{j+1} - t_j}{6}, \quad j = 2, \ldots, n$$

$$\langle B_{1,2}, B_{1,2}\rangle = \int\limits_a^b B_{1,2}(x) B_{1,2}(x)\,dx = \int\limits_{t_2}^{t_3} B_{1,2}(x) B_{1,2}(x)\,dx$$

$$= \frac{t_3 - t_2}{3}$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

$$\langle B_{j,2}, B_{j,2}\rangle = \int\limits_a^b B_{j,2}(x)B_{j,2}(x)dx = \int\limits_{t_j}^{t_{j+2}} B_{j,2}(x)B_{j,2}(x)dx$$

$$= \frac{t_{j+2} - t_j}{3}, \quad j = 1, \ldots, n-1$$

$$\langle B_{n,2}, B_{n,2}\rangle = \int\limits_a^b B_{n,2}(x)B_{n,2}(x)dx = \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} B_{n,2}(x)B_{n,2}(x)dx$$

$$= \frac{t_{n+1} - t_n}{3}$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

- Matrica A je dakle tridijagonalna, strogo dijagonalno domnatntna, pozitivno definitna, oblika

$$A = \begin{bmatrix} \frac{t_3-t_2}{3} & \frac{t_3-t_2}{6} & & & \\ \frac{t_3-t_2}{6} & \frac{t_4-t_2}{3} & \frac{t_4-t_3}{6} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{t_n-t_{n-1}}{6} & \frac{t_{n+1}-t_{n-1}}{3} & \frac{t_{n+1}-t_n}{6} \\ & & & \frac{t_{n+1}-t_n}{6} & \frac{t_{n+1}-t_n}{3} \end{bmatrix},$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

a vektor b je oblika

$$b = \begin{bmatrix} \int\limits_{t_2}^{t_3} f(x) B_{1,2}(x)\,dx \\ \int\limits_{t_2}^{t_4} f(x) B_{2,2}(x)\,dx \\ \vdots \\ \int\limits_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(x) B_{n-1,2}(x)\,dx \\ \int\limits_{t_n}^{t_{n+1}} f(x) B_{n,2}(x)\,dx \end{bmatrix}.$$

Linearna splajn aproksimacija pomoću NMNK

- Sustav $Ax = b$ se sada jednostavno može riješiti
  - pomoću faktorizacije Choleskog
  - specijalnom LDL^T metodom za tridijagonalne matrice
  - SOR metodom
  - metodom konjugiranih gradijenata

Ortogonalne funkcije

Ortogonalne funkcije i najmanji kvadrati

Linearni sustav za neprekidni problem najmanjih kvadrata zapisali smo kao

$$\sum_{j=0}^{m} \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle a_j = \langle \varphi_i, f \rangle, \quad i = 0, \ldots, m.$$

Ako φ_i, $i = 0, \ldots, m$, tvore ortogonalni sustav funkcija, onda je

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0 \quad \text{za } i \neq j, \quad \langle \varphi_j, \varphi_j \rangle = \|\varphi_j\|^2 > 0.$$

Uvrštavanjem u linearni sustav, dobivamo da je sustav dijagonalan, a njegovo rješenje je

$$a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}, \quad j = 0, \ldots, m.$$

Problemi

Oblikom koeficijenata a_j nismo izbjegli sve probleme.

- Tipično norme $\|\varphi_j\|_2^2$ padaju kad j raste, dok su funkcije u integralu brojnika reda veličine f.
- Ipak za koeficijente a_j se očekuje da rapidno padaju.
- Zbog toga se očekuju greške nastale kraćenjem pri računanju skalarnog produkta u brojniku.

Alternativna forma za računanje a_j je

$$a_j = \frac{1}{\|\varphi_j\|_2^2} \left\langle f - \sum_{k=0}^{j-1} a_k \varphi_k, \varphi_j \right\rangle, \quad j = 0, \ldots, m.$$

Uočite da je skalarni produkt “sume” s φ_j jednak nuli zbog ortogonalnosti.

Algoritam računanja koeficijenata

Sljedeći algoritam računa ne samo a_j, nego i aproksimaciju

$$\varphi^{(m)}(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x).$$

Računanje koeficijenata

$$
\begin{array}{l}
\texttt{s[-1] = 0;} \\
\texttt{za j = 0 do m radi \{} \\
\quad \texttt{a[j] = } \langle \texttt{f - s[j - 1], phi[j]} \rangle \texttt{ / } \|\texttt{phi[j]}\|_2^2\texttt{;} \\
\quad \texttt{s[j] = s[j - 1] + a[j] * phi[j];} \\
\texttt{\};}
\end{array}
$$

Vrijednost $\varphi^{(m)}(x)$ izračunata je u `s[m]`.

Projekcija je opet rješenje

Tvrdimo da je greška aproksimacije $f - \varphi^{(m)}$ okomita na sve linearne kombinacije funkcija φ_k, za $k = 0, \ldots, m$.
Dovoljno je pokazati da je greška okomita na svaki φ_k

$$\begin{aligned} \langle f - \varphi^{(m)}, \varphi_k \rangle &= \left\langle f - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \varphi_k \right\rangle = \langle f - a_k \varphi_k, \varphi_k \rangle \\ &= \langle f, \varphi_k \rangle - a_k \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle \\ &= \langle f, \varphi_k \rangle - \frac{\langle \varphi_k, f \rangle}{\langle \varphi_k, \varphi_k \rangle} \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle = 0. \end{aligned}$$

Dobiveni rezultat ima jednostavno geometrijsko značenje — aproksimacija je ortogonalna projekcija na prostor Φ_m razapet funkcijama φ_k, za $k = 0, \ldots, m$.

Projekcija je opet rješenje (nastavak)

Iz ortogonalnosti

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \psi \rangle = 0,$$

gdje je $\psi \in \Phi_m$ bilo koja linearna kombinacija φ_k, zaključujemo da je i

$$\langle f - \varphi^{(m)}, \varphi^{(m)} \rangle = 0.$$

Tada, zbog okomitosti, možemo pisati

$$\begin{aligned} \|f\|_2^2 = \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \|\varphi^{(m)}\|_2^2 &= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \left\| \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j \right\|_2^2 \\ &= \|f - \varphi^{(m)}\|_2^2 + \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2. \end{aligned}$$

Greška rješenja

Iz prethodne relacije slijedi da se greška aproksimacije može zapisati kao

$$\| f - \varphi^{(m)} \|_2 = \left(\| f \|_2^2 - \sum_{j=0}^{m} |a_j|^2 \, \| \varphi_j \|_2^2 \right)^{1/2}.$$

Ako je zadan niz prostora Φ_m, $m = 0, 1, 2, \ldots$, onda je iz prethodne relacije jasno da je

$$\| f - \varphi^{(0)} \|_2 \geq \| f - \varphi^{(1)} \|_2 \geq \| f - \varphi^{(2)} \|_2 \geq \cdots,$$

što jasno slijedi i iz činjenice da je

$$\Phi_0 \subset \Phi_1 \subset \Phi_2 \subset \cdots.$$

Greška rješenja (nastavak)

Ako je prostora Φ_k beskonačno mnogo, očito je da je norma greške aproksimacije

- monotono padajuća i
- odozdo ograničena s 0,

pa mora konvergirati.

Mora li norma greške konvergirati u 0?

Odgovor je ne! Naravno, nužni i dovoljni uvjet da bi greška konvergirala u nulu je

$$\|f\|_2^2 = \sum_{j=0}^{\infty} |a_j|^2 \, \|\varphi_j\|_2^2,$$

što se odmah čita iz oblika greške.

Ortogonalizacija

Ako je zadan skup funkcija $\hat{\varphi}_j$ koje su linearno nezavisne, ali nisu ortogonalne na nekom intervalu,

- $\hat{\varphi}_j$ ortogonaliziramo korištenjem (modificiranog) Gram–Schmidtovog procesa ortogonalizacije.
- Funkcije φ_j koje razapinju isti prostor kao $\hat{\varphi}_j$ ne treba normirati.

Ortogonalizacija započinje s:

$$\varphi_0 := \hat{\varphi}_0.$$

Zatim, za $j = 1, 2, \ldots$ stavimo

$$\varphi_j := \hat{\varphi}_j - \sum_{k=0}^{j-1} a_k \varphi_k, \quad a_k = \frac{\langle \hat{\varphi}_j, \varphi_k \rangle}{\|\varphi_k\|_2^2}.$$

Tada je φ_j ortogonalan na sve prethodne φ_k, $k = 0, \ldots, j-1$.

Primjer

Primjer. Nađite ortogonalnu bazu za prostor razapet funkcijama $1, x, x^2$ na intervalu $[-1, 1]$ s težinskom funkcijom $w = 1$.

Rješenje. Skalarni produkt funkcija u i v definiran je s

$$\langle u, v\rangle = \int_{-1}^{1} w(x)u(x)v(x)\,dx = \int_{-1}^{1} u(x)v(x)\,dx.$$

Prva funkcija u ortogonalnoj bazi jednaka je prvoj zadanoj funkciji,

$$\varphi_0(x) = 1.$$

Primjer (nastavak)

Sada je

$$\langle x, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot 1 \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot 1 \, dx = x \, \Big|_{-1}^{1} = 2,$$

pa je

$$a_0 = \frac{\langle x, \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{0}{2} = 0.$$

Odatle odmah dobivamo

$$\varphi_1(x) = x - a_0 \cdot 1 = x.$$

Primjer (nastavak)

Za ortogonalni polinom stupnja 2 treba izračunati a_0 i a_1

$$\langle x^2, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} x^2 \cdot 1 \, dx = \frac{x^3}{3} \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3},$$

$$\langle x^2, \varphi_1 \rangle = \int_{-1}^{1} x^2 \cdot x \, dx = (\text{neparnost}) = 0,$$

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot x \, dx = \frac{2}{3},$$

pa je

$$a_0 = \frac{\langle x^2, \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{\frac{2}{3}}{2} = \frac{1}{3}, \qquad a_1 = \frac{\langle x^2, \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle} = \frac{0}{\frac{2}{3}} = 0.$$

Jednostavni primjer (nastavak)

Odatle je

$$\varphi_2(x) = x^2 - a_1 \cdot x - a_0 \cdot 1 = x^2 - \frac{1}{3}.$$

Primjer. Korištenjem ortogonalnih polinoma izračunatih u prethodnom primjeru, po neprekidnoj metodi najmanjih kvadrata nađite polinome stupnjeva 0 i 1 koji aproksimiraju funkciju

$$f(x) = e^x$$

na intervalu $[-1, 1]$ uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Jednostavni primjer — ortogonalni polinomi

Rješenje problema najmanjih kvadrata je funkcija

$$\varphi^{(m)} = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j, \qquad a_j = \frac{\langle \varphi_j, f \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle}, \quad j = 0, 1.$$

Za račun koeficijenata a_j moramo izračunati

$$\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot 1 \, dx = 2, \qquad \langle \varphi_0, e^x \rangle = \int_{-1}^{1} 1 \cdot e^x \, dx = e - e^{-1},$$

$$\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot x \, dx = \frac{2}{3}, \qquad \langle \varphi_1, e^x \rangle = \int_{-1}^{1} x \cdot e^x \, dx = 2e^{-1}.$$

Jednostavni primjer — ortogonalni polinomi

Odatle odmah izlazi

$$a_0 = \frac{e - e^{-1}}{2} = \mathrm{sh}(1), \quad a_1 = \frac{2e^{-1}}{\frac{2}{3}} = 3e^{-1}.$$

Aproksimacija konstantom je

$$\varphi^{(0)}(x) = \mathrm{sh}(1)\varphi_0(x) = \mathrm{sh}(1) \cdot 1,$$

a polinomom stupnja 1

$$\varphi^{(1)}(x) = \mathrm{sh}(1)\varphi_0(x) + 3e^{-1}\varphi_1(x) = \mathrm{sh}(1) \cdot 1 + 3e^{-1} \cdot x,$$

što se poklapa s već izračunatim rješenjem koje nije koristilo ortogonalne polinome.

Primjeri ortogonalnih familija funkcija

Trigonometrijske funkcije

Trigonometrijske funkcije

$$\{1, \cos x, \cos 2x, \cos 3x, \ldots, \sin x, \sin 2x, \sin 3x, \ldots\}$$

čine ortogonalnu familiju funkcija na intervalu $[0, 2\pi]$ uz težinsku funkciju $w(x) = 1$.

Pokažimo da je to zaista istina. Neka su $k, \ell \in \mathbb{N}_0$. Tada vrijedi

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \sin \ell x \, dx = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \big(\cos(k + \ell)x - \cos(k - \ell)x \big) \, dx.$$

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija

Ako je $k = \ell$, onda je prethodni integral jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - x\right)\Bigg|_0^{2\pi} = \pi.$$

Ako je $k \neq \ell$, onda je jednak

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(k+\ell)x}{k+\ell} - \frac{\sin(k-\ell)x}{k-\ell}\right)\Bigg|_0^{2\pi} = 0.$$

Drugim riječima, vrijedi

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \sin \ell x \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq \ell, \\ \pi, & k = \ell, \end{cases} \qquad k, \ell = 1, 2, \ldots,$$

Ortogonalnost trigonometrijskih funkcija (nast.)

Na sličan način, pretvaranjem produkta trigonometrijskih funkcija u zbroj, možemo pokazati da je

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cdot \cos \ell x \, dx = \begin{cases} 0, & k \neq \ell, \\ 2\pi, & k = \ell = 0, \\ \pi, & k = \ell > 0, \end{cases} \qquad k, \ell = 0, 1, \ldots,$$

te, također, da je

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \cdot \cos \ell x \, dx = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, \quad \ell = 0, 1, \ldots,$$

Fourierov red

Ako periodičku funkciju f osnovnog perioda duljine 2π aproksimiramo redom oblika

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx),$$

onda, množenjem odgovarajućim trigonometrijskim funkcijama i integriranjem, dobivamo

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos kx \, dx, \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \sin kx \, dx.$$

Prethodni red poznat je pod imenom Fourierov red, a koeficijenti kao Fourierovi koeficijenti.

Fourierov red i najmanji kvadrati

Ako Fourierov red odsiječemo za $k = m$ dobijemo tzv. trigonometrijski polinom.

- Taj polinom je najbolja aproksimacija u smislu najmanjih kvadrata za f u klasi trigonometrijskih polinoma stupnja manjeg ili jednakog m.

Uz ortogonalnost trigonometrijskih funkcija (obzirom na integral kao skalarni produkt), postoji diskretna ortogonalnost (integral se zamijeni sumom).

Klasični ortogonalni polinomi

Klasični ortogonalni polinomi — uvod

U praksi najčešće susrećemo pet tipova klasičnih ortogonalnih polinoma.

Prisjetimo se, za polinome

$$\{p_0, p_1, p_2, \ldots, p_n, \ldots\},$$

(indeks polinoma označava stupanj), kažemo da su ortogonalni obzirom na težinsku funkciju w, na $[a, b]$, ako vrijedi

$$\int_a^b w(x)\, p_m(x)\, p_n(x)\, dx = 0, \quad \text{za } m \neq n.$$

Klasični ortogonalni polinomi — uvod (nast.)

Težinska funkcija

- određuje sistem polinoma do na konstantni faktor u svakom od polinoma.
- Izbor takvog faktora zove se još i standardizacija ili normalizacija.

Zajedničke karakteristike ortogonalnih polinoma:

- Ortogonalni polinomi zadovoljavaju tročlanu rekurziju

$$p_{n+1}(x) + \alpha_n(x)p_n(x) + \beta_n(x)p_{n-1}(x) = 0, \quad n = 1, 2, \ldots,$$

s tim da su poznate "početne" funkcije p_0 i p_1, i sve funkcije α_n, β_n, za $n \in \mathbb{N}$.

Klasični ortogonalni polinomi — uvod (nast.)

Zajedničke karakteristike ortogonalnih polinoma (nastavak):

- Oprez. Prethodnu rekurziju zadovoljavaju i mnoge specijalne funkcije koje nisu ortogonalne!
- Nultočke ortogonalnih polinoma uvijek se nalaze unutar intervala $[a, b]$ na kojem su polinomi ortogonalni.

Dokaze za tročlanu rekurziju i nultočke možete naći u skripti. Napravit ćemo ih na početku sljedećeg predavanja.

Čebiševljevi polinomi prve vrste

Čebiševljevi polinomi prve vrste

- označavaju se s T_n,
- ortogonalni su na intervalu $[-1, 1]$
- obzirom na težinsku funkciju

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Relacija ortogonalnosti:

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)\, T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ \pi, & \text{za } m = n = 0, \\ \pi/2, & \text{za } m = n \neq 0. \end{cases}$$

Čebiševljevi polinomi prve vrste (nastavak)

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

$$T_{n+1}(x) - 2xT_n(x) + T_{n-1}(x) = 0,$$

uz start

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

Za njih postoji i eksplicitna formula

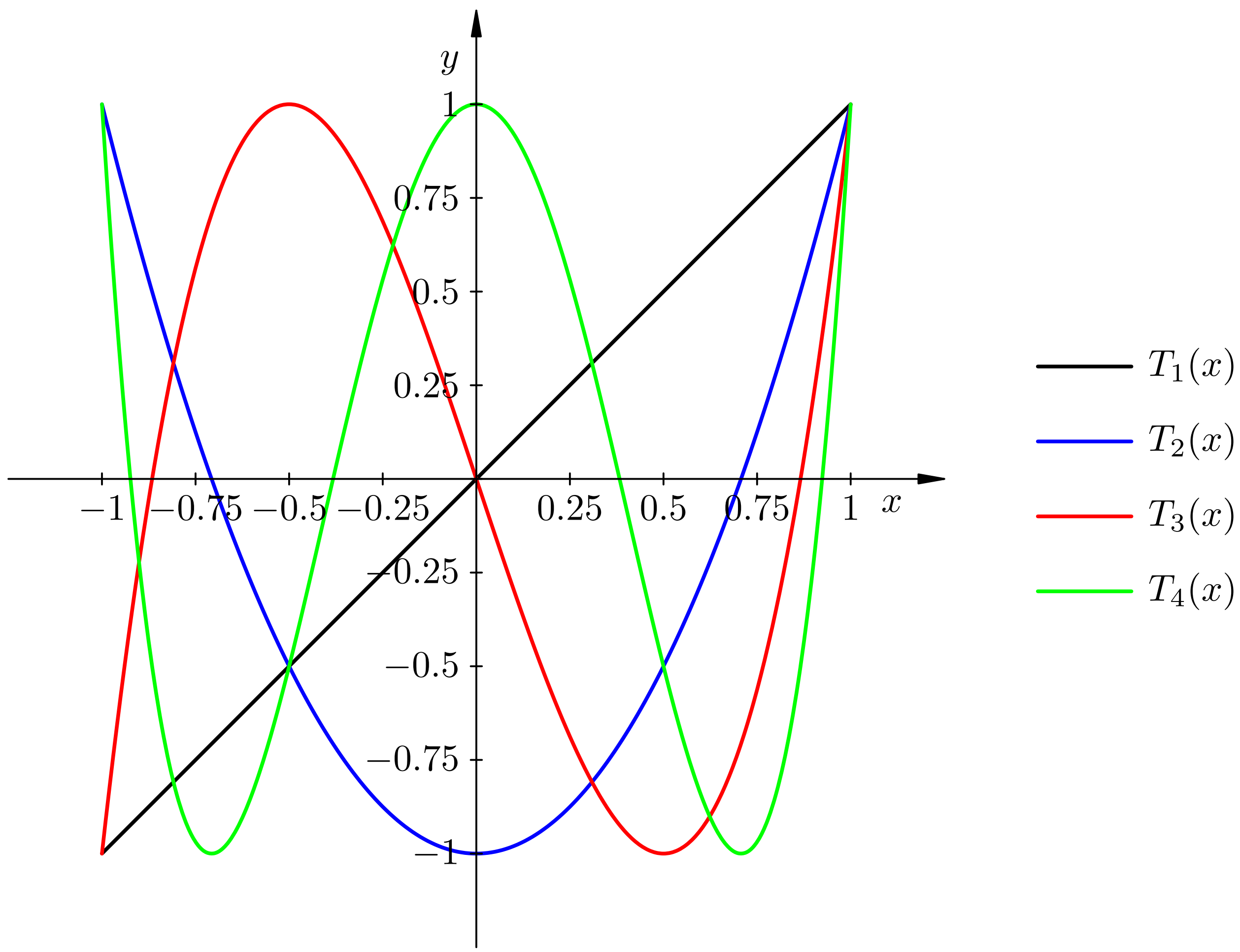
$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

Osim toga, n-ti Čebiševljev polinom prve vrste T_n zadovoljava diferencijalnu jednadžbu

$$(1 - x^2)y'' - xy' + n^2y = 0.$$

Čebiševljevi polinomi prve vrste (nastavak)

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.



Čebiševljevi polinomi prve vrste na $[0,1]$

Katkad se koriste i Čebiševljevi polinomi prve vrste

- transformirani na interval $[0,1]$,
- u oznaci T_n^*.

Dobivaju se korištenjem linearne (preciznije, afine) transformacije

$$[0,1] \ni x \mapsto \xi := 2x - 1 \in [-1,1].$$

Relacija ortogonalnosti postaje

$$\int_0^1 \frac{T_m^*(x)\, T_n^*(x)}{\sqrt{x - x^2}}\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ \pi, & \text{za } m = n = 0, \\ \pi/2, & \text{za } m = n \neq 0, \end{cases}$$

Čebiševljevi polinomi prve vrste na $[0,1]$ (nast.)

a rekurzivna relacija

$$T_{n+1}^*(x) - 2(2x-1)T_n^*(x) + T_{n-1}^*(x) = 0,$$

uz start

$$T_0^*(x) = 1, \quad T_1^*(x) = 2x - 1.$$

Čebiševljevi polinomi druge vrste

Čebiševljevi polinomi druge vrste

- označavaju se s U_n,
- ortogonalni su na intervalu $[-1, 1]$
- obzirom na težinsku funkciju

$$w(x) = \sqrt{1 - x^2}.$$

Relacija ortogonalnosti:

$$\int_{-1}^{1} \sqrt{1 - x^2}\, U_m(x)\, U_n(x)\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ \pi/2, & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Čebiševljevi polinomi druge vrste (nastavak)

Zadovoljavaju istu rekurziju kao i polinomi prve vrste

$$U_{n+1}(x) - 2xU_n(x) + U_{n-1}(x) = 0,$$

uz malo drugačiji start

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x.$$

Za njih postoji i eksplicitna formula

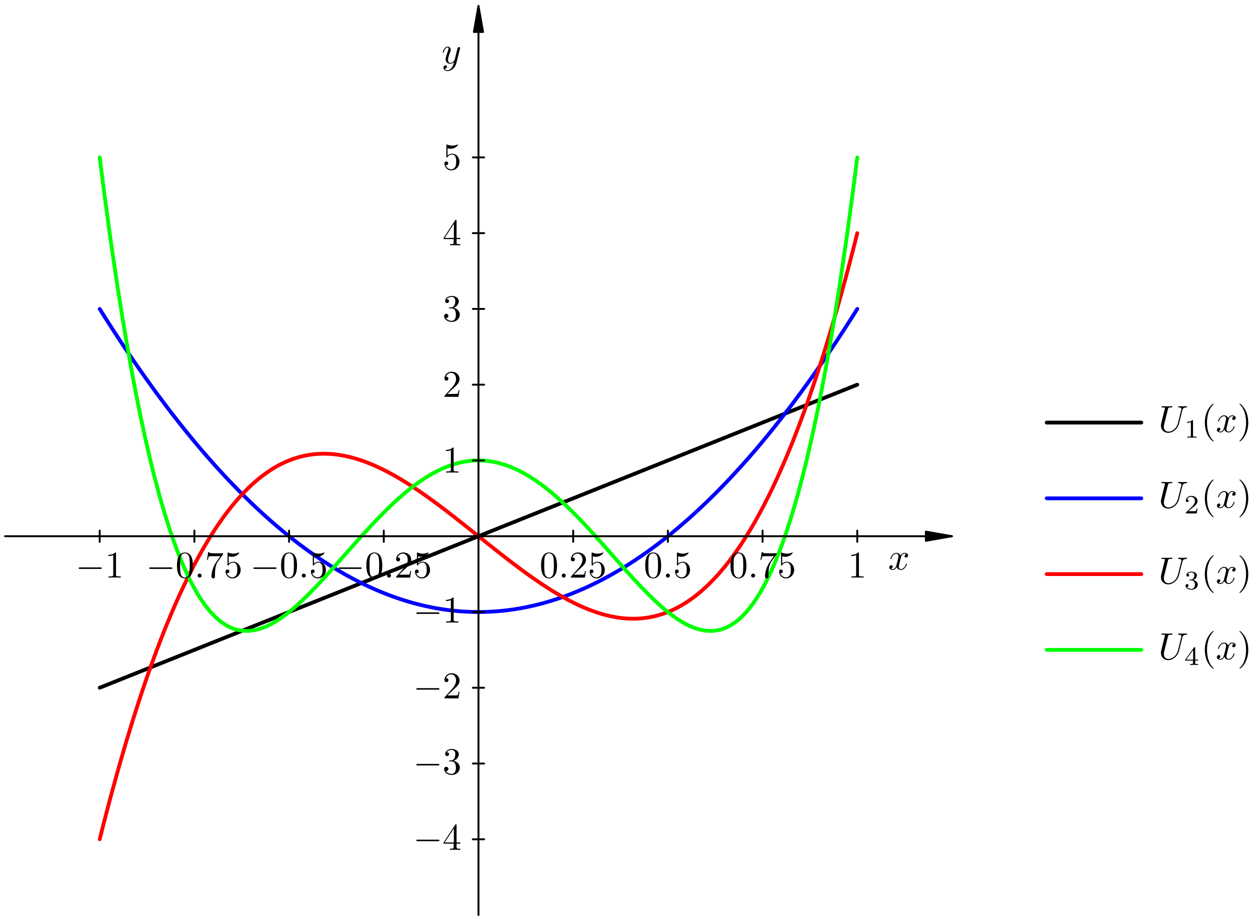
$$U_n(x) = \frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sin(\arccos x)}.$$

n-ti Čebiševljev polinom druge vrste U_n zadovoljava diferencijalnu jednadžbu

$$(1 - x^2)y'' - 3xy' + n(n+2)y = 0.$$

Čebiševljevi polinomi druge vrste (nastavak)

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.



Legendreovi polinomi

Legendreovi polinomi

- označavaju se s P_n,
- ortogonalni su na intervalu $[-1, 1]$
- obzirom na težinsku funkciju

$$w(x) = 1.$$

Relacija ortogonalnosti:

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)\, P_n(x)\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ 2/(2n+1), & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Legendreovi polinomi (nastavak)

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

$$(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0,$$

uz start

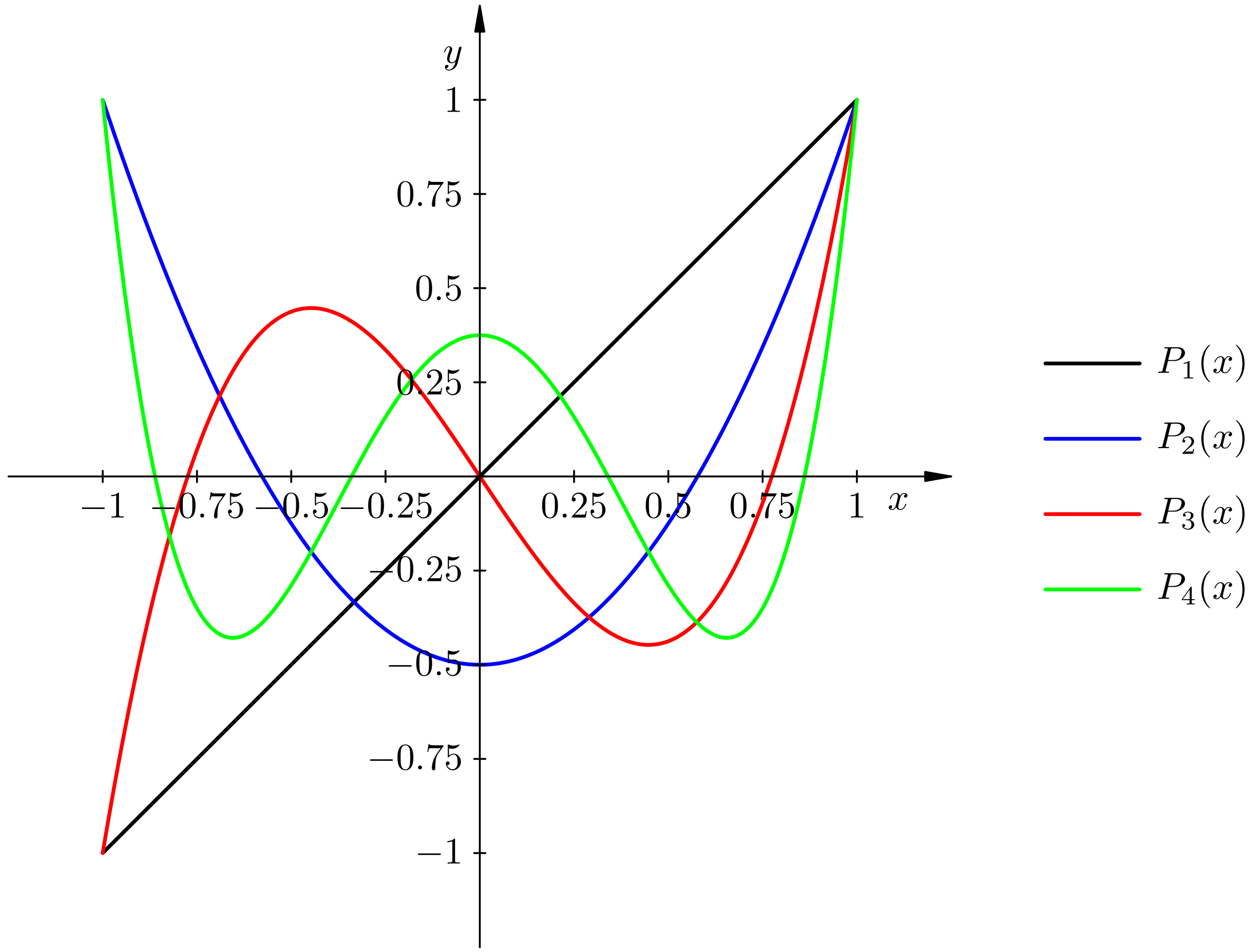
$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x.$$

Osim toga, n-ti Legendreov polinom P_n zadovoljava diferencijalnu jednadžbu

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0.$$

Legendreovi polinomi (nastavak)

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.



Laguerreovi polinomi

Laguerreovi polinomi

- označavaju se s L_n,
- ortogonalni su na intervalu $[0, \infty)$
- obzirom na težinsku funkciju

$$w(x) = e^{-x}.$$

Relacija ortogonalnosti:

$$\int\limits_0^\infty e^{-x} \, L_m(x) \, L_n(x) \, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ 1, & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Laguerreovi polinomi (nastavak)

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

$$(n+1)L_{n+1}(x) + (x - 2n - 1)L_n(x) + nL_{n-1}(x) = 0,$$

uz start

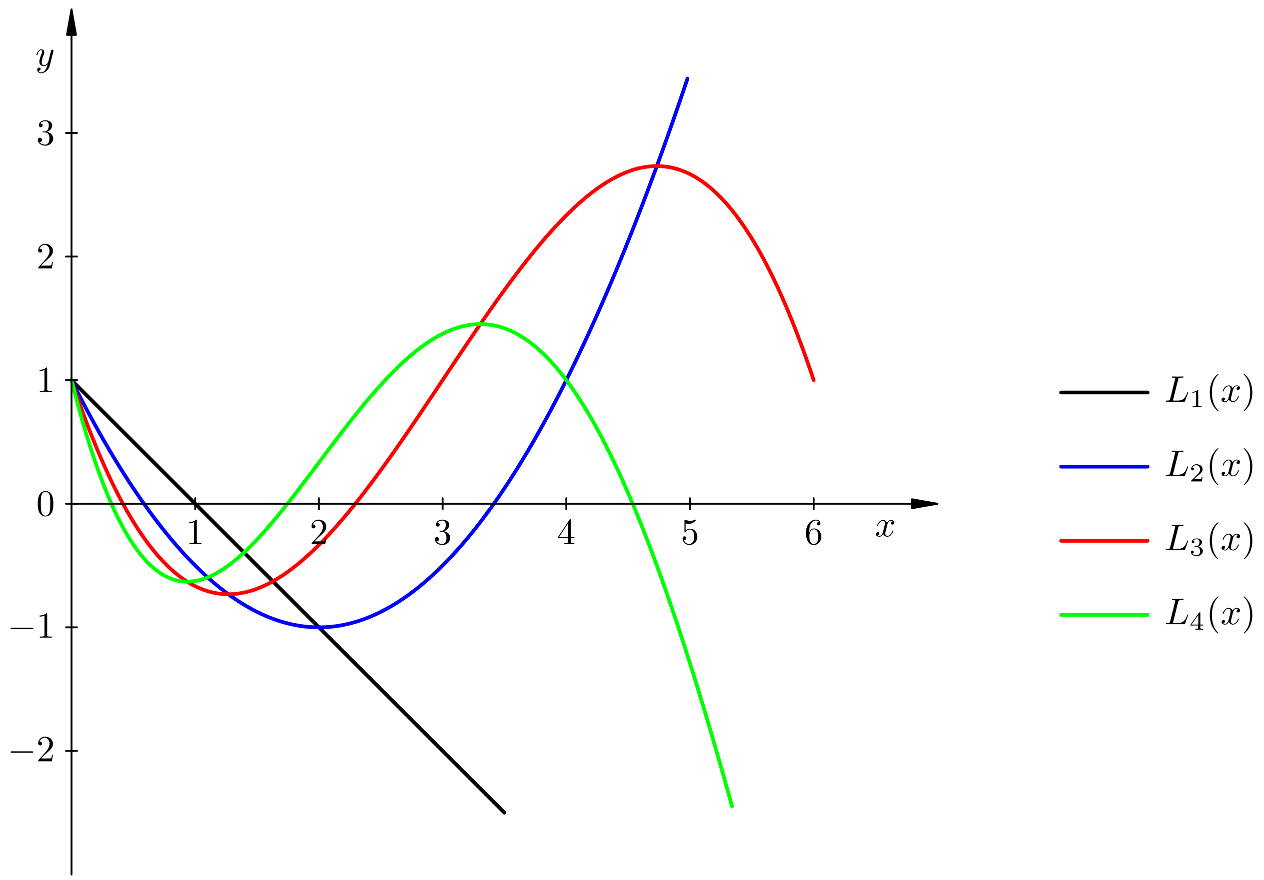
$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x.$$

Osim toga, n-ti Laguerreov polinom L_n zadovoljava diferencijalnu jednadžbu

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0.$$

Laguerreovi polinomi (nastavak)

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.



Laguerreovi polinomi (nastavak)

Često se nailazi na još jednu rekurziju za Laguerreove polinome

$$\widetilde{L}_{n+1}(x) + (x - 2n - 1)\widetilde{L}_n(x) + n^2\widetilde{L}_{n-1}(x) = 0,$$

uz jednaki start

$$\widetilde{L}_0(x) = 1, \quad \widetilde{L}_1(x) = 1 - x.$$

Uspoređivanjem ove i prethodne rekurzije dobivamo da je

$$\widetilde{L}_n(x) = n!\, L_n(x),$$

tj. radi se samo o drugačijoj normalizaciji

$$\int_0^\infty e^{-x}\, \widetilde{L}_m(x)\, \widetilde{L}_n(x)\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ (n!)^2, & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Hermiteovi polinomi

Hermiteovi polinomi

- označavaju se s H_n,
- ortogonalni su na intervalu $(-\infty, \infty)$
- obzirom na težinsku funkciju

$$w(x) = e^{-x^2}.$$

Relacija ortogonalnosti:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, H_m(x)\, H_n(x)\, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ 2^n\, n!\sqrt{\pi}, & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Hermiteovi polinomi (nastavak)

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0,$$

uz start

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x.$$

Osim toga, n-ti Hermiteov polinom H_n zadovoljava diferencijalnu jednadžbu

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0.$$

Hermiteovi polinomi (nastavak)

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.