Numerička matematika
9. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Metoda najmanjih kvadrata:
  - QR faktorizacija i pivotiranje.
  - Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije.
  - Neprekidni problem najmanjih kvadrata.
  - Ortogonalni polinomi.
  - Primjeri ortogonalnih familija funkcija.
  - Svojstva ortogonalnih polinoma.

Informacije

Rezultati prvog kolokvija — komentar:

- Nisu tako "strašni", ali moglo je i puno bolje.
- Oni koji imaju manje od 20 bodova su ozbiljno "ugroženi".

Kolokviji ispituju gradivo cijelog kolegija, a ne samo vježbe!

Informacije — nastavak

Domaće zadaće iz NM — realizacija ide preko web aplikacije. Pogledajte na službeni web kolegija, pod “zadaće”.

- Tamo su početne upute.

Skraćeni link je

`http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php`

Direktni link na aplikaciju za zadaće je

`http://degiorgi.math.hr/nm/`

Kolegij “Numerička matematika” ima demonstratora!

- Sonja Šimpraga — termin je četvrtkom, od 16–18.

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

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

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

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 7 tjedana):

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

Informacije — nastavak

Na molbu Sanje Singer i Vedrana Novakovića, za goste je otvorena i web stranica kolegija Matematika 3 i 4 na FSB-u.

Tamo možete naći dodatne materijale za neke dijelove NM,

- posebno — vježbe i riješene zadatke.

Predavanja su “malo nježnija” od naših. Početna stranica je

http://e-ucenje.fsb.hr/

Zatim potražite “Katedra za matematiku” i onda:

- odete (kliknete) na kolegije Matematika 3 i 4,
- kliknete na gumb “Prijava kao gost”,
- na stranici potražite blok 3 “Numerička matematika”.

Iskoristite! Naravno, smijete pogledati i ostalo!

QR faktorizacija i pivotiranje

Računanje QR faktorizacije

Neka je G zadana matrica tipa $m \times n$, s tim da je $m \geq n$.

Računanje QR faktorizacije matrice G

- provodimo u nizu od n koraka. Ako dozvolimo i $m < n$, broj koraka je $\min\{m, n\}$.

Na početku algoritma označimo $R^{(0)} := G$.

Opišimo kako izgleda k–ti korak algoritma, za $k = 1, \ldots, n$.

- Na početku k-tog koraka trenutna radna matrica je $R^{(k-1)}$.
- U njoj prvih $k - 1$ stupaca već ima gornjetrokutastu formu, tj. nule ispod dijagonale.
- Ti stupci se više neće mijenjati!

Računanje QR faktorizacije

Izgled radne matrice $R^{(k-1)}$ na početku k-tog koraka:

$$\left[\begin{array}{cccc:ccc}
r_{1,1}^{(1)} & r_{1,2}^{(2)} & \cdots & r_{1,k-1}^{(k-1)} & r_{1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{1,n}^{(k-1)} \\
 & r_{2,2}^{(2)} & \cdots & r_{2,k-1}^{(k-1)} & r_{2,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{2,n}^{(k-1)} \\
 & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & r_{k-1,k-1}^{(k-1)} & r_{k-1,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k-1,n}^{(k-1)} \\
 & & & & r_{k,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{k,n}^{(k-1)} \\
 & & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & r_{m,k}^{(k-1)} & \cdots & r_{m,n}^{(k-1)}
\end{array}\right].$$

Računanje QR faktorizacije

U k-tom koraku — u matrici $R^{(k-1)}$

- poništavamo sve elemente k-tog stupca ispod dijagonale, nekom ortogonalnom transformacijom Q_k.
- Tako dobivamo novu radnu matrcu $R^{(k)}$ koja ima jedan "sređeni" stupac više.

Ovu transformaciju možemo prikazati u obliku

$$R^{(k)} = Q_k R^{(k-1)}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Na kraju dobivamo gornju trokutastu matricu $R := R^{(n)}$.

Nije bitno kako računamo Q_k — rotacijama ili reflektorima!

Pivotiranje stupaca u QR faktorizaciji

Slično kao kod LR faktorizacije, i kod QR faktorizacije možemo koristiti pivotiranje.

- Uobičajeno se koristi pivotiranje stupaca

  $$GP = QR,$$

  gdje je P matrica permutacije.
- Ako su x_ℓ, $\ell = k, \ldots, n$, skraćeni stupci, na prvo mjesto dovodi se onaj s najvećom normom, tj. takav da je $\|x_k\|_2$ maksimalna.
- Postupak dovođenja na prvo mjesto ponavljamo u svakom koraku QR faktorizacije sa sve kraćim i kraćim stupcima.

Svrha pivotiranja

Svrha?

- Ako je matrica G bila takva da su joj stupci (skoro) linearno zavisni, onda se QR faktorizacijom s pivotiranjem određuje rang matrice G.

Teorem. Neka je $G \in \mathbb{R}^{m\times n}$ matrica ranga r. Tada postoje $n \times n$ matrica permutacije P, ortogonalna matrica Q reda m te gornja trokutasta matrica R_0 ranga r, tipa $\min\{m,n\} \times n$ tako da vrijedi

$$\|(R_0)_{kk}\|^2 \geq \sum_{i=k}^{j} \|(R_0)_{ij}\|^2, \quad 1 \leq k \leq \min\{m,n\}, \quad k \leq j \leq n.$$

Rješenje matrične formulacije korištenjem QR faktorizacije

Korištenje QR faktorizacije

Već smo najavili da ćemo za rješenje diskretnog problema najmanjih kvadrata koristiti QR faktorizaciju.

Prisjetimo se, ako je A punog stupčanog ranga (tj. vrijedi $\mathrm{rang}(A) = m$), onda QR faktorizacija matrice A ima oblik

$$A = QR = \begin{bmatrix} Q_0 & Q_0^\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_0 R_0.$$

Za početak, ako minimiziramo $\|Ax - b\|_2^2$, minimizirali smo i $\|Ax - b\|_2$. Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, imamo

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2 = \min_x \|Q^T(Ax - b)\|_2^2 = \min_x \|Q^T Ax - Q^T b\|_2^2.$$

Korištenje QR faktorizacije

Za Q uzmimo ortogonalnu matricu iz QR faktorizacije, pa je

$$\begin{aligned}
\min_x \|Q^T(Ax-b)\|_2^2 &= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} x - Q^T b \right\|_2^2 \\
&= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} Q_0^T \\ (Q_0^\perp)^T \end{bmatrix} b \right\|_2^2 \\
&= \min_x \left\| \begin{bmatrix} R_0 x - Q_0^T b \\ 0 - (Q_0^\perp)^T b \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \min_x \left(\|R_0 x - Q_0^T b\|_2^2 + \|(Q_0^\perp)^T b\|_2^2 \right).
\end{aligned}$$

Korištenje QR faktorizacije

Primijetimo da samo prvi član u prethodnom minimumu ovisi o x, a drugi ne.

Budući da je R_0 kvadratna i punog ranga, onda je i regularna, pa postoji jedinstveno rješenje x linearnog sustava

$$R_0 x = Q_0^T b.$$

Time smo prvi član u kvadratu norme napravili najmanjim mogućim, jer je $\|R_0 x - Q_0^T b\|_2^2 = 0$.

Zaključak. Onda vrijedi

$$\min_x \|Ax - b\|_2 = \|(Q_0^\perp)^T b\|_2,$$

a postiže se za vektor x koji je rješenje sustava $R_0 x = Q_0^T b$.

Drugi način

Napomena. Postoji i lakši način da se dođe do prethodnog zaključka, ako znamo da su rješenja problema minimizacije

$$\min_x \|Ax - b\|_2$$

jednaka rješenju sustava normalnih jednadžbi

$$A^T Ax = A^T b.$$

Ako je $A^T A$ nesingularna, što je ekvivalentno tome da A ima puni stupčani rang, onda problem najmanjih kvadrata ima jedinstveno rješenje

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Drugi način

Napravimo skraćenu QR faktorizaciju matrice A

$$A = Q_0 R_0.$$

Uvrštavanjem u rješenje x izlazi

$$\begin{aligned} x &= (A^T A)^{-1} A^T b = ((Q_0 R_0)^T Q_0 R_0)^{-1} (Q_0 R_0)^T b \\ &= (R_0^T Q_0^T Q_0 R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b = (R_0^T R_0)^{-1} R_0^T Q_0^T b \\ &= R_0^{-1} (R_0^T)^{-1} R_0^T Q_0^T b = R_0^{-1} Q_0^T b, \end{aligned}$$

pa je x, očito, rješenje sustava

$$R_0 x = Q_0^T b.$$

Primjer

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.

Primjer — 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

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

Primjer — linearizacija

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 $w = w(u, v)$.

Primjer — 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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Deriviranjem po sve tri varijable izlazi

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

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

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

Primjer — sustav normalnih jednadžbi

Odavde dobivamo simetrični, pozitivno definitni linearni sustav

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

Primjer — 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

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

Primjer — 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

$$a = 1.768586298,$$

$$b = 1.936999050,$$

$$c = 0.874229442.$$

Primjer — 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!

Primjer — 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

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

Metoda najmanjih kvadrata imat će oblik

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

Primjer — 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

$$\begin{aligned} a &= 1.752205717, \\ b &= 1.938744602, \\ c &= 0.853483129. \end{aligned}$$

Ova rješenja se donekle razlikuju od prethodnih!

Primjer — 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

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

Primjer — QR faktorizacija

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 $M = A^T A$.

Primjer — QR faktorizacija

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.

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Ako napravimo QR faktorizaciju s pivotiranjem stupaca, dobit ćemo $AP = Q_0R_0$, gdje je poredak stupaca $p = [2, 3, 1]$,

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

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

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

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

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

Primjer — QR faktorizacija s pivotiranjem

Pravo rješenje x dobit ćemo kao

$$x = P^T x' = \begin{bmatrix} 1.76858629811 \\ 1.93699905025 \\ 0.87422944194 \end{bmatrix}.$$

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

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

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

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

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 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

pa mora biti ...

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

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

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

Deriviranjem dobivamo

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

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

pa uz oznake

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

treba riješiti sljedeći linearni sustav ...

Jednostavni primjer

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

$$\begin{aligned} s_k &= \int_{-1}^{1} x^k \, dx = \frac{1}{k+1} x^{k+1} \Big|_{-1}^{1} = \frac{1 - (-1)^{k+1}}{k+1} \\ &= \begin{cases} \dfrac{2}{k+1}, & \text{za } k \text{ paran}, \\ 0, & \text{za } k \text{ neparan}. \end{cases} \end{aligned}$$

Jednostavni primjer

Za integrale desne strane dobivamo

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

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

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

Jednostavni primjer

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

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

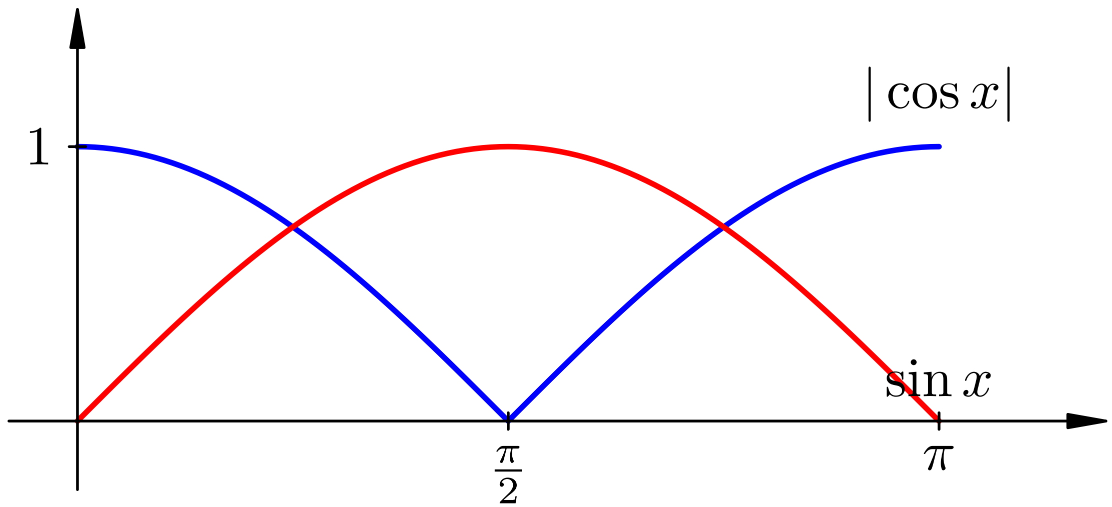
Složeniji primjer

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

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

$$S = \int_0^{\pi} |\cos x| \big(\sin x - p_n(x) \big)^2 \, dx \to \min .$$

Složeniji primjer

Iz uvjeta

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

dobivamo linearni sustav

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

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

Složeniji primjer

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

Nađimo rekurziju za integral

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

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

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

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

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

Složeniji primjer

Još treba izračunati

$$s_0 = \int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} |\sin y|\, dy = 2\int\limits_{0}^{\frac{\pi}{2}} \sin y\, dy = -2\cos y\,\Big|_0^{\frac{\pi}{2}} = 2.$$

Sada je

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

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

$$s_6 = 12\left(\frac{\pi}{2}\right)^5 - 30s_4 = \frac{3}{8}\pi^5 - 24\pi^3 + 720\pi - 1440.$$

Složeniji primjer

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

Za parne indekse k s desne strane imamo

$$t_k := \int_0^{\frac{\pi}{2}} y^k \sin(2y)\,dy = \left\{ \begin{matrix} u = y^k & du = k y^{k-1}\,dy \\ dv = \sin(2y)\,dy & v = -\cos(2y)/2 \end{matrix} \right\}$$

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

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

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

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

Složeniji primjer

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

Za $n = 1$ sustav je:

$$s_0 a_{10} + s_1 a_{11} = t_0$$
$$s_1 a_{10} + s_2 a_{11} = t_1,$$

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

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

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.

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 brojnici reda veličine f.
- 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

```
s[-1] = 0;
za j = 0 do m radi {
  a[j] = ⟨f - s[j - 1], phi[j]⟩ / ‖phi[j]‖₂²;
  s[j] = s[j - 1] + a[j] * phi[j];
};
```

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

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

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

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

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

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

Za ortogonalni polinom stupnja 2 treba izračunati a_0 i a_1

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

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

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

pa je

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

Primjer

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

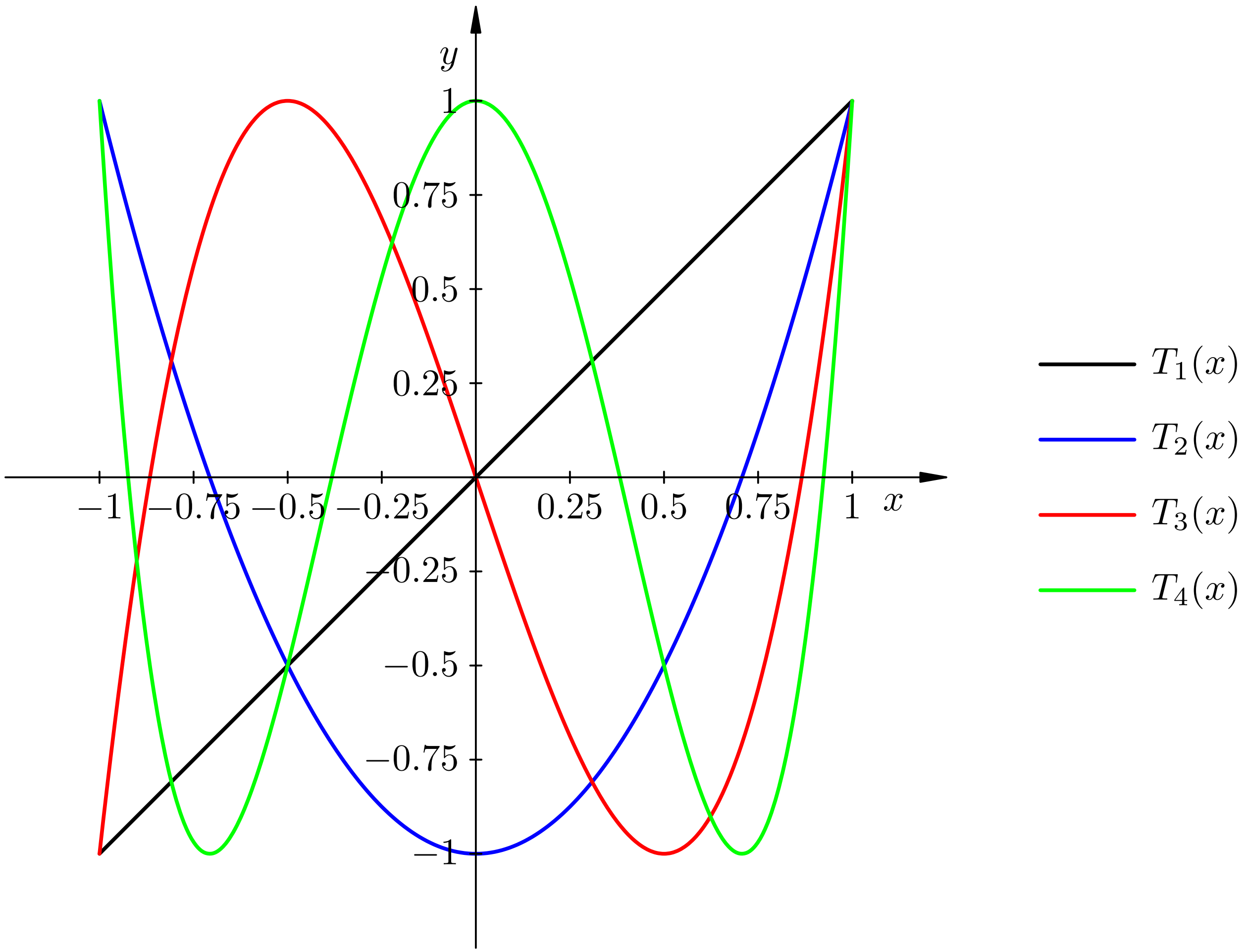
$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

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

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

Čebiševljevi polinomi prve vrste

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 $[0, 1]$

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

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

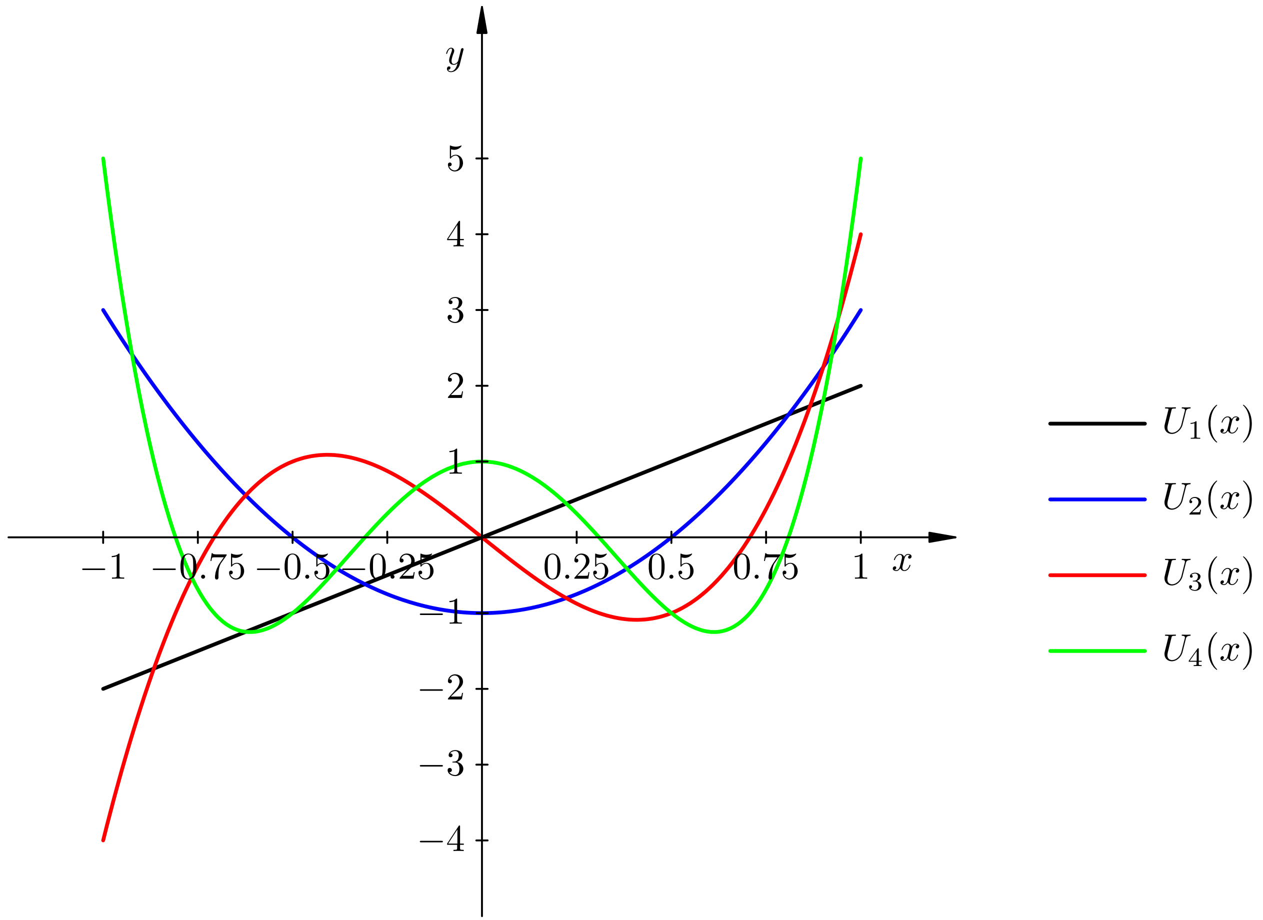
$$U_n(x) = \frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sin(\arccos x)}.$$

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

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

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

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

uz start

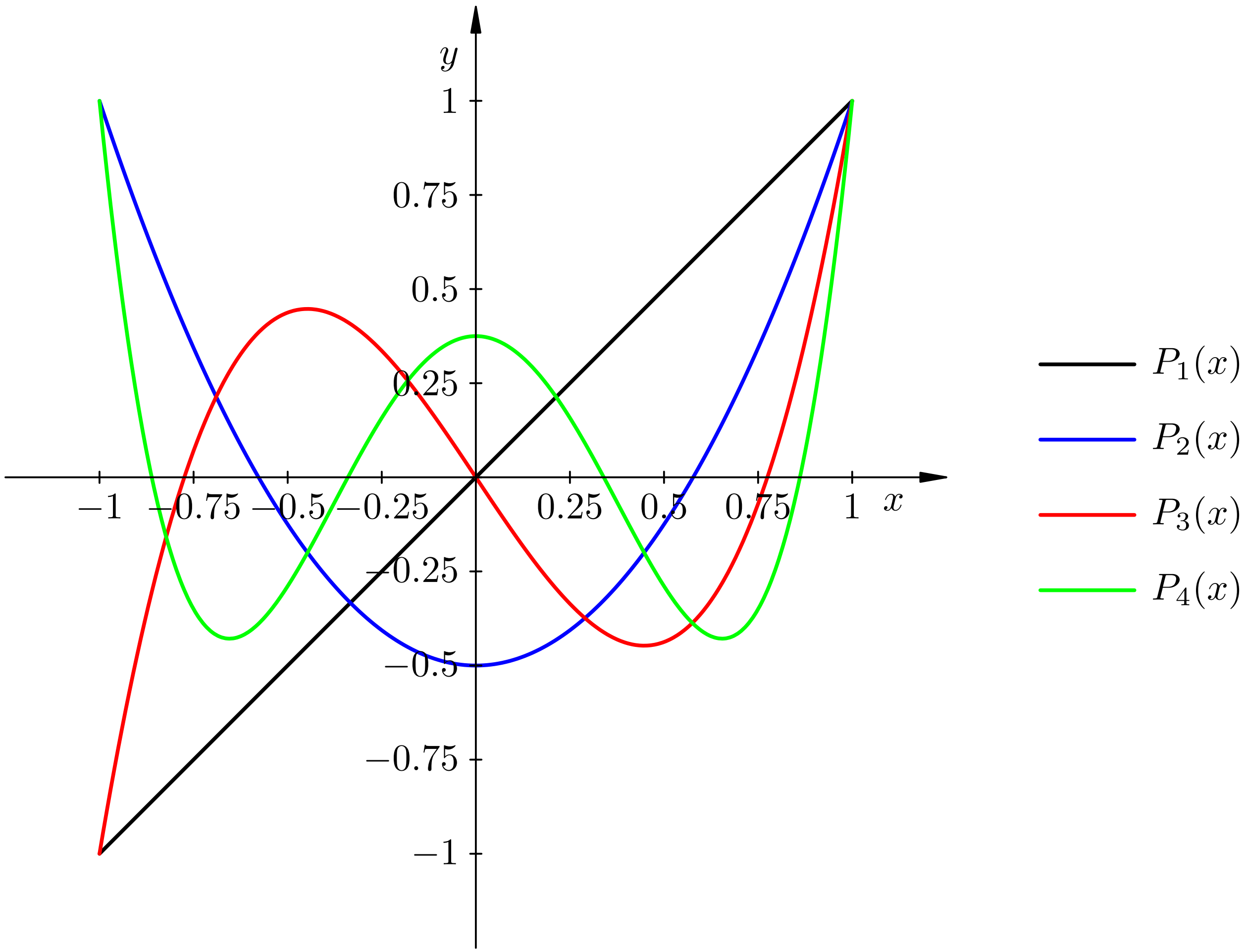
$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x.$$

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

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

Legendreovi polinomi

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:

$$\int_0^\infty e^{-x} \, L_m(x) \, L_n(x) \, dx = \begin{cases} 0, & \text{za } m \neq n, \\ 1, & \text{za } m = n. \end{cases}$$

Laguerreovi polinomi

Oni zadovoljavaju rekurzivnu relaciju

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

uz start

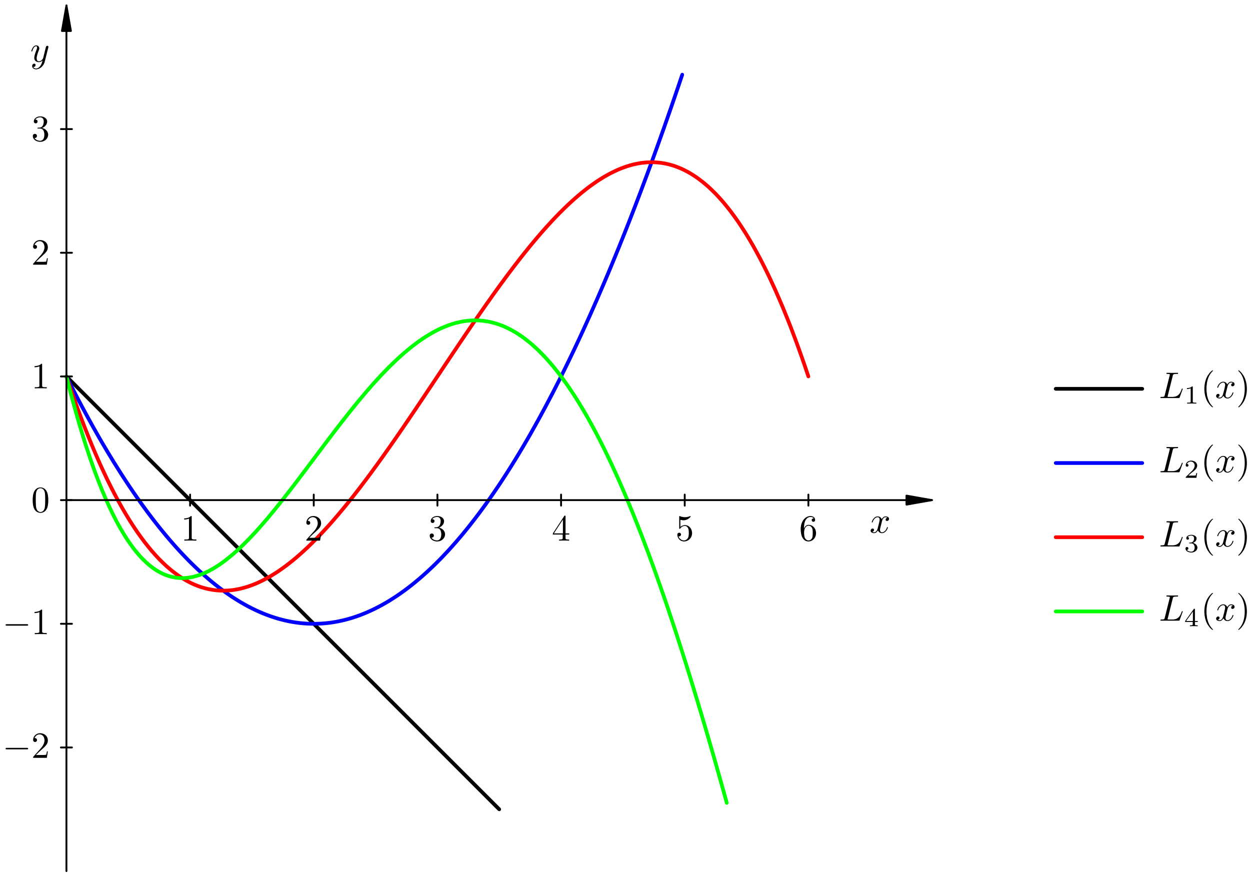
$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x.$$

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

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

Laguerreovi polinomi

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.



Laguerreovi polinomi

Često 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

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

Graf prvih par polinoma izgleda ovako.