Numerička matematika

2. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

Greške — ponavljanje

Pri numeričkom rješavanju nekog problema javljaju se različiti tipovi grešaka:

- greške modela — svođenje realnog problema na neki "matematički" problem,
- greške u ulaznim podacima (mjerenja i sl.),
- greške numeričkih metoda za rješavanje "matematičkog" problema,
- greške "približnog" računanja — obično su to
  - greške zaokruživanja u aritmetici računala.

Greške modela su "izvan" dosega numeričke matematike.

- Spadaju u fiziku, kemiju, biologiju, tehniku, ekonomiju, ...

Greške (nastavak)

Sljedeće tri kategorije (podaci, metoda, računanje) su vezane za “matematički” problem, i

- spadaju u domenu numeričke matematike!

O njima nešto “moramo reći”.

Skica numeričkog rješavanja nekog problema sliči algoritmu:

Zamislite da pojam “algoritam” uključuje

- metodu i
- stvarno računanje rezultata na računalu!

Greške (nastavak)

Sve tri vrste grešaka — podaci, metoda, računanje,

- rezultiraju nekom greškom u konačnom rezultatu!

Ta greška nas “zanima”.

Uočite da greške u ulaznim podacima možemo gledati

- neovisno o metodi ili algoritmu za rješenje problema,
- i tako dolazimo do pojma uvjetovanosti problema.

Za razliku od toga, greške metode i računanja, naravno,

- ovise o metodi, odnosno, algoritmu za rješenje problema.

Greška metode

Gruba podjela numeričkih metoda — prema greškama:

Egzaktne metode

- daju egzaktno rješenje u konačnom broju “koraka”, odnosno, računskih operacija.

Primjer:

- Gaussove eliminacije ili LR faktorizacija za linearne sustave.

Greška takvih metoda je nula, uz egzaktno računanje.

Približne ili neegzaktne metode

- daju približno rješenje problema, u konačnom broju “koraka” (računskih operacija).

Greška metode — približne metode

Mogu biti egzaktne — na nekom limesu!

Primjeri:

- zamjena kompliciranog modela jednostavnijim,
- greške diskretizacije (numerička integracija),
- greške odbacivanja/rezanja, konačne iteracije (rješavanje nelinearnih jednadžbi)

Analiza ovih grešaka spada u **TEORIJU APROKSIMACIJA**.

Pošteno, to je standardni predmet proučavanja numeričke matematike, u širem smislu,

- numerička analiza, funkcionalna analiza, itd.

Time se bavimo veći dio kolegija!

Greške u podacima

Ključno svojstvo problema je

- ovisnost rješenja o greškama ili pertubacijama ulaznih podataka.

To spada u **TEORIJU PERTURBACIJE**.

Da bi problem uopće imao smisla, očekujemo

- neku vrstu neprekidnosti rješenja,
- ili barem ograničenu osjetljivost rješenja na perturbacije.

Inače imamo "loše" postavljen (engl. "ill-posed") problem!

Osjetljivost se obično mjeri tzv. brojem uvjetovanosti problema (engl. "condition number"). Može ih biti i više.

Kako mjeriti grešku?

Prije definicije broja uvjetovanosti, potrebno je odrediti kako ćemo mjeriti greške.

Kad x i $y = f(x)$ nisu brojevi, nego vektori ili matrice, grešku možemo mjeriti na više načina.

- Po svakoj od komponenata vektora/matrica,
  - što je "vrlo precizno",
  - međutim, to je malo previše brojeva.
- Kao neku "ukupnu ili najveću" grešku,
  - što je samo jedan broj — pa se lakše nalazi,
  - iako može biti "neprecizno" (sažeta informacija).

Ovo se radi korištenjem vektorskih i/ili matričnih normi.

Prisjetite se: vektorski prostor na kojem je definirana norma zove se normirani prostor.

Vektorske norme

"Vektorska" norma na vektorskom prostoru V (nad poljem F, gdje je $F = \mathbb{R}$ ili $F = \mathbb{C}$) je

- svaka funkcija $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$

koja zadovoljava sljedeća svojstva:

1. $\|x\| \geq 0, \quad \forall x \in V$,
   a jednakost vrijedi ako i samo ako je $x = 0$,
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \, \|x\|, \quad \forall \alpha \in F, \ \forall x \in V$,
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \quad \forall x, y \in V$
   (nejednakost poznata pod imenom nejednakost trokuta).

Najpoznatije vektorske norme

Kad je vektorski prostor konačnodimenzionalan, $V = \mathbb{R}^n$ ili $V = \mathbb{C}^n$, najčešće se koriste sljedeće tri norme:

- 1-norma ili ℓ_1 norma $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$,
- 2-norma ili ℓ_2 norma ili euklidska norma
$$\|x\|_2 = (x^* x)^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2},$$
- ∞-norma ili ℓ_∞ norma $\|x\|_\infty = \max_{i=1,\dots,n} |x_i|$.

Samo je 2-norma izvedena iz skalarnog produkta.

Norme na prostoru funkcija

Vektorski prostor V ne mora biti konačnodimenzionalan.

Na primjer, norme definirane na vektorskom prostoru $C[a, b]$ neprekidnih funkcija f na segmentu $[a, b]$, definiraju se slično normama na $\mathbb{R}^n$ (suma $\mapsto$ integral):

- L_1 norma $\|f\|_1 = \displaystyle\int_a^b |f(t)|\, dt$,
- L_2 norma $\|f\|_2 = \left(\displaystyle\int_a^b |f(t)|^2\, dt \right)^{1/2}$,
- L_∞ norma $\|f\|_\infty = \max\{\, |f(x)| \mid x \in [a, b]\,\}$.

Ekvivalentnost normi

Može se pokazati da vrijedi sljedeći teorem.

Teorem. Na svakom konačnodimenzionalnom vektorskom prostoru V sve su norme ekvivalentne, tj. za svake dvije norme $\| \ \|_a$ i $\| \ \|_b$, postoje konstante c i C, takve da za sve $v \in V$ vrijedi

$$c\|v\|_a \leq \|v\|_b \leq C\|v\|_a.$$

■

Na primjer,

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n}\,\|x\|_\infty,$$

za sve $x \in \mathbb{R}^n$.

Razlika između teorije i prakse — kad je n ogroman.

Matrične norme

Zamijenimo li u definiciji vektorske norme, čisto formalno, vektor x matricom A, dobivamo matričnu normu.

Matrična norma je svaka funkcija $\| \cdot \| : \mathbb{C}^{m \times n} \to \mathbb{R}$ koja zadovoljava sljedeća svojstva:

1. $\|A\| \geq 0, \quad \forall A \in \mathbb{C}^{m \times n}$,
   a jednakost vrijedi ako i samo ako je $A = 0$,
2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \, \|A\|, \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}, \ \forall A \in \mathbb{C}^{m \times n}$,
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|, \quad \forall A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$.

Tome se često dodaje i zahtjev konzistentnosti

4. $\|AB\| \leq \|A\| \, \|B\|$, kad god je produkt AB definiran.

Matrične norme (nastavak)

Matrične norme nastaju na dva načina.

- Matricu A promatramo kao vektor s $m \times n$ elemenata i za taj vektor koristimo odgovarajuću vektorsku normu.

  Najpoznatija takva norma odgovara vektorskoj 2-normi i zove se euklidska, Frobeniusova, Hilbert–Schmidtova, ili Schurova norma

$$\|A\|_F = (\mathrm{tr}(A^* A))^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2}.$$

- Operatorske norme:

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad \text{ili} \quad \|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

Najpoznatije operatorske matrične norme

Uvrštavanjem odgovarajućih vektorskih normi, dobivamo

- matrična 1-norma, “maksimalna stupčana norma”

$$\|A\|_1 = \max_{j=1,\ldots,n} \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|,$$

- matrična 2-norma, spektralna norma

$$\|A\|_2 = (\rho(A^* A))^{1/2} = \sigma_{\max}(A),$$

  ρ je spektralni radijus, a σ singularna vrijednost matrice,

- matrična ∞-norma, “maksimalna retčana norma”

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,m} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

Matrične norme (nastavak)

Svojstva:

- Za matrične norme, također, vrijedi ekvivalentnost.
- Matrična 2-norma se teško računa u praksi — uobičajeno se procjenjuje korištenjem ostalih normi.
- Za svaku operatorsku normu vrijedi

  $$\|Ay\| \leq \|A\| \, \|y\|,$$

  za svaki vektor y. To se često koristi kod ocjena. Ova formula direktno izlazi iz definicije operatorske norme.
- Unitarna invarijantnost spektralne i Frobeniusove norme: za bilo koje unitarne matrice U (reda m) i V (reda n) vrijedi $\|UAV\|_2 = \|A\|_2, \ \|UAV\|_F = \|A\|_F$.

Uvjetovanost problema

Neformalno rečeno, uvjetovanost problema mjeri

- osjetljivost problema na greške u podacima.

Osnovno svojstvo uvjetovanosti:

- Ne ovisi o konkretnoj numeričkoj metodi za rješenje problema, već samo o problemu.

Svrha uvjetovanosti $=$ daje odgovor na pitanje:

- Koju točnost rezultata možemo očekivati
- pri točnom računanju, bez grešaka zaokruživanja,
- s (malo) pomaknutim — netočnim podacima?

To je upravo ono što nam treba nakon obavljene "obratne" analize greške u natrag nekog algoritma.

Velika uvjetovanost $\longleftrightarrow$ nestabilan problem.

Model problema

Matematički model problema, zovimo ga P:

- za zadani ulaz — podatak $x \in \mathcal{X}$,
- dobivamo izlaz — rezultat $y \in \mathcal{Y}$.

Slikica modela je

$$x \longrightarrow \boxed{P} \longrightarrow y$$

Problem P interpretiramo kao računanje vrijednosti funkcije

$$f : \mathcal{X} \to \mathcal{Y},$$

gdje su $\mathcal{X}$ i $\mathcal{Y}$ odgovarajući matematički objekti. Na primjer, vektorski prostori, a vrlo često su i normirani prostori (treba nam mjera za grešku). Najčešće, $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$, $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^n$.

Uvjetovanost problema (nastavak)

Ideja uvjetovanosti:

$$\text{greška u rezultatu} \lesssim \text{uvjetovanost} \cdot \text{greška u podacima}$$

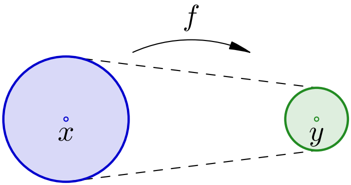
Ovisi o obje vrijednosti: točnoj x i približnoj $\hat{x}$.
Za $m > 1$ ili $n > 1$, ovisi i o tome kako mjerimo greške.

Napomene:

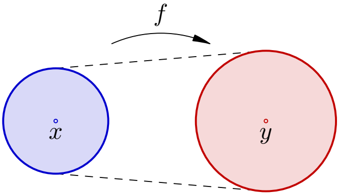
- Obično nas uvjetovanost posebno zanima za male perturbacije (greške, smetnje) podataka.
- Ako je f dovoljno glatka funkcija, možemo koristiti Taylorov razvoj u okolini točnog ulaznog podatka x
- i dobiti procjenu uvjetovanosti preko derivacija!

Uvjetovanost — prigušivač i pojačalo grešaka

Mala uvjetovanost $\longleftrightarrow$ funkcija f je "prigušivač" grešaka:



Velika uvjetovanost $\longleftrightarrow$ funkcija f je "pojačalo" grešaka:



Vrste uvjetovanosti — kratki pregled

Prema vrsti (tipu) greške koju gledamo:

- Apsolutna, relativna — po x, odnosno, po $y = f(x)$.

Prema načinu mjerenja greške (u više dimenzija):

- Po pojedinim komponentama ili po normi cijelog vektora.

Po dozvoljenoj "varijaciji" argumenata x i $\hat{x}$:

- U "fiksnim" točkama — tj. x i $\hat{x}$ su zadani. Nema puno smisla kao informacija o funkciji f, jer su točke fiksne.
- Lokalno oko x — $\hat{x}$ varira u nekoj zadanoj okolini oko x.
- Lokalno u točki x, za male perturbacije — na limesu kad $\hat{x} \to x$, tj. $\Delta x \to 0$, ako limes postoji. Ovisi samo o x.
- Globalno po x — (obično) kao najgori slučaj po svim x iz nekog skupa ili cijelog prostora. Ovisi samo o f.

Apsolutna greška i apsolutna uvjetovanost

Apsolutna, odnosno, relativna uvjetovanost problema mjeri koliko je problem osjetljiv na odgovarajuće promjene polaznih podataka.

- Apsolutna greška: $\|\Delta x\|$, $\|\Delta y\|$, (svaka norma u svom prostoru), gdje je

$$\Delta x = \hat{x} - x, \qquad \Delta y = \hat{y} - y.$$

- Apsolutna uvjetovanost:

$$\kappa_f^{\mathrm{abs}}(x) := \lim_{\varepsilon \to 0} \sup_{\|\Delta x\| \leq \varepsilon} \frac{\|\Delta y\|}{\|\Delta x\|}.$$

Relativna greška i relativna uvjetovanost

U praksi se češće koristi relativna mjera za grešku (na primjer, zbog aritmetike računala).

- Relativna greška (po normi):

$$\delta_x := \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}, \qquad \delta_y := \frac{\|\Delta y\|}{\|y\|}.$$

- Relativna uvjetovanost (po normi):

$$\kappa_f^{\text{rel}}(x) = \kappa_f(x) := \lim_{\varepsilon \to 0} \sup_{\|\Delta x\| \le \varepsilon \|x\|} \frac{\delta_y}{\delta_x}.$$

Problem je dobro uvjetovan u relativnom smislu ako je

- $\kappa_f(x)$ što je moguće manji.

Landauov simbol — red veličine

Za zapis "reda veličine" vrijednosti neke funkcije u okolini neke točke koristimo tzv. Landauov simbol $\mathcal{O}$ ("veliko O").

Definicija. Neka su $g, h : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ funkcije, $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ i $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$ norme i neka je $x_0 \in \mathbb{R}^m$.

Ako postoje konstante $\delta > 0$ i $C > 0$, takve da za sve x vrijedi

$$\|x - x_0\|_{\mathbb{R}^m} \leq \delta \quad \Longrightarrow \quad \|g(x)\|_{\mathbb{R}^n} \leq C\,\|h(x)\|_{\mathbb{R}^n},$$

onda kažemo da je

"funkcija g reda veličine $\mathcal{O}$ od h, kad x teži prema x_0"

i to pišemo ovako

$$g(x) = \mathcal{O}(h(x)) \quad (x \to x_0).$$

Landauov simbol (nastavak)

Napomena. Umjesto znaka "$=$", korektno bi bilo pisati $\in$, tj.

$$g(x) \in \mathcal{O}(h(x)) \quad (x \to x_0).$$

Također, često se piše "veliko" O, umjesto "pisanog" $\mathcal{O}$.

Primjer. Za $m = n = 1$ vrijedi:

$$\begin{aligned} \sin x = \mathcal{O}(x), \quad \sin x &= x + \mathcal{O}(x^3) \quad (x \to 0), \\ x^2 + 3x &= \mathcal{O}(x) \quad (x \to 0), \\ x^2 - x - 6 &= \mathcal{O}(x - 3), \quad (x \to 3). \end{aligned}$$

Zadnje dvije relacije opisuju ponašanje polinoma u okolini jednostruke nultočke, a izlaze iz zapisa

$$x^2 + 3x = x(x + 3), \quad x^2 - x - 6 = (x - 3)(x + 2).$$

Uvjetovanost i Taylorov teorem

Istražimo uvjetovanost problema računanja vrijednosti funkcije $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ u nekoj točki x.

Promatramo ponašanje funkcije f za male perturbacije Δx u okolini točke x. Neka je Δy pripadna perturbacija funkcijske vrijednosti $y = f(x)$, tj.

$$f(x + \Delta x) = y + \Delta y.$$

Neka je f još dva puta neprekidno derivabilna oko x. Korištenjem Taylorovog polinoma stupnja 1 dobivamo da je

$$\begin{aligned} \Delta y &= f(x + \Delta x) - f(x) \\ &= f'(x)\,\Delta x + \frac{f''(x + \vartheta \Delta x)}{2!}\,(\Delta x)^2, \quad \vartheta \in (0, 1). \end{aligned}$$

Apsolutna uvjetovanost i Taylorov teorem

Druga derivacija f'' je neprekidna oko $x \implies f''$ je ograničena oko x, tj. vrijedi

$$f''(x + \vartheta \Delta x) = \mathcal{O}(1),$$

za sve dovoljno male Δx i sve $\vartheta \in [0, 1]$.

Za male perturbacije Δx, apsolutni oblik relacije za grešku je

$$\Delta y = f'(x)\,\Delta x + O((\Delta x)^2),$$

odnosno

$$\frac{|\Delta y|}{|\Delta x|} \leq |f'(x)| + O(|\Delta x|).$$

Odavde slijedi da je apsolutna uvjetovanost funkcije f

$$\kappa_f^{\text{abs}}(x) = |f'(x)|,$$

i za male perturbacije Δx tada vrijedi

$$|\Delta y| \approx |f'(x)||\Delta x|.$$

Relativna uvjetovanost i Taylorov teorem

Ako je $x \neq 0$ i $y \neq 0$, dijeljenjem s y izlazi relativna forma

$$\frac{\Delta y}{y} = \frac{xf'(x)}{f(x)} \cdot \frac{\Delta x}{x} + O\left(\frac{(\Delta x)^2}{y}\right).$$

Ovdje koristimo da su x, $1/x$ i $1/y$ ograničene, pa za sve dovoljno male relativne pertubacije $\Delta x/x$ vrijedi

$$\frac{(\Delta x)^2}{y} = \frac{x^2}{y}\left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2 = O\left(\left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2\right).$$

Zbog toga je

$$\frac{\frac{|\Delta y|}{|y|}}{\frac{|\Delta x|}{|x|}} = \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| + O\left(\frac{|\Delta x|}{|x|}\right).$$

Onda relativnu uvjetovanost funkcije f možemo definirati

$$\kappa_f^{\text{rel}}(x) = \kappa_f(x) = \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right|.$$

Uvjetovanost — posebni slučajevi oko nule

Ako je $x = 0$ i $y \neq 0$, onda relativna greška u x nema smisla (nije ograničena). Zato gledamo apsolutnu grešku u x i relativnu u y. Pripadni tzv. “miješani” broj uvjetovanosti je

$$\kappa_f(x) := \left| \frac{f'(x)}{f(x)} \right|.$$

Analogno, za $x \neq 0$ i $y = 0$, pripadni broj uvjetovanosti je

$$\kappa_f(x) := |xf'(x)|.$$

Ako je $x = y = 0$, onda gledamo samo apsolutne greške, pa je

$$\kappa_f(x) := |f'(x)|.$$

Uvjetovanost — primjer

Primjer. Relativna uvjetovanost funkcije

$$f(x) = \ln x$$

jednaka je

$$\kappa_f(x) = \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| = \left|\frac{1}{\ln x}\right|,$$

što je veliko za $x \approx 1$, kada je $\ln x \approx 0$.

Pitanje: Apsolutna uvjetovanost?

Što u više dimenzija?

Kad je $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$, problem postaje složeniji. Uz oznake

$$x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)^T \in \mathbb{R}^m, \quad y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n,$$

preslikavanje f možemo komponentno zapisati kao

$$y_k = f_k(x_1, x_2, \ldots, x_m), \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

Ponovno, pretpostavljamo da svaka funkcija f_k ima

- neprekidne parcijalne derivacije po svim komponentnim varijablama x_ℓ u točki x, do barem drugog reda.

Najdetaljniju analizu dobivamo gledajući promjene

- svake komponentne funkcije f_k po svakoj varijabli x_ℓ.

Finija analiza — svaki izlaz po svakom ulazu

Promjena koju uzrokuje mala relativna perturbacija varijable x_ℓ u funkciji f_k ista je kao za funkciju jedne varijable.

Relativna uvjetovanost tog problema je

$$\gamma_{k\ell}(x) := \kappa_{f_k,x_\ell}(x) := \left| \frac{x_\ell}{f_k(x)} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell} \right|.$$

Ako to napravimo za sve varijable x_ℓ i za svaku funkciju f_k, dobivamo matricu brojeva uvjetovanosti

$$\Gamma(x) = [\, \gamma_{k\ell}(x) \,] \in \mathbb{R}_+^{n\times m}.$$

Da bismo iz matrice $\Gamma(x)$ dobili jedan broj, koristimo neku normu i definiramo

$$(\mathrm{cond} f)(x) := \|\Gamma(x)\|.$$

Primjer — uvjetovanost aritmetičkih operacija

Zadatak. Osnovne aritmetičke operacije $\circ = +, -, *, /$, na realnim brojevima gledamo kao računanje vrijednosti funkcije $f_\circ : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, gdje je

$$f_\circ(x_1, x_2) = x_1 \circ x_2.$$

Izračunajte pripadne matrice $\Gamma_\circ(x_1, x_2)$ za svaku operaciju $\circ$ i nađite pripadnu relativnu uvjetovanost u ∞–normi.

Rješenje.

$$\|\Gamma_\pm(x_1, x_2)\|_\infty = \frac{|x_1| + |x_2|}{|x_1 \pm x_2|},$$

$$\|\Gamma_*(x_1, x_2)\|_\infty = \|\Gamma_/(x_1, x_2)\|_\infty = 2.$$

To odgovara ranijim rezultatima za (vrlo) male relativne greške u polaznim podacima, tj. na limesu kad $\varepsilon \to 0$!

Grublja analiza — po normi

Grublju analizu — s manje parametara, dobivamo po ugledu na jednodimenzionalnu, promatranjem

- apsolutnih i relativnih perturbacija vektora u smislu norme, pri čemu je $\|\cdot\|$ bilo koja vektorska norma.

Relativnu perturbaciju vektora $x \in \mathbb{R}^m$ “po normi” definiramo kao

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}, \quad \Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2, \ldots, \Delta x_m)^T,$$

Pretpostavljamo da su komponente Δx_ℓ vektora perturbacije Δx male u odnosu na pripadne komponente x_ℓ vektora x. Tada je i $\|\Delta x\|/\|x\|$ malo (obrat ne vrijedi).

Isto napravimo i za vektor $y \in \mathbb{R}^n$, tj. gledamo $\|\Delta y\|/\|y\|$.

Taylorov razvoj komponentnih funkcija

Sada možemo pokušati povezati relativnu perturbaciju od y s relativnom perturbacijom od x.

Za male perturbacije Δx, iz početka Taylorovog razvoja funkcije f_k dobivamo

$$\Delta y_k = f_k(x + \Delta x) - f_k(x) \approx \sum_{\ell=1}^{m} \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell} \Delta x_\ell.$$

Ovu relaciju možemo zapisati u vektorsko-matričnom obliku

$$\Delta y \approx \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x,$$

gdje je $\dfrac{\partial f}{\partial x} = J_f(x)$ Jacobijeva matrica funkcije f u točki x.

Jacobijeva matrica preslikavanja

Jacobijeva matrica $J_f(x)$ sadrži parcijalne derivacije svih komponentnih funkcija po svim varijablama:

$$[\,J_f(x)\,]_{k\ell} = \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell}, \quad k = 1, \ldots, n, \quad \ell = 1, \ldots, m,$$

ili

$$J_f(x) = \frac{\partial f}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_m} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Apsolutne perturbacije po normi

Iz približne jednakosti za male perturbacije

$$\Delta y \approx \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x,$$

uzimanjem bilo koje operatorske ili konzistentne norme izlazi

$$\|\Delta y\| \approx \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x \right\| \lesssim \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\| \cdot \|\Delta x\|.$$

Za operatorske norme, prethodna nejednakost oštra, tj. postoji perturbacija Δx za koju se ona dostiže.

Odavde vidimo da normu Jacobijeve matrice možemo uzeti kao apsolutnu uvjetovanost "po normi".

Uočite: Za $m = n = 1$ dobivamo isto kao i ranije!

Relativne perturbacije po normi

Kao i ranije, ako je $x \neq 0$ i $y \neq 0$, dijeljenjem s $\|y\|$ dobivamo da za relativne perturbacije po normi vrijedi

$$\frac{\|\Delta y\|}{\|y\|} \lesssim \frac{\|x\|}{\|f(x)\|} \cdot \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\| \cdot \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}.$$

To opravdava definiciju relativne uvjetovanosti “po normi” u obliku

$$\kappa_f(x) := \frac{\|x\|}{\|f(x)\|} \cdot \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|.$$

Ova uvjetovanost je mnogo grublja nego $\|\Gamma(x)\|$, jer norma pokušava “uništiti” detalje o komponentama vektora.

Ako su komponente bitno različitih redova veličina, samo najveće po apsolutnoj vrijednosti igraju neku ulogu.

Problem — računanje integrala (Gautschi)

Ispitajmo uvjetovanost problema računanja integrala

$$I_n = \int_0^1 \frac{t^n}{t+5}\,dt,$$

za zadani nenegativni cijeli broj $n \in \mathbb{N} \cup \{0\} = \mathbb{N}_0$.

U ovom obliku, problem je napisan kao preslikavanje iz $\mathbb{N}_0$ u $\mathbb{R}$ i ne "paše" ranijem pojmu problema.

- Domena ovdje nije $\mathbb{R}$, nego $\mathbb{N}_0$ (diskretan skup), pa nema smisla govoriti o neprekidnosti, derivabilnosti i sl.

Zato prvo transformiramo problem.

Rekurzija za integral

Nađimo vezu između I_k i I_{k-1}, s tim da I_0 znamo izračunati

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{t+5}\,dt = \ln(t+5)\,\Big|_0^1 = \ln\frac{6}{5}.$$

Za početak, očito vrijedi da je

$$\frac{t}{t+5} = 1 - \frac{5}{t+5}.$$

Množenjem obje strane s t^{k-1} dobivamo

$$\frac{t^k}{t+5} = t^{k-1} - 5\,\frac{t^{k-1}}{t+5}.$$

Rekurzija za integral (nastavak)

Na kraju, integracijom na segmentu $[0, 1]$ izlazi

$$I_k = \int_0^1 t^{k-1}\,dt - 5I_{k-1} = \frac{1}{k} - 5I_{k-1}, \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

Dakle, I_k je rješenje (linearne, nehomogene) diferencijske jednadžbe prvog reda

$$y_k = -5y_{k-1} + \frac{1}{k}, \quad k = 1, 2, \ldots,$$

uz početni uvjet $y_0 = I_0$.

Ovo gore je dvočlana rekurzivna relacija za y_k (pogledajte priču o rekurzivnim relacijama u Diskretnoj matematici).

Rekurzija unaprijed — zapis funkcijama

Varijacija početnog uvjeta definira niz funkcija f_k, $y_k = f_k(y_0)$.

Zanima nas relativna uvjetovanost funkcije f_n u točki $y_0 = I_0$, u ovisnosti o $n \in \mathbb{N}_0$. Razlog:

- I_0 nije egzaktno prikaziv u računalu,
- umjesto I_0, spremi se aproksimacija $\widehat{I}_0$,
- konačni rezultat — neka aproksimacija $\widehat{I}_n = f_n(\widehat{I}_0)$.

Indukcijom ili supstitucijom unatrag lako se dokaže da vrijedi

$$y_n = f_n(y_0) = (-5)^n y_0 + p_n, \quad p_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{(-5)^{n-k}}{k},$$

gdje je p_n ovisi samo o nehomogenim članovima rekurzije, ali ne i o početnom uvjetu y_0.

Rekurzija unaprijed — relativna uvjetovanost

Relativna uvjetovanost funkcije f_n u točki y_0 je

$$\kappa_{f_n}(y_0) = \left| \frac{y_0 f_n'(y_0)}{y_n} \right| = \left| \frac{y_0(-5)^n}{y_n} \right|.$$

Iz definicije integrala slijedi: I_n monotono padaju po n, čak

$$\lim_{n\to\infty} I_n = 0.$$

Zbrajanjima dobivamo sve manje i manje brojeve! U $y_0 = I_0$ je

$$\kappa_{f_n}(I_0) = \frac{I_0 \cdot 5^n}{I_n} > \frac{I_0 \cdot 5^n}{I_0} = 5^n.$$

Zaključak: f_n je vrlo loše uvjetovana u $y_0 = I_0$, i to tim gore kad n raste.

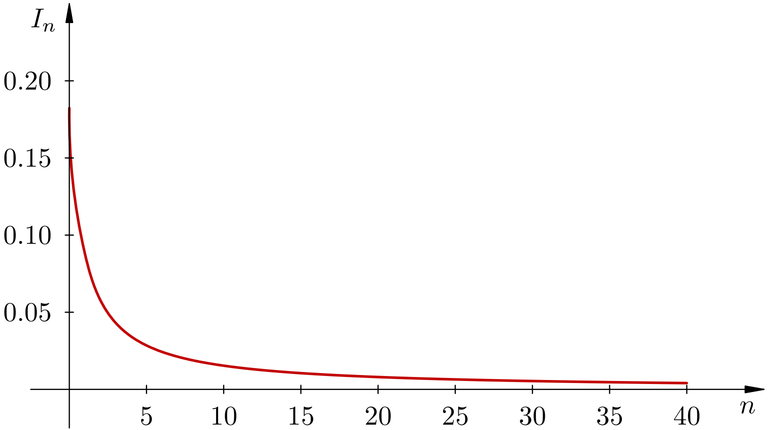
Rekurzija unaprijed — rezultati

Pitanje: Kako se loša uvjetovanost vidi, kad stvarno računamo $f_n(I_0)$ u aritmetici računala?

Algoritam unaprijed, za zadani n (pseudokôd):

```
k = 0;
y = ln( 6.0 / 5.0 );     /* y_0 */
ispisi k, y;
za k = 1 do n radi {
    y = -5.0 * y + 1.0 / k;     /* y_k */
    ispisi k, y;
}
```

Točne vrijednosti integrala I_n



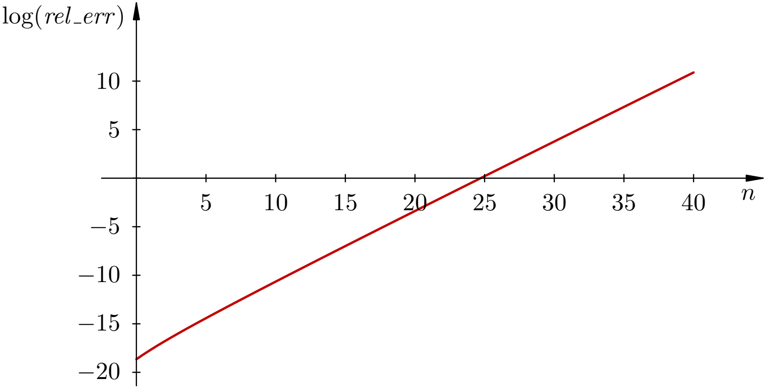
egzaktne/točne vrijednosti integrala I_n

Rekurzija unaprijed — numerički rezultati

Izračunate vrijednosti u tipu `extended` ($u \approx 5.42 \cdot 10^{-20}$).
Crvene znamenke su pogrešne!

n	$\widehat{I}_n$	I_n	rel. greška
0	1.82321556793954626E−1	1.82321556793954626E−1	2.2E−19
1	8.83922160302268688E−2	8.83922160302268689E−2	−2.0E−18
2	5.80389198488656562E−2	5.80389198488656553E−2	1.5E−17
. .	. . .	. . .	. . .
22	7.38035060732479776E−3	7.29738306511145509E−3	1.1E−02
23	6.57650783294122857E−3	6.99134554400794192E−3	−5.9E−02
24	8.78412750196052383E−3	6.70993894662695705E−3	3.1E−01
25	−3.92063750980261915E−3	6.45030526686521474E−3	−1.6E+00
. .	. . .	. . .	. . .
39	−6.32992112791892692E+7	4.18374034921478077E−3	−1.5E+10
40	3.16496056420946346E+8	4.08129825392609613E−3	7.8E+10

Rekurzija unaprijed za I_n — relativne greške



$(\log_{10})$ relativne greške izračunate vrijednosti integrala I_n rekurzijom unaprijed

Rekurzija unaprijed — komentar rezultata

Izračunata vrijednost $\widehat{I}_0$ ima

- vrlo malu relativnu grešku — samo nekoliko u.

Međutim, ta mala greška "eksplodira" vrlo brzo,

- jer se pojačava s faktorom 5 u svakoj iteraciji.

Isto vrijedi i za sve greške zaokruživanja iza toga, samo je ukupni faktor pojačanja malo manji (kasnije su nastale).

Stvarni problem i bitna razlika od primjera "$\sin 24\pi$":

- Ovdje nema velikih omjera brojeva u algoritmu.

Brojevi I_n relativno sporo padaju — omjer I_0 / I_{40} je ispod 50. Po tome, očekivali bismo gubitak točnosti od oko 2 decimale,

- a stvarno imamo užasno i još "nevidljivo" kraćenje.

Rekurzija unatrag — zapis funkcijama

Može li se loša uvjetovanost izbjeći?

- Može — okretanjem rekurzije, unaprijed $\mapsto$ unatrag!

Treba uzeti neki $\nu > n$ i “silazno” računati

$$y_{k-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{k} - y_k\right), \quad k = \nu, \nu - 1, \ldots, n + 1.$$

Ovo, u principu, smijemo koristiti i za $n = 0$, tj. računati y_0.

Problem: Kako izračunati početnu vrijednost y_ν?

Nova rekurzija definira niz funkcija $g_{n,\nu}$, koje vežu y_n i y_ν, uz $\nu > n$, tj.

$$y_n = g_{n,\nu}(y_\nu).$$

Rekurzija unatrag — relativna uvjetovanost

Relativna uvjetovanost za $g_{n,\nu}$ je

$$\kappa_{g_{n,\nu}}(y_\nu) = \left| \frac{y_\nu \, (-1/5)^{\nu-n}}{y_n} \right|, \quad \nu > n.$$

Za $y_\nu = I_\nu$ dobivamo da je $y_n = I_n$, a iz monotonosti I_n slijedi

$$\kappa_{g_{n,\nu}}(I_\nu) = \frac{I_\nu}{I_n} \cdot \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n} < \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n}, \quad \nu > n,$$

što je ispod 1, tj. relativne greške se prigušuju.

- Prigušenje grešaka ide s faktorom $1/5$ po svakoj iteraciji!
- To vrijedi i za greške zaokruživanja napravljene u ranijim iteracijama (u aritmetici računala).

Rekurzija unatrag — početna vrijednost

Ako je $\widehat{I}_\nu$ neka aproksimacija za I_ν, onda za relativne perturbacije vrijedi

$$\left|\frac{\widehat{I}_n - I_n}{I_n}\right| = \kappa_{g_{n,\nu}}(I_\nu) \cdot \left|\frac{\widehat{I}_\nu - I_\nu}{I_\nu}\right| < \left(\frac{1}{5}\right)^{\nu-n} \cdot \left|\frac{\widehat{I}_\nu - I_\nu}{I_\nu}\right|.$$

Zbog linearnosti funkcije $g_{n,\nu}$, ova relacija vrijedi za bilo kakve perturbacije, a ne samo za male.

- Početna vrijednost $\widehat{I}_\nu$ uopće ne mora biti blizu prave I_ν.
- Možemo uzeti $\widehat{I}_\nu = 0$, čime smo napravili relativnu grešku od 100% (tj. 1) u početnoj vrijednosti ...

Rekurzija unatrag — točnost i start ν

- ... a još uvijek dobivamo $\widehat{I}_n$ s relativnom greškom

$$\left|\frac{\widehat{I}_n - I_n}{I_n}\right| < \left(\frac{1}{5}\right)^{\nu-n}, \quad \nu > n.$$

- Povoljnim izborom ν, ocjenu na desnoj strani možemo napraviti po volji malom — ispod tražene točnosti ε.
- Dovoljno je uzeti $\widehat{I}_\nu = 0$ i

$$\nu \geq n + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log 5},$$

a zatim računamo vrijednosti

$$\widehat{I}_{k-1} = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{k} - \widehat{I}_k\right), \quad k = \nu, \nu - 1, \ldots, n + 1.$$

Rekurzija unatrag — rezultati

Pitanje: Kako se dobra uvjetovanost vidi, kad stvarno računamo $g_{n,\nu}(I_\nu)$ u aritmetici računala?

Promatramo rezultate za $\varepsilon = 10^{-19}$!

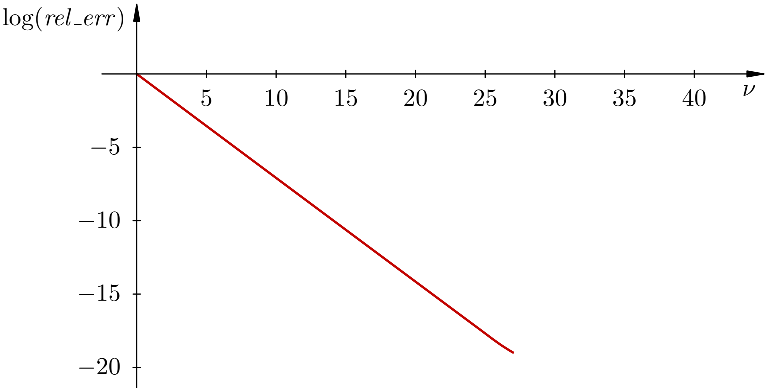
- Početna vrijednost je $\widehat{I_\nu} = 0$.
- Za ovaj ε dobijemo

$$\nu \geq n + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log 5} \approx n + 28.$$

Dakle, "silazno" računamo 28 vrijednosti.

Usput, to su vrijednosti za I_n iz ranije tablice i sve prikazane znamenke su točne (ima ih 18). Dakle, "ništa se ne vidi". Greška je samo nekoliko u, jer je $\varepsilon \approx 2u$ i imamo 3 operacije.

Rekurzija unatrag za I_{40} — ovisno o startu ν



($\log_{10}$) relativne greške izračunate vrijednosti integrala I_{40} obratnom rekurzijom za $I_{40+\nu} = 0$

Rekurzivno računanje — završne napomene

Rekurzije prvog i (posebno) drugog reda se vrlo često koriste u praksi

- ne samo za računanje vrijednosti integrala,
- već za računanje raznih specijalnih funkcija (poput Besselovih) i ortogonalnih polinoma (v. kasnije).

Zato oprez . . .

- treba znati nešto o stabilnosti rekurzije, prije računanja!

“Trik” okretanja rekurzije poznat je kao Millerov algoritam. Prvi puta je iskorišten baš za računanje Besselovih funkcija.

Kvadratna jednadžba

Uzmimo da treba riješiti (realnu) kvadratnu jednadžbu

$$ax^2 + bx + c = 0,$$

gdje su a, b i c zadani, i vrijedi $a \neq 0$.

Matematički gledano, problem je lagan: imamo 2 rješenja

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Numerički gledano, problem je mnogo izazovniji:

- ni uspješno računanje po ovoj formuli,
- ni točnost izračunatih korijena,

ne možemo uzeti “zdravo za gotovo”.

Kvadratna jednadžba — standardni oblik

Za početak, jer znamo da je $a \neq 0$, onda jednadžbu možemo podijeliti s a, tako da dobijemo tzv. “normalizirani” oblik

$$x^2 + px + q = 0, \qquad p = \frac{b}{a}, \quad q = \frac{c}{a}.$$

Po standardnim formulama, rješenja ove jednadžbe su

$$x_{1,2} = \frac{-p \pm \sqrt{p^2 - 4q}}{2}.$$

Međutim, u praksi, stvarno računanje se radi po formuli

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q},$$

s tim da na početku izračunamo i zapamtimo $p/2$ ili $-p/2$.
Ovim postupkom štedimo jedno množenje (ono s 4).

Kvadratna jednadžba — problem

Primjer. Rješavamo kvadratnu jednadžbu $x^2 - 56x + 1 = 0$.

U dekadskoj aritmetici s $p = 5$ značajnih znamenki dobijemo

$$x_1 = 28 - \sqrt{783} = 28 - 27.982 = 0.018000,$$
$$x_2 = 28 + \sqrt{783} = 28 + 27.982 = 55.982.$$

Točna rješenja su

$$x_1 = 0.0178628\ldots \quad \text{i} \quad x_2 = 55.982137\ldots.$$

Apsolutno manji od ova dva korijena — x_1, ima samo dvije točne znamenke (kraćenje), relativna greška je $7.7 \cdot 10^{-3}$!

Apsolutno veći korijen x_2 je “savršeno” točan.

Kvadratna jednadžba — popravak

Prvo izračunamo većeg po apsolutnoj vrijednosti, po formuli

$$x_2 = \frac{-(b + \operatorname{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac})}{2a} = -\frac{p}{2} - \operatorname{sign}(p)\sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q},$$

a manjeg po apsolutnoj vrijednosti, izračunamo iz

$$x_1 \cdot x_2 = \frac{c}{a} = q$$

(Vièteova formula), tj. formula za x_1 je

$$x_1 = \frac{c}{x_2\, a} = \frac{q}{x_2}.$$

Opasnog kraćenja za x_1 više nema!

Kvadratna jednadžba (nastavak)

Ovo je bila samo jedna, od (barem) tri “opasne” točke za računanje. Preostale dvije su:

- “kvadriranje” pod korijenom — mogućnost za overflow. Rješenje — “skaliranjem”.
- oduzimanje u diskriminanti s velikim kraćenjem — nema jednostavnog rješenja. Naime, “krivac” nije aritmetika.
  - To je samo odraz tzv. nestabilnosti problema. Tad imamo dva bliska korijena, koji su vrlo osjetljivi na male promjene (perturbacije) koeficijenata jednadžbe.
  - Na primjer, pomak c = pomak grafa “gore–dolje”. Mali pomak rezultira velikom promjenom korijena!

Neki primjeri izbjegavanja kraćenja

Primjer. Treba izračunati

$$y = \sqrt{x+\delta} - \sqrt{x},$$

gdje su x i δ zadani ulazni podaci, s tim da je $x > 0$,

- a $|\delta|$ vrlo mali broj.

U ovoj formuli, očito, dolazi do velike greške zbog kraćenja — zaokruživanje korijena prije oduzimanja.

Ako formulu "deracionaliziramo" u oblik

$$y = \frac{\delta}{\sqrt{x+\delta} + \sqrt{x}},$$

problema više nema!

Neki primjeri izbjegavanja kraćenja

Primjer. Treba izračunati

$$y = \cos(x + \delta) - \cos x,$$

gdje su x i δ zadani ulazni podaci, s tim da je $|\cos x|$ razumno velik,

- a $|\delta|$ vrlo mali broj.

Opet, dolazi do velike greške zbog kraćenja.

Ako formulu napišmo u “produktnom” obliku

$$y = -2 \sin \frac{\delta}{2} \sin \left(x + \frac{\delta}{2} \right),$$

problema više nema!

Svojstvene vrijednosti i nultočke polinoma

U linearnoj algebri, svojstvene vrijednosti zadane matrice A se računaju "na ruke" kao

- nultočke karakterističnog polinoma te matrice

$$k_A(\lambda) = \det(\lambda I - A) = 0.$$

Prvo, računanjem determinante, nađemo "standardni" oblik karakterističnog polinoma, preko koeficijenata

$$k_A(\lambda) = \lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + c_1\lambda + c_0,$$

a onda tražimo nultočke $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ tog polinoma.

Oprez: Nultočke polinoma mogu biti vrlo osjetljive na male perturbacije u koeficijentima polinoma.

Primjer — Wilkinsonov polinom

Primjer. Uzmimo tzv. Wilkinsonov polinom stupnja $n = 20$,

$$P_{20}(\lambda) = (\lambda - 1) \cdot (\lambda - 2) \cdots (\lambda - 19) \cdot (\lambda - 20).$$

Iz ovog "multiplikativnog" oblika odmah čitamo da su nultočke tog polinoma, redom, prirodni brojevi

$$\lambda_i = i, \quad i = 1, \ldots, 20.$$

Ovaj oblik polinoma — kao produkt linearnih faktora, je

- idealno stabilan na male perturbacije "polaznih" podataka,
- jer su ti podaci upravo nultočke polinoma!

Wilkinsonov polinom — razvijen po potencijama

Kad polinom P_{20} “razvijemo” po potencijama od λ, tj. zapišemo preko koeficijenata c_j, dobivamo

$$P_{20}(\lambda) = \lambda^{20} + c_{19}\lambda^{19} + \cdots + c_1\lambda + c_0,$$

s koeficijentima:

$$\begin{aligned} c_{19} &= -(1 + 2 + \cdots + 19 + 20) = -210, \\ &\vdots \\ c_0 &= (-1) \cdot (-2) \cdots (-19) \cdot (-20) = 20! \end{aligned}$$

Baš to je oblik kojeg bismo, na primjer, izračunali iz pripadne matrice. Poanta:

- Ovdje se nultočke baš i “ne vide” odmah ...

Treba ih izračunati!

Egzaktni koeficijenti Wilkinsonovog polinoma

Točne vrijednosti koeficijenata c_j su

$c_0 =$	$2432\,90200\,81766\,40000$	$c_{10} =$	$1\,30753\,50105\,40395$
$c_1 =$	$-8752\,94803\,67616\,00000$	$c_{11} =$	$-13558\,51828\,99530$
$c_2 =$	$13803\,75975\,36407\,04000$	$c_{12} =$	$1131\,02769\,95381$
$c_3 =$	$-12870\,93124\,51509\,88800$	$c_{13} =$	$-75\,61111\,84500$
$c_4 =$	$8037\,81182\,26450\,51776$	$c_{14} =$	$4\,01717\,71630$
$c_5 =$	$-3599\,97951\,79476\,07200$	$c_{15} =$	$-16722\,80820$
$c_6 =$	$1206\,64780\,37803\,73360$	$c_{16} =$	$533\,27946$
$c_7 =$	$-311\,33364\,31613\,90640$	$c_{17} =$	$-12\,56850$
$c_8 =$	$63\,03081\,20992\,94896$	$c_{18} =$	20615
$c_9 =$	$-10\,14229\,98655\,11450$	$c_{19} =$	-210

Koeficijenti su “jedva” prikazivi u tipu `extended`, a sigurno nisu egzaktno prikazivi u manjim tipovima, poput `double`.

Mala perturbacija koeficijenta c_{19}

U polinomu P_{20} napravimo

- jednu jedinu perturbaciju veličine 2^{-23} u koeficijentu c_{19},

tako da dobijemo polinom

$$\widetilde{P}_{20}(\lambda) = P_{20}(\lambda) - 2^{-23}\lambda^{19}.$$

Pripadna relativna perturbacija koeficijenta c_{19} je

- reda veličine 2^{-30}, odnosno, ispod 10^{-9}.

Reklo bi se — zaista mala perturbacija!

Kako izgledaju nultočke tog perturbiranog polinoma $\widetilde{P}_{20}$, tj.

- jesu li se i nultočke "malo" promijenile?

Nažalost, ne!

Nestabilnost nultočaka Wilkinsonovog polinoma

Egzaktne nultočke polinoma $\widetilde{P}_{20}$, na 9 decimala, su

1.00000 0000	6.00000 6944	$10.09526\,6145 \pm 0.64350\,0904\,i$
2.00000 0000	6.99969 7234	$11.79363\,3881 \pm 1.65232\,9728\,i$
3.00000 0000	8.00726 7603	$13.99235\,8137 \pm 2.51883\,0070\,i$
4.00000 0000	8.91725 0249	$16.73073\,7466 \pm 2.81262\,4894\,i$
4.99999 9928	20.84690 8101	$19.50243\,9400 \pm 1.94033\,0347\,i$

Od 20 realnih nultočaka polinoma P_{20}, dobili smo

- samo 10 realnih — prvih 9 i zadnja,
- i 5 parova konjugirano kompleksnih, s vrlo "nezanemarivim" imaginarnim dijelovima.

Ni govora o "maloj" perturbaciji!

Svojstvene vrijednosti matrica — pouka

Zato se, u praksi, svojstvene vrijednosti matrice A

- nikad (ili gotovo nikad) ne računaju kao
- nultočke karakterističnog polinoma k_A.

Za taj problem postoji gomila raznih numeričkih metoda, ovisno o vrsti matrice i raznim drugim stvarima.

Primjer: računanje sume u aritmetici računala

Primjer. Računamo sumu (zbroj) $s_n = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$, uz pretpostavku da su svi brojevi x_i prikazivi u računalu, tj. vrijedi $x_i = f\ell(x_i)$, za $i = 1, \ldots, n$.

Algoritam. Zbrajamo unaprijed — redom po indeksima:

```
s = x_1;
za i = 2 do n radi
    s = s + x_i;
```

Oznake. Razlikujemo egzaktne i izračunate parcijalne sume:

- Egzaktne parcijalne sume su $s_i = s_{i-1} + x_i = x_1 + \cdots + x_i$,
- Izračunate parcijalne sume su $\hat{s}_i = f\ell(\hat{s}_{i-1} + x_i)$,

za $i = 2, \ldots, n$. Za početnu sumu vrijedi $s_1 = \hat{s}_1 = x_1$.

Greške zaokruživanja u aritmetici računala

Prema IEEE standardu, za svaki izračunati rezultat vrijedi

$$\hat{s}_i = f\ell(\hat{s}_{i-1} + x_i) = (1 + \varepsilon_{i-1})\,(\hat{s}_{i-1} + x_i), \quad i = 2, \ldots, n,$$

s tim da je $|\varepsilon_{i-1}| \leq u$, uz pretpostavku da su svi $\hat{s}_i$ unutar prikazivog raspona (nadalje smatramo da je tako).

Jedino razumno je izraziti završni rezultat $\hat{s}_n$ u terminima

- polaznih vrijednosti $x_1, \ldots, x_n$.

Kad to napravimo i sredimo po x_i, dobivamo

$$\begin{aligned}\hat{s}_n = {} & (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1})\, x_1 + (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1})\, x_2 \\ & + (1 + \varepsilon_2) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1})\, x_3 + \cdots \\ & + (1 + \varepsilon_{n-2})\,(1 + \varepsilon_{n-1})\, x_{n-1} + (1 + \varepsilon_{n-1})\, x_n.\end{aligned}$$

Zapis izračunate sume

Izračunatu sumu $\hat{s}_n$ možemo napisati u obliku

$$\hat{s}_n = (1 + \eta_1)\, x_1 + (1 + \eta_2)\, x_2 + \cdots + (1 + \eta_n)\, x_n,$$

gdje je

$$\begin{aligned}
\eta_1 = \eta_2 &= (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1 \\
\eta_3 &= (1 + \varepsilon_2) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1 \\
&\vdots \\
\eta_{n-1} &= (1 + \varepsilon_{n-2})\,(1 + \varepsilon_{n-1}) - 1 \\
\eta_n &= (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1 = \varepsilon_{n-1}.
\end{aligned}$$

Iz $|\varepsilon_i| \leq u$ dobivamo ocjene (v. “velika” skripta, str. 135–136)

$$|\eta_i| \leq (1 + u)^{n+1-i} - 1 \leq \gamma_{n+1-i} := \frac{(n + 1 - i)u}{1 - (n + 1 - i)u},$$

za $i = 2, \ldots, n$, i $|\eta_1| = |\eta_2| \leq \gamma_{n-1}$ (uz uvjet $(n - 1)u < 1$).

Što ćemo s tim — interpretacija unatrag

Pogled unatrag u domenu — obratna greška, stabilnost unatrag (engl. backward error, backward stability), iz relacije

$$\hat{s}_n = (1 + \eta_1)\, x_1 + (1 + \eta_2)\, x_2 + \cdots + (1 + \eta_n)\, x_n.$$

Izračunati rezultat $\hat{s}_n$ je egzaktna suma

- malo "perturbiranih" polaznih podataka $x_1, \ldots, x_n$,
- s obratnim ili polaznim relativnim greškama $\eta_1, \ldots, \eta_n$.

To kaže da je algoritam zbrajanja stabilan "unatrag".

Pogled unaprijed = teorija perturbacije za greške $\eta_1, \ldots, \eta_n$.
Prava greška izračunate sume je

$$\hat{s}_n - s_n = \eta_1 x_1 + \eta_2 x_2 + \cdots + \eta_n x_n.$$

Ocjena relativne greške unaprijed

Odavde slijedi

$$\begin{aligned}|\hat{s}_n - s_n| &\leq (|x_1| + \cdots + |x_n|) \cdot \max_{i=1,\ldots,n} |\eta_i| \\ &\leq (|x_1| + \cdots + |x_n|) \cdot \gamma_{n-1}.\end{aligned}$$

Za relativnu grešku izračunate sume dobivamo ocjenu

$$\frac{|\hat{s}_n - s_n|}{|s_n|} \leq \frac{|x_1| + \cdots + |x_n|}{|x_1 + \cdots + x_n|} \cdot \gamma_{n-1} = \kappa_{s_n} \cdot \gamma_{n-1},$$

gdje je uvjetovanost

$$\kappa_{s_n} = \frac{|x_1| + \cdots + |x_n|}{|x_1 + \cdots + x_n|}.$$

Zbrajanje brojeva istog predznaka $\Longrightarrow$ $\kappa_{s_n} = 1$.

Poredak zbrajanja za iste predznake

Zbog prijelaza $|\eta_i| \leq \max_{i=1,\ldots,n} |\eta_i|$, prethodna ocjena vrijedi

- za bilo koji algoritam — neovisno o poretku sumanada!

Prave obratne greške η_i, naravno, ne znamo. Međutim, znamo da za ocjene tih grešaka vrijedi:

$$|\eta_1| = |\eta_2| \leq \gamma_{n-1}, \quad |\eta_i| \leq \gamma_{n+1-i}, \quad i = 2, \ldots, n,$$

tj. najveća je ocjena za prva dva sumanda x_1, x_2, i ocjena pada kako indeksi rastu (sumandi kasnije ulaze u zbrajanja).

Kad zbrajamo brojeve istog predznaka (tj. nema kraćenja), najmanju ocjenu greške dobivamo tako da

- sumande x_i poredamo uzlazno po apsolutnoj vrijednosti! Razlog: veće (ocjene) greške množe se sa manjim sumandima.

Općenito o linearnim sustavima — teorija

Neka je $\mathcal{F} = \mathbb{R}$ polje realnih brojeva (može i $\mathcal{F} = \mathbb{C}$).

Zadani su:

- (pravokutna) matrica $A \in \mathcal{F}^{m \times n}$ i vektor $b \in \mathcal{F}^m$.

Tražimo rješenje linearnog sustava

$$Ax = b.$$

Teorem Kronecker–Capelli kaže da linearni sustav $Ax = b$

- ima rješenje $x \in \mathcal{F}^n$ — ako i samo ako je rang matrice A, u oznaci r, jednak rangu proširene matrice $\widehat{A} = [\,A \mid b\,]$,
- rješenje sustava je jedinstveno ako je $r = n$.

Znamo čak i malo više!

Linearni sustavi — teorija (nastavak)

Opće rješenje sustava $Ax = b$ (ako postoji) ima oblik

$$x = x_p + \mathcal{N}(A),$$

gdje je

- x_p jedno partikularno rješenje polaznog sustava $Ax = b$,
- $\mathcal{N}(A)$ je nul-potprostor od A, ili opće rješenje pripadnog homogenog sustava $Ax = 0$.

Iz teorema o rangu i defektu za matricu A

$$r + \dim \mathcal{N}(A) = n,$$

slijedi tvrdnja o jedinstvenosti rješenja:

- $\dim \mathcal{N}(A) = 0 \iff r = n$.

Linearni sustavi — od teorije prema praksi

U praksi se najčešće rješavaju linearni sustavi $Ax = b$ kod kojih je matrica A kvadratna i regularna.

- A kvadratna — znači da je $m = n$ (A je reda n).
- A regularna — znači, na primjer, $\det A \neq 0$.

Iz teorema Kronecker–Capelli onda izlazi da

- rješenje x takvog sustava postoji i jedinstveno je.

$\Longrightarrow$ ima smisla promatrati algoritme za računanje rješenja.

Nema smisla računati nešto što (možda) ne postoji, ili nije jedinstveno (koje od beskonačno mnogo rješenja računamo).

Oprez: To što unaprijed znamo da je A regularna

- ne znači da to vrijedi i numerički!

Kako naći rješenje? — Inverz matrice

Teorija (1). Možemo naći inverz matrice A, tj. matricu A^{-1}

- i slijeva pomnožiti sustav $Ax = b$ matricom A^{-1}.

Dobivamo

$$x = A^{-1}b.$$

Samo je pitanje: Kako ćemo izračunati inverz A^{-1}?

Zaključak: Lakši problem sveli smo na teži — u prijevodu, pali smo s konja na magarca.

Zašto? Jednostavno, zato što je

- j-ti stupac inverza, upravo, rješenje sustava $Ax = e_j$.

Dakle, za n stupaca od A^{-1} treba riješiti n linearnih sustava. A krenuli smo od jednog (sustava)! Ne tako!

Kako naći rješenje? — Cramerovo pravilo

Teorija (2). Iz linearne algebre znate za Cramerovo pravilo:

- j-ta komponenta rješenja sustava je

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A}, \quad j = 1, \ldots, n,$$

- pri čemu je matrica A_j jednaka matrici A,
- osim što je j-ti stupac u A_j zamijenjen desnom stranom b.

Treba još "samo" izračunati determinante — i to $n + 1$ njih.
A kako ćemo to?

"Klasični" odgovor: pa ... recimo, Laplaceovim razvojem.

Jao, jao ... Bilo kako, samo ne tako!

Kako naći rješenje? — Zaboravite Cramera

Zašto? Laplaceovim razvojem dobijemo (kao u definiciji det)

- "samo" $n!$ pribrojnika u svakoj determinanti,
- a svaki pribrojnik je produkt od n faktora.

Prava "sitnica". I tako to, još $n+1$ puta ...

Zaključak: Ako determinante računamo na ovaj način,

- složenost Cramerovog pravila za rješavanje linearnog sustava je eksponencijalna u n (dokažite to!)
- i nikad se ne koristi kao metoda numeričkog rješavanja.

Zaboravite determinante i Cramera — finale

Komentar: Determinante možemo računati i puuuno brže,

- tako da matricu svedemo na trokutasti oblik,
- postupkom sličnim Gaussovim eliminacijama.

Naime, determinanta trokutaste matrice (gornje ili donje) je

- produkt dijagonalnih elemenata,

pa se lako računa!

No, isti postupak eliminacija koristimo i za

- rješavanje "cijelog" linearnog sustava $Ax = b$,
- i to samo jednom, a ne $n + 1$ puta.

Dakle, Cramerovo pravilo se ne isplati ni kad ovako računamo determinante.

Kako naći rješenje? — Gaussove eliminacije!

Najjednostavnija metoda za rješavanje linearnih sustava su

- Gaussove eliminacije, odnosno,
- slične metode svođenja na trokutastu formu.

Ideja: Sustav $Ax = b$ se ekvivalentnim transformacijama svodi na sustav oblika

$$Ux = y,$$

gdje je

- U trokutasta matrica (recimo, gornja),

iz kojeg se lako, tzv. povratnom supstitucijom, nalazi rješenje.

Oznaka U — "upper" (gornja) = gornja trokutasta matrica.

Ekvivalentne transformacije sustava

Ekvivalentne transformacije sustava su

- one koje ne mijenjaju rješenje sustava.

Standardne ekvivalentne transformacije su (v. LA):

- zamjena poretka jednadžbi (nužno!),
- množenje jednadžbe brojem različitim od nule,
  - ova transformacija “skaliranja” se obično ne koristi, ili se vrlo pažljivo koristi — za povećanje stabilnosti,
- množenje jedne jednadžbe nekim brojem i dodavanje drugoj jednadžbi (ključno!),

  $=$ dodavanje linearne kombinacije preostalih jednadžbi, s tim da uzmemo samo jednu preostalu jednadžbu.

Gaussove eliminacije — algoritam

Označimo $A^{(1)} := A$, $b^{(1)} := b$ na početku prvog koraka.

U skraćenoj notaciji, bez pisanja nepoznanica x_i, linearni sustav $Ax = b$ možemo zapisati proširenom matricom, kao

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right].$$

Svođenje na trokutastu formu radimo u $n - 1$ koraka.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

1. korak.

- U prvom stupcu matrice $A^{(1)}$ poništimo sve elemente, osim prvog, tj. sve elemente strogo ispod dijagonale.

Kako se to radi?

Ako je element $a_{11}^{(1)} \neq 0$, onda redom, možemo

- od i-te jednadžbe oduzeti
- prvu jednadžbu pomnoženu s

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, \ldots, n.$$

Pritom se prva (tzv. "ključna") jednadžba ne mijenja.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Prva jednadžba — kao redak proširene matrice $[\, A^{(1)} \mid b^{(1)} \,]$, je

$$\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \end{array}.$$

Polazna i-ta jednadžba — pisana na isti način, za $i = 2, \ldots, n$,

$$\begin{array}{cccc|c} a_{i1}^{(1)} & a_{i2}^{(1)} & \cdots & a_{in}^{(1)} & b_i^{(1)} \end{array}.$$

Nova i-ta jednadžba — pisana na isti način, za $i = 2, \ldots, n$,

$$\begin{array}{cccc|c} a_{i1}^{(2)} & a_{i2}^{(2)} & \cdots & a_{in}^{(2)} & b_i^{(2)} \end{array}.$$

Relacije za nove elemente su

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)},$$

za $j = 1, \ldots, n$, $i = 2, \ldots, n$. Prvi redak ($i = 1$) ostaje isti.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Iz ovih relacija za nove elemente (prepisane još jednom)

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)},$$

vidimo da su multiplikatori

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, \ldots, n.$$

odabrani upravo tako da je $a_{i1}^{(2)} = 0$, za $i = 2, \ldots, n$.

Dakle, nakon prvog koraka dobivamo proširenu matricu $[\, A^{(2)} \mid b^{(2)} \,]$ u kojoj

- prvi stupac ima nule (strogo) ispod dijagonale, tj. gornju trokutastu formu.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Time smo dobili ekvivalentni linearni sustav $A^{(2)}x = b^{(2)}$ s proširenom matricom

$$\left[\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right].$$

Postupak poništavanja možemo nastaviti s drugim stupcem matrice $A^{(2)}$ — na isti način.

Ako je $a_{22}^{(2)} \neq 0$, biramo faktore m_{i2} tako da poništimo sve elemente drugog stupca ispod dijagonale. I tako redom.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Općenito, k–ti korak izgleda ovako, za $k = 1, \ldots, n-1$:

- iz proširene matrice $[\,A^{(k)} \mid b^{(k)}\,]$ dobivamo novu proširenu matricu $[\,A^{(k+1)} \mid b^{(k+1)}\,]$,
- tako da poništimo sve elemente strogo ispod dijagonale u k–tom stupcu matrice $A^{(k)}$, koristeći "ključni" k-ti redak.

Relacije za nove elemente koje treba izračunati u matrici $A^{(k+1)}$ i vektoru $b^{(k+1)}$ su

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

za $i, j = k+1, \ldots, n$. Iz $a_{ik}^{(k+1)} = 0$, multiplikatori m_{ik} su

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, \ldots, n.$$

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Prvih k redaka u $[\, A^{(k+1)} \mid b^{(k+1)} \,]$ ostaju isti kao u $[\, A^{(k)} \mid b^{(k)} \,]$.

Konačno, ako su svi $a_{ii}^{(i)} \neq 0$, za $i = 1, \ldots, n-1$ (ne treba n), završni linearni sustav $[\, A^{(n)} \mid b^{(n)} \,]$, ekvivalentan polaznom, je

$$\left[\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array}\right].$$

Dobili smo gornju trokutastu matricu $U = A^{(n)}$ (nule u strogo donjem trokutu matrice U ne pišemo).

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Uz pretpostavku da je $a_{nn}^{(n)} \neq 0$, ovaj se linearni sustav lako rješava tzv. povratnom supstitucijom (supstitucijom unatrag)

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},$$

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

Pitanje: Ako je A kvadratna i regularna matrica,

- moraju li svi elementi $a_{ii}^{(i)}$ biti različiti od nule?

To je nužno (i dovoljno) da algoritam "prođe" u ovom obliku.

Gaussove eliminacije — primjedba na algoritam

Odgovor: Ne!

Primjer. Linearni sustav $Ax = b$, s proširenom matricom

$$[\,A \mid b\,] = \left[\begin{array}{cc:c} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{array}\right],$$

je regularan ($\det A = -1$), sustav ima jedinstveno rješenje $x_1 = x_2 = 1$,

- a ipak ga ne možemo riješiti Gaussovim eliminacijama,
- ako ne mijenjamo poredak jednadžbi.

Zaključak: Moramo dozvoliti promjenu poretka jednadžbi.