

VI. OBLICZANIE WYZNACZNIKA I ODWRACANIE MACIERZY

Metody obliczania wyznaczników, które polegają na rozwijaniu względem kolumny lub wiersza są praktycznie bezużyteczne, gdy korzystamy z komputera. Na przykład, przy rozwijaniu względem wiersza w celu obliczenia wyznacznika macierzy stopnia n trzeba wykonać $n!$ działań (dla $n = 16$ mamy prawie $5 \cdot 10^{12}$ działań). Dlatego lepiej skorzystać z rozkładu macierzy A na iloczyn LU (rozkład taki można otrzymać na przykład za pomocą algorytmu eliminacji Gaussa, przy czym nie dla każdej macierzy taki rozkład istnieje, gdyż w ogólności mamy $LU = PA$, gdzie P oznacza macierz permutacji macierzy A – zob. p. 4.2).

Jeżeli $A = LU$, to

$$\det A = \det LU = \det L \cdot \det U = \det U,$$

bo elementy na głównej przekątnej macierzy dolnotrójkątnej L są równe 1, czyli $\det L = 1$. Wyznacznik macierzy U (górnortrójkątnej) jest równy iloczynowi elementów na głównej przekątnej i można go wyznaczyć za pomocą $n - 1$ mnożeń.

Obliczona w arytmetyce zmiennopozycyjnej wartość wyznacznika nie jest wyznacznikiem macierzy A , lecz macierzy zaburzonej $A + \Delta A$. Można pokazać, że stosując algorytm Gaussa z częściowym wyborem elementu podstawowego do wyznaczenia rozkładu $A = LU$ mamy

$$\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \leq 8 \cdot \text{eps} \cdot (n^2 - n)$$

dla normy $\|\cdot\|_1$ (norma będąca maksymalną sumą modułów w kolumnie) oraz

$$\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \leq 8 \cdot \text{eps} \cdot (n^2 + n - 2)$$

dla normy $\|\cdot\|_\infty$ (norma będąca maksymalną sumą modułów w wierszu), gdzie eps oznacza dokładność maszynową (zob. p. 1.1). Norma zaburzenia może więc być mała, ale nie oznacza to, że również błąd względny obliczania wartości $\det A$ jest mały.

Przykład 6.1

Niech

$$A = \begin{bmatrix} 2 & \varepsilon \\ 1 & \varepsilon \end{bmatrix},$$

gdzie ε oznacza najmniejszą liczbę dodatnią, którą można zapisać w arytmetyce komputera. Jeśli zastosujemy rozkład $A = LU$, to otrzymamy

$$U = \begin{bmatrix} 2 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon - \frac{\varepsilon}{2} \end{bmatrix}.$$

Obliczenie wartości wyrażenia $\varepsilon - \frac{\varepsilon}{2}$ na komputerze da wartość ε , bo wartość $\frac{\varepsilon}{2}$ w komputerze jest równa 0. Otrzymamy zatem $\det U = 2\varepsilon$, czyli obliczymy $\det A$ ze 100% błędem. Tymczasem

$$\|\Delta A\| = \|LU - A\| = \frac{\varepsilon}{2},$$

skąd wynika, że

$$\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \approx \frac{\varepsilon}{4} \ll 1$$

dla normy $\|\cdot\|_\infty$. ■

Powyższy przykład pokazuje, że małe zaburzenia elementów macierzy mogą spowodować duże zmiany wartości wyznacznika.

Do wyznaczenia macierzy A^{-1} stosuje się zwykle metodę eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu podstawowego. Algorytm składa się z dwóch podstawowych etapów:

- wyznaczamy rozkład LU macierzy A (uwzględniając ewentualne przestawienia wierszy macierzy A),
- rozwiązujemy n razy układ równań

$$LUx^{(i)} = e^{(i)}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

gdzie $e^{(i)}$ oznacza i -ty wersor w przestrzeni $\mathbf{R}^n$, tj.

$$e^{(i)} = [0, \dots, \underset{i\text{-ta pozycja}}{1}, \dots, 0]^T.$$

Rozwiązania $x^{(i)}$ są kolumnami macierzy A^{-1} , przy czym należy ustawić je w kolejności wynikającej z przestawień wierszy macierzy. Można też równocześnie rozwiązywać n układów równań z prawymi stronami równymi $e^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

Przykład 6.2

Wyznaczmy macierz

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}^{-1}.$$

Zgodnie z podanym algorytmem w pierwszym etapie rozkładamy macierz A na iloczyn LU . Najpierw wykonujemy przestawienia wierszy (numery wierszy będziemy zapisywać w oddzielnej kolumnie). Mamy zatem

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix},$$

a po przestawieniu wierszy otrzymujemy

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Stosując metodę Gaussa w wyniku eliminacji pierwszej zmiennej z drugiego i trzeciego równania za pomocą mnożników $l_{21} = \frac{1}{3}$ i $l_{31} = 0$ otrzymujemy macierz (mnożniki zapisujemy w tej macierzy – por. algorytm podany na końcu p. 4.2)

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ \frac{1}{3} & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix},$$

skąd po przestawieniu wierszy drugiego i trzeciego mamy

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ \frac{1}{3} & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Po eliminacji drugiej zmiennej z trzeciego równania za pomocą mnożnika $l_{32} = -\frac{1}{2}$ dostajemy

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Zatem

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

W drugim etapie rozwiązujemy równania

$$LUx^{(i)} = e^{(i)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Dla $i = 1$ równania te mają postać

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} x^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Otrzymamy

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \\ -\frac{1}{6} \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Numer 1 w wektorze przestawień

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

zajmuje trzecią pozycję, więc jako pierwszą kolumnę macierzy A^{-1} należy przyjąć $x^{(3)}$. Numer 2 znajduje się na pozycji pierwszej, więc drugą kolumną macierzy A^{-1} jest $x^{(1)}$. Wreszcie, numer 3 zajmuje drugą pozycję, zatem trzecią kolumną jest $x^{(2)}$. Ostatecznie otrzymujemy

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

■

Zadania

1. Znaleźć rozkład LU macierzy

$$T = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \end{bmatrix}.$$

2. Obliczyć wyznacznik macierzy T z zadania 1.

3. Stosując metodę Gaussa wyznaczyć A^{-1} , jeżeli

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{bmatrix}.$$

VII. APROKSYMACJA

7.1. Wprowadzenie

W zagadnieniu aproksymacji funkcję $F(x)$, określoną tablicą wartości lub o znanej postaci analitycznej, będziemy *aproksymować*, czyli zastępować inną funkcją $f(x)$, zwaną *funkcją aproksymującą* lub *przybliżeniem funkcji* $F(x)$. Przybliżenie powoduje powstanie błędów, zwanych *błędami aproksymacji*. Gdy zbiór, na którym mierzymy błąd aproksymacji, jest zbiorem dyskretnym, wówczas mówimy o aproksymacji *punktowej*, gdy zaś jest to przedział – aproksymację nazywamy *integralną*.

Niech $F(x)$ oznacza funkcję, którą chcemy aproksymować, X – pewną przestrzeń unormowaną (skończenie lub nieskończenie wymiarową), taką że $F(x) \in X$, a X_n niech oznacza n -wymiarową podprzestrzeń liniową przestrzeni X .

Definicja 7.1. *Aproksymacja funkcji* $F(x)$ polega na wyznaczeniu takich współczynników $a_0, a_1, \dots, a_n$ funkcji

$$f(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x), \quad (7.1)$$

gdzie $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ oznaczają funkcje bazowe $(n+1)$ -wymiarowej podprzestrzeni X_{n+1} , aby funkcja $f(x)$ minimalizowała normę

$$\|f(x) - F(x)\|.$$

Aproksymacja określona wzorem (7.1) nazywa się *aproksymacją liniową*. Czasami stosuje się też *aproksymację wymierną* określoną wzorem

$$f(x) = \frac{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x)}{b_0\psi_0(x) + b_1\psi_1(x) + \dots + b_m\psi_m(x)},$$

gdzie funkcje φ_i i ψ_j są elementami tej samej bazy k -wymiarowej podprzestrzeni liniowej ($k = \max(n, m)$), a wielkości a_i i b_j są współczynnikami, które należy wyznaczyć.

7.2. Aproksymacja średniokwadratowa

Dla funkcji $F(x)$ określonej na przedziale $[a, b]$ poszukujemy minimum całki

$$\|F(x) - f(x)\| = \int_a^b w(x)[F(x) - f(x)]^2 dx,$$

gdzie $w(x)$ oznacza funkcję wagową, a dla funkcji $F(x)$ danej na dyskretnym zbiorze argumentów poszukujemy minimum sumy

$$\|F(x) - f(x)\| = \sum_{i=0}^m w(x_i) [F(x_i) - f(x_i)]^2, \quad (7.2)$$

przy czym $w(x_i) \geq 0$ dla $i = 0, 1, \dots, m$.

Niech funkcja $y = F(x)$ przyjmuje na pewnym zbiorze $X = \{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ wartości $y_0, y_1, \dots, y_m$. Będziemy poszukiwali takiej funkcji $f(x)$ przybliżającej daną funkcję $F(x)$, która umożliwi wygładzenie funkcji $F(x)$. Niech $\varphi_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n$, oznacza układ funkcji bazowych podprzestrzeni X_{n+1} . Poszukajmy wielomianu uogólnionego (7.1) będącego najlepszym przybliżeniem średniokwadratowym funkcji $F(x)$ na zbiorze X , tj. funkcji

$$f(x) = \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i(x),$$

gdzie współczynniki a_i są tak określone, by wyrażenie (7.2) było minimalizowane.

Oznaczmy

$$H(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{j=0}^m w(x_j) [F(x_j) - \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i(x_j)]^2 = \sum_{j=0}^m w(x_j) R_j^2, \quad (7.3)$$

gdzie funkcja wagowa $w(x)$ jest ustalona z góry i taka, że $w(x_j) > 0$ dla $j = 0, 1, \dots, m$, a R_j oznacza odchylenie w punkcie x_j . Aby znaleźć współczynniki a_i , obliczamy pochodne funkcji H względem a_i :

$$\frac{\partial H}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (7.4)$$

Z warunku (7.4) otrzymamy wówczas układ $n + 1$ równań liniowych z $n + 1$ niewiadomymi a_i :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial a_k} &= -2 \sum_{j=0}^m w(x_j) [F(x_j) - \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i(x_j)] \varphi_k(x_j) = 0, \\ k &= 0, 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (7.5)$$

zwany *układem normalnym*. Można wykazać, że jeśli układ (7.5) ma wyznacznik różny od zera, to rozwiązanie tego układu daje minimum funkcji H .

Jeżeli jako funkcje bazowe przyjmiemy ciąg jednomianów $\{x^i\}$ ($i = 0, 1, \dots, n$), to wzór (7.5) przyjmie postać (zakładamy, że $w(x) \equiv 1$)

$$\sum_{j=0}^m [F(x_j) - \sum_{i=0}^n a_i x_j^i] x_j^k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Stąd

$$\sum_{i=0}^n a_i \left(\sum_{j=0}^m x_j^{i+k} \right) = \sum_{j=0}^m F(x_j) x_j^k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Oznaczmy

$$\alpha_{ik} = \sum_{j=0}^m x_j^{i+k}, \quad \beta_k = \sum_{j=0}^m F(x_j) x_j^k.$$

Otrzymamy wówczas układ normalny w postaci

$$\sum_{i=0}^n \alpha_{ik} a_i = \beta_k, \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (7.6)$$

Można wykazać, że jeżeli punkty $x_0, x_1, \dots, x_m$ są różne i $n \leq m$, to wyznacznik układu (7.6) jest różny od zera, a więc układ ten ma jednoznaczne rozwiązanie. Jeżeli $n = m$, to wielomian aproksymacyjny $f(x)$ pokrywa się z wielomianem interpolacyjnym dla punktów $x_0, x_1, \dots, x_n$ i wówczas $H = 0$.

Uwaga: W praktyce powinno być $n \ll m$ (stopień wielomianu powinien być znacznie mniejszy od liczby punktów), gdyż wówczas korzystamy z dużej liczby informacji (np. pomiarów) uzyskując jednocześnie prostsze funkcje aproksymujące.

Przykład 7.1 [3]

Niech dane będą wyniki pomiarów, jak w poniższej tabelce.

x	1	3	4	6	8	9	11	14
y	1	2	4	4	5	7	8	9

Poszukajmy zależności między wartościami x i y postaci

$$ax + by = 1, \quad (7.7)$$

przy czym zadanie polega na znalezieniu „najlepszych” współczynników a i b .

Przy tak sformułowanym zadaniu pojawia się problem: czy rozpatrywać odchylenia wartości x , czy wartości y ? Przedyskutujemy obydwa przypadki i pokażemy, że prowadzą one do różnych wyników.

Gdy przyjmiemy, że wartości y są obarczone pewnymi błędami, wówczas minimalizujemy wyrażenie

$$\sum_{j=0}^7 (y_j - \bar{y}_j)^2, \quad (7.8)$$

gdzie, zgodnie z wzorem (7.7),

$$ax_j + b\bar{y}_j = 1, \quad j = 0, 1, \dots, 7.$$

Jeśli natomiast przyjmiemy, że wartości x są obarczone błędami, to powinniśmy minimalizować wyrażenie

$$\sum_{j=0}^7 (x_j - \bar{x}_j)^2, \quad (7.9)$$

przy czym

$$a\bar{x}_j + by_j = 1, \quad j = 0, 1, \dots, 7.$$

W przypadku minimalizacji wyrażenia (7.8) otrzymujemy układ normalny postaci

$$8a_0 + \left(\sum_{j=0}^7 x_j \right) a_1 = \sum_{j=0}^7 y_j,$$

$$\left(\sum_{j=0}^7 x_j \right) a_0 + \left(\sum_{j=0}^7 x_j^2 \right) a_1 = \sum_{j=0}^7 x_j y_j,$$

w którym $a_1 = -a/b$, $a_0 = 1/b$ i stąd

$$a_0 = \frac{\sum_{j=0}^7 y_j \sum_{j=0}^7 x_j^2 - \sum_{j=0}^7 x_j \sum_{j=0}^7 x_j y_j}{n \sum_{j=0}^7 x_j^2 - \left(\sum_{j=0}^7 x_j \right)^2},$$

$$a_1 = \frac{8 \sum_{j=0}^7 x_j y_j - \sum_{j=0}^7 x_j \sum_{j=0}^7 y_j}{n \sum_{j=0}^7 x_j^2 - \left(\sum_{j=0}^7 x_j \right)^2}.$$

Dla danych z tabelki otrzymujemy $a_0 = 6/11$ i $a_1 = 7/11$, a stąd równanie (7.7) ma postać

$$11y - 7x = 6.$$

Minimalizując w taki sam sposób wyrażenie (7.9), otrzymamy równanie

$$2x - 3y = -1.$$

Jak widać, otrzymaliśmy różne równania, chociaż ich wykresy prawie pokrywają się. ■

7.3. Aproksymacja jednostajna

W aproksymacji jednostajnej dla funkcji $F(x)$ określonej na przedziale $[a, b]$ poszukujemy funkcji $f(x)$ dającej najmniejsze maksimum różnicy między $F(x)$ i $f(x)$ na całym przedziale $[a, b]$, czyli

$$\|F(x) - f(x)\| = \sup_{x \in [a, b]} |F(x) - f(x)|.$$

W przypadku aproksymacji funkcji wielomianami i aproksymacji funkcji okresowej wielomianami trygonometrycznymi mamy następujące twierdzenia (ich dowody można znaleźć np. w podręczniku[4]):

Twierdzenie 7.1. (Weierstrassa) *Jeżeli funkcja $F(x)$ jest ciągła na skończonym przedziale $[a, b]$, to dla każdego $\varepsilon > 0$ można dobrać takie n , że jest możliwe utworzenie wielomianu $P_n(x)$ stopnia n , przy czym $n = n(\varepsilon)$, który spełnia nierówność*

$$|F(x) - P_n(x)| < \varepsilon$$

na całym przedziale $[a, b]$.

Twierdzenie 7.2. *Jeżeli funkcja $F(x)$ jest funkcją ciągłą i okresową o okresie 2π , to dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje wielomian trygonometryczny*

$$S_n(x) = a_0 + \sum_{k=1}^n (a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad n = n(\varepsilon),$$

spełniający dla wszystkich wartości x nierówność

$$|F(x) - S_n(x)| \leq \varepsilon.$$

Pierwsze twierdzenie zapewnia, że dowolną funkcję $F(x)$ ciągłą w przedziale $[a, b]$ możemy aproksymować jednostajnie za pomocą wielomianów z dowolnie dużą dokładnością. Jeżeli funkcję $F(x)$ można w przedziale $[a, b]$ rozwinąć w szereg Taylora, to przybliżeniem może być odpowiednio obcięty szereg Taylora, w którym liczba wyrazów jest uzależniona od żądanej dokładności.

Niech funkcja $F(x)$ będzie rozwijalna w otoczeniu $Q(x_0, \delta)$ i określona na przedziale $[a, b]$, przy czym

$$x_0 - \delta < a < b < x_0 + \delta.$$

Rozpatrzmy wielomian

$$W_n(x) = F(x_0) + \frac{F'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{F''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \dots + \frac{F^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n,$$

który jest przybliżeniem funkcji $F(x)$ na przedziale $[a, b]$. Korzystając z wzoru Taylora z resztą Lagrange'a mamy

$$F(x) - W_n(x) = \frac{F^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1},$$

gdzie c oznacza punkt leżący między punktami x i x_0 . Stąd

$$|F(x) - W_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \delta^{n+1},$$

gdzie $|F^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ dla $x \in [a, b]$.

Przykład 7.2

Znajdźmy przybliżenie funkcji $F(x) = \sin x$ na przedziale $[0, \pi/2]$ wielomianem stopnia drugiego. Przyjmijmy, że $x_0 = \pi/4$. Mamy

$$\begin{aligned} W_2(x) &= \sin \frac{\pi}{4} + \cos \frac{\pi}{4} \cdot \left(x - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{1}{2} \sin \frac{\pi}{4} \left(x - \frac{\pi}{4}\right)^2 \\ &= -0,3536x^2 + 1,2625x - 0,0663. \end{aligned}$$

Ponieważ $|F'''(x)| = |-\cos x| \leq 1$ dla $x \in [0, \pi/2]$ i $\delta = \pi/4$, więc

$$|F(x) - W_2(x)| \leq \frac{1}{3!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^3 < 0,081.$$

Zatem maksymalny błąd aproksymacji jest nie większy od 0,081. Na przykład, dla $x = 0$ mamy $W_2(x) \approx -0,0663$, co mieści się w granicach obliczonego błędu. ■

Zadania

1. Dla funkcji $y = F(x)$, której wartości są określone w poniższej tabelce

x	0	1	2	3	4	5	6
y	29	28	27	24	21	21	18

znaleźć wielomian aproksymacyjny stopnia pierwszego.

2. Funkcja $y = F(x)$ jest określona poniższą tabelką (jest to tabelka wartości funkcji $y = \sin x$).

x	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$
y	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1

Znaleźć wielomian aproksymujący stopnia drugiego.

3. Dla funkcji $y = |x|$ znaleźć w przedziale $[-1, 1]$ wielomian aproksymacyjny stopnia trzeciego.