

9 Метода најмањих квадрата

9.1 Решавање преодређених система једначина

Посматрајмо систем једначина

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1m}x_m &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2m}x_m &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nm}x_m &= b_n, \end{aligned}$$

где је $n > m$, тј. број једначина је већи од броја непознатих. Овакав систем једначина зовемо *преодређеним* и он у општем случају није сагласан. Ипак, ако су величине a_{ij} и b_j ($i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$) приближни бројеви, можда се могу одредити приближне вредности x_j , тако да све једначине буду задовољене са извесном грешком.

Једна од метода за решавање преодређених система је *метода најмањих квадрата* и састоји се у налажењу вредности x_j за које је сума квадрата разлика између десних и левих страна једначина у систему минимална, тј.

$$S = \sum_{i=1}^n \left[b_i - \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j \right]^2 \quad \text{је минимално.}$$

Услови минимума величине S су

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = 0, \quad k = 1, \dots, m,$$

или

$$\frac{\partial S}{\partial x_k} = -2 \sum_{i=1}^n \left[b_i - \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j \right] a_{ik} = 0, \quad k = 1, \dots, m.$$

Претходни систем има m једначина и m непознатих и зове се нормалан систем једначина, а полазни систем се зове систем условних једначина.

Пример 9.1. Методом најмањих квадрата решити систем једначина

$$\begin{aligned} x + 2y &= 5 \\ x - y &= -1 \\ 2x + y &= 7. \end{aligned}$$

Прво формирамо суму

$$S = (x + 2y - 5)^2 + (x - y + 1)^2 + (2x + y - 7)^2,$$

па налазимо њен минимум. Стационарне тачке функције S су решења система

$$\begin{aligned} S'_x &= 2(x + 2y - 5) + 2(x - y + 1) + 2(2x + y - 7) \cdot 2 = 0 \\ S'_y &= 2(x + 2y - 5) \cdot 2 + 2(x - y + 1) \cdot (-1) + 2(2x + y - 7) = 0, \end{aligned}$$

тј. $2x + y = 6$, $x + 2y = 6$, па је једина стационарна тачка $(x, y) = (2, 2)$ и она је минимум функције S .

9.2 Апроксимација функција методом најмањих квадрата

Нека је функција $y = f(x)$ дата својим вредностима $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots, y_n = f(x_n)$. Метод најмањих квадрата представља налажење функције $\varphi(x; a_0, a_1, \dots, a_n)$ са непознатим параметрима a_1, \dots, a_n која апроксимира функцију $y = f(x)$ тако да је сума квадрата растојања од $\varphi(x_i; a_0, a_1, \dots, a_n)$ од y_i минимална. Дакле, треба минимизовати функцију

$$S(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^n [y_i - \varphi(x_i; a_0, a_1, \dots, a_n)]^2,$$

па треба решити одговарајући нормални систем једначина

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n \quad (9.1)$$

Ако је $\varphi(x; a_0, \dots, a_n)$ линеарна апроксимациона функција по непознатим параметрима a_0, a_1, \dots, a_n , тј. има облик

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

тада је одговарајући нормални систем једначина (9.1) линеаран.

Пример 9.2. Методом најмањих квадрата наћи линеарну функцију $\varphi(x) = a + bx$ која апроксимира таблично дату функцију

x_i	1	2	3	4
y_i	3.5	3.0	2.8	2.3

Формирамо функцију

$$S = \sum_{i=0}^3 [y_i - (a + bx_i)]^2 = (3.5 - a - b)^2 + (3.0 - a - 2b)^2 + (2.8 - a - 3b)^2 + (2.3 - a - 4b)^2$$

и налазимо њене стационарне тачке, тј. решења система $S'_a = 0$, $S'_b = 0$, тј.

$$-27.1 + 10a + 30b = 0, \quad -11.6 + 4a + 10b = 0,$$

одакле добијамо

$$(a, b) = (3.85, -0.38), \quad \text{па је } \varphi(x) = 3.85 - 0.38x.$$

Са друге стране, ако функција $\varphi(x)$ није линеарна по својим параметрима, одговарајући нормални систем није линеаран, па га треба решити неким сложенијим нумеричким методом, нпр. Њутновим методом за системе. Један покушај бржег приближног одређивања параметара је увођење смена $X = g(x)$, $Y = h(y)$ помоћу којих се нелинеарни проблем своди на линеарни. Нпр. нека је $\varphi(x; a_0, a_1) = a_0 e^{a_1 x}$. Тада логаритмовањем и увођењем смена

$$X = x, \quad Y = \ln y, \quad b_0 = \ln a_0, \quad b_1 = a_1$$

проблем се своди на линеаран јер треба минимизовати функцију

$$\bar{S}(b_0, b_1) = \sum_{i=0}^n [Y_i - b_0 - b_1 X_i]^2.$$

Ипак, на овај начин решавамо други проблем у односу на претходни, тј. у односу на проблем минимизовања функције

$$S(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^n [y_i - a_0 e^{a_1 x_i}]^2$$

и зато добијене вредности могу значајно да одступају.

Пример 9.3. Методом најмањих квадрата одредити параметре a и b тако да функција $\varphi(x) = ae^{bx}$ апроксимира таблично дату функцију

x_i	0	0.25	0.4	0.5
y_i	9.532	7.983	4.826	5.503

Директна примена методе најмањих квадрата би захтевала минимизовање функције

$$S(a, b) = \sum_{i=0}^3 (y_i - ae^{bx_i})^2,$$

тј. решавање система нелинеарних једначина $S'_a = 0$, $S'_b = 0$ (на овај начин добило би се решење $(a, b) = (9.73109, -1.26518)$). Да бисмо избегли нумеричке методе за решавање оваквог система, уведемо смене $X = x$, $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $B = b$, и минимизујмо функцију

$$\bar{S}(A, B) = \sum_{i=0}^3 (Y_i - A - BX_i)^2, \quad (X_i = x_i, Y_i = \ln(y_i)), \quad \text{тј.}$$

$$\bar{S} = (2.25465 - A - 0 \cdot B)^2 + (2.07731 - A - 0.25 \cdot B)^2 + (1.57402 - A - 0.4 \cdot B)^2 + (1.70529 - A - 0.5 \cdot B)^2.$$

Одговарајући нормални систем $\bar{S}'_A = 0$, $\bar{S}'_B = 0$ је линеаран:

$$-15.2226 + 8A + 2.3B = 0, \quad -4.00316 + 2.3A + 0.945B.$$

Његово решење је $(A, B) = (2.28108, -1.31567)$, па је $a = e^A = 9.7872$ и $b = B = -1.31567$.

Сличне трансформација променљивих је могуће су у следећим случајевима:

$$\begin{array}{ll} 1^\circ y = a_0 x^{a_1}, & X = \ln x, Y = \ln y, (b_0, b_1) = (\ln a_0, a_1), \\ 2^\circ y = \frac{1}{a_0 + a_1 x}, & X = x, Y = \frac{1}{y}, (b_0, b_1) = (a_0, a_1), \\ 3^\circ y = \frac{x}{a_0 + a_1 x}, & X = \frac{1}{x}, Y = \frac{1}{y}, (b_0, b_1) = (a_0, a_1), \\ 4^\circ y = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}}, & X = e^{-x}, Y = \frac{1}{y}, (b_0, b_1) = (a_0, a_1). \end{array}$$

10 Нумеричка интеграција

Поступак приближног израчунавања интеграла

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \quad (10.1)$$

на основу низа датих вредности $y_k = f(x_k)$, $x_k \in [a, b]$, $k = 0, 1, \dots, n$, назива се *нумеричка интеграција*.

Формуле за приближно израчунавање интеграла су *квadratурне формуле*. Најчешће се те формуле добијају тако што се подинтегрална функција $f(x)$ замени (на одсечку $[a, b]$ или његовим деловима) једноставнијом функцијом $\varphi(x)$ која је у неком смислу блиска функцији $f(x)$. Нпр. захтева се да се ове две функције поклапају у чворовима, $\varphi(x_i) = f(x_i)$ и тада се добијају интерполационе квадратурне формуле. Ми ћемо за функције $\varphi(x)$ бирати полиноме, а уобичајени избори за $\varphi(x)$ су и тригонометријски полиноми и рационалне функције. Ако је интервал интеграције коначан и на њему нема сингуларитета, може се постићи висока тачност са интерполационим полиномима релативно ниског степена.

Квadratурне формуле су најћешће облика

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad x_k \in [a, b], \quad (10.2)$$

где су A_k коефицијенти или тежине, а x_k чворови квадратурне формуле, $I(f) \approx Q_n(f)$. Ако је број чворова n фиксиран, оваква формула има $2n + 2$ параметра (по $n + 1$ чворова и тежина).

Претпоставимо да су чворови x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, унапред изабрани и нека је

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Лагранжов интерполациони полином за функцију $f(x)$ у тим чворовима је

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} f(x_k)$$

и ако је $M_{n+1} = \max_{[a,b]} |f^{(n+1)}(x)| < \infty$, важи

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x), \quad |R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega(x)|.$$

Даље је

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx,$$

одакле добијамо редом тежине и оцену грешку квадратурне формуле (10.2)

$$A_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

$$|r_n(f)| = |I(f) - \sum_{i=0}^k A_i f(x_i)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b |\omega(x)| dx.$$

Ако су крајеви интервала интеграције уједно и чворови квадратурне формуле, тада је она затвореног типа, а иначе је отвореног типа.

10.1 Алгебарски степен тачности квадратурне формуле. Метод неодређених коефицијената.

Ако је квадратурна формула тачна за све полиноме степена мањег или једнаког од m , а није тачна за x^{m+1} , тада је алгебарски степен тачности те формуле једнак m .

Ако квадратурна формула има $n + 1$ чвор, увек се може постићи да алгебарски степен тачности буде бар n . Можемо користити раније описан начин - интегралити Лагранжов интерполациони полином, чиме се добија интерполациона квадратурна формула одговарајућег степена тачности. Други начин је *метод неодређених коефицијената*, где се тежине A_k у квадратурној формули (10.2) бирају тако да формула буде тачна на скупу $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$, тј. треба да важи

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad \text{за } f(x) \in \{1, x, x^2, \dots, x^n\}.$$

Може се постићи и већи алгебарски степен тачности ако се могу бирати и чворови - највише $2n - 1$ у Гаусовим квадратурним формулама. Ипак, ми ћемо се овде задржати на случају када су чворови унапред изабрани и када се само бирају тежине тако да алгебарски степен тачности буде максималан.

Пример 10.1. Наћи коефицијенте A_0, A_1, A_2 тако да квадратурна формула

$$\int_{-1}^1 f(x) \cos(\pi x/2) dx = A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

има максималан алгебарски степен тачности.

Дата квадратурна формула треба да буде тачна за редом функције $1, x, x^2, \dots$. Како су дата три параметра, очекујемо да ће алгебарски степен тачности бити бар два, тј. да ће дата формула бити тачна за $f(x) \in \{1, x, x^2\}$, одакле добијамо систем

$$\begin{aligned} f(x) = 1: \quad A_0 + A_1 + A_2 &= \int_{-1}^1 \cos(\pi x/2) dx = \frac{4}{\pi} \\ f(x) = x: \quad -A_0 + A_2 &= \int_{-1}^1 x \cos(\pi x/2) dx = 0 \\ f(x) = x^2: \quad A_0 + A_2 &= \int_{-1}^1 x^2 \cos(\pi x/2) dx = \frac{4}{\pi} = \frac{4(\pi^2 - 8)}{\pi^3}, \end{aligned}$$

чије је решење $(A_0, A_1, A_2) = (0.121, 1.032, 0.121)$. Приметимо још да је алгебарски степен тачности бар три, јер за $f(x) = x^3$ добијамо

$$-A_0 + A_1 = 0 = \int_{-1}^1 x^3 \cos(\pi x/2) dx.$$

10.2 Трапезна квадратурна формула

Конструирамо интерполациону квадратурну формулу за интеграл (10.1), са чворовима $x_0 = a$ и $x_1 = b$.

Лагранжов интерполациони полином је у овом случају

$$L_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b) = \frac{1}{b-a} [f(b)(x-a) + f(a)(b-x)].$$

Интеграцијом овог полинома од a до b добијамо *трапезну квадратурну формулу*

$$\frac{1}{b-a} \int_a^b (f(b)(x-a) + f(a)(b-x)) dx = \frac{1}{b-a} \left[f(b) \frac{(x-a)^2}{2} - f(a) \frac{(b-x)^2}{2} \right] \Big|_a^b = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)].$$

Грешка методе је

$$r_1(f) = \int_a^b \frac{f''(\eta)}{2!} (x-a)(x-b) dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in (a, b).$$

Геометријски, трапезна квадратура формула апроксимира интеграл трапезом, тј. одсечом праве од тачке $(a, f(a))$ до тачке $(b, f(b))$. Наравно, трапезна формула ће онда бити тачна на свим линеарним полиномима (правама).

На основу формуле за грешку видимо да грешка зависи од дужине $b - a$, па да бисмо добили већу тачност можемо поделити интервал $[a, b]$ на n једнаких делова дужина $h = \frac{b-a}{n}$ и на сваком одсечку $[a + kh, a + (k + 1)h]$, $k = 0, 1, \dots, n - 1$ применити трапезно правило

$$\int_{a+kh}^{a+(k+1)h} f(x)dx = \frac{h}{2} [f_k + f_{k+1}] + r_k(f),$$

где је $f_k = f(a + kh)$ и

$$r_k(f) = -\frac{h^3}{12} f''(\eta_k), \quad \eta_k \in (a + kh, a + (k + 1)h).$$

На овај начин добијемо *уопштену трапезну формулу*,

$$Q_T(f) = \frac{h}{2} [f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n] + r(f), \quad r(f) = -\frac{h^3}{12} [f''(\eta_0) + f''(\eta_1) + \dots + f''(\eta_{n-1})]. \quad (10.3)$$

Ако је f'' непрекидна на интервалу $[a, b]$, тада постоји $\eta \in (a, b)$ тдв.

$$f''(\eta) = \frac{f''(\eta_0) + f''(\eta_1) + \dots + f''(\eta_{n-1})}{n}.$$

Искористимо ли још да је $b - a = n \cdot h$, добијемо да је грешка уопштене трапезне формуле

$$r(f) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta), \quad \eta \in (a, b).$$

Ако би у задатку била задата тачност ε , онда бисмо из услова

$$|r(f)| \leq \frac{b-a}{2} M_2 \cdot h \leq \varepsilon, \quad M_2 = \max_{[a,b]} |f''(x)|$$

прво нашли корак h :

$$h \leq \sqrt{\frac{12\varepsilon}{(b-a)M_2}}.$$

Пример 10.2. Користећи уопштену трапезну квадратурну формулу израчунати

$$\int_0^{0.4} \frac{dx}{1+x^4}.$$

Нека је $h = 0.1$. Вредности функције у чворовима су тада

$$f(0) = 1.00000, \quad f(0.1) = 0.99990, \quad f(0.2) = 0.99840, \quad f(0.3) = 0.99196, \quad f(0.4) = 0.97504,$$

па је према формули (10.3)

$$Q_T(f) = \frac{0.1}{2} [1.00000 + 2(0.99990 + 0.99840 + 0.99196) + 0.97504] = 0.39778.$$

Да бисмо поценили ову апроксимацију, рачунамо изводе

$$f'(x) = -\frac{4x^3}{(1+x^4)^2}, \quad f''(x) = \frac{4x^2(5x^4-3)}{(1+x^4)^3}.$$

и налазимо

$$\max_{[0,0.4]} |f''(x)| \approx 1.7.$$

Коначно,

$$|r(f)| \leq \frac{0.4}{12} \cdot 0.1^2 \cdot 1.7 < 0.0006,$$

па је $I(f) = 0.3978 \pm 0.0006$.

10.3 Симпсонова квадратурна формула

Слично као за трапезну формулу, интергацијом од a до b Лагранжовог интерполационог полинома са чворовима $a, \frac{a+b}{2}, b$ добија се *Симпсонова квадратурна формула*

$$Q_S = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] = \frac{h}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right], \quad (10.4)$$

јер је $h = \frac{b-a}{2}$. Геометријски, површина $I(f)$ се апроксимира површином испод лука параболе која садржи тачке $(a, f(a)), (\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2})), (b, f(b))$ од праве $x = a$ до праве $x = b$. Следи да је алгебарски степен тачности ове квадратурне формуле бар 2 - она је тачна на свим квадратним полиномима. Испоставља се да је Симпсонова формула тачна и за полиноме трећег степена - да бисмо то видели приметимо да је тачна за полином $(x - \frac{a+b}{2})^3$, јер је ова функција непарна на $[a, b]$ у односу на средину интервала $\frac{a+b}{2}$, а коефицијенти у Симпсоновој формули су симетрични. Дакле, за грешку ове формуле важи $r_2(x^3) = 0$, па је њен алгебарски степен тачности бар 3. Показује се да за грешку Симпсонове формуле важи

$$r_2(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b).$$

Као и у случају трапезне формуле, можемо добити *уопштену Симпсонову формулу* поделом интервала $[a, b]$ на паран број $n = 2m$ једнаких делова дужина $h = \frac{b-a}{n}$:

$$I(f) \approx \frac{h}{3} [f_0 + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{n-2}) + 4(f_1 + f_3 + \dots + f_{n-1})], \quad (10.5)$$

$$r(f) = -\frac{n \cdot h^5}{180} \cdot f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)h^4}{180} \cdot f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b). \quad (10.6)$$

Пример 10.3. Користећи Симпсонову квадратурну формулу израчунати $\int_0^1 e^{-x^2} dx$.

Нека је $h = 0.1$ и $f(x) = e^{-x^2}$. Рачунамо $f_i = f(x_i)$, $x_i = hi$, $i = 0, 1, \dots, 10$:

$$f_0 = 1.00000, f_1 = 0.99005, f_2 = 0.96079, \dots, f_{10} = 0.36788,$$

па коришћењем уопштене Симпсонове формуле (10.5) добијамо

$$I(f) \approx 0.74683.$$

Да бисмо проценили грешку, треба нам максимум M_4 четвртог извода: $f^{(4)}(x) = 4e^{-x^2}(4x^4 - 12x^2 + 3)$ на интервалу $[0, 1]$. Испоставља се да је $M_4 = 12$, па је

$$|r(f)| \leq \frac{1}{180} \cdot 0.1^4 \cdot 12 < 0.000007.$$

Напоменимо на крају да су трапезно и Симпсоново правило специјални случајеви Њутн-Коутсових формула, које представљају интерполационе квадратурне формуле са једнако размакнутим чворовима. Како се те формуле добијају интеграцијом од a до b Лагранжовог интерполационог полинома са једнако размакнутим чворовима, за који је раније показано да не конвергира за све непрекидне функције (Рунгеов феномен је приказивао како грешка Лагранжове интерполације са једнако размакнутим чворовима функције $1/(1+25x^2)$ на $[-1, 1]$ експоненцијално расте са повећањем броја чворова), исто важи и за Њутн-Коутсове квадратуре. Испоставља се да је довољан услов за ковергенцију интерполационих квадратура за све непрекидне функције да тежине A_k буду позитивне, што није увек испуњено у случају Њутн-Коутсових квадратура. Тај услов је увек испуњен у случају Гаусових квадратурних формула (које имају максималан алгебарски степен тачности $2n - 1$, где је n број чворова), али се ту захтева да чворови буду унапред изабрани (чворови су нуле одговарајућих ортогоналних полинома).

10.4 Рунгеов принцип оцене грешке

Како изведена оцена грешке квадратурне формуле зависи од извода реда $n + 1$, који је у пракси непознат или компликован за рачунање, користе се приближни методи оцене грешке.

Изведимо један приближан метод за оцену грешке Симпсонове формуле, познат као *Рунгеова оцена*. Претпоставимо да се $f^{(4)}(x)$ не мења много на $[a, b]$ и запишимо грешку (10.6) у облику

$$R = K \cdot h^4, \quad (10.7)$$

где константа K зависи од функције $f(x)$ и интервала интеграције (a, b) . Нека су I_h и I_{2h} приближне вредности интеграла (10.1) добијене помоћу Симпсонове формуле са корацима h и $2h$ редом. Следи да је

$$I(f) = I_h + M \cdot h^4 \quad \text{и} \quad I(f) = I_{2h} + M \cdot (2h)^4,$$

па је *Рунгеова оцена грешке*

$$|R| = \frac{|I_h - I_{2h}|}{15}.$$

Приметимо да је степен корака h у формули за грешку (10.7) једнак $m + 1$, где је m алгебарски степен тачности коришћене квадратурне формуле. На основу те чињенице можемо закључити да је Рунгеова оцена грешке у случају произвољне квадратуре алгебарског степена тачности m

$$|R| = \frac{|I_h - I_{2h}|}{2^{m+1} - 1}.$$