Numerička matematika
7. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Interpolacija splajnovima (nastavak):
  - Linearni splajn i ocjena greške (ponavljanje).
  - Po dijelovima kubična interpolacija — uvod.
  - Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija.
  - Ocjene pogreške za kubičnu Hermiteovu interpolaciju.
  - Aproksimacije derivacija i numeričko deriviranje.
  - Po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija.
  - Kubični splajn i neprekidnost druge derivacije.
  - Razne vrste rubnih uvjeta.
  - Ocjene pogreške za kubični splajn.

Informacije

Stalna promjena termina predavanja (odobreno):

- utorak, 16–19 sati u (005).

Nema predavanja u petak 18. 4.

Termin prvog kolokvija je:

- ponedjeljak, 28. 4., u 12 sati.

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`

Drugi dio stiže negdje pred kraj kolokvija!

Interpolacija splajnovima (nastavak)

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Primjer. Funkciju

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

na intervalu $[1, 100]$ aproksimiramo po dijelovima linearnom interpolacijom, s točnošću $\varepsilon = 10^{-4}$, koju tražimo na cijelom intervalu.

Nađite broj čvorova interpolacije $n + 1$ potrebnih da se postigne ta točnost ε, uz

(a) ekvidistantnu mrežu na cijelom intervalu,

(b) interval $[1, 100]$ podijelimo na tri podintervala $[1, 2]$, $[2, 7]$, $[7, 100]$ i na svakom od njih koristimo posebnu ekvidistantnu mrežu.

Po obje metode nađite aproksimaciju za $\ln 2$.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Rješenje. Za po dijelovima linearnu interpolaciju φ vrijedi sljedeća ocjena pogreške

$$|f(x) - \varphi(x)| \le \frac{1}{8}\, h^2 \cdot M_2.$$

Ako je mreža ekvidistantna na $[a, b]$, onda je

$$h = \frac{b-a}{n},$$

pri čemu je n broj podintervala interpolacije.

Tražimo li točnost ε, onda mora biti

$$|f(x) - \varphi(x)| \le \varepsilon.$$

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Da bi se to postiglo, dovoljno je zatražiti da je

$$\frac{1}{8}\,h^2 \cdot M_2 = \frac{1}{8}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 M_2 \leq \varepsilon.$$

Odatle odmah slijedi da mora biti

$$n \geq (b-a)\sqrt{\frac{M_2}{8\varepsilon}}.$$

Sada još samo treba izračunati M_2. Deriviranjem dobivamo

$$f''(x) = -\frac{1}{x^2}.$$

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Budući da je f'' negativna, strogo rastuća funkcija, onda je maksimum njezine apsolutne vrijednosti na lijevom rubu, tj.

$$M_2 = \max_{x\in[a,b]} \left| -\frac{1}{x^2} \right| = \frac{1}{a^2}.$$

Rješenje za (a). Na intervalu $[1, 100]$ je $M_2 = 1$. Dobivamo

$$n \geq (100 - 1)\sqrt{\frac{1}{8 \cdot 10^{-4}}} = \frac{9900}{\sqrt{8}} \approx 3500.1785667,$$

pa je $n = 3501$, dok je broj čvorova $n + 1 = 3502$.

Da bismo odredili aproksimaciju za $\ln 2$, moramo naći u kojem podintervalu se 2 nalazi.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Ako je $\hat{x}$ u podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$, mora biti

$$a + (k-1) \cdot \frac{b-a}{n} \le \hat{x} \le a + k \cdot \frac{b-a}{n}.$$

U našem slučaju je $\hat{x} = 2$. Onda dobivamo

$$1 + (k-1) \cdot \frac{99}{3501} \le 2 \le 1 + k \cdot \frac{99}{3501}$$

$$(k-1) \cdot \frac{99}{3501} \le 1 \le k \cdot \frac{99}{3501}$$

$$(k-1) \le \frac{3501}{99} \le k$$

$$(k-1) \le 35.\dot{3}\dot{6} \le k.$$

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Prema tome, $k = 36$, $x_{35} \approx 1.9897172240$, $x_{36} \approx 2.0179948590$, pa imamo tablicu podijeljenih razlika

x_k	$f[x_k]$	$f[x_k, x_{k+1}]$
1.9897172240	0.6879925301	
		0.4990461264
2.0179948590	0.7021043744	

Interpolacijski polinom na tom podintervalu onda glasi:

$$p_1(x) = 0.6879925301 + 0.4990461264(x - 1.9897172240),$$

pa je

$$p_1(2) = 0.6931241097, \quad |\ln(2) - p_1(2)| = 0.0000230709.$$

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Rješenje za (b). Na intervalu $[1, 2]$ je $M_2 = 1$, pa je

$$n_1 \geq (2-1)\sqrt{\frac{1}{8 \cdot 10^{-4}}} = \frac{100}{\sqrt{8}} \approx 35.3535,$$

pa je $n_1 = 36$.

Na intervalu $[2, 7]$ je $M_2 = \frac{1}{4}$, pa je

$$n_2 \geq (7-2)\sqrt{\frac{\frac{1}{4}}{8 \cdot 10^{-4}}} = \frac{500}{2\sqrt{8}} \approx 88.388834765,$$

pa je $n_2 = 89$.

Primjer — po dijelovima linearna interpolacija

Na intervalu $[7, 100]$ je $M_2 = \dfrac{1}{49}$, pa je

$$n_3 \geq (100 - 7)\sqrt{\frac{\frac{1}{49}}{8 \cdot 10^{-4}}} = \frac{9300}{7\sqrt{8}} \approx 469.7209334,$$

pa je $n_3 = 470$.

Ukupan broj podintervala je $n = n_1 + n_2 + n_3 = 595$, što je skoro 6 puta manje nego u (a). Broj čvorova je 596.

Budući da je 2 čvor interpolacije, onda nemamo što računati, i vrijednost u čvoru je upravo $\ln 2 \approx 0.693147181$.

Po dijelovima kubična interpolacija

Po dijelovima kubična interpolacija

Kod po dijelovima kubične interpolacije, restrikcija aproksimacijske funkcije φ na svaki podinterval $[x_{k-1}, x_k]$ je kubični polinom

$$\varphi\Big|_{[x_{k-1}, x_k]} = p_k, \quad k = 1, \ldots, n,$$

gdje je $p_k \in \mathcal{P}_3$.

Ove polinome p_k obično zapisujemo relativno obzirom na početnu točku intervala x_{k-1}, u obliku

$$\begin{aligned} p_k(x) = c_{0,k} &+ c_{1,k}(x - x_{k-1}) \\ &+ c_{2,k}(x - x_{k-1})^2 + c_{3,k}(x - x_{k-1})^3, \end{aligned}$$

za $x \in [x_{k-1}, x_k]$, i za $k = 1, \ldots, n$.

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Ukupno imamo n kubičnih polinoma,

- od kojih svakome treba odrediti 4 koeficijenta,
- dakle, ukupno moramo odrediti $4n$ koeficijenata.

Uvjeta interpolacije je $2n$, jer svaki kubični polinom p_k

- mora interpolirati funkciju f u rubovima svog podintervala $[x_{k-1}, x_k]$,

tj. mora vrijediti

$$\begin{aligned} p_k(x_{k-1}) &= f_{k-1}, \\ p_k(x_k) &= f_k, \end{aligned} \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Ovi uvjeti automatski osiguravaju neprekidnost funkcije φ.

Dodatni uvjeti interpolacije na derivaciju

Obično želimo da interpolacijska funkcija φ bude glađa:

- barem klase $C^1[a,b]$, tj.
- da je i derivacija funkcije φ neprekidna i u čvorovima.

Dodavanjem tih uvjeta za svaki kubični polinom p_k, dobivamo točno još $2n$ uvjeta "interpolacije"

$$\begin{aligned} p_k'(x_{k-1}) &= s_{k-1}, \\ p_k'(x_k) &= s_k, \end{aligned} \qquad k = 1, \ldots, n,$$

pri čemu su s_k neki brojevi.

Njihova uloga može biti višeznačna, pa ćemo je detaljno opisati kasnije.

- Ideja — brojeve s_k možemo birati/zadati na razne načine.

Neprekidnost derivacije interpolacijske funkcije

Zasad, možemo zamišljati da su brojevi s_k

- neke aproksimacije derivacije funkcije f u čvorovima.

Oznaka s_k dolazi od engleske riječi "slope" = nagib.

Primijetite da je takvim izborom dodatnih uvjeta

- osigurana neprekidnost prve derivacije funkcije φ u svim unutrašnjim čvorovima,

jer je

$$p'_{k-1}(x_{k-1}) = p'_k(x_{k-1}) = s_{k-1}, \quad k = 2, \ldots, n.$$

Ako pretpostavimo da su s_k nekako zadani brojevi, dobivamo problem Hermiteove interpolacije za svaki polinom p_k.

Nađimo koeficijente interpolacijskog polinoma p_k.

Zapis po dijelovima kubične interpolacije

Za ovaj problem Hermiteove interpolacije

- najzgodnije je koristiti Newtonov oblik interpolacijskog polinoma p_k,
- s tzv. dvostrukim čvorovima x_{k-1} i x_k.

Razlog. U oba čvora x_{k-1} i x_k zadajemo po dva podatka:

- vrijednost funkcije i derivacije.

Razmak susjednih različitih čvorova označavamo ovako:

$$h_k := x_k - x_{k-1}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Ponovimo što, zapravo, znači da je x_k dvostruki čvor.

Dvostruki čvorovi u podijeljenim razlikama

Ako se u podijeljenoj razlici $f[x_k, x_k + h]$ ova dva čvora približavaju jedan drugom, onda na limesu kad $h \longrightarrow 0$ dobivamo

$$\lim_{h \to 0} f[x_k, x_k + h] = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h} = f'(x_k),$$

naravno, pod uvjetom da f ima derivaciju u točki x_k. Drugim riječima, vrijedi

$$f[x_k, x_k] = f'(x_k).$$

U našem slučaju, ako u točki x_k

- derivaciju $f'(x_k)$ zadajemo ili aproksimiramo sa s_k,

onda je

$$f[x_k, x_k] = s_k.$$

Tablica podijeljenih razlika za polinom p_k

Tablica podijeljenih razlika za Hermiteov interpolacijski polinom p_k koji ima dva dvostruka čvora x_{k-1} i x_k je

$$
\begin{array}{c|ccccc}
t_k & f[t_k] & f[t_k, t_{k+1}] & f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}] & f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}, t_{k+3}] \\
\hline
x_{k-1} & f_{k-1} & & & \\
 & & s_{k-1} & & \\
x_{k-1} & f_{k-1} & & \dfrac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k} & \\
 & & f[x_{k-1}, x_k] & & \dfrac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2} \\
x_k & f_k & & \dfrac{s_k - f[x_{k-1}, x_k]}{h_k} & \\
 & & s_k & & \\
x_k & f_k & & &
\end{array}
$$

Newtonov oblik polinoma p_k

Newtonov oblik Hermiteovog interpolacijskog polinoma p_k koji ima dva dvostruka čvora x_{k-1} i x_k je

$$\begin{aligned} p_k(x) = f[x_{k-1}] &+ f[x_{k-1}, x_{k-1}] \cdot (x - x_{k-1}) \\ &+ f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k] \cdot (x - x_{k-1})^2 \\ &+ f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k] \cdot (x - x_{k-1})^2 (x - x_k), \end{aligned}$$

uz uvažavanje da je

$$\begin{aligned} f[x_{k-1}, x_{k-1}] &= s_{k-1}, \\ f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k] &= \frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k}, \\ f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k] &= \frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2}. \end{aligned}$$

Newtonov oblik polinoma p_k

Uvrštavanjem čvorova x_{k-1} i x_k u prethodnu formulu za p_k, odmah možemo provjeriti da je

$$\begin{aligned} p_k(x_{k-1}) &= f_{k-1}, &\qquad p_k'(x_{k-1}) &= s_{k-1}, \\ p_k(x_k) &= f_k, &\qquad p_k'(x_k) &= s_k. \end{aligned}$$

Drugim riječima, našli smo traženi polinom p_k na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$, za $k = 1, \ldots, n$.

Za nalaženje koeficijenata $c_{i,k}$ u standardnom zapisu, treba još

- Newtonov oblik polinoma p_k "preurediti" tako da bude napisan po potencijama od $(x - x_{k-1})$.

Standardni oblik polinoma p_k

Posljednji član Newtonovog oblika polinoma p_k možemo napisati kao

$$\begin{aligned}(x - x_{k-1})^2 (x - x_k) &= (x - x_{k-1})^2 (x - x_{k-1} + x_{k-1} - x_k) \\ &= (x - x_{k-1})^2 (x - x_{k-1} - h_k) \\ &= (x - x_{k-1})^3 - h_k (x - x_{k-1})^2.\end{aligned}$$

Zapis polinoma p_k sada glasi

$$\begin{aligned}p_k(x) = f[x_{k-1}] &+ f[x_{k-1}, x_{k-1}] \cdot (x - x_{k-1}) \\ &+ \big(f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k] - h_k\, f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k] \big) \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad \cdot (x - x_{k-1})^2 \\ &+ f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k] \cdot (x - x_{k-1})^3.\end{aligned}$$

Standardni oblik polinoma p_k

Uspoređivanjem koeficijenata uz odgovarajuće potencije od $(x - x_{k-1})$, dobivamo

$$c_{0,k} = p_k(x_{k-1}) = f_{k-1},$$

$$c_{1,k} = p_k'(x_{k-1}) = s_{k-1},$$

$$c_{2,k} = \frac{p_k''(x_{k-1})}{2} = f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k] - h_k \, f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k],$$

$$c_{3,k} = \frac{p_k'''(x_{k-1})}{6} = f[x_{k-1}, x_{k-1}, x_k, x_k].$$

Promotrimo li posljednje dvije relacije, otkrivamo da se isplati

- prvo izračunati koeficijent $c_{3,k}$,
- a zatim ga upotrijebiti za računanje $c_{2,k}$.

Standardni oblik polinoma p_k

Na kraju, dobivamo sljedeće relacije

- za koeficijente $c_{i,k}$ u standardnom zapisu polinoma p_k,

napisane redom kako se računaju:

$$c_{0,k} = f_{k-1},$$

$$c_{1,k} = s_{k-1},$$

$$c_{3,k} = \frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2},$$

$$c_{2,k} = \frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k} - h_k c_{3,k},$$

za $k = 1, \ldots, n$.

Po dijelovima kubična interpolacija — komentar

Drugim riječima, ako znamo s_k, onda

- nije problem naći koeficijente po dijelovima kubične interpolacije.

Ostaje nam samo pokazati kako bismo mogli birati brojeve s_k.

Tu postoje dva bitno različita načina.

- s_k su “prave” vrijednosti derivacije funkcije f u čvorovima, tj. $s_k = f'(x_k)$.
- s_k su neke aproksimacije za $f'(x_k)$. Takve aproksimacije možemo naći numeričkim deriviranjem.

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija

Vrijednosti s_k možemo izabrati tako da su one baš jednake derivaciji zadane funkcije u odgovarajućoj točki, tj. da vrijedi

$$s_k = f'(x_k).$$

U tom slučaju je kubični polinom

- određen lokalno, tj. ne ovisi o drugim kubičnim polinomima,
- razlog — na rubovima zadane 2 funkcijske vrijednosti i 2 vrijednosti derivacija.

Takva se interpolacija zove po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Neka je funkcija $f \in C^4[a,b]$. Za svaki podinterval $[x_{k-1}, x_k]$ vrijedi ocjena greške za Hermiteovu kubičnu interpolaciju

$$|f(x) - p_k(x)| \le \frac{M_4^k}{4!}\,|\omega(x)|,$$

pri čemu je

$$\omega(x) = (x - x_{k-1})^2 (x - x_k)^2, \qquad M_4^k = \max_{x \in [x_{k-1}, x_k]} |f^{(4)}(x)|.$$

Ostaje samo još pronaći u kojoj je točki intervala $[x_{k-1}, x_k]$ maksimum funkcije $|\omega|$.

Dovoljno je naći sve lokalne ekstreme funkcije ω, jer je na rubovima greška 0.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Deriviranjem izlazi da se ekstrem (i to lokalni maksimum) dostiže u $x_e = (x_{k-1} + x_k)/2$.

Vrijednost u x_e je kvadrat vrijednosti greške za po dijelovima linearnu interpolaciju na istoj mreži čvorova

$$\omega(x_e) = (x_e - x_{k-1})^2 (x_e - x_k)^2 = \frac{(x_k - x_{k-1})^4}{16}.$$

Prijelazom na apsolutnu vrijednost, slijedi da je x_e točka lokalnog maksimuma za $|\omega|$ i

$$|\omega(x)| \leq |\omega(x_e)| \leq \frac{(x_k - x_{k-1})^4}{16}, \quad \forall x \in [x_{k-1}, x_k].$$

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Definiramo li, ponovno, maksimalni razmak čvorova

$$h = \max_{1 \leq k \leq n} \{h_k = x_k - x_{k-1}\},$$

onda, na čitavom $[a, b]$, možemo pisati

$$|f(x) - \varphi(x)| \leq \frac{M_4}{4!} \frac{h^4}{16} = \frac{1}{384} h^4 \cdot M_4,$$

pri čemu je

$$M_4 = \max_{k=1,\ldots,n} \{M_4^k\} = \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Drugim riječima, ako ravnomjerno povećavamo broj čvorova, tako da $h \to 0$, onda i maksimalna greška teži u 0.

Greška po dijelovima kubične Hermiteove interp.

Neka je $f \in C^1[a,b]$ i pretpostavimo da

- f ima ograničenu i integrabilnu četvrtu derivaciju na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$.

Tada je

$$\|f(x) - \varphi(x)\|_\infty \le \frac{1}{384}\, h^4\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f'(x) - \varphi'(x)\|_\infty \le \frac{\sqrt{3}}{216}\, h^3\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f''(x) - \varphi''(x)\|_\infty \le \frac{1}{12}\, h^2\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f^{(3)}(x) - \varphi^{(3)}(x)\|_\infty \le \frac{1}{2}\, h\, \|f^{(4)}\|_\infty.$$

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Primjer. Nađite po dijelovima kubičnu Hermiteovu interpolaciju za podatke

x_k	0	1	2
f_k	1	2	0
f'_k	0	1	1

.

Očito, treba povući dva kubična polinoma

- p_1 na intervalu $[0,1]$,
- p_2 na intervalu $[1,2]$.

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Za polinom p_1 imamo sljedeću tablicu podijeljenih razlika

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
0	1			
		0		
0	1		1	
		1		-1
1	2		0	
		1		
1	2			

Iz nje dobivamo

$$p_1(x) = 1 + (1+1)(x-0)^2 - 1(x-0)^3 = 1 + 2x^2 - x^3.$$

Primjer — po dijelovima Hermiteova interp.

Na sličan način, za p_2 dobivamo tablicu podijeljenih razlika

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
1	2			
		1		
1	2		-3	
		-2		6
2	0		3	
		1		
2	0			

pa je

$$\begin{aligned} p_2(x) &= 2 + (x-1) + (-3-6)(x-1)^2 + 6(x-1)^3 \\ &= 2 + (x-1) - 9(x-1)^2 + 6(x-1)^3. \end{aligned}$$

Demo — po dijelovima kub. Hermiteova interp.

Pokazati kako izgleda po dijelovima kubična Hermiteova interpolacija na primjeru funkcije Runge:

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \qquad x \in [-5, 5],$$

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

- `Num_Pas\Interp\Comp_Her\GnuPlot\HerRung.plt`

Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje

U praksi, često derivacije funkcije nisu dostupne, već

- treba aproksimirati derivaciju diferencijabilne funkcije f na nekom skupu točaka, korištenjem samo vrijednosti funkcije f u zadanim točkama.

Ideja. Aproksimacija derivacije = derivacija aproksimacije.

Koristimo interpolacijski polinom. Uz pretpostavku da je f klase $C^{n+1}[a,b]$, funkciju f možemo napisati

$$f(x) = p_n(x) + e_n(x),$$

gdje je $p_n(x)$ interpolacijski polinom

$$\begin{aligned} p_n(x) = f[x_0] &+ (x - x_0) f[x_0, x_1] \\ &+ \cdots + (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \ldots, x_n], \end{aligned}$$

Derivacija funkcije = derivacija interp. polinoma

a $e_n(x)$ greška interpolacijskog polinoma

$$e_n(x) = \frac{\omega(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi).$$

Deriviranjem p_n, a zatim uvrštavanjem $x = x_0$ dobivamo aproksimaciju za $f'(x_0)$

$$\begin{aligned} p_n'(x_0) = f[x_0, x_1] + (x_0 - x_1) f[x_0, x_1, x_2] \\ + \cdots + (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \ldots, x_n], \end{aligned}$$

Ako f ima još jednu neprekidnu derivaciju, tj. ako je f klase $C^{n+2}[a, b]$, onda je pogreška aproksimacije

$$e_n'(x_0) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n).$$

Greška = derivacija greške interp. polinoma

Dakle, $p_n'(x_0)$ je aproksimacija derivacije funkcije f u točki x_0 i vrijedi

$$f'(x_0) = p_n'(x_0) + e_n'(x_0).$$

Ako označimo s

$$H = \max_k |x_0 - x_k|,$$

onda je, za $H \to 0$, greška $e_n'(x_0)$ reda veličine

$$e_n'(x_0) \leq O(H^n).$$

To nam pokazuje da aproksimacijska formula za derivaciju može biti proizvoljno visokog reda n, ali takve formule s velikim n imaju ograničenu praktičnu vrijednost.

Numeričko deriviranje — linearni polinom

Pokažimo kako se ta formula ponaša za niske n.

$n = 1$.

Aproksimacija derivacije je

$$p_1'(x_0) = f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

pri čemu smo napravili grešku

$$e_1'(x_0) = \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!}\,(x_0 - x_1) = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}\,h,$$

uz pretpostavku da je $f \in C^3[x_0, x_1]$. Greška je reda veličine $O(h)$ za $h \to 0$.

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

$n = 2.$

Za $n = 2$, točke x_1, x_2 možemo uzeti na više raznih načina.

1. Simetričan izbor točaka

Izaberemo x_1 i x_2 simetrično oko x_0

$$x_1 = x_0 + h, \qquad x_2 = x_0 - h.$$

Sugestivnija oznaka

$$x_{-1} := x_2,$$

jer se točke pišu prirodnom redosljedu: x_{-1}, x_0, x_1. U tom slučaju je

$$p_2'(x_0) = f[x_0, x_1] + (x_0 - x_1) f[x_0, x_1, x_{-1}].$$

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Izračunajmo potrebne podijeljene razlike.

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$
x_{-1}	f_{-1}		
		$\dfrac{f_0 - f_{-1}}{h}$	
x_0	f_0		$\dfrac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}$
		$\dfrac{f_1 - f_0}{h}$	
x_1	f_1		

Uvrštavanjem dobivamo

$$p_2'(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} - h\,\frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2} = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}.$$

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Prethodnu formulu zovemo simetrična (centralna) razlika, jer su točke x_1 i x_{-1} simetrične obzirom na x_0.

Takva aproksimacija derivacije ima bolju ocjenu greške nego obične podijeljene razlike, tj. vrijedi

$$e_2'(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}\,(x_0 - x_1)\,(x_0 - x_{-1}) = -h^2\,\frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

2. Slučaj x_1 i x_2 s iste strane x_0

Rasporedimo, na primjer, x_1 i x_2 desno od x_0,

$$x_1 = x_0 + h, \qquad x_2 = x_0 + 2h.$$

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Iako su i u ovom slučaju točke ekvidistantne, deriviramo u najljevijoj, a ne u srednjoj točki.

Pripadna tablica podijeljenih razlika je

$$
\begin{array}{c|cccc}
t_k & f[t_k] & f[t_k, t_{k+1}] & f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}] \\
\hline
x_0 & f_0 & & \\
 & & \dfrac{f_1 - f_0}{h} & \\
x_1 & f_1 & & \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} \\
 & & \dfrac{f_2 - f_1}{h} & \\
x_2 & f_2 & &
\end{array}
$$

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Konačno, aproksimacija derivacije u x_0 je

$$\begin{aligned} p_2'(x_0) &= f[x_0, x_1] + (x_0 - x_1) f[x_0, x_1, x_2] \\ &= \frac{f_1 - f_0}{h} - h\, \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} \\ &= \frac{-f_2 + 4f_1 - 3f_0}{2h}, \end{aligned}$$

dok je greška jednaka

$$e_2'(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}\,(x_0 - x_1)\,(x_0 - x_2) = h^2\,\frac{f^{(3)}(\xi)}{3},$$

tj. greška je istog reda veličine $O(h^2)$, međutim konstanta je dvostruko veća nego u prethodnom (simetričnom) slučaju.

Numeričko deriviranje — zaključci

Formula za derivaciju

- postaje sve točnija što su bliže točke iz kojih se derivacija aproksimira, tj. što je h manji.

To vrijedi samo teoretski.

U praksi, mnogi podaci su mjereni, pa nose neku pogrešku, u najmanju ruku zbog grešaka zaokruživanja.

Osnovu numeričkog deriviranja čine podijeljene razlike,

- ako su točke bliske, dolazi do kraćenja. Do kraćenja mora doći, zbog neprekidnosti funkcije f.

Problem je to izrazitiji, što su točke bliže, tj. što je h manji.

Dakle, imamo dva oprečna zahtjeva na veličinu h. Manji h daje bolju ocjenu greške, ali veću grešku zaokruživanja.

Numeričko deriviranje — ilustracija problema

Ilustrirajmo to analizom simetrične razlike,

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + e_2'(x_0), \qquad e_2'(x_0) = -h^2 \, \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

Pretpostavimo da smo, umjesto vrijednosti f_{-1} i f_1, uzeli malo perturbirane vrijednosti

$$\widehat{f}_1 = f_1 + \varepsilon_1, \qquad \widehat{f}_{-1} = f_{-1} + \varepsilon_{-1}, \qquad |\varepsilon_1|, |\varepsilon_{-1}| \leq \varepsilon.$$

Ako odatle izrazimo f_1 i f_{-1} i uvrstimo ih u formulu za derivaciju, dobivamo

$$f'(x_0) = \frac{\widehat{f}_1 - \widehat{f}_{-1}}{2h} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e_2'(x_0).$$

Koliko malen smije biti h?

Prvi član s desne strane je ono što smo mi zaista izračunali kao aproksimaciju derivacije, a ostalo je greška.

Zbog jednostavnosti analize pretpostavimo da je

- h prikaziv u računalu,
- greška pri računanju kvocijenta u podijeljenoj razlici zanemariva.

U tom je slučaju napravljena ukupna greška

$$err_2 = f'(x_0) - \frac{\widehat{f}_1 - \widehat{f}_{-1}}{2h} = -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e_2'(x_0).$$

Ogradimo err_2 po apsolutnoj vrijednosti. Greška u prvom članu je najveća ako su ε_1 i ε_{-1} suprotnih predznaka, maksimalne apsolutne vrijednosti ε.

Koliko malen smije biti h?

Za drugi član koristimo ocjenu za $e_2'(x_0)$, pa zajedno dobivamo

$$|err_2| \le \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6} h^2, \qquad M_3 = \max_{x \in [x_{-1}, x_1]} |f^{(3)}(x)|.$$

Lako se vidi da je ocjena na desnoj strani najbolja moguća, tj. da se može dostići. Označimo tu ocjenu s $e(h)$

$$e(h) := \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6} h^2.$$

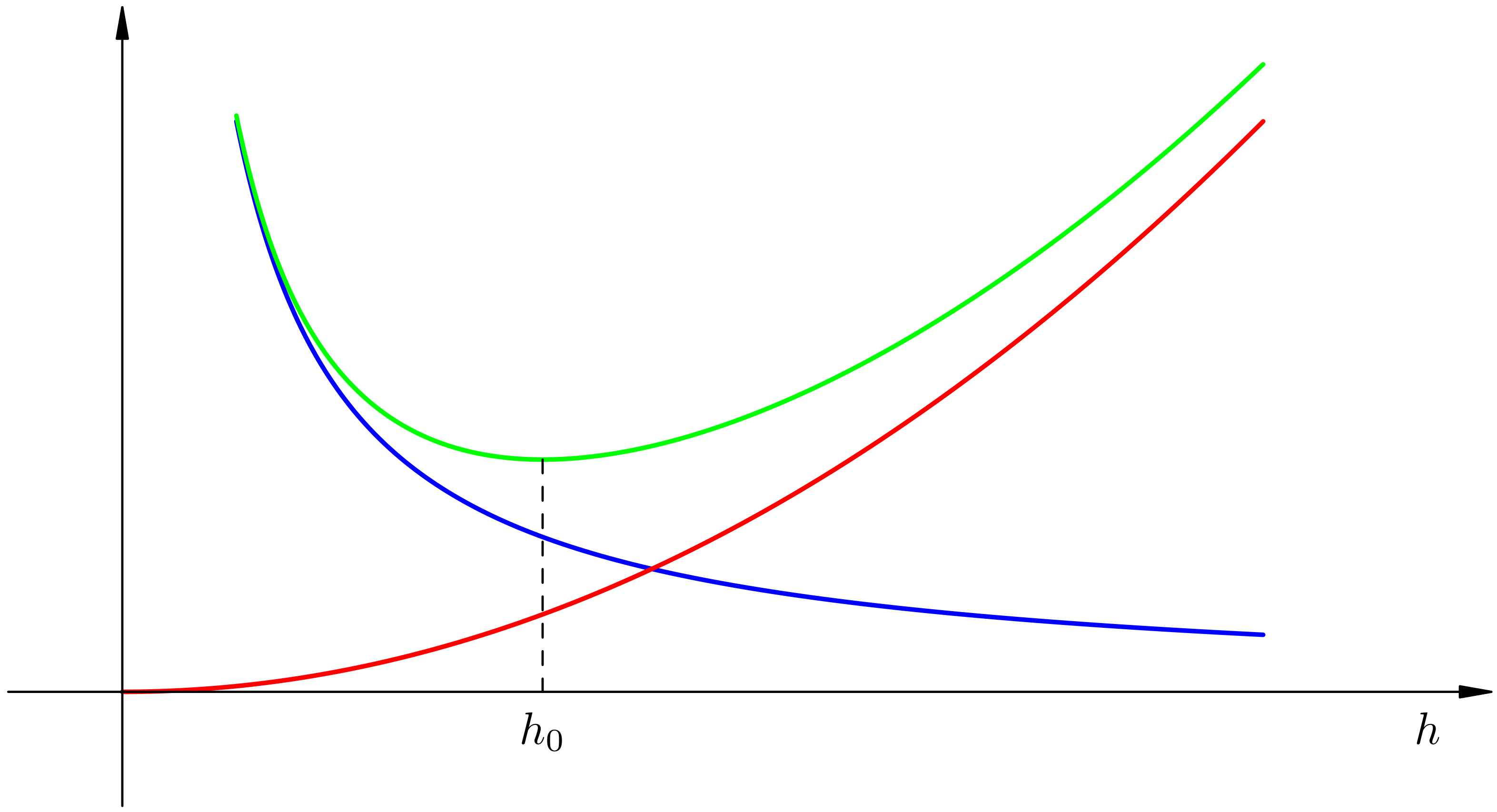
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

Koliko malen smije biti h?

Legenda:

- plava boja — prvi član ε/h oblika hiperbole, koji dolazi od greške u podacima,
- crvena boja — drugi član oblika parabole, koji predstavlja maksimalnu grešku odbacivanja kod aproksimacije derivacije podijeljenom razlikom,
- zelena boja — označava zbroj grešaka $e(h)$.

Optimalni h_0



Optimalni h_0

Odmah vidimo da $e(h)$ ima minimum po h. Taj minimum se lako računa, jer iz

$$e'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{M_3}{3} h = 0$$

izlazi da se lokalni, a onda (zbog $e''(h) > 0$ za $h > 0$) i globalni minimum postiže za

$$h_0 = \left(\frac{3\varepsilon}{M_3} \right)^{1/3}.$$

Najmanja vrijednost funkcije je

$$e(h_0) = \frac{3}{2} \left(\frac{M_3}{3} \right)^{1/3} \varepsilon^{2/3}.$$

Ukupna greška koju ne očekujemo

To pokazuje da je čak i u najboljem slučaju,

- kad je ukupna greška najmanja, ona je reda veličine $O(\varepsilon^{2/3})$, a ne $O(\varepsilon)$, kao što bismo željeli.

To predstavlja značajni gubitak točnosti.

Posebno, daljnje smanjivanje koraka h samo povećava grešku!

Isti problem se javlja, i to u još ozbiljnijem obliku, u formulama višeg reda za aproksimaciju derivacija.

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija

Po dijelovima kubična kvazihermiteova interp.

Sad se možemo vratiti problemu kako napraviti po dijelovima kubičnu Hermiteovu interpolaciju, ako nemamo zadane derivacije.

U tom slučaju

- derivacije možemo aproksimirati na različite načine,
- a samu interpolaciju zvat ćemo kvazihermiteova po dijelovima kubična interpolacija.

Napomena. U slučaju aproksimacije derivacije, greška po dijelovima kubične interpolacije ovisi o tome

- koliko je "dobra" aproksimacija derivacije.

Podijeljene razlike unaprijed

Najjednostavnije je uzeti podijeljene razlike kao aproksimacije derivacija u čvorovima. One mogu biti

- unaprijed (do na posljednju), ili
- unazad (do na prvu).

Ako koristimo podijeljene razlike unaprijed, onda je

$$s_k = \begin{cases} \dfrac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k}, & \text{za } k = 0, \ldots, n-1, \\[2ex] \dfrac{f_n - f_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}, & \text{za } k = n. \end{cases}$$

Podijeljene razlike unazad

a ako koristimo podijeljene razlike unazad, onda je

$$s_k = \begin{cases} \dfrac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, & \text{za } k = 0, \\ \dfrac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}, & \text{za } k = 1, \ldots, n. \end{cases}$$

Međutim, greška koju smo napravili takvom aproksimacijom derivacije je reda veličine

- $O(h)$ u derivaciji,
- odnosno $O(h^2)$ u funkcijskoj vrijednosti,

što je dosta loše.

Simetrične razlike kao aproksimacije derivacije

Ako su točke x_k ekvidistantne, možemo korisititi simetričnu razliku (osim na lijevom i desnom rubu gdje to nije moguće). Uz oznaku $h = x_k - x_{k-1}$, imamo

$$s_k = \begin{cases} \dfrac{f_1 - f_0}{h}, & \text{za } k = 0, \\[2ex] \dfrac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h}, & \text{za } k = 1, \ldots, n-1, \\[2ex] \dfrac{f_n - f_{n-1}}{h}, & \text{za } k = n. \end{cases}$$

Greška obzirom na obične podijeljene razlike

- će se popraviti tamo gdje se koristi simetrična razlika, ali
- najveće greške ostaju na prvom i zadnjem podintervalu.

Besselova aproksimacija derivacija

Postoje i bolje aproksimacije derivacija, a pripadni kvazihermiteovi kubični polinomi obično dobivaju ime po načinu aproksimacije derivacija.

Ako derivaciju u točki x_k aproksimiramo tako da povučemo

- kvadratni interpolacijski polinom kroz x_{k-1}, x_k i x_{k+1},
- a zatim ga deriviramo.

Pripadna kvazihermiteova interpolacija zove se Besselova po dijelovima kubična interpolacija.

U prvoj i posljednjoj točki ne možemo postupiti tako (jer nema lijeve, odnosno desne točke).

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

Derivaciju u x_0 aproksimiramo tako da povučemo

- kvadratni interpolacijski polinom kroz x_0, x_1 i x_2, i
- njega deriviramo u x_0.

Slično, derivaciju u x_n aproksimiramo tako da povučemo

- kvadratni interpolacijski polinom kroz x_{n-2}, x_{n-1} i x_n, i
- njega deriviramo u x_n.

U unutrašnjim čvorovima x_k, za $k = 1, \ldots, n-1$, dobivamo

$$\begin{aligned} p_{2,k}(x) = f_{k-1} &+ f[x_{k-1}, x_k](x - x_{k-1}) \\ &+ f[x_{k-1}, x_k, x_{k+1}](x - x_{k-1})\,(x - x_k), \end{aligned}$$

Besselova aproksimacija derivacija — sredina

a zatim, deriviranjem i uvrštavanjem x_k

$$s_k = p'_{2,k}(x_k) = f[x_{k-1}, x_k] + f[x_{k-1}, x_k, x_{k+1}](x_k - x_{k-1}).$$

Uz oznaku $h_k = x_k - x_{k-1}$, $k = 1, \ldots, n$, prethodna se formula može napisati i kao

$$s_k = f[x_{k-1}, x_k] + h_k \, \frac{f[x_k, x_{k+1}] - f[x_{k-1}, x_k]}{h_k + h_{k+1}}$$

$$= \frac{h_{k+1}\, f[x_{k-1}, x_k] + h_k\, f[x_k, x_{k+1}]}{h_k + h_{k+1}},$$

tj. s_k je težinska srednja vrijednost podijeljene razlike unaprijed i unatrag.

Besselova aproksimacija derivacija — početak

Za $k = 0$ pripadni polinom je

$$\begin{aligned} p_{2,1}(x) = f_0 &+ f[x_0, x_1](x - x_0) \\ &+ f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)\,(x - x_1). \end{aligned}$$

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_0 dobivamo

$$\begin{aligned} s_0 &= p'_{2,1}(x_0) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x_0 - x_1) \\ &= \frac{(2h_1 + h_2)\, f[x_0, x_1] - h_1\, f[x_1, x_2]}{h_1 + h_2}. \end{aligned}$$

Besselova aproksimacija derivacija — kraj

Za $k = n$ pripadni polinom je

$$p_{2,n-1}(x) = f_{n-2} + f[x_{n-2}, x_{n-1}](x - x_{n-2}) + f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n](x - x_{n-2})\,(x - x_{n-1}).$$

Deriviranjem, pa uvrštavanjem x_n dobivamo

$$\begin{aligned} s_n &= p'_{2,n-1}(x_n) \\ &= f[x_{n-2}, x_{n-1}](x_n - x_{n-2}) + f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n](x_n - x_{n-2}) \\ &\qquad + f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n](x_n - x_{n-1}) \\ &= \frac{(h_{n-1} + 2h_n)\, f[x_{n-2}, x_{n-1}] - h_n\, f[x_{n-1}, x_n]}{h_{n-1} + h_n}. \end{aligned}$$

Besselova aproksimacija derivacija — greška

Dakle, za Besselovu po dijelovima kubičnu interpolaciju stavljamo

$$s_k = \begin{cases} \dfrac{(2h_1 + h_2)\, f[x_0, x_1] - h_1\, f[x_1, x_2]}{h_1 + h_2}, & k = 0, \\[2ex] \dfrac{h_{k+1}\, f[x_{k-1}, x_k] + h_k\, f[x_k, x_{k+1}]}{h_k + h_{k+1}}, & k = 1, \ldots, n-1, \\[2ex] \dfrac{(h_{n-1} + 2h_n)\, f[x_{n-2}, x_{n-1}] - h_n\, f[x_{n-1}, x_n]}{h_{n-1} + h_n}, & k = n. \end{cases}$$

Greška

- u derivaciji je reda veličine $O(h^2)$,
- što znači da je greška u funkciji reda veličine $O(h^3)$.

Akimina aproksimacija derivacija — sredina

Još jedna varijanta aproksimacije derivacija "s imenom".
Akima je 1970. godine dao sljedeću aproksimaciju koja

- usrednjava podijeljene razlike,
- s ciljem da se spriječe oscilacije interpolacijske funkcije φ:

$$s_k = \frac{w_{k+1} f[x_{k-1}, x_k] + w_{k-1} f[x_k, x_{k+1}]}{w_{k+1} + w_{k-1}}, \qquad k = 0, \ldots, n,$$

uz

$$w_k = |f[x_k, x_{k+1}] - f[x_{k-1}, x_k]|$$

i

$$w_{-1} = w_0 = w_1, \qquad w_{n-1} = w_n = w_{n+1}.$$

Akimina aproksimacija derivacija — početak

Za $k = 0$ i $k = n$, formule se ne mogu direktno iskoristiti, bez dodatnih definicija.

Kraćenjem svih težina w_k u formuli za $k = 0$ dobivamo da je

$$s_0 = \frac{f[x_{-1}, x_0] + f[x_0, x_1]}{2}.$$

Treba još definirati što je $f[x_{-1}, x_0]$. Podijeljenu razliku $f[x_0, x_1]$ možemo interpretirati kao sredinu dvije susjedne podijeljene razlike, tj.

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_{-1}, x_0] + f[x_1, x_2]}{2}.$$

Akimina aproksimacija derivacija — kraj

Odatle slijedi da je

$$f[x_{-1}, x_0] = 2f[x_0, x_1] - f[x_1, x_2],$$

odnosno

$$s_0 = \frac{3f[x_0, x_1] - f[x_1, x_2]}{2}.$$

Na sličan način, možemo dobiti i relaciju za s_n

$$s_n = \frac{3f[x_{n-1}, x_n] - f[x_{n-2}, x_{n-1}]}{2}.$$

Akimina aproksimacija derivacija — greška

Akimin algoritam je

- popularan u praksi,
- nalazi se u standardnim numeričkim paketima, poput IMSL-a, iako je točnost ovih formula za aproksimaciju derivacije relativno slaba.

Za neekvidistantne točke, greška

- u derivaciji je reda veličine samo $O(h)$,
- a to znači samo $O(h^2)$ za funkcijske vrijednosti.

Ako su točke ekvidistantne, onda je greška

- reda veličine $O(h^2)$ za derivaciju,
- a $O(h^3)$ za funkciju, tj. kao i kod Besselove po dijelovima kvazihermitske interpolacije.

Akimina aproksimacija derivacija — osnovni cilj

Slabija točnost je potpuno u skladu s osnovnim ciljem Akimine aproksimacije derivacija. U mnogim primjenama

- želimo dobiti geometrijski ili vizuelno poželjan, oblik aproksimacijske funkcije φ,
- tipičan primjer je (približno) crtanje grafova funkcija.

Ostaje još pitanje kako postići vizuelnu "glatkoću"?

- Heuristika — izbjegavanje naglih promjena u derivaciji.
- Dobivene podatke za derivaciju moramo "izgladiti".
- Problem izglađivanja podataka je klasični problem numeričke analize.
- Najjednostavniji pristup je zamjena podatka srednjom vrijednošću podataka preko nekoliko susjednih točaka.

Druge aproksimacije derivacija

Aproksimacija derivacije mogla bi se napraviti još i bolje, ako

- povučemo interpolacijski polinom stupnja 3 koji prolazi točkama x_k, x_{k-1}, x_{k+1} i jednom od točaka x_{k-2} ili x_{k+2} (nesimetričnost!)
- i njega deriviramo u x_k (uz pažljivo deriviranje na rubovima).

Takvim postupkom možemo dobiti grešku

- u funkcijskoj vrijednosti $O(h^4)$.

Primijetite da bolja aproksimacija derivacija nije potrebna, jer je greška kod po dijelovima Hermiteove kubične interpolacije također reda veličine $O(h^4)$.

Zaključak

Kvazihermiteova po dijelovima kubična interpolacija je, također,

- lokalna, tj. promjenom jedne točke promijenit će se samo nekoliko susjednih kubičnih polinoma.

Točno koliko, ovisi o tome koju smo aproksimaciju derivacije izabrali.

Kubična splajn interpolacija

Kubična splajn interpolacija

Brojeve $s_0, \ldots, s_n$ možemo odrediti i iz zahtjeva da

- φ ima neprekidnu drugu derivaciju u u unutarnjim čvorovima $x_1, \ldots x_{n-1}$, tj. da je klase $C^2[a, b]$.

Takva se interpolacija zove kubična splajn interpolacija.

Iz tih uvjeta ne možemo jednoznačno izračunati splajn, jer

- treba odrediti $4n$ koeficijenata kubičnih polinoma,
- a imamo $2n$ uvjeta interpolacije (svaki polinom mora interpolirati rubne točke svog podintervala),
- uvjeta ljepljenja prve i derivacije u unutarnjim točkama ima $n - 1$ (toliko je unutarnjih točaka),
- i $n - 1$ je uvjeta ljepljenja druge derivacije.

Broj nepoznatih parametara i broj uvjeta

Zaključak. Ukupno imamo

- $4n - 2$ uvjeta,
- a moramo odrediti $4n$ koeficijenata,
- pa vidimo da nedostaju 2 uvjeta da bismo te koeficijente mogli odrediti.

Za početak, prva derivacija se lijepi u unutarnjim točkama čim postavimo zahtjev da je

$$\varphi'(x_k) = s_k$$

u tim točkama, bez obzira na to što je s_k.

Ljepljenje druge derivacije

Ostaje postaviti uvjete ljepljenja druge derivacije u unutarnjim čvorovima. Zahtjev je

$$p_k''(x_k) = p_{k+1}''(x_k), \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Ako polinome p_k pišemo u formi relativno obzirom na početnu točku podintervala, tj. ako je

$$\begin{aligned} p_k(x) = c_{0,k} &+ c_{1,k}(x - x_{k-1}) \\ &+ c_{2,k}(x - x_{k-1})^2 + c_{3,k}(x - x_{k-1})^3, \end{aligned}$$

onda je

$$\begin{aligned} p_k''(x) &= 2c_{2,k} + 6c_{3,k}(x - x_{k-1}) \\ p_{k+1}''(x) &= 2c_{2,k+1} + 6c_{3,k+1}(x - x_k). \end{aligned}$$

Ljepljenje druge derivacije

Uvrštavanjem x_k i dijeljenjem s 2 izlazi uvjet ljepljenja

$$c_{2,k} + 3c_{3,k}(x_k - x_{k-1}) = c_{2,k+1}.$$

Ostaje samo ispisati koeficijente $c_{i,k}$ u terminima f_k i s_k. Ponovimo, za kubični polinom s 2 dvostruka čvora, imali smo

$$c_{3,k} = \frac{s_k + s_{k-1} - 2f[x_{k-1}, x_k]}{h_k^2},$$

$$c_{2,k} = \frac{f[x_{k-1}, x_k] - s_{k-1}}{h_k} - h_k c_{3,k}.$$

Sada još treba uvrstiti uvjeta ljepljenja druge derivacije u prethodne dvije relacije.

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Sređivanjem izlazi

$$\frac{-3f[x_{k-1}, x_k] + s_{k-1} + 2s_k}{h_k} = \frac{3f[x_k, x_{k+1}] - 2s_k - s_{k+1}}{h_{k+1}}.$$

Pomnožimo li prethodnu relaciju s $h_k h_{k+1}$ i

- prebacimo li sve s_k na lijevu stranu,
- a članove koji nemaju s_k na desnu stranu,

za $k = 1, \ldots, n-1$, dobivamo

$$\begin{aligned} h_{k+1}s_{k-1} + 2(h_k + h_{k+1})s_k + h_k s_{k+1} \\ = 3(h_{k+1}f[x_{k-1}, x_k] + h_k f[x_k, x_{k+1}]). \end{aligned}$$

Linearni sustav za kubičnu splajn interpolaciju

Ovo je linearni sustav

- s $(n+1)$-om nepoznanicom i $(n-1)$-om jednadžbom.

Ako zadamo nagibe s_0 i s_n, ostaje točno $n-1$ nepoznanica. Matrica tako dobivenog linearnog sustava je trodijagonalna

$$\begin{bmatrix} 2(h_1+h_2) & h_1 & & & \\ h_3 & 2(h_2+h_3) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{n-1} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-2} \\ & & & h_n & 2(h_{n-1}+h_n) \end{bmatrix}$$

i strogo dijagonalno dominantna po recima, jer je

$$2(h_k+h_{k+1}) > h_k + h_{k+1},$$

pa je i regularna.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ovaj linearni sustav sigurno ima jedinstveno rješenje $s_1, \ldots s_{n-1}$.

Za rješavanje sustava možemo koristiti Gaussove eliminacije ili LR faktorizaciju bez pivotiranja.

Za trodijagonalnu matricu

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & e_1 & & & \\ c_2 & d_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & d_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & c_n & d_n \end{bmatrix}.$$

pretpostavimo da postoji LR faktorizacija bez pivotiranja.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Tada nije teško pokazati da su matrice L i R oblika

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ell_{n-1} & 1 & \\ & & & \ell_n & 1 \end{bmatrix},$$

$$R = \begin{bmatrix} r_1 & e_1 & & & \\ & r_2 & e_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & r_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & & r_n \end{bmatrix}.$$

Matrice A i R imaju jednake dijagonale iznad glavne.

Rješenje linearnog sustava za splajn interpolaciju

Ostale elemente matrica L i R računamo po sljedećim rekurzijama

$$
\begin{aligned}
& r_1 = d_1, \\
& \text{za } i = 2, \ldots, n : \\
& \quad \ell_i = c_i / r_{i-1}, \\
& \quad r_i = d_i - \ell_i \, e_{i-1}.
\end{aligned}
$$

Primijetite, sada s_k

- nisu nezavisni, nego ovise jedan o drugom.
- To znači da aproksimacija više nije lokalna, jer se promjenom jedne točke mijenjaju svi polinomi.

Dva dodatna uvjeta

Posljednje otvoreno pitanje je kako možemo izabrati s_0 i s_n (nedostaju 2 uvjeta!)?

- Oni se ne zadaju direktno,
- uobičajeno se zadaju rubni uvjeti na funkciju φ iz kojih se određuju s_0 i s_n.

Postoji nekoliko tradicionalnih načina zadavanja rubnih uvjeta, odnosno jednadžbi koje nedostaju.

Potpuni (kompletni) splajn

(a) Potpuni (kompletni) splajn

Poznato:

- derivacija funkcije f u rubovima, (recimo kod rješavanja rubnih problema za običnu diferencijalnu jednadžbu).

Zadaje se:

$$s_0 = f'(x_0), \qquad s_n = f'(x_n).$$

Greška aproksimacije u funkcijskoj vrijednosti je $O(h^4)$.

Zadana druga derivacija u rubovima

(b) Zadana druga derivacija u rubovima

Poznato:

- druga derivacija funkcije f u rubovima.

Zadaje se:

$$f''(x_0) = \varphi''(x_0) = p_1''(x_0), \qquad f''(x_n) = \varphi''(x_n) = p_n''(x_n).$$

Treba još izraziti

- $p_1''(x_0)$ preko s_0, s_1,
- $p_n''(x_n)$ preko s_{n-1} i s_n.

Zadana druga derivacija u rubovima — početak

Znamo da je

$$c_{2,1} = \frac{p_1''(x_0)}{2} = \frac{f''(x_0)}{2}.$$

Iz izraza za $c_{2,1}$ izlazi

$$\frac{3f[x_0, x_1] - 2s_0 - s_1}{h_1} = \frac{f''(x_0)}{2},$$

ili, ako sredimo, dobivamo

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1] - \frac{h_1}{2} f''(x_0).$$

Ovu jednadžbu treba dodati kao prvu u linearni sustav.

Zadana druga derivacija u rubovima — kraj

Slično, korištenjem da je

$$p_n''(x_n) = 2c_{2,n} + 6c_{3,n}h_n,$$

te uvrštavanjem izraza za $c_{2,n}$ i $c_{3,n}$, izlazi i

$$s_{n-1} + 2s_n = 3f[x_{n-1}, x_n] + \frac{h_n}{2} f''(x_n).$$

Tu jednadžbu dodajemo kao zadnju u linearni sustav.

Dobiveni linearni sustav

- ima $(n+1)$-u jednadžbu i isto toliko nepoznanica,
- može se pokazati da ima i jedinstveno rješenje.

Greška aproksimacije u funkcijskoj vrijednosti je $O(h^4)$.

Prirodni splajn

(c) Prirodni splajn

Poznato: tzv. slobodni krajevi,

$$\varphi''(x_0) = \varphi''(x_n) = 0.$$

Dodatne jednadžbe: kao u (b), samo se stavi
$f''(x_0) = f''(x_n) = 0$

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1], \qquad s_{n-1} + 2s_n = 3f[x_{n-1}, x_n].$$

Greška aproksimacije:

- Ako f nema druge derivacije na rubu 0, onda je greška u funkcijskoj vrijednosti $O(h^2)$,
- ako ih ima, onda je (kao u (b) slučaju) greška $O(h^4)$.

Numerička aproksimacija derivacija

(d) Numerička aproksimacija derivacija

Nepoznato: ponašanje derivacije funkcije f na rubovima.

Preostala dva parametra mogu se odrediti tako da

- numerički aproksimiramo φ' ili φ'' ili φ''' u rubovima.
- Kao aproksimaciju koristimo odgovarajuću derivaciju kubičnog interpolacijskog polinoma koji prolazi točkama $x_0, \ldots, x_3$, odnosno $x_{n-3}, \ldots, x_n$.

Greška za bilo koju od ovih varijanti daje je reda $O(h^4)$ u funkcijskoj vrijednosti.

Not-a-knot (nije čvor) splajn

(e) Not-a-knot (nije čvor) splajn

Nepoznato: ponašanje derivacije funkcije f na rubovima.

Umjesto neke aproksimacije derivacije, koristimo tzv. "not-a-knot" (nije čvor) uvjet.

- Parametre s_0 i s_n biramo tako da su prva dva i posljednja dva kubična polinoma jednaka, tj. da je

$$p_1 = p_2, \qquad p_{n-1} = p_n.$$

To znači da se u čvoru

- x_1 zalijepi i treća derivacija polinoma p_1 i p_2,
- x_{n-1} se zalijepi treća derivacija polinoma p_{n-1} i p_n.

Not-a-knot (nije čvor) splajn — početak

Te zahtjeve možemo pisati kao

$$p_1'''(x_1) = p_2'''(x_1), \qquad p_{n-1}'''(x_{n-1}) = p_n'''(x_{n-1}).$$

Zahtjev $p_1'''(x_1) = p_2'''(x_1)$ znači da su vodeći koeficijenti polinoma p_1 i p_2, jednaki,

$$c_{3,1} = c_{3,2}.$$

Pridružimo li taj zahtjev zahtjevu ljepljenja druge derivacije,

$$c_{2,1} + 3c_{3,1}h_k = c_{2,2},$$

dobivamo ...

Not-a-knot (nije čvor) splajn — početak

$$\frac{f[x_0,x_1]-s_0}{h_1}+2\,\frac{s_1+s_0-2f[x_0,x_1]}{h_1} = \frac{f[x_1,x_2]-s_1}{h_2}-h_2\,\frac{s_1+s_0-2f[x_0,x_1]}{h_1^2}.$$

Sređivanjem, izlazi

$$h_2 s_0+(h_1+h_2)s_1 = \frac{(h_1+2(h_1+h_2))h_2\,f[x_0,x_1]+h_1^2\,f[x_1,x_2]}{h_1+h_2}.$$

Not-a-knot (nije čvor) splajn — kraj

Na sličan način dobivamo i zadnju jednadžbu

$$
\begin{aligned}
&(h_{n-1} + h_n)s_{n-1} + h_{n-1}s_n \\
&= \frac{(h_n + 2(h_{n-1} + h_n))h_{n-1}\, f[x_{n-1}, x_n] + h_n^2\, f[x_{n-2}, x_{n-1}]}{h_{n-1} + h_{n-2}}.
\end{aligned}
$$

Greška aproksimacije za funkcijske vrijednosti je $O(h^4)$.

Porijeklo naziva "not-a-knot":

- kubični splajn je uobičajeno ima neprekidne druge derivacije u unutarnjim čvorovima $x_1, \ldots, x_{n-1}$.
- Treća derivacija funkcije φ, općenito, "puca".
- Kod "not-a-knot" splajna u x_1 i x_{n-1} ne puca treća derivacija, pa to nisu pravi čvorovi splajna.

Ostali rubni uvjeti

(f) Ostali rubni uvjeti

Svi dosad opisani načini zadavanja rubnih uvjeta "čuvaju"

- trodijagonalnu strukturu lin. sustava za parametre s_k.

Za aproksimaciju periodičkih funkcija (na intervalu koji odgovara periodu) zahtijeva se periodičnost prve i druge derivacije na rubovima

$$\varphi'(x_0) = \varphi'(x_n), \qquad \varphi''(x_0) = \varphi''(x_n),$$

što vodi na jednadžbe

$$p_1'(x_0) = p_n'(x_n), \qquad p_1''(x_0) = p_n''(x_n).$$

Dobiveni linearni sustav više nije trodijagonalan.

Greška kubične splajn interpolacije

Neka je $f \in C^2[a,b]$ i pretpostavimo da

- f ima ograničenu i integrabilnu četvrtu derivaciju na svakom podintervalu $[x_{k-1}, x_k]$.

Tada je

$$\|f(x) - \varphi(x)\|_\infty \le \frac{5}{384}\, h^4\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f'(x) - \varphi'(x)\|_\infty \le \frac{1}{24}\, h^3\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f''(x) - \varphi''(x)\|_\infty \le \frac{3}{8}\, h^2\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

$$\|f^{(3)}(x) - \varphi^{(3)}(x)\|_\infty \le \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\beta} + \beta\right) h\, \|f^{(4)}\|_\infty,$$

gdje je $\beta := (\max_k h_k)/(\min_k h_k)$ mjera neuniformnosti mreže.

Demo — Not-a-knot kubična splajn interp.

Pokazati kako izgleda Not-a-knot kubična splajn interpolacija na primjeru funkcije Runge:

$$f(x) = \frac{1}{1 + x^2}, \qquad x \in [-5, 5],$$

na ekvidistantnim mrežama s parnim brojem podintervala.

- `Num_Pas\Interp\Comp_Spl\GnuPlot\SplRung.plt`

Primjer — prirodni splajn

Dozvoljeno je i kombinirati razne oblike rubnih uvjeta u jednom i drugom rubu.

Primjer. Neka je

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

Nađite prirodni splajn koji aproksimira funkciju f na $[0, 1]$ s čvorovima interpolacije $x_k = 0.2k$, za $k = 0, \ldots, 5$. Izračunajte vrijednost tog splajna u točki 0.55.

Budući da su točke ekvidistantne s razmakom $h = 0.2$, "srednje" jednadžbe linearnog sustava za splajn su

$$hs_{k-1} + 4hs_k + hs_{k+1} = 3(hf[x_{k-1}, x_k] + hf[x_k, x_{k+1}]),$$

$$k = 1, \ldots, 4.$$

Primjer — prirodni splajn

Dodatne jednadžbe (prva i zadnja) za prirodni splajn su

$$2s_0 + s_1 = 3f[x_0, x_1], \qquad s_4 + 2s_5 = 3f[x_4, x_5].$$

Za desnu stranu sustava trebamo prve podijeljene razlike

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$
0.0	0.0000000000	
		2.9389262615
0.2	0.5877852523	
		1.8163563200
0.4	0.9510565163	
		0.0000000000
0.6	0.9510565163	
		−1.8163563200
0.8	0.5877852523	
		−2.9389262615
1.0	0.0000000000	

Primjer — prirodni splajn

Iz svih ovih podataka dobivamo linearni sustav

$$\begin{bmatrix} 0.4 & 0.2 & & & & \\ 0.2 & 0.8 & 0.2 & & & \\ & 0.2 & 0.8 & 0.2 & & \\ & & 0.2 & 0.8 & 0.2 & \\ & & & 0.2 & 0.8 & 0.2 \\ & & & & 0.2 & 0.4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \\ s_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.7633557569 \\ 2.8531695489 \\ 1.0898137920 \\ -1.0898137920 \\ -2.8531695489 \\ -1.7633557569 \end{bmatrix}$$

Rješenje tog linearnog sustava za “nagibe” je

$$\begin{aligned} s_0 &= -s_5 = 3.1387417029, \\ s_1 &= -s_4 = 2.5392953786, \\ s_2 &= -s_3 = 0.9699245271. \end{aligned}$$

Primjer — prirodni splajn

Budući da se točka $x = 0.55$ nalazi u intervalu $[x_2, x_3] = [0.4, 0.6]$, restrikcija splajna na taj interval je polinom p_3, kojeg nalazimo iz tablice podijeljenih razlika

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$	$f[t_k, \ldots, t_{k+3}]$
0.4	0.9510565163			
		0.9699245271		
0.4	0.9510565163		-4.8496226357	
		0.0000000000		0.0000000000
0.6	0.9510565163		-4.8496226357	
		-0.9699245271		
0.6	0.9510565163			

Odavde odmah slijedi da je p_3 zapravo, kvadratni polinom

$$
\begin{aligned}
p_3(x) = 0.9510565163 &+ 0.9699245271(x - 0.4) \\
&- 4.8496226357(x - 0.4)^2.
\end{aligned}
$$

Primjer — prirodni splajn

Pogledajmo još aproksimacije za funkciju, prvu i drugu derivaciju u točki 0.55.

	funkcija $j = 0$	prva derivacija $j = 1$	druga derivacija $j = 2$
$f^{(j)}(0.55)$	0.9876883406	-0.4914533661	-9.7480931932
$\varphi^{(j)}(0.55)$	0.9874286861	-0.4849622636	-9.6992452715
greška	0.0002596545	-0.0064911026	-0.0488479218

Aproksimacije su vrlo točne, iako je h relativno velik, jer funkcija $\sin(\pi x)$ zadovoljava prirodne rubne uvjete.

Greška aproksimacije funkcije je reda veličine $O(h^4)$, prve derivacije $O(h^3)$, a druge derivacije $O(h^2)$.

Usporedba raznih vrsta interpolacije

Demo — Interpolacija izmjerenih podataka

Pokazati kako izgleda usporedba raznih vrsta interpolacije:

- interpolacija polinomima,
- Akimina po dijelovima kubična kvazihermiteova interpolacija,
- interpolacija Not-a-knot kubičnim splajnom,

na skupu izmjerenih podataka u praksi,

- s raznim izborima čvorova interpolacije.

Ovo je poznato "težak" primjer za interpolaciju!

- `Num_Pas\Interp\C_Akim_1\GnuPlot\C_Akim_1.plt`